



HELMHOLTZ
ZENTRUM FÜR
UMWELTFORSCHUNG
UFZ

Habilitation

Modelle und Methoden zur Entscheidungsfindung in der Grundwasserbewirtschaftung

Frido Reinstorf

2007

ISSN 1863-4087

"Modelle und Methoden zur Entscheidungsfindung in der
Grundwasserbewirtschaftung"

H a b i l i t a t i o n s s c h r i f t

zur Erlangung des akademischen Grades

(Dr. rer. nat. habil.)

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

von

Herrn Dr. rer. nat. Frido Reinstorf

geboren am 01. Juni 1963 in Quedlinburg

Gutachter/in

1. Prof. Dr. rer. nat. habil. Mario Schirmer (Helmholtz-Zentrum für
Umweltforschung Leipzig & Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg)
2. Prof. Dr. rer. nat. habil. Peter Wycisk (Martin-Luther-Universität Halle-
Wittenberg)
3. Univ.-Prof. Dr. phil. Hans Zojer (Joanneum Research Graz & Technische
Universität Graz)

Halle (Saale), im Juli 2007

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Oberassistent bzw. als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Grundwasserwirtschaft der Technischen Universität Dresden (TUD) und am Department Hydrogeologie des UFZ-Umweltforschungszentrums Leipzig-Halle in der Helmholtzgemeinschaft (UFZ).

Mein Dank gilt in besonderem Maße Herrn Prof. em. Walther, an dessen Lehrstuhl die Grundlagen für diese Arbeit gelegt wurden, für seine Unterstützung, für sein großes Interesse und für seine fachliche Begleitung.

Weiterhin möchte ich Herrn Prof. Schirmer für seine Förderung und die Ermutigung zur der Fertigstellung dieser Arbeit sowie für die kritische Durchsicht danken.

Bedanken möchte ich mich weiterhin bei Herrn Prof. Thunvik von der Königlichen Universität Stockholm, dessen Anregungen mir bei der Einarbeitung in die Thematik der Entscheidungshilfen sehr nützten und bei Herrn Prof. Wycisk von der Universität Halle-Wittenberg für die kritische Durchsicht der Arbeit und die wertvollen Hinweise.

Bei allem Kolleginnen und Kollegen des Instituts für Grundwasserwirtschaft der TUD und des Departments Hydrogeologie am UFZ möchte ich mich für die freundliche Atmosphäre und für die gute Zusammenarbeit bedanken.

Auch den Kollegen, mit denen ich in verschiedenen Projekten zusammengearbeitet habe, möchte ich meinen Dank für die vielfältigen fachlichen Anregungen und Diskussionen sagen. Insbesondere waren dies Herr Prof. Grathwohl (Universität Tübingen), Herr Prof. Mioduszewski (IMUZ, Polen), Herr Prof. Meissner (UFZ), Herr Dr. Fank (Joanneum Graz, Österreich), Herr Dr. Querner (Alterra, Niederlande), Herr Dr. Grimm-Strele (Landesamt für Umweltschutz, Baden-Württemberg), Herr Dr. Bittersohl (Landesamt für Umwelt, Bayern), Frau Dipl.-Ing. Binder (RWTH Aachen), Herr Dipl.-Ing. Beyer (Universität Karlsruhe) und Herr Dipl.-Ing. Harms (Oldenburgisch-Ostfriesischer Wasserverband).

Ganz besonders möchte ich mich für die Unterstützung durch meine Frau Antje und meine beiden Söhne Julius und Karl bedanken, die viel Rücksicht auf mich nahmen und des Öfteren auf mich verzichten mussten.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung.....	I
Inhaltsverzeichnis.....	II
Abbildungsverzeichnis.....	V
Tabellenverzeichnis	VIII
Anlagenverzeichnis	X
1 Einleitung	1
1.1 Motivation und Probleme	1
1.2 Politische und ökonomische Rahmenbedingungen zum Schutz des Grundwassers	2
1.3 Die Zielstellung und deren Umsetzung	4
2 Grundlagen zu den berücksichtigten Prozessen und Methoden	7
2.1 Grundlegende Prozesse und Wirkungen von Stoffeintrag und Transport	7
2.1.1 Der Prozess des atmosphärischen Stoffeintrages und seine Erfassung	7
2.1.2 Der Fluss in der ungesättigten Zone	9
2.1.3 Der Fluss in der gesättigten Zone	10
2.1.4 Transport in der ungesättigten und gesättigten Zone	10
2.1.4.1 Quellen von Schadstoffen	10
2.1.4.2 Verwundbarkeit von Grundwassersystemen	11
2.1.4.3 Stationäre oder instationäre Annahmen	11
2.1.4.4 Transportmechanismen	12
2.1.4.5 Sorption und biologischer Abbau	14
2.1.5 Boden- und Gewässerversauerung	16
2.1.5.1 Einführung in das Thema	16
2.1.5.2 Begriffserläuterungen und Kriterien der Versauerung	17
2.2 Regionalisierungsmethoden für Gebietsdaten	21
2.2.1 Deterministische Interpolationsmethoden	21
2.2.2 Geostatistische Interpolationsmethoden	22
2.3 Numerische Modelle zum Stofftransport	23
2.3.1 Chemische Transportmodelle für den atmosphärischen Stoffeintrag	23
2.3.1.1 Modellbeschreibung	23
2.3.1.2 Anwendbarkeit für die Regionalisierung	24
2.3.2 Modelle für die Sickerwasserprognose, Anwendung und Fazit	25
2.3.3 Modelle zum Stickstoffumsatz in der ungesättigten Zone	26
2.3.3.1 Klassifizierung	27
2.3.3.2 Qualität der Stickstoffmodelle	27
2.3.3.3 Grenzen der Modelle	29
2.3.3.4 Schlussfolgerungen	30
2.3.4 Modelle für die gesättigte Zone	31
2.3.4.1 Aktueller Stand	31
2.3.4.2 Modellierung hydrochemischer Transport- und Reaktionsprozesse	33
2.3.4.3 Grenzen der Modelle bei der Anwendung	35
2.3.4.4 Schlussfolgerungen	36
2.4 Methoden der Entscheidungshilfe im Grundwassermanagement	36
2.4.1 Entscheidungshilfe und Nachhaltigkeit	36
2.4.2 Nachhaltigkeitsindikatoren	37
2.4.3 Entscheidungshilfen	39
2.4.4 Entscheidungsmodelle	39

2.4.4.1 Entscheidungshäufigkeit und Struktur eines Problems	40
2.4.4.2 Entscheidungshilfswerkzeuge	41
2.4.4.3 Konstruktion von Entscheidungshilfesystemen	43
2.4.4.4 Entwicklung von Expertensystemen	46
2.4.4.5 Erfolgsfaktoren für die Entwicklung von Entscheidungshilfen	47
2.4.5 Techniken der Entscheidungsfindung	47
2.4.6 Entwicklungstrends von Entscheidungshilfen im Umweltbereich	50
2.4.7 Schlussfolgerungen für die Entscheidungsunterstützung und das Grundwasser- management	51
2.5 Grundwasserschutz in der Europäischen Union.....	52
2.5.1 Rechtliche Grundlagen	52
2.5.2 EU-Grundwasseraktionsprogramm und Tochterrichtlinie über den Grundwasserschutz	54
3 Vergleichende Bewertung von Regionalisierungsmethoden am Beispiel atmosphärischer Stoffeinträge	58
3.1 Anlass und Ziel der Untersuchung	58
3.2 Beobachtungsnetze, Datenbasis und Daten-Preprocessing	58
3.3 Vergleich und Bewertung der Regionalisierungsmethoden	61
3.3.1 Kriterien für den Methodenvergleich	62
3.3.2 Ergebnisse	64
3.4 Verifikation	65
3.5 Diskussion	67
3.6 Schlussfolgerungen	68
4 Interpretation von Beschaffenheitsdaten des Boden- und Grundwassers – Fallbeispiel Thülsfeld	71
4.1 Das Einzugsgebiet des Thülsfelder Wasserwerkes.....	71
4.2 Beispielhafte Ermittlung des dominierenden Nitratreduktionsprozesses anhand von Wasserproben	74
4.2.1 Nitratsituation und Möglichkeiten der Prozessidentifizierung	74
4.2.2 Beschaffenheit des Aquifers	75
4.2.3 Beschaffenheit des Grundwassers	77
4.2.4 Grundwasseraltersbestimmung	79
4.2.5 Auswertung der Grundwasserbeschaffenheitsdaten	79
4.2.6 Tiefenorientierte Betrachtung einzelner Wasserinhaltsstoffe	84
4.2.6.1 Nitrat	84
4.2.6.2 Sulfat	84
4.2.6.3 Hydrogencarbonat	85
4.2.7 Anionenäquivalentkonzentrationen	85
4.2.8 Chlorid-Sulfat-Diagramme	87
4.2.9 Vergleich der tiefenorientierten Betrachtungen mit den Einfachpegeln	90
4.2.10 Gegenüberstellung der Ergebnisse	90
4.3 Versauerungsstatus und Auswirkungen von Aufforstung auf den Nitratintrag in das Grundwasser	91
4.3.1 Einführung	92
4.3.2 Das Untersuchungskonzept	93
4.3.3 Zusammenfassende Bewertung der Ergebnisse	95
4.3.4 Aufforstung als Grundwasserschutz	103
4.4 Schlussfolgerung und Ausblick	105

5 Gekoppelte Modellierung	108
5.1 Modellauswahl und –bewertung	108
5.2 Kopplungskonzept und Modellkopplung	109
5.2.1 Konzept	109
5.2.2 Regionalisierungsmethode	111
5.2.3 Methodik der Modellkopplung	112
5.3 Simulation mit gekoppelten Modellen	113
5.3.1 Ungesättigte Zone	113
5.3.1.1 Grundlagen zur Modellierung mit dem Modell HERMES	113
5.3.1.2 Anfangswerte	114
5.3.1.3 Modellergebnisse für den Bodenfeuchtegehalt	114
5.3.1.4 Modellierung der Ergebnisse der Nitratkonzentration	116
5.3.1.5 Simulation von Szenarien	118
5.3.1.5.1 Aufstellung der Szenarien	118
5.3.1.5.2 Berechnungen für die Regionalisierung der Nitratauswaschung	119
5.3.2 Gesättigte Zone	121
5.3.2.1 Grundlagen zur Modellierung mit dem Modell MODFLOW/MT3D	121
5.3.2.2 Strömungsmodell	121
5.3.2.2.1 Modellstruktur und Diskretisierung	121
5.3.2.2.2 Randbedingungen und Parametrisierung	123
5.3.2.2.3 Ergebnis der Kalibrierung des Strömungsmodells	124
5.3.2.3 Transportmodell	126
5.3.2.3.1 Grundlagen und Annahmen	126
5.3.2.3.2 Kinetik der Nitratreduktion	127
5.3.2.3.3 Parametrisierung, Kalibrierung und Berechnungsszenarien	129
5.3.2.4 Ergebnis der Kalibrierung und der Simulation	130
5.4 Inverse Modellierung zur Rekonstruktion des Nitratreintrages	132
5.4.1 Modellierung von Einzelpegeln	133
5.4.2 Modellierung des flächenhaften Eintrages	135
5.4.3 Auswertung	138
5.5 Zusammenfassung	141
5.6 Schlussfolgerungen und Ausblick	142
6 Multikriterielle Entscheidungshilfe	144
6.1 Anwendung auf das Untersuchungsgebiet Thülsfeld	144
6.2 Akteure	145
6.3 Kriterien	145
6.4 Einflussmatrix	147
6.5 Gleichheitsmatrix	148
6.6 Ranking der Bewirtschaftungsszenarien und Sensitivitätsanalyse	148
6.7 Konfliktanalyse und Koalitionsbildungsprozess	151
6.8 Diskussion und Analyse	152
7 Schlussfolgerungen und Ausblick	154
8 Literaturverzeichnis	157

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Überblick über die anthropogen initiierten Stoffflüsse, die in dieser Arbeit behandelt werden.....	2
Abbildung 1-2: Thematische Struktur der Arbeit und bearbeitete Aspekte.....	5
Abbildung 2-1: Beispiele für Depositions-/Niederschlagssammler	9
Abbildung 2-2: Vereinfachte Darstellung der ungesättigten Zone, der darin ablaufenden Prozesse und der Konzentrationsentwicklungen eines Schadstoffes im Sickerwasser unter Berücksichtigung verschiedener Prozesse	12
Abbildung 2-3: Die Ausbreitung der Verschmutzung durch (a) Dispersion und Konvektion und (b) nur durch Konvektion (nach Bedient et al., 1999)	13
Abbildung 2-4: Faktoren, die die longitudinale Dispersion verursachen (nach Bedient et al., 1999).....	14
Abbildung 2-5: Versauerungsphasen im Grundwasser, nach DVWK (1997)	18
Abbildung 2-6: Möglichkeiten der mathematischen Modellierung in Abhängigkeit der Komplexität der Strömungs-, Transport- und Reaktionsprozesse (Schenk & Kaupe, 1998) ...	33
Abbildung 2-7: Entscheidungsmodell nach Turban & Aronson (1998)	39
Abbildung 2-8: Hauptsächliche Klassen von Entscheidungshilfswerkzeugen	41
Abbildung 2-9: Pro und Contra von Gruppenarbeit	42
Abbildung 2-10: Modell eines GDSS nach Turban & Aronson (1998)	43
Abbildung 2-11: Typisches DSS nach Turban & Aronson (1998)	44
Abbildung 2-12: Der Entwicklungsprozess eines DSS nach Turban & Aronson (1998)	45
Abbildung 2-13: Fall basiertes Schließen für einen Fahrzeugschlosser, aus Bergmann (1999) ..	48
Abbildung 2-14: Der Kreislauf des fallbasierten Schließens (CBR-Circle), (Richter, 1998 aus Aamodt & Plaza, 1994)	49
Abbildung 3-1: Depositionsmessnetze in Niedersachsen und Sachsen	59
Abbildung 3-2: Variogramm für die Depositionsfrachten in den Bundesländern Niedersachsen: (1) Sulfat, (2) Ammonium, (3) Nitrat, (4) Natrium, (5) Cadmium, (6) Blei und für Sachsen: (7) Sulfat. Die Distanz ist in [m] angegeben	62
Abbildung 3-3: Interpolationskarten (OK) für die Jahresmittel der Depositionsfrachten [kg ha ⁻¹ a ⁻¹] der Bundesländer Niedersachsen (1) Sulfat (Sulphate Loads), (2) Ammonium (Ammonium Loads), (3) Nitrat (Nitrate Loads), (4) Natrium (Sodium Loads), (5) Cadmium (Cadmium Loads), (6) Blei (Lead Loads) und für Sachsen (7) Sulfat (Sulphate Loads)	69
Abbildung 3-4: Korrelation zwischen den Zufallswerten der wet-Deposition nach der UBA-Methode und dem OK für Niedersachsen: (1) Sulfat (wet); (2) Nitrat (wet), (3) Ammonium (wet) (4) Natrium (wet), und Sachsen: (9) Sulfat (wet).....	70
Abbildung 4-1: Einzugsgebiet der Wasserfassung A des Wasserwerkes Thülsfeld mit Grundwassergleichen und Verlauf des geologischen Schnittes D-D'	71
Abbildung 4-2: Gebietsübersicht mit Lage der Pegel.....	73
Abbildung 4-3: Geologischer Schnitt D-D' durch das Untersuchungsgebiet (Fassung A). Die Schnittführung D-D' ist in Abbildung 4-1 ersichtlich.....	73
Abbildung 4-4: Tiefenprofil des Glühverlusts (gestörte Proben, SGM) (aus Walther et. al 2001).....	75

Abbildung 4-5: Tiefenprofil Corg und TC (SGM) (aus Walther et. al 2001).....	76
Abbildung 4-6: Tiefenprofil N(tot) und S(tot) (SGM) (aus Walther et al., 2001).....	77
Abbildung 4-7: Sauerstoffgehalte der flachen Pegel (0 bis 10 m uGOK).....	80
Abbildung 4-8: Vertikale Konzentrationsfrontverschiebung.....	81
Abbildung 4-9: Konzentrationsverlauf der flachen Pegel (10 m uGOK).....	82
Abbildung 4-10: Tiefenprofil der Nitratkonzentration an der SGM-Messstelle.....	83
Abbildung 4-11: Tiefenprofil der Sulfatkonzentration an der SGM-Messstelle.....	83
Abbildung 4-12: Tiefenprofil der Hydrogencarbonatkonzentration der SGM-Messstelle.....	83
Abbildung 4-13: Anteile der Äquivalentkonzentrationen der Anionen Hydrogencarbonat, Nitrat, Sulfat und Chlorid an der Summe der 4 Anionen (SGM).....	87
Abbildung 4-14: Anteile der Äquivalentkonzentrationen der Anionen Hydrogencarbonat, Nitrat, Sulfat und Chlorid an der Summe der 4 Anionen (Staffelbrunnen).....	87
Abbildung 4-15: Messwerte des Staffelbrunnens im Chlorid-Sulfat-Diagramm.....	88
Abbildung 4-16: Messwerte der SGM-Messstelle im Chlorid-Sulfat-Diagramm.....	89
Abbildung 4-17: pH/Eh-Beziehung des Grundwassers und mögliche Reaktionen, in Anlehnung an Becking et al. (1960) (aus Walther, 1999).....	92
Abbildung 4-18: Übersichtskarte des Untersuchungsgebietes mit Probenahmepunkten.....	94
Abbildung 4-19: Tiefenprofile der pH(CaCl ₂)-Werte aller Untersuchungsflächen.....	97
Abbildung 4-20: Tiefenprofile der Nitratkonzentrationen aller Untersuchungsflächen; „Fk“ bedeutet „Feldkapazität“.....	100
Abbildung 4-21: Tiefenprofile der Basensättigung (aus NH ₄ Cl-Extraktion) aller Untersuchungsflächen.....	102
Abbildung 5-1: Allgemeines Strukturmodell für das Untersuchungsgebiet.....	110
Abbildung 5-2: Grundwassersystem mit lokalen und regionalen Flüssen (aus Groenendijk und Kroes, 1999).....	110
Abbildung 5-3: Schematisierter Überblick über das regionale Grundwassermodell (RGWM) mit verteilten lokalen Bodenmodellen (LSMs).....	112
Abbildung 5-4: Simulierte und gemessene Bodenfeuchtegehalte, Modell HERMES.....	115
Abbildung 5-5: Simulierte und gemessene Nitratkonzentrationen, Modell HERMES, Fallbeispiel Thülsfeld.....	117
Abbildung 5-6: Das Modellgebiet in der Draufsicht mit den Feldern von Bauer Högemann I und II und übrige landwirtschaftliche Flächen und der Ausdehnung der Waldflächen.....	122
Abbildung 5-7: Vertikale Diskretisierung des Modellgitters (West-Ost-Schnitt).....	123
Abbildung 5-8: Das Modellgebiet in der Draufsicht mit Lage der Brunnengalerie, Gütepegeln und berechneten Äquipotenziallinien der GW-Stände.....	124
Abbildung 5-9: Vergleich der gemessenen (Obs. Head) und berechneten (Calc. Head) Piezometerhöhen.....	125
Abbildung 5-10: Lage der Zone mit geringem Sauerstoffgehalt.....	127
Abbildung 5-11: Ermittlung der Reaktionskonstanten der Nitratreduktion.....	129
Abbildung 5-12: Kalibrierungsplot für die Nitratkonzentration im Grundwasser (quasi instationär). Nur die 12 Beobachtungsbrunnen mit Langzeitmessungen sind in den Plot aufgenommen.....	131

Abbildung 5-13: Draufsicht auf die Nitratkonzentrationsverteilung und Markierung der Schnittlinie A-A'	131
Abbildung 5-14: Anfangszustand für Szenario 1 (Status quo), Jahr 0	132
Abbildung 5-15: Ende der Simulation von Szenario 1, Jahr 20	132
Abbildung 5-16: Ende der Simulation nach Szenario 2a, Jahr 20	132
Abbildung 5-17: Pegel P 369 mit Bahnlinie und den verschiedenen Ausgangskonzentrationen der einzelnen Schichten	133
Abbildung 5-18: Ergebnis der Modellierung am Pegel P 369 (Die vom Modell berechneten Werte sind als Linie dargestellt, die gemessenen als große Kästchen.)	135
Abbildung 5-19: Felderaufteilung für den Feldgenerator und Waldgebiete.....	137
Abbildung 5-20: Vergleich des gemessenen Grundwasseralters (FCKW-Datierung) mit dem simulierten Alter.....	139
Abbildung 5-21: Ergebnis des vertikalen Nitratkonzentrationsverlaufs der Flächensimulation (Schnitt bei x = 26000 m; Süd – Nord).....	140
Abbildung 5-22: Nitratdurchbruch in einen Förderbrunnen.....	141
Abbildung 6-1: Nutzung des MCDA NAIADE als Werkzeug im Wassermanagement (Linde, 2000)	145
Abbildung 6-2: Die multikriterielle Einflussmatrix für das Ranking der unterschiedlichen Landnutzungsszenarien. Die Tabelle zeigt 7 Kriterien und 5 Alternativen.....	148
Abbildung 6-3: Die Gleichheitsmatrix für die unterschiedliche Bewirtschaftungsvarianten.....	148
Abbildung 6-4: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen für hohe Unsicherheit ($\alpha=0.2$). Die Alternativen sind miteinander vergleichbar und ordnen sich daher aufeinander folgend an. Die Alternative A wurde, im Vergleich aller Alternativen, als die beste Alternative identifiziert	149
Abbildung 6-5: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen für mittlere Unsicherheit ($\alpha=0.4$). Alternative B und C sind jetzt miteinander nicht mehr vergleichbar, da die Sicherheit (Zuverlässigkeit) der Aussage gesteigert wurde. Alternative A wurde wiederum als beste Alternative identifiziert.....	149
Abbildung 6-6: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen für geringe Unsicherheit ($\alpha =0.6$). Alternative B und C sind auch hier nicht miteinander vergleichbar. Alternative A wurde auch hier wieder als beste Alternative identifiziert	150
Abbildung 6-7: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen mit dem Zimmermann-Zysno-Operator, mittlere Kompensation ($\alpha=0,6$), mittlere Unsicherheit ($\alpha =0,4$).....	150
Abbildung 6-8: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen mit einer Reduktion der Ersetzungskosten (harte Daten) um 50%	151
Abbildung 6-9: NAIADE-Dendrogramm der Koalitionsbildung für die Akteursgruppen in Thülsfeld. Die Ähnlichkeiten zwischen den Akteursbeurteilungen hinsichtlich der vorgeschlagenen Alternativen werden in den verschiedenen Stadien der Interaktion durch die Ähnlichkeitsindizes (links in der Abbildung) deutlich	152

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1: Prinzipielle hydrogeologische Merkmale, die die Verwundbarkeit eines Aquifers durch Kontaminanten beeinflussen (modifiziert nach Johnston, 1986)	11
Tabelle 2-2: Pufferbereiche, zusammengestellt aus Ulrich et al. (1981a) und Krieter (1991).....	21
Tabelle 2-3: Kurzbeschreibungen deterministischer Grundwassermodelle.....	32
Tabelle 2-4: Schadstoffspezifische Prozesse und Mechanismen, die bei Modellrechnungen berücksichtigt werden müssten (aus Schenk & Kaupe, 1998).....	37
Tabelle 2-5: Beispiele aus Industry Canada (1997)	37
Tabelle 2-6: Enge und breitere Betrachtung im Prozess der Entscheidungsfindung aus Turban & Aronson (1998)	46
Tabelle 2-7: Existierende Technologien für die Entscheidungsfindung	48
Tabelle 3-1: Anteile der wet-Deposition an der bulk-Deposition (fp) aus simultanen Messungen (nach Gauger et al., 2002; ergänzt mit Daten von Van Leeuwen et al., 1996)	60
Tabelle 3-2: Variogrammodelle der Deposition (4-Jahresmittel: 1995-1998) und Parameter...	61
Tabelle 3-3: Vergleich der Fehler für IDW und OK	64
Tabelle 3-4: Korrelationsmatrix für die Hilfsvariablen Höhenlage (ALT) und Niederschlag (P) für die Stoffdeposition in Niedersachsen und Sachsen	65
Tabelle 3-5: Vergleich der UBA-Methode und der OK-Methode: Mittelwert in kg/ha*a bzw. für Pb ²⁺ und Cd ²⁺ in g/ha*a, Standardabweichung und prozentuale Differenz [%] der wet-Deposition für Niedersachsen und Sachsen	66
Tabelle 4-1: Grundwasserneubildungsraten (GWN) im Einzugsgebiet Thülsfeld (Harms, 1987)	72
Tabelle 4-2: Lage der Filteroberkanten der Pegel im Einzugsgebiet der Brunnengalerie A	72
Tabelle 4-3: Beprobungstermine und Anzahl der Bohrsondierungen	96
Tabelle 4-4: Schwankungsbreiten der Konzentration ausgewählter Ionen in der Gleichgewichtsbodenlösung (GBL) bzw. bei Feldkapazität, im Falle von Nitrat [mg/l]	101
Tabelle 5-1: Bodentypen im HERMES Modell, Fallbeispiel Thülsfeld	114
Tabelle 5-2: Anfangswerte für die Modellsimulation mit HERMES, Fallbeispiel Thülsfeld	114
Tabelle 5-3: Eingangsdaten der landwirtschaftlichen Nutzung	115
Tabelle 5-4: Mittlere absolute Fehler des Wassergehaltes (gemessen - berechnet) mit HERMES für verschiedene Tiefen	116
Tabelle 5-5: Mittlere absolute Fehler der Nitratkonzentration; mit HERMES modellierte Tiefenprofile	117
Tabelle 5-6: Szenarien, die für die Testfelder berechnet wurden	119
Tabelle 5-7: Fruchtfolgen, Aussaat, Ernte und Düngung als Input in HERMES für das Einzugsgebiet der Brunnenfassung A	120
Tabelle 5-8: Stickstoffauswaschung und Sickerwassermenge für verschiedene Fruchtfolgen, berechnet mit HERMES für das Einzugsgebiet der Brunnenfassung A	121
Tabelle 5-9: Nitratkonzentration im Vergleich zum Grundwasseralter	128
Tabelle 5-10: Parameter des MT3D Modells.....	129
Tabelle 5-11: Beobachtungsbrunnen, die für die Kalibrierung von MT3D genutzt wurden.....	130
Tabelle 5-12: Nitratkonzentrationen der GWN [mg/l] in den Szenarien 1 und 2a	130

Tabelle 5-13: Concentration-Recharge-Werte des Pegels P 369 von 1991 - 2001.....	134
Tabelle 5-14: Mittlerer Nitrateintrag in das Grundwasser, berechnet aus den flachen sauerstoffgesättigten Pegeln von 1991 – 2001.....	136
Tabelle 5-15: Concentration-Recharge-Werte in mg/l unter den einzelnen Anbauflächen.....	137
Tabelle 5-16: Vergleich des gemessenen und simulierten Grundwasseralters.....	140
Tabelle 6-1: Identifizierte Interessensgruppen und deren Belange.....	146
Tabelle 6-2: Die Hauptbelange für das Thülsfelder Fallbeispiel	146
Tabelle 6-3: Gewählte Kriterien für das Fallbeispiel Thülsfeld mit Hauptbelanggebiet, Zielen, Bewertungskriterien, Größeneinheiten und Definitionen	147

Anlagenverzeichnis

Anlage 2-1: Modelle zur Sickerwasserprognose - Zusammenstellung der Informationen der Internet-Recherche

Anlage 2-2: Übersichts- und Bewertungsmatrix für die recherchierten Entscheidungshilfesysteme.

Anlage 4-1: Ausgewählte Grundwasserbeschaffenheitsdaten des Thülsfelder Aquifers

Anlage 4-2: Äquivalentkonzentrationsanteile der Anionen zur Bewertung der Denitrifikation.

Anlage 4-3: Anwendung von Isotopenmethoden im Untersuchungsgebiet Thülsfeld

Anlage 5-1: Kurzbeschreibungen der für die Kopplung ausgewählten Modelle für die ungesättigte und die gesättigte Zone

Anlage 5-2: Modellvergleich der für die Kopplung ausgewählten Modelle

Anlage 5-3: Anleitung für die Anwendung der Software für die Datentransformation

Anlage 5-4: Quelltext des Transformationsprogramms für die Kopplung von HERMES und MODFLOW/MT3D.

Anlage 5-5: Stabilitätskriterien und Lösungsverfahren für die Transportgleichung in MT3D

Anlage 5-6: Zonierung der Grundwasserneubildung und der hydraulischen Leitfähigkeiten im Modellgebiet.

Anlage 5-7: Piezometerdaten der Pegel im Modellgebiet.

Anlage 5-8: Daten der Konzentrationsbeobachtungspegel im Modellgebiet.

Anlage 5-9: Vergleich der gemessenen und simulierten Konzentrationsverläufe der Einzelpegel im Modellgebiet.

Anlage 5-10: Concentration-Recharge-Werte der flachen Pegel im Modellgebiet.

Anlage 5-11: Eingabemaske des Feldsimulators.

Anlage 5-12: Concentration-Recharge-Werte der ersten 6 Felder im Feldsimulator.

Anlage 5-13: Concentration-Recharge-Werte bezogen auf die Pegel im Modellgebiet.

Anlage 5-14: Wahl des Lösungsverfahrens und Diskretisierung des Berechnungsnetzes für das Modellgebiet.

Anlage 6-1: Die multikriterielle Entscheidungsmethode NAIADE - Beschreibung und Theorie.

1 Einleitung

1.1 Motivation und Probleme

In Deutschland, wie auch in den meisten Ländern dieser Erde, ist das Grundwasser die wichtigste Ressource für die Trinkwassergewinnung. Der Schutz des Rohstoffs Grundwasser als Lebensgrundlage aller Menschen sollte deshalb ein zentrales Interesse einer Gesellschaft sein.

Es muss aber festgestellt werden, dass das Grundwasser zunehmend durch anthropogene Einflüsse verunreinigt wird. Die Rohwasserqualität in vielen Trinkwasserfassungen ist heute bereits beeinträchtigt beziehungsweise verschlechtert sich entsprechend. Dies hat zur Folge, dass z.B. aufwändige und kostenintensive Wasseraufbereitungsanlagen installiert und betrieben werden. Die dadurch entstehenden Kosten müssen über den Preis des Trinkwassers letztlich vom Verbraucher getragen werden.

Insbesondere diffuse Stoffeinträge, die entweder direkt durch die landwirtschaftliche Düngung oder indirekt über die atmosphärische Deposition entstehen, haben erheblichen Anteil an der flächenhaften Belastung des Grundwassers. Hier nimmt Nitrat als wichtiger Bestandteil des Stickstoffkreislaufs eine herausragende Stellung ein. Zum einen sind Nitratverbindungen besonders ertragsbeeinflussende Düngemittel, zum anderen aber sind sie auch ein gesundheitsrelevanter Schadstoff¹. Hinzu kommt die hohe Mobilität von Nitrat-Ionen, da die verwendeten Nitratverbindungen gut wasserlöslich sind und die Ionen kaum sorptiv sind. Im Grundwasserleiter werden sie deshalb kaum retardiert und können über größere Entfernungen transportiert werden. Auch wenn Abbau geschieht, z.B. durch lithotrophe Denitrifikation, stellt sich die Frage nach der Denitrifikationskapazität des Untergrundes und es ist lediglich eine Frage der Zeit bis Rohwasserfassungen beeinträchtigt werden können. Die Abbildung 1-1 gibt einen Überblick über die Aspekte der anthropogen initiierten Stoffflüsse, die in dieser Arbeit behandelt werden.

Die Aufforstung landwirtschaftlich genutzter Flächen wird als eine geeignete Maßnahme angesehen, die Emissionen aus der ackerbaulichen Bodennutzung nachhaltig zu vermindern. Dies betrifft vor allem Stickstoff in der Form von Nitrat aber auch die Hauptnährstoffe Phosphor und Kalium sowie die Begleit-Ionen Chlorid und Sulfat. Bei der Anpflanzung von jungen Baumbeständen besteht jedoch anfangs nur ein geringer Nährstoffbedarf, so dass die Stickstoffvorräte des Bodens weiter über Jahre mit ihren mobilisierten Nitratmengen das Grundwasser belasten können. Weiterhin ist aus vielen Untersuchungen im Bereich der Waldforschung bekannt, dass Baumbestände Luft getragene Stoffe „auskämmen“, die dann staubförmig oder mit dem Niederschlag auf dem Boden deponiert und mit dem Sickerwasser in die Tiefe verlagert werden können. Die dadurch erhöhte Deposition verstärkt möglicherweise die Gefährdung des Grundwassers bzgl. Kontamination. Von Bedeutung für die Grundwasserressource sind auf der einen Seite besonders die Stickstoff- und

¹ Nitrat ist an sich nicht toxisch, es kann jedoch im menschlichen Körper durch Bakterien zu Nitrit umgewandelt werden. Das entstandene Nitrit oxidiert das Eisen(II)-Ion im Hämoglobin der roten Blutkörperchen und bildet das so genannte Methämoglobin. Dadurch kann Hämoglobin keinen Sauerstoff binden und es kommt zur Unterbindung des Sauerstofftransports im Körper. Als Folge dessen kommt es zum Sauerstoffmangel in den Zellen und Organen. Dieses als Blausucht bezeichnete Krankheitsbild kann vor allem bei Kleinkindern zum Tod führen.

Schwefelverbindungen. Diese können als Nitrat und Sulfat das Grundwasser belasten und gleichzeitig als Säurebildner wirken. Luft getragene Metalle, wie z.B. Cadmium und Blei, können bei sinkenden pH-Werten mobilisiert und in das Grundwasser transportiert werden. Hinzu kommt, dass durch eine Versauerung bodenbürtige Metalle wie Eisen, Mangan, Nickel verstärkt freigesetzt werden können.

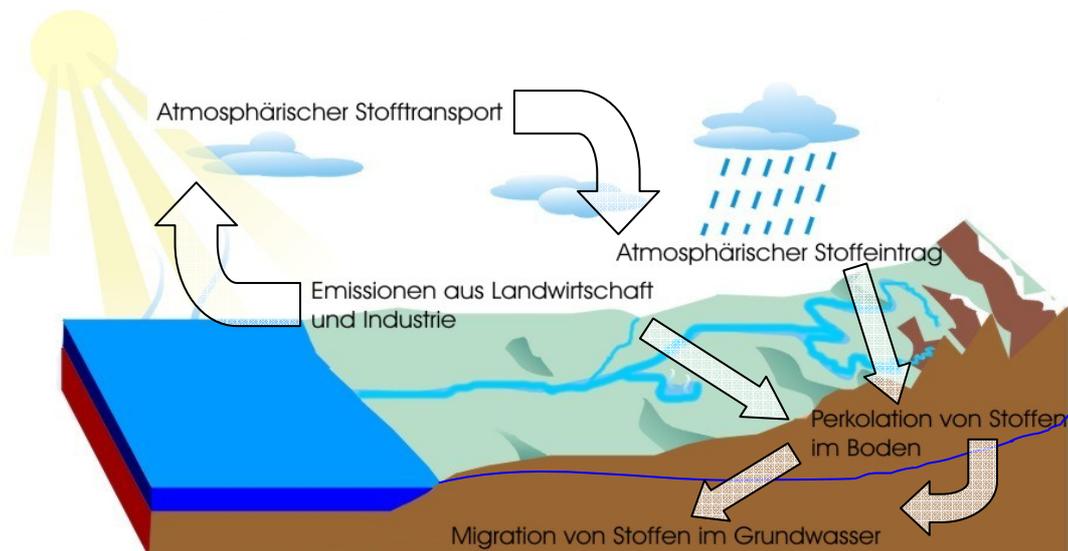


Abbildung 1-1: Überblick über die anthropogen initiierten Stoffflüsse, die in dieser Arbeit behandelt werden.

Diese kurze Problemdarstellung, die nur die zwei Aspekte landwirtschaftliche Bodennutzung und atmosphärische Deposition betrachtet, macht deutlich, dass ein einfaches Problem sehr komplex werden kann. Versucht man zusätzlich wirtschaftliche, soziale und gesetzliche Aspekte mit ihren zum Teil auch auseinander liegenden Zielen ebenfalls bei der Planung zu berücksichtigen, wird schnell deutlich, dass zu treffende Entscheidungen zur Grundwasserbewirtschaftung die Fachkenntnis eines einzelnen Entscheidungsträgers übersteigen können. Um unter diesen Randbedingungen nachhaltige Entscheidungen zu treffen benötigt man Werkzeuge und Methoden, die die Vorbereitung von Entscheidungen und den Entscheidungsprozess selbst unterstützen. Diese Instrumente können, in der Stufe der Vorbereitung, beispielsweise numerische Modelle sein und in der Stufe der Entscheidungsfindung Managementstrategien, wie Systemanalysen und adaptives Management oder auch komplette rechnergestützte Entscheidungshilfesysteme.

1.2 Politische und ökonomische Rahmenbedingungen zum Schutz des Grundwassers

Wenn Entscheidungen zur Nutzung und zum Schutz des Grundwassers getroffen werden, findet sein materieller Wert im Allgemeinen keine Berücksichtigung. Der Hauptgrund dafür besteht darin, dass Grundwasser traditionell eine freie Ressource und kein Handelsgut ist. Damit kann der Wert nur schwer angegeben werden. Sollen Entscheidungen hinsichtlich der Nutzung von Grundwasserressourcen getroffen werden, ist es wichtig die Kosten im Verhältnis zu den Umwelteinflüssen darzustellen. Wird Wasser kontaminiert, müssten die Kosten für die Sanierung ebenso wie die Aufwendungen für alternative Wasserversorgungseinrichtungen berücksichtigt werden, falls eine Reinigung nicht ökonomisch ist. Ein weiterer Grund ist, dass Grundwasser eine „unsichtbare“ Ressource ist

und die Prozesse im Untergrund kompliziert sind. So können sich beispielsweise Schadstoffe über Jahre im Aquifer anreichern und plötzlich infolge Änderungen der physikalischen oder chemischen Umgebungsbedingungen mobilisiert werden.

Eingang die Gesetzgebung fand der Grundwasserschutz bisher prinzipiell neben dem Schutz anderer Wasserressourcen, wie Seen und Vorflutern (Richtlinie, 2000; WHG, 1996). Die Tatsache, dass es keine Gesetzgebung gibt, die die Grundwasserressourcen allein betreffen, erschwert deren Schutz². Oft werden deshalb ökonomische, landeskulturelle oder biodiversitäre Aspekte stärker wahrgenommen. Auch verfolgen verschiedene Interessensgruppen unterschiedliche Ziele, die auch konträr sein können, und messen deswegen dem Grundwasserschutz unterschiedliche Bedeutung bei. Daraus können Kommunikationsbarrieren zwischen verschiedenen Fachdisziplinen entstehen, z.B. zwischen Umweltschutz und Ökonomie. Diese müssen in einem nachhaltigen Entscheidungsprozess überwunden werden. Einen Durchbruch könnte die Tochterrichtlinie zur Wasserrahmenrichtlinie der Europäischen Union (KOM, 2003) bringen.

Wie sich immer wieder zeigt, steigt der Bedarf an Methoden für die Entscheidungsunterstützung, für die Bewertung von Grundwasserbelastungen und für den Grundwasserschutz. Bislang waren die Aktivitäten mehr auf die unmittelbare Gefahrenabwehr als auf den vorbeugenden Grundwasserschutz orientiert.

Der Bedarf an umweltverträglichen Methoden wurde in verschiedenen Rahmenvereinbarungen zum Ziel erklärt. Seit dem Brundtland-Bericht (1987) der Weltkommission für Umwelt und Entwicklung ist das Ziel einer nachhaltigen Entwicklung zum Leitfaden geworden. Die Europäische Union (EU) fördert die Umweltpolitik und hebt z.B. im 5. Aktionsprogramm einen steigenden Bedarf an Entscheidungsprozessen und besserem Verständnis der Probleme durch Information, Ausbildung und Bewusstseinsbildung hervor.

Weiterhin ist die Wasserrahmenrichtlinie der EU (Richtlinie, 2000), die u.a. die Kosten für die Bereitstellung von Wasser für ökonomische Sektoren wie Haushalt, Industrie und Landwirtschaft berücksichtigt, für den Grundwasserschutz relevant. Auf globalem Niveau gibt es eine integrative Herangehensweise für die Wasserressourcen mit der AGENDA 21 (United Nations, 1993). Im Abschnitt 18 der Agenda wird die Zielstellung formuliert: „Wasser wird für alle Belange des Lebens benötigt. Das generelle Ziel ist es zu sichern, dass eine adäquate Versorgung durch Wasser mit guter Qualität für die alle Menschen auf diesem Planeten gewährleistet wird, wobei die hydrologischen, biologischen und chemischen Funktionen der Ökosysteme bewahrt werden.“ (*übersetzt aus dem Englischen*)

Entscheidungen über umweltgefährdende Aktivitäten, die in Konflikt mit den Grundwasserressourcen stehen, betreffen in der Regel die Ökonomie, die Naturressourcen, die Soziologie, landeskulturelle Werte und die Gesetzgebung. Die verfügbaren Informationen sind jedoch oft unvollständig, unsicher und/oder von hoher Komplexität. Deshalb könnte die Nutzung von Modellen und verschiedenen Bewertungswerkzeugen die Analyse der Situation objektivieren.

² Als Vergleich soll hier der Schutz des Bodens herangezogen werden, der in einem eigenen nationalen Gesetz, dem Bundesbodenschutzgesetz (BBodSchG, 1998) geregelt ist. Auf dieser Grundlage werden seit Inkrafttreten spezifische Konzepte und Methoden zum Schutz des Bodens erarbeitet.

Für die Vorhersage von Einflüssen umweltgefährdender Aktivitäten gibt es vielfältige Verfahren, die von analytischen Methoden bis zu numerischen Modellen reichen. Die Art der Anwendung hängt von der Zielstellung, der akzeptierten Unsicherheit und der Komplexität des Problems ab. Wichtige Komponenten sind das Risiko der Kontamination, die Auswirkungen und die notwendigen Konsequenzen.

Zum gegenwärtigen Zeitpunkt ist die numerische Grundwassermodellierung aufgrund der sich ergebenden Prognosemöglichkeiten eines der wichtigsten Werkzeuge für die Grundwasserbewirtschaftung. Sie sollte deswegen eine wesentliche Grundlage für die Entscheidungsfindung sein (z.B. Reefsgaard & Abbott, 1996; Nukuric & Hall, 1998).

1.3 Die Zielstellung und deren Umsetzung

Das Ziel der Arbeit ist die Untersuchung von Modellen und Methoden zur Entscheidungsfindung in der Grundwasserbewirtschaftung. Unter den Begriff „Methoden“ werden im Folgenden sowohl in-situ-Methoden als auch Interpretationsmethoden zur Erfassung von Prozessgrößen und Parametern zusammengefasst. Es erfolgt eine Analyse der vorhandenen Methoden und von numerischen Modellen und es erfolgen Weiterentwicklungen. Es wird gezeigt, wie mit geeigneten Erkundungstechniken belastbare Ergebnisse über den Zustand des Grundwassers und des Bodenwassers erhalten werden können. Es wird weiterhin dargelegt, wie mit Hilfe der Anwendung und Kombination von numerischen Modellen, z.B. für den Stofftransport im Boden- und Grundwasser, und mit Hilfe geeigneter Entscheidungshilfesoftware, ein multikriterieller Entscheidungsprozess ablaufen kann. Der Entscheidungsprozess wird anhand eines praktischen Beispiels für das Einzugsgebiet eines Wasserwerkes demonstriert.

Für diese Arbeit wurden Literaturquellen v.a. aus den Jahren 1994 bis 2006 ausgewertet und zusammengefasst. Es wird eine Übersicht über naturwissenschaftliche Grundlagen sowie Modellierungs-, Entscheidungshilfe- und europäische Gesetzgebungswerkzeuge gegeben. Hinsichtlich des Anwendungsbeispiels wurde Material verwendet, das aus Voruntersuchungen und Messungen im Einzugsgebiet des Wasserwerkes Thülsfeld stammt. Die Daten stammen aus den 80er und 90er Jahren und wurden vom Wasserwerksbetreiber, dem Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverband (OOWV) in Niedersachsen, und verschiedenen niedersächsischen Landesbehörden zur Verfügung gestellt. Seit Beginn der Untersuchungen durch das Institut für Grundwasserwirtschaft der Technischen Universität Dresden in den 90er Jahren wurde die vorhandene Datenbasis mit Daten, die speziell für die Modellierung benötigt wurden, ergänzt.

Die Ausführungen in dieser Arbeit beziehen sich, zur Gewährleistung der Übersichtlichkeit, nur auf die Interpretation von Messungen bzw. die Modellierung der anorganischen Ionen NO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^- , HCO_3^- , H^+ , Na^+ , NH_4^+ , NH_3 , Ca^{2+} , Mg^{2+} , K^+ , Al^{3+} , Mn^{2+} , Fe^{2+} , Pb^{2+} und Cd^{2+} . Die technische Durchführung von Labor- und Feldmethoden bleibt unberücksichtigt.

Bei der Auswahl der numerischen Modelle stand eine universelle Anwendbarkeit im Vordergrund. Damit soll gewährleistet werden, dass die Übertragbarkeit auf andere Standorte und Schadensarten weitestgehend möglich ist. Zu beachten ist, dass die Anwendbarkeit der Methoden an bestimmte räumliche Skalen gebunden ist. Eine Ausnahme bilden die Entscheidungshilfemodelle, die Informationen verschiedener Skalenniveaus berücksichtigen

können. Als Überblick über die gesamte Arbeit ist die thematische Struktur in Abbildung 1-2 skalenorientiert dargestellt.

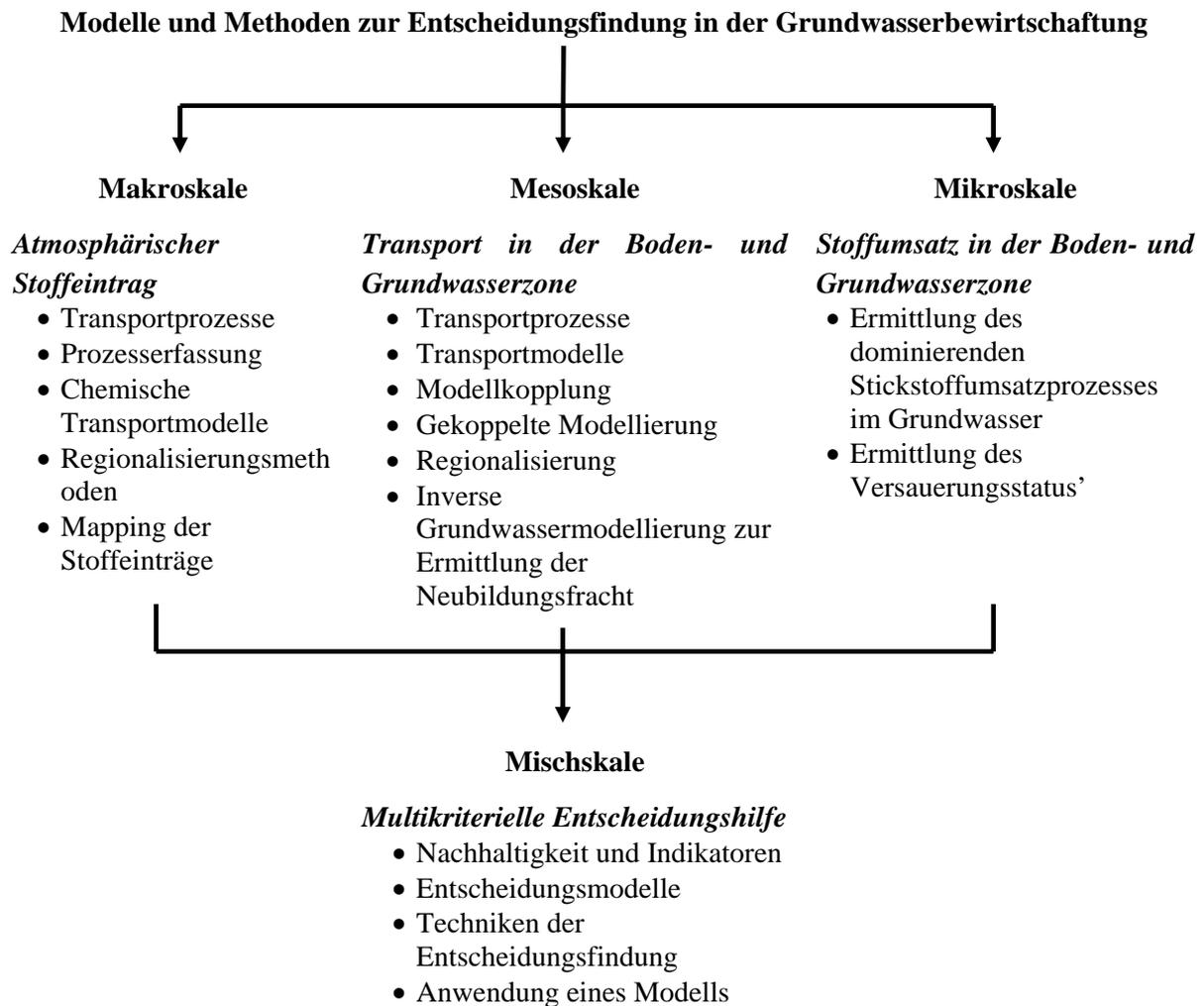


Abbildung 1-2: Thematische Struktur der Arbeit und bearbeitete Aspekte.

Im folgenden 2. Kapitel wird ein Überblick über die Prozesse des Stoffeintrages in Boden und Grundwasser durch atmosphärische Deposition und durch landwirtschaftliche und industrielle Emissionen gegeben. Danach erfolgen Erläuterungen zum Transport im Boden und Grundwasser sowie zu möglichen Regionalisierungsmethoden und numerischen Prognosemodellen. Zum Abschluss des Kapitels werden Aspekte der Entscheidungsfindung für eine nachhaltige Grundwasserbewirtschaftung aufgezeigt und deutsche und internationale legislative Möglichkeiten zum Grundwasserschutz zusammengefasst und bewertet. Das Kapitel 3 befasst sich mit einer vergleichenden Bewertung der in Kapitel 2 erläuterten Regionalisierungsmethoden. Dieses wird am Beispiel von atmosphärischen Stoffdepositionen durchgeführt. Die hier erläuterten geostatistischen und deterministischen Regionalisierungsmethoden lassen sich ebenso im Bereich der Bodenforschung und der Hydrogeologie anwenden. Im 4. Kapitel wird im ersten Teil demonstriert, wie anhand von Auswertungen von Einbohrlochmessungen Rückschlüsse auf die dominierenden Nitratreduktionsprozesse gezogen werden können. Durch die Fokussierung auf Einbohrlochmethoden ist eine Kostenersparnis bei der Erkundung möglich. Die notwendigen Zusatzinformationen, die vorliegen müssen, werden erläutert. Das Kapitel 5 erläutert das Konzept einer Kopplung zwischen numerischen Modellen der ungesättigten und gesättigten

Zone als Voraussetzung für eine integrierte Modellierung. Die gekoppelten Modelle werden angewendet und die Ergebnisse interpretiert. Mit Hilfe einer inversen Modellierung wird die Nitratkonzentration in der Grundwasserneubildung ermittelt, was eine Validierung der Bodenmodellierung gestattet. Im Kapitel 6 wird ein spezielles Werkzeug zur multikriteriellen Entscheidungsfindung erläutert und angewendet. Unter Einbeziehung der Resultate der gekoppelten Modellierung (Kapitel 5) sowie sozio-ökonomischer und landeskultureller Kriterien wird der Entscheidungsprozess an einem konkreten Beispiel erläutert und die Wege zur Entscheidungsfindung aufgezeigt. Im 7. Kapitel werden Schlussfolgerungen gezogen und ein Ausblick gegeben.

2 Grundlagen zu den berücksichtigten Prozessen und Methoden

Das folgende Kapitel erläutert methodische Aspekte der Grundwasserschutzes und der Bewirtschaftung, die in dieser Arbeit betrachtet werden. Zu Beginn werden Grundlagen zu Prozessen des Stofftransportes beim atmosphärischen Stoffeintrag, in der Boden- und in der Grundwasserzone und zu Methoden der Regionalisierung von Gebietsdaten erläutert. Des Weiteren wird der aktuelle Entwicklungsstand numerischer Modelle zur Beschreibung von Strömungs- und Transportprozessen für die atmosphärische Stoffdeposition und dem Transport in der wasserungesättigten und gesättigten Zone beschrieben und bewertet. Es erfolgt eine Zusammenschau von Methoden der Entscheidungshilfe, der Entwicklung von Entscheidungshilfesystemen und den Möglichkeiten der Entscheidungsfindung. Das Kapitel schließt mit einer Zusammenfassung aktueller Gesetze und Regelungen in der Europäischen Union zur Grundwasserbewirtschaftung.

2.1 Grundlegende Prozesse und Wirkungen von Stoffeintrag und Transport

2.1.1 Der Prozess des atmosphärischen Stoffeintrages und seine Erfassung

Die Messung und Bewertung von Depositionsraten setzt die Kenntnis der unterschiedlichen Mechanismen der Stoffflüsse aus der Atmosphäre voraus. Die folgenden Definitionen lehnen sich an die von Ulrich et al. (1979) an.

Gesamt - Deposition (D_{ges})	= Summe der nassen (D_a) und trockenen (D_b) Deposition = $D_a + D_b$
Nasse Deposition (D_a)	= Summe der Stoffe, die während Niederschlägen (Regen, Schnee) in nasser Form auf die Erdoberfläche oder auf Vegetationsflächen gelangen)
Trockene Deposition (D_b)	= Sedimentation (D_{b1}) + Interzeption (D_{b2}) = $D_{b1} + D_{b2}$
Interzeption (D_{b2})	= Anlagerung von Aerosolen (Teilchen $< 1\mu\text{m}$) (D_{b21}) und Nebeltropfchen (D_{b22}) und Gasen (D_{b23}) an Vegetationsflächen = $D_{b21} + D_{b22} + D_{b23}$
Sedimentation (D_{b1})	= Transport aus der Atmosphäre unter Schwerkrafteinwirkung (Staubteilchen $> 5\mu\text{m}$)
Niederschlagsdeposition (bulk) (D_n)	= Summe aus der nassen Deposition (D_a) und der Sedimentation (D_{b1})
D_{ges}	= $D_a + D_{b1} + D_{b21} + D_{b22} + D_{b23}$ = $D_n + D_{b2}$

Die mit Messgeräten erfassten Komponenten hängen vom Messstandort (Freiland oder Bestand) und von der Sammeltechnik ab.

In Abhängigkeit vom Standort der Messung wird der Stoffeintrag durch unterschiedliche Depositionsmechanismen beeinflusst. Man unterscheidet zwischen im Freiland gemessener, weitgehend akzeptorunabhängiger Deposition und unter Bestand gemessener, akzeptorabhängiger Deposition.

Die nasse Deposition (D_a) ist die Summe der Stoffe, die während Niederschlägen (Regen, Schnee) auf die Erdoberfläche oder auf Vegetationsflächen gelangen. Sie ist an Prozesse wie Ausregnung (rain out) und Auswaschung (wash out) geknüpft.

Ausregnung bezeichnet den Eintrag luftverunreinigender Stoffe in die Wolken. Darunter fallen Prozesse, die während der Wolkenbildung zur Lösung, Adsorption und Kondensation betragen, sowie chemische Umsetzungsprozesse in der Atmosphäre, z.B. heterogene Gasphasenreaktionen. Der Eintrag wird durch den Grad der Luftverunreinigungen auf dem gesamten Weg des Wolkenferntportes bestimmt, d.h. nur gering durch örtliche Schadstoffquellen.

Auswaschung bezeichnet den Eintrag (Absorption, Lösung und chemische Umsetzung) der luftverunreinigenden Stoffe in den fallenden Regentropfen. Dieser Prozess ist meistens deutlich geringer als der Anteil aus der Ausregnung, wird aber maßgeblich durch örtliche Quellen bestimmt (LUA Brandenburg, 1998).

Nach LAWA (1998) wird neben der nassen Deposition noch genannt die **feuchte oder okkulte Deposition** (cloud or fog deposition): Eintrag durch Nebel, Tau und Reif (oft der nassen Deposition zugeschlagen) und Eintrag auf feuchte, mit Wasserfilm überzogene Oberflächen (häufig der trockenen Deposition zugeschlagen).

Das Verhältnis zwischen nasser und trockener Deposition ist stoff- und ortsabhängig. Daneben spielen die Nähe zum Emittenten, das Niveau der Vorbelastung und die Oberflächenrauigkeit eine determinierende Rolle. Die Deposition kann mit genormten Niederschlagssammlern direkt erfasst werden (DVWK, 1984).

Die unter Bestand ermittelte Stoffdeposition ist akzeptorabhängig. Dort werden nasse Deposition einschließlich des abgefangenen Niederschlages (Nebel) und trockene Deposition (Aerosoladsorption, Ab- und Adsorption von Gasen an trockenen und benetzten Oberflächen, Abfangen von Stäuben, in Waldgebieten auch mit Filterung bezeichnet) erfasst. Unterschieden wird dabei in die zwei Komponenten Kronendurchlass und Stammabfluss, die beide durch die Eigenschaften des jeweiligen Akzeptors geprägt sind. Bei Fichten kann beispielsweise der Stammabfluss vernachlässigt werden (z.B. Reinstorf, 1995).

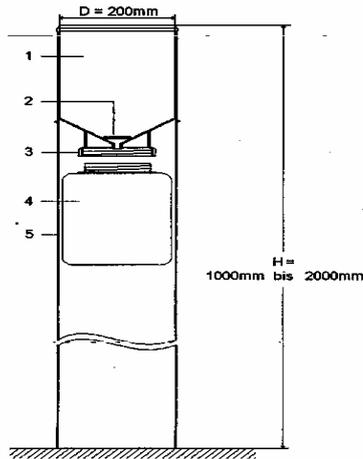
Der Kronendurchlass wird ebenfalls mit Niederschlagssammlern, wie im Freiland erfasst, der Stammabfluss mit stammumfassenden Rinnen. Aus der Differenz zwischen im Freiland gemessener und unter Bestand gemessener Deposition wird dann die bestandesspezifische Deposition ermittelt.

In der Praxis existieren mehrere unterschiedliche Messgerätetypen zur Erfassung der Deposition. Einige typische Depositions-/Niederschlagssammler sind in Abbildung 2-1 dargestellt.

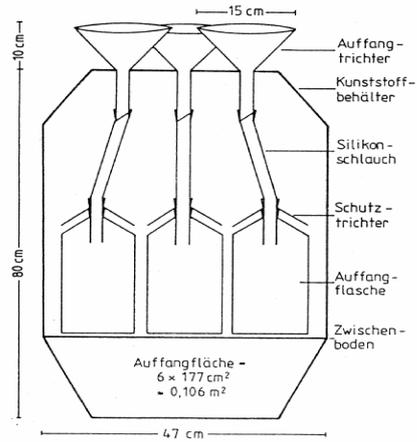
Hinsichtlich der Sammeltechnik unterscheidet man grundsätzlich zwischen den Verfahren zur Sammlung der gesamten nassen Deposition einschließlich Sedimentation (Bulk-Sammlung) und der Sammlung dieser Depositionskomponenten ausschließlich während Niederschlagsereignissen (Wet-Only-Sammlung). Die Messgefäße für die Wet-Only-Sammlung öffnen sich nur während eines Niederschlagsereignisses, so dass kein Stoffeintrag während niederschlagsfreier Perioden stattfindet.

Daneben gibt es Sammlertypen, die für Sondermessungen eingesetzt werden, die Nass-/Trocken-Sammler (Wet/dry-Sammler). Eine getrennte Erfassung von trockenen (vorwiegend partikulären) und nassen Depositionen wird dabei durch zwei getrennte Sammelvorrichtungen und eine sensorgesteuerte Abdeckung möglich (LAWA, 1998).

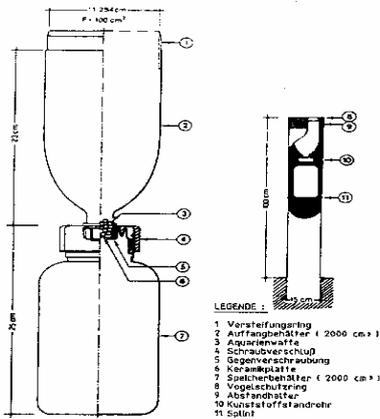
Zur Ermittlung der unterschiedlichen Stoffgruppen sind bestimmte Messgeräte bevorzugt anzuwenden. Die LAWA gibt in einer Richtlinie dazu Empfehlungen (LAWA, 1998).



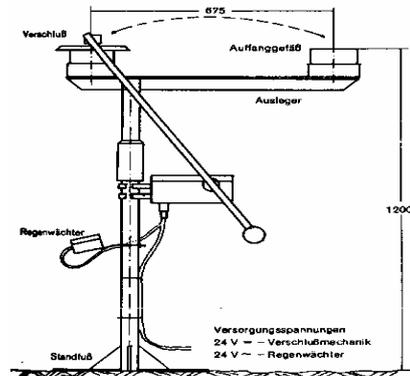
Bulk-Sammler des Trichter-Flaschen-Typs (aus LAWA, 1998)



Typ Osnabrück (aus NLÖ,1993)



Typ Münden 100 (aus NLÖ,1993)



Naß-/Trocken-Sammler MEIWES (aus NLÖ,1993)

Abbildung 2-1: Beispiele für Depositions-/Niederschlagssammler

2.1.2 Der Fluss in der ungesättigten Zone

Zur Beschreibung der vertikalen Wasserbewegung in der ungesättigten Zone bei ebener Bodenoberfläche genügt oft die eindimensionale Betrachtung. Diese wird beschrieben durch die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\delta \theta}{\delta t} = - \frac{\delta q}{\delta z} \tag{Gl. 2.1}$$

mit q = vertikaler Wasserfluss in der ungesättigten Zone [$\text{cm}^3/\text{cm}^2 \cdot \text{d}$], und das Darcy-Gesetz:

$$q = -k(\theta) \left(\frac{\delta \psi}{\delta z} - 1 \right) \tag{Gl. 2.2}$$

Die Gleichungen (2.1) und (2.2) ergeben zusammen:

$$\frac{\delta \theta}{\delta t} = \frac{\delta}{\delta z} \left(k(\theta) \left(\frac{\delta \psi}{\delta z} - 1 \right) \right) \tag{Gl. 2.3}$$

Falls bei dem betrachteten Standort eine aktive Pflanzendecke zu berücksichtigen ist, muss in den betreffenden Zeiträumen, neben der Wasserbewegung (Gl. 2.3), auch die Wasseraufnahme durch die Pflanzen berücksichtigt werden. Dazu wird in Gleichung (2.5) ein volumetrischer Senkenterm ($-S(z, t)$) eingefügt.

2.1.3 Der Fluss in der gesättigten Zone

Die bedeutendste Gesetzmäßigkeit zur Beschreibung des Grundwasserflusses ist das Darcy-Gesetz, welches aussagt, dass die Geschwindigkeit des Flusses bei laminarem Fließen proportional des hydraulischen Gradienten ist. Die Darcy-Geschwindigkeit des Grundwasserflusses, d.h. der volumetrische Fluss pro Flächeneinheit eines verbundenen Porenraumes, ist wie folgt definiert:

$$q = vn_e = -\frac{K}{n_e} \frac{\delta h}{\delta L} \quad (\text{Gl. 2.4})$$

mit q = Darcy-Geschwindigkeit [m^3/s]; v = Partikelgeschwindigkeit [m^3/s]; K = Hydraulische Leitfähigkeit [m/s]; n_e = Effektive Porosität: Volumen von verbundenen Poren geteilt durch das Gesamtvolumen der Matrix; $\delta h/\delta L$ = Hydraulischer Gradient: Änderung der hydraulischen Druckhöhe pro Längeneinheit.

Die Darcy-Geschwindigkeit steigt mit sinkender effektiver Porosität und beschreibt eine lineare Beziehung zwischen dem spezifischen Durchfluss und dem hydraulischen Gradienten. Das gilt für laminaren Fluss, welcher in den meisten porösen Materialien stattfindet. Die Fließgeschwindigkeit in porösen Böden und Gesteinen variiert von Dezimetern bis Metern pro Tag. In Wasserversorgungsgebieten, speziell bei künstlicher Grundwasseranreicherung, liegt die Fließgeschwindigkeit im Bereich 10 – 25 m/d in Extremfällen bis zu 300 m/d.

Das Darcy-Gesetz gilt für horizontale und vertikale Flüsse in der gesättigten und in der ungesättigten Zone. Die Fließrichtung hängt von der Formation der geologischen Einheiten, z.B. Aquifersystem, hydraulische Eigenschaften, Topographie, GW-Neubildung und dem Vorhandensein von Wasserförderung (-entnahme) ab. Der Transport von Schadstoffen, d.h. ob und wie sie mit dem Grundwasser transportiert werden, hängt von physikalischen, chemischen und biologischen Bedingungen ab.

2.1.4 Transport in der ungesättigten und gesättigten Zone

2.1.4.1 Quellen von Schadstoffen

Ein Schadstoff ist eine Verschmutzung, die die Nutzung von Wasser beeinträchtigt, d.h. Wasser muss gereinigt oder vorbehandelt werden, bevor es genutzt wird. Die Kontamination von Grundwasser geschieht, wenn es die Möglichkeit des Massentransportes gibt, durch abwärts gerichtete Perkolation von der Kontaminationsquelle zum Grundwasser. Die Quellen können diffus, punkt- oder linienförmig sein. Beispiele für diffuse Stoffeinträge sind die atmosphärische Deposition, für Punktquellen Lagerplätze und für Linienquellen undichte Rohrleitungen. Die Gefährdung einer Grundwasserressource hinsichtlich Kontamination mit Schadstoffen, die so genannte Verwundbarkeit, hängt von verschiedenen Aspekten ab.

2.1.4.2 Verwundbarkeit von Grundwassersystemen

Die Verwundbarkeit von Grundwassersystemen wird beeinflusst:

- *vom Ort, an dem der Schadstoff deponiert wird* – Eine Quelle, die sich direkt in der ungesättigten Zone befindet, z.B. Leckage von Abwasserleitungen, reduziert die Entfernung und die Laufzeit bis zur gesättigten Zone. Eine direkte Ablagerung in den Grundwassersystemen bewirkt eine unmittelbare Kontamination des Grundwassers.
- *von den hydrogeologischen Eigenschaften* – (Siehe Tabelle 2-1).
- *von den Eigenschaften des Schadstoffes* – Die chemischen Eigenschaften und die Phase des Schadstoffes sind wichtig für die Interaktionen mit Prozessen in der gesättigten und ungesättigten Zone.
- *von der Wasserförderung* – Die Förderung von Grundwasser führt z.B. zu schnelleren Fließgeschwindigkeiten im Aquifer und dadurch auch zur Ausbreitung des Schadstoffes.
- *von der Vegetation* – Wenn es einen gut entwickelten Bodenhorizont gibt, wird der Schadstofftransport durch Adsorption und Degradation reduziert. Dieser Prozess wird gefördert durch die mikrobielle Aktivität.

Tabelle 2-1: Prinzipielle hydrogeologische Merkmale, die die Verwundbarkeit eines Aquifers durch Kontaminanten beeinflussen (modifiziert nach Johnston, 1986).

Merkmale	Niedrige Verwundbarkeit	Hohe Verwundbarkeit
Ungesättigte Zone	Ausgeprägte ungesättigte Zone, mit hohem Gehalten an Ton und organischem Material	Dünne ungesättigte mit hohem Anteil an Sand, Kies, Kalk oder Basalt hoher Permeabilität
Abgrenzende Einheit	Ausgeprägte abgrenzende Einheiten von Ton oder Schieferen über dem Aquifer	Keine abgrenzende Schicht
Aquifer-Eigenschaften	Dichter Sandstein oder toniger Kalkstein mit geringer Permeabilität	Hohlraumreicher Kalkstein, Sand und Kies oder Basalt hoher Permeabilität
GW-Neubildungsrate	Vernachlässigbare GWN-Rate	Große GWN-Rate
Lage innerhalb des Fließsystems, z.B. Nähe zu Neubildungs- oder Entnahmegebieten	Lage in tiefen inaktiven Bereichen des regionalen Fließsystems	Lage in einem GWN-Gebiet oder innerhalb des Absenkungsbereiches eines Förderbrunnens

2.1.4.3 Stationäre oder instationäre Annahmen

Der wohl schwierigste Teil der Identifizierung der Grundwasserverwundbarkeit liegt in der Bewertung der in der ungesättigten Bodenzone während des Transports zur Grundwasseroberfläche wirkenden Abbau- und Rückhalteprozesse (Reinstorf u.a., 2001). Die Geschwindigkeit des Transportes von Substanzen hängt vom konvektiven Fluss mit dem Sickerwasser bzw. bei flüchtigen Stoffen von der Gas-Diffusion in der ungesättigten Bodenzone sowie von Sorptions-, Fällungs- und Abbauprozessen ab. Die Sickerwassergeschwindigkeit ist, wie auch einige andere (z.B. temperaturabhängige) Prozesse, zeitlich stark variabel. Bei der Bewertung der Mobilität einer Stoffkomponente wird vorzugsweise von einer konstanten Sickerrate ausgegangen (stationäre Annahme). Dieses ist jedoch unter natürlichen Bedingungen sehr selten der

Fall. Bei der Beantwortung der Frage, unter welchen Bedingungen die vereinfachende Annahme zulässig ist, treten zwei wesentliche Komplikationen auf, nämlich die Wasseraufnahme durch die Wurzeln der Pflanzen und der Infiltrationsprozess, welche beide nichtstationär sind (Roth, 1989). Es sei hier darauf hingewiesen, dass zeitlich und örtlich variable Fließbedingungen den Stofftransport wesentlich beeinflussen können.

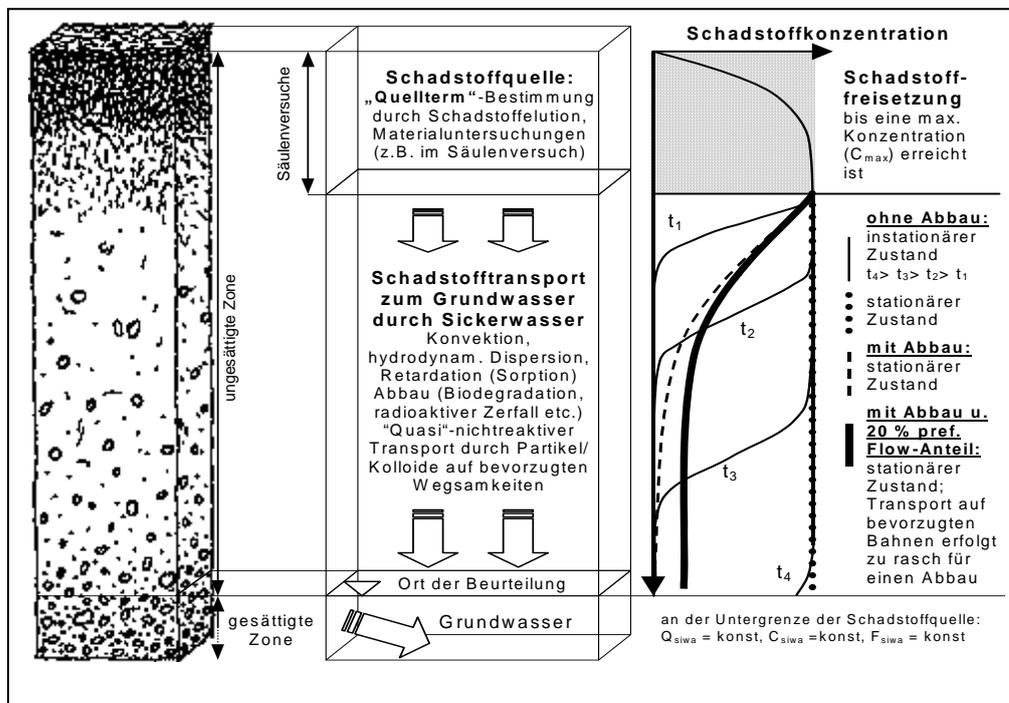


Abbildung 2-2: Vereinfachte Darstellung der ungesättigten Zone, der darin ablaufenden Prozesse und der Konzentrationsentwicklungen eines Schadstoffes im Sickerwasser unter Berücksichtigung verschiedener Prozesse (Reinstorf u.a., 2001).

Wenn für die Bewertung von kontaminiertem Material eher der mittlere Schadstoffeintrag ins Grundwasser und weniger Konzentrationsschwankungen bzw. Schwankungen der Stoffflüsse von Interesse sind, können stationäre Verhältnisse angenommen werden (siehe Abbildung 2-2), was die Sickerwasserprognose entscheidend erleichtert. Das heißt bei konstanter Sickerate, dass die Schadstoffflüsse und auch die sich einstellenden Schadstoffkonzentrationen im Sickerwasser aus dem kontaminierten Material heraus (Quellterm) als zeitlich konstant betrachtet werden dürfen. Bei Annahme stationärer Verhältnisse kann von einer mittleren Verlagerungsgeschwindigkeit nicht-reaktiver Stoffe (entspricht der Geschwindigkeit des Sickerwassers) bei Löss von ca. 60 cm/a und bei Feinsand von ca. 170 cm/a ausgegangen werden.

2.1.4.4 Transportmechanismen

Die drei wichtigsten Transportmechanismen in der gesättigten und ungesättigten Zone sind Konvektion, molekulare Diffusion und Dispersion.

Für den Massenfluss von Stoffen, die nur der Konvektion unterliegen gilt, dass eine kontinuierliche Konzentration c_0 , die ab einem Zeitpunkt t_0 am Ort z_0 in ein System gegeben wird, zur Zeit t_1 am Ort z_1 mit der Konzentration $c_1 = c_0$ beobachtet werden kann. Die Strecke, die der Stoff zurückgelegt hat, ist dann nur von der Fließgeschwindigkeit (Darcy-Geschwindigkeit)

des Wassers abhängig. Demnach steigt die Schadstoffgeschwindigkeit mit zunehmender effektiver Porosität der Matrix an. Wenn jedoch der Schadstoff relativ schlecht wasserlöslich ist, z.B. bei petrochemischen Produkten, kann sich das Ausbreitungsmuster deutlich vom Wasserfluss unterscheiden. In diesem Fall muss stattdessen ein Mehrphasenfluss berücksichtigt werden. Dabei wird angenommen, dass sich die Dichte der Schadstofflösung nicht zu stark von der des Wassers unterscheidet.

Die molekulare Diffusion wird durch thermische Bewegung der Moleküle verursacht und findet auch ohne Wasserbewegung statt. Die Ausbreitung des Stoffes wird durch das Fick'sche Gesetz beschrieben. Der Diffusionskoeffizient in einem porösen Medium weicht von den Diffusionskoeffizienten in freiem Wasser oder in der Gasphase ab, da er dem Einfluss der Porengeometrie und anderen Eigenschaften, wie z.B. der Temperatur und dem Wassergehalt unterliegt.

Die Dispersion wird durch ungleichmäßige Geschwindigkeitsverteilung der gelösten Stoffe und Teilchen beim Fließen durch ein poröses Medium verursacht (Abbildung 2-3).

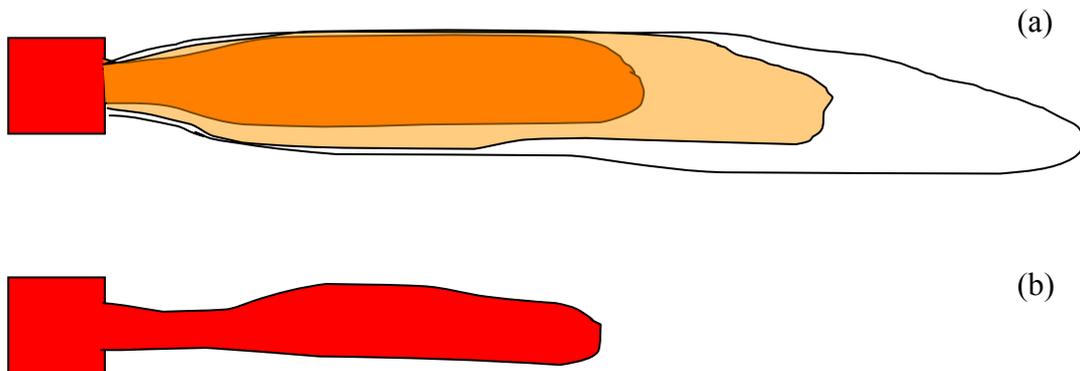


Abbildung 2-3: Die Ausbreitung der Verschmutzung durch (a) Dispersion und Konvektion und (b) nur durch Konvektion (nach Bedient et al., 1999). Die Schadstofffahne wird größer während das Konzentrationsmaximum infolge Dispersion sinkt.

Sie tritt nur auf, solange eine Wasserbewegung stattfindet. Die Variabilität der Transportrichtung und Transportrate wird durch nicht-ideale Bedingungen bezüglich der mikro-, meso- und makroskaligen Heterogenitäten hervorgerufen (Abbildung 2-4). Diese nicht-idealen Bedingungen rufen unterschiedliche hydrodynamische Dispersionen in horizontaler und vertikaler Richtung hervor. Die Dispersion wird deshalb durch zwei voneinander unabhängige Komponenten, die longitudinale (in der Strömungsrichtung) und die transversale (senkrecht zur Strömungsrichtung) Dispersion abstrahiert. Die longitudinale Dispersion ist deutlich größer als die transversale. Gelhar et al. (1992) recherchierten 106 Feldmessungen aus insgesamt 59 Feldstudien und fanden longitudinale Dispersivitäten zwischen 0,01 und 1mal der Transportweite, d.h. der Schadstofffahnenlänge. Die transversale Dispersivität hat einen Bereich zwischen 0,1 bis 1mal der longitudinalen Dispersivität (Freeze & Cherry, 1979). Auch gibt es eine Beziehung zwischen steigender Dispersivität bei steigender Transportweite (Domenico & Robins, 1984). Diese ist jedoch weiterhin Forschungsgegenstand (Engesgaard et al., 1996, Miralles-Wilhelm & Gelhar, 1996, Rajaram & Gelhar, 1995, Torbjarnson & Mackay, 1994). Weitere Informationen sind z.B. in Domenico & Schwartz (1998) enthalten. Da sowohl die

Dispersion als auch die molekulare Diffusion durch das Fick'sche Gesetz beschreibbar sind, werden beide meist zusammengefasst und als „hydrodynamische Dispersion“ bezeichnet.

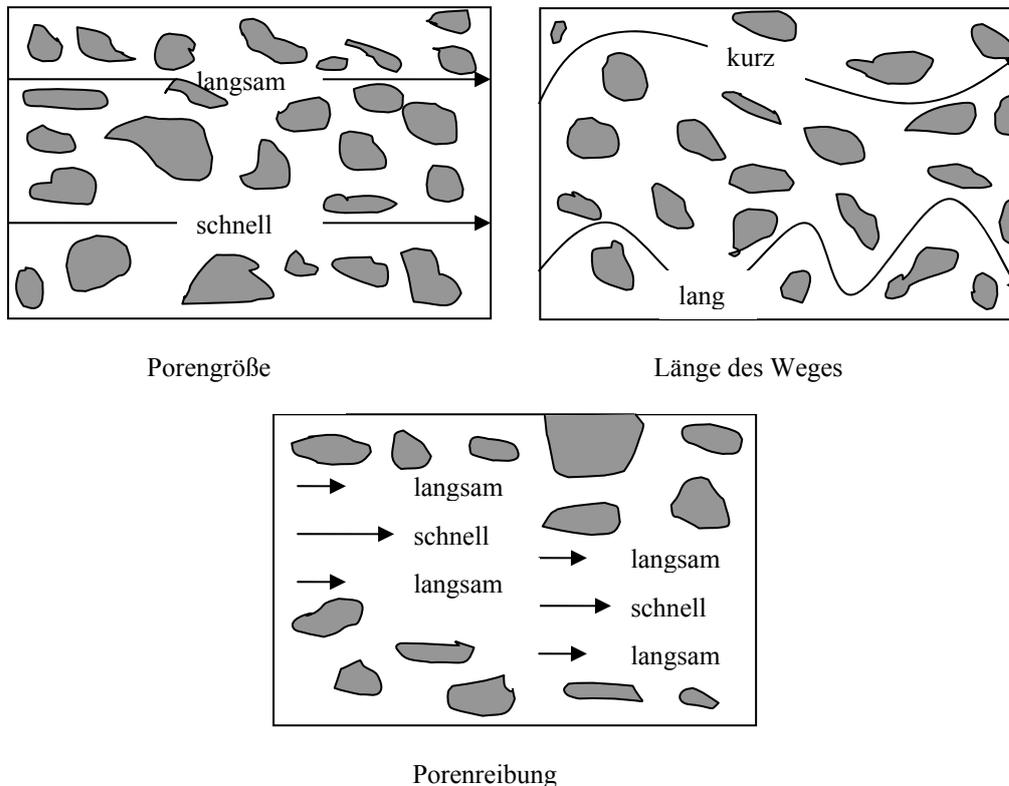


Abbildung 2-4: Faktoren, die die longitudinale Dispersion verursachen (nach Bedient et al., 1999).

Die mathematische Beschreibung erfolgt in vielen Modellen durch die Konvektions-Dispersions-Gleichung:

$$\frac{\delta \theta c}{\delta t} = \frac{\delta}{\delta z} \left(\theta D \frac{\delta c}{\delta z} \right) - \frac{\delta q c}{\delta z} - \partial S / \partial t \quad (\text{Gl. 2.5})$$

mit θ = volumetrischer Wassergehalt [cm^3/cm^3], c = Konzentration eines gelösten Stoffes in der Bodenlösung [mmol/cm^3], t = Zeitkoordinate [d], z = vertikale Koordinate [cm], D = Dispersionskoeffizient [cm^2/d], q = vertikaler Wasserfluss im Boden [$\text{cm}^3/\text{cm}^2 \cdot \text{d}$].

Diese Gleichung gilt für den stationären und instationären Transport von Stoffen im ungesättigten Bereich, und zwar für Stoffe, die nicht sorbierbar und für die keine Quellen und Senken vorhanden sind.

2.1.4.5 Sorption und biologischer Abbau

Prozesse, die die Sorption und den Abbau beeinflussen sind z.B. Redox-Prozesse, Adsorption/Desorption, biologischer Umbau und mikrobiologische Prozesse. Diese Prozesse sind, infolge höherer Anteile organischer Substanz, in der ungesättigten Zone oft von größerer Bedeutung als in der gesättigten. Jedoch sind sie in der ungesättigten Zone komplizierter, da sowohl Luft als auch Wasser vorhanden ist.

Diese natürlichen (physikalischen, chemischen und biologischen) Prozesse, die während des Flusses in der ungesättigten und gesättigten Zone stattfinden, sind für die Wasserversorgung

oft von Vorteil. So werden z.B. bei der Grundwasseranreicherung mit Oberflächenwasser oder kontaminiertem Grundwasser die Wässer infolge Bodenfiltration gereinigt.

Die *Sorption* von Schadstoffen im Untergrund verursacht eine Verzögerung des Stofftransports, die so genannte Retardation. Der Retardationsfaktor (R_d) ergibt sich aus dem Verhältnis der Abstandsgeschwindigkeit des Sickerwassers (v_{SiWa}) und der Geschwindigkeit des Schadstoffes (v_s). R_d kann unter Gleichgewichtsbedingungen direkt aus dem Verteilungskoeffizienten (K_d), der Trockenraumdichte (ρ_b) und dem wassererfüllten Porenraum bei der Feldkapazität (θ_{FK}) berechnet werden:

$$R_d = \frac{v_{SiWa}}{v_s} = 1 + K_d \frac{\rho_b}{\theta_{FK}} \quad (\text{Gl. 2.6})$$

Schadstoffe, die nicht abgebaut werden, kommen verzögert, aber irgendwann in unverminderter Konzentration am Ort der Beurteilung an (vgl. Abbildung 2-2). Der Verteilungskoeffizient kann bei nichtlinearer Sorption auch von der Konzentration abhängig sein. Dies wird bei einigen Modellen dadurch berücksichtigt, dass die Sorption über die Freundlich- oder Langmuir-Isotherme beschrieben wird. Ist dies nicht möglich, dann ist darauf zu achten, dass K_d zumindest für die zu betrachtende Konzentrationsspanne bestimmt wird, d.h. Linearisierung der Sorptionsisotherme bei der im Modell verwendeten Stoffkonzentration.

Die maximale Retardation wird nur dann erreicht, wenn sich beim Transport ein Gleichgewicht zwischen den im Sickerwasser gelösten Stoffen und den durch die festen Bodenbestandteile sorbierten Stoffen einstellt. Dies ist vor allem bei stückigem oder grobkörnigem Material sowie beim Sickerwassertransport auf bevorzugten Wegsamkeiten nicht immer gegeben. Die Sorptionskinetik wird nicht durch den eigentlichen Sorptionsvorgang (Anlagerung an eine Oberfläche), sondern durch die Zeit bestimmt, die notwendig ist, um über Diffusion zum Sorptionsplatz in der Bodenmatrix zu gelangen. In den meisten Modellen, die Sorptionskinetik berücksichtigen, wird dieser Diffusionsprozess durch einen Prozess erster Ordnung abgebildet. Modelle, welche dem physikalischen Prozess der Diffusion in die Matrix hinein Rechnung tragen, sind noch sehr selten.

Wie zuvor schon angedeutet wurde, ist die Quantifizierung der tatsächlich zu erwartenden Retardation sehr aufwändig und in der täglichen Praxis nicht ohne weiteres umsetzbar. Selbst wenn die effektiven Retardationsfaktoren richtig abgeschätzt werden könnten, würde man nur etwas über die zu erwartende Zeitverzögerung des Schadstoffeintrags ins Grundwasser erfahren.

Der *biologische Abbau* von Schadstoffen bedeutet dagegen eine echte dauerhafte Reduzierung der Fracht bzw. der Konzentration im Sickerwasser. In den betrachteten Modellen wird in der Regel das Transportverhalten von einzelnen Substanzen nachgebildet, nicht das von Gemischen. Meistens wird von einer Abbaukinetik 0. oder 1. Ordnung ausgegangen. Auf der Seite der Nachbildung des Abbaus und der Verlagerung von Substanzen in der ungesättigten Zone ist noch beträchtlicher Entwicklungsbedarf vorhanden (Reinstorf u.a., 2001).

Sieht man von möglichen Nitrit- und Ammoniumkonzentrationen ab, die durch Abbauvorgänge von Nitrat unter anaeroben Bedingungen entstehen, liegt die Hauptbelastung von Grundwässern mit Stickstoffverbindungen auf Seiten des leicht löslichen Nitrats. Vergleichbar mit der hohen Mobilität der Chlorid-Anionen, wird das Nitrat-Anion, wenn es einmal aus dem Aufnahmebereich von Pflanzenwurzeln ausgewaschen worden ist, nicht durch Ausfällung oder durch Adsorption aus dem Wasser entfernt.

Die Differenz zwischen Nitratanlieferung und der im Grundwasser resultierenden Nitratkonzentration ist auf verschiedene echte Eliminationsprozesse zurückzuführen. Im Grundwasserleiter dürften vor allem die beiden folgenden Reaktionen von Bedeutung sein, bei der denitrifizierende Bakterien die Reaktionen entscheidend katalysieren (Rohmann & Sontheimer, 1985):

Heterotroph-chemoorganotrophe Denitrifikation über organischen Kohlenstoff:



Autotroph-chemolithotrophe Denitrifikation z.B. durch Pyrit:



Beiden Reaktionen ist gemein, dass der Abbau von Nitrat zu molekularem Stickstoffgas (N_2) erfolgt. Ansonsten unterliegen sie vielen Wechselwirkungen und Abhängigkeiten, weshalb an dieser Stelle auf die Fachliteratur verwiesen wird (Rohmann & Sontheimer, 1985).

Welchen Anteil die unterschiedlichen Denitrifikationsvorgänge - als ein weiterer wäre die Nitrat-Sorption zu nennen - am Nitratabbau leisten, ist nur schwer zu ermitteln. Hierzu sollten neben der stochastischen Zusammensetzung des Aquifers auch Informationen über die Eh/pH-Bedingungen und die Reaktionskinetik bekannt sein. Unabhängig von der Art des Nitratabbaus muss festgestellt werden, dass jede Nitrateliminierung auch zu einer Erschöpfung der Reaktionspartner führt. Sind die hierfür notwendigen Stoffdepots einmal erschöpft, geht damit auch die Fähigkeit zur Denitrifikation verloren. Insgesamt bereitet die Abschätzung der Stickstoffverluste durch Denitrifikation heute noch Schwierigkeiten. Sie liegen zwischen nahe 0 für Wald und bis 29 kgN/ha/a für kohlenstoffreiche Ackerböden.

Eine Sorption von Stickstoff wurde z.B. von Kölle (1996) diskutiert. Sorption konnte in Laborversuchen nachgewiesen werden ist jedoch im Vergleich zum Abbau quantitativ von untergeordneter Bedeutung.

Schleyer & Kerndorff (1992) ermittelten statistisch als geogenen Normalbereich für Nitratgehalte im Grundwasser von Lockersedimenten 0,4 - 30 mg/l (Mittelwert: 10,5 mg/l). Ein anthropogen beeinflusster Bereich fehlt bei ihrer Auswertung. Der Grenzwert der TrinkwV (1990) ist 50 mg/l.

2.1.5 Boden- und Gewässerversauerung

Im Gegensatz zum Nitratproblem ist die Boden- und Gewässerversauerung ein, in der öffentlichen Argumentation, eher wenig beachtetes Problem. Es soll deshalb hier ausführlicher erläutert werden. Die folgenden Erläuterungen zur Versauerung sind Ergebnis eines Forschungsprojektes (Walther u.a., 2000).

2.1.5.1 Einführung in das Thema

Versauerungserscheinungen sind seit langem aus den karbonatarmen geologischen Formationen Skandinaviens und Nordamerikas bekannt. Anfang der achtziger Jahre machten verschiedene Veröffentlichungen von Untersuchungen am Bodenwasser (z.B. Ulrich, 1981a), an kleinen Fließgewässern (z.B. Schoen u.a., 1984), an Seen (z.B. Steinberg & Arzet, 1984) und im Bereich der Wasserversorgung im bewaldeten Mittelgebirge (z.B. Schretzenmayr & Röder, 1987) deutlich, dass Zentraleuropa gleichermaßen betroffen ist. Die mächtigeren Böden haben

hier allerdings die Wirkung der luftgetragenen Säurebildner länger gepuffert. Veröffentlichungen, die vermehrt gegen Ende der achtziger Jahre erschienen, zeigten, dass auch Grundwasserleiter zunehmend betroffen sind (Hultberg, 1981, Böttcher & Strebel, 1985). Fischer (1991) berichtet für die Stadtwerke Bielefeld, dass die Versauerung so weit fortgeschritten war, dass am Grundwasserleiter Gegenmaßnahmen in Form der Einleitung von Kalkmilch ergriffen werden mussten, um die Rohwassergewinnung sicherzustellen.

In Deutschland berücksichtigten die Wasserwirtschaftsverwaltungen der Bundesländer diese Entwicklung seit Mitte der achtziger Jahre zum Teil durch den Entwurf von Maßnahmenkatalogen zur Beobachtung der Situation und zur Abwehr der negativen Folgen der Versauerung, z.B. Schultz-Wildelau u.a. (1986). Auch wurden Pilotprojekte in besonders gefährdeten Gebieten (z.B. BLW, 1995) durchgeführt. Seit 1985 wurden von den Wasserwirtschaftsverwaltungen Grundwassermessnetze aufgebaut, mit denen unter anderem die Entwicklung der Wirkung luftgetragener Säurebildner erfasst werden kann. Der Aufbau und Betrieb von landesweiten Messnetzen der Deposition, mit denen Stoffeinträge über Niederschlag und Sedimentation über Staub und Aerosolen beobachtet werden können, gehört als notwendige Komplettierung dazu.

Im Zusammenhang mit dem Aufbau des Messnetzes Grundwasserbeschaffenheit in Niedersachsen wurden an 6 neu angelegten Messstellen an Dauerbeobachtungsflächen unter Wald Bohrkerne gewonnen und auf Versauerung untersucht. Zwei Standorte lagen im Solling, einer bei Göttingen, zwei in der Lüneburger Heide, einer in der Wingst und einer bei Westerberg. Fazit der Untersuchungen war, dass die Messstellen im Solling in einem Fall bis in 8 m Tiefe versauert waren. An den beiden Standorten Wingst und Westerberg konnte das Ausmaß der Versauerung in der Tiefe nicht festgestellt werden, da die Bohrungen nicht tief genug waren (Meiwes u.a., 1994). Mitte der achtziger Jahre waren an beiden Standorten wegen Schäden an den Forstbeständen vom Waldforschungszentrum der Universität Göttingen Untersuchungen durchgeführt worden, die auf die starke Versauerung der Böden hinwiesen.

2.1.5.2 Begriffserläuterungen und Kriterien der Versauerung

Eine ausführliche Beschreibung der wichtigsten Begriffe und zu Methoden der Identifizierung und Bewertung ist in Walther u.a. (2000) und Reinstorf et al. (2001) enthalten. Grundlegende Zusammenhänge und Begriffe sollen im Folgenden erläutert werden.

Unter Versauerung versteht man die Abnahme des Vermögens Säure zu puffern (Abnahme der Pufferkapazität) bzw. die langfristige Verringerung der Säureneutralisationskapazität in der gelösten und der Festphase der ungesättigten und gesättigten Zone. Sie ist messbar als Zunahme der Acidität bzw. als Abnahme der Alkalinität des Gesamtsystems (Gl. 2.9 und 2.10). Abbildung 2-5 illustriert mögliche Konsequenzen einer Verringerung des Säurepuffervermögens für die Wasserbeschaffenheit, die sich z.B. in einer Verringerung des pH-Wertes, einer möglichen Aufhärtung sowie in einer Aluminium- und Schwermetallmobilisierung dokumentieren kann.

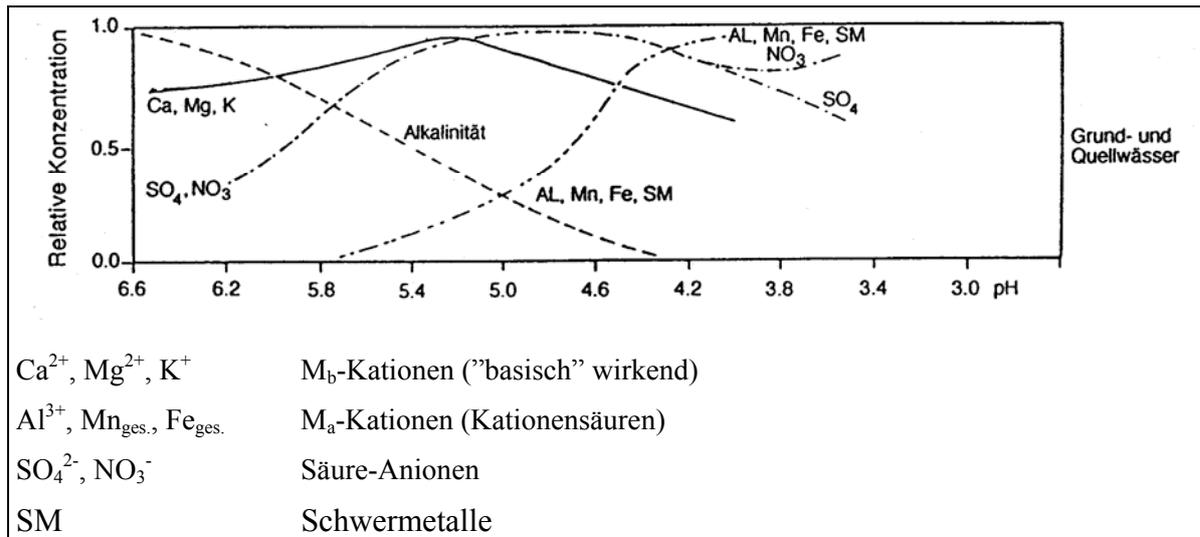


Abbildung 2-5: Versauerungsphasen im Grundwasser, nach DVWK (1997).

Die Säurepufferung in der wässrigen Phase erfolgt in der ungesättigten und gesättigten Zone einmal als phaseninterner Prozess. Diese Pufferung ist mit der Pufferung in Oberflächenwässern vergleichbar. Die Beschaffenheit der wässrigen Phase richtet sich dann hauptsächlich nach der Art des Pufferprozesses.

Eine zentrale Bedeutung kommt hier den Begriffen Acidität und Alkalinität (Konzept der starken Säuren und Basen) zu. Sie sind wie folgt definiert (Van Breemen et al., 1983 und 1984; Sigg & Stumm, 1994; Uhlmann, 1990):

$$Aci = 2[SO_4^{2-}] + [Cl^-] + [NO_3^-] + \dots - [Na^+] - [K^+] - 2[Ca^{2+}] - 2[Mg^{2+}] \quad (Gl. 2.9)$$

$$Alk = [HCO_3^-] + 2[CO_3^{2-}] + [R-COO^-] + [OH^-] + \dots - [NH_4^+] - [H^+] - 3[Al^{3+}] \quad (Gl. 2.10)$$

Zwischen Acidität und Alkalinität besteht folgender Zusammenhang:

$$Aci = -Alk \quad (Gl. 2.11)$$

Das Konzept führt methodisch zur Bilanzierung starker Säuren und Basen

$$Aci = \sum \text{starke Säuren} - \sum \text{starke Basen} \quad (Gl. 2.12)$$

Das Aciditäts-/Alkalinitäts-Konzept differenziert streng zwischen dem pH-Wert als Maß der Wasserstoffionenaktivität wässriger Lösungen und der Acidität als Maß der starken Säuren bzw. der Alkalinität als Maß der starken Basen (Stumm & Morgan, 1996). Unter Versauerung wässriger Lösungen wird dann im Allgemeinen der Verlust von Alkalinität verstanden.

Außerdem bezeichnet die Alkalinität das Vermögen des Wasserkörpers, der Zufuhr von Säure nicht im gleichen Maße mit einer Verringerung des pH-Wertes zu folgen. Dieser Sachverhalt verdeutlicht auch den Unterschied zwischen dem Konzentrationsparameter pH-Wert und dem Kapazitätsparameter Alkalinität. Ersterer wird zwar oft zur Versauerungscharakterisierung eingesetzt, ist aber laut Definition nur ein Bestandteil der realen Versauerung.

In weitaus stärkerem Maße erfolgt die Säurepufferung jedoch durch Prozesse in der Festphase, die im Zug der Wechselwirkung der Phasen stattfinden (Sickerwasser/Grundwasser \leftrightarrow Feststoff). Zu diesen Prozessen gehören hauptsächlich die Verwitterung und der Kationenaustausch. Der Gehalt an Kationen (Na⁺, K⁺, Mg²⁺, Ca²⁺, Al³⁺, Mn²⁺, Fe²⁺, H⁺) bei aktuellem

pH-Wert im Bodeneluat (Gleichgewichtsbodenlösung, GBL), ist ein geeignetes Maß zur Kennzeichnung des Versauerungszustandes der Festphase im Untergrund. Stoffeinträge, die sich letztlich auch in einer Veränderung der Austauschbelegung niederschlagen, führen langfristig zu einer nachhaltigen Beeinflussung der Wasserbeschaffenheit.

Das Substrat des Untergrundes hat für die Beurteilung hinsichtlich der Versauerung eine große Bedeutung. Von ihm hängt primär ab, ob ein Standort gegenüber Versauerung empfindlich ist oder nicht. Es ist über verschiedene Puffermechanismen in der Lage, der mit dem Eintrag von Protonen einhergehenden pH-Absenkung einen Widerstand entgegenzusetzen. Die bei absinkendem pH-Wert aufeinander folgenden Pufferreaktionen werden nachfolgend erläutert.

Unterhalb einer definierten Schwelle der Basensättigung BS verringert sich das Puffervermögen von Kationenaustauschern drastisch ($BS < 5-20\%$, Al-Sättigung $> 80-95\%$). Das hat vor allem für tiefere Schichten der ungesättigten Zone Konsequenzen, da dort bei gleichbleibendem Säureeintrag weniger Basen zugeführt werden (Tiefenwirkung der Versauerung). Die Versauerungsfront driftet nach Verlassen der Bodenzone dann schneller voran, wenn pufferschwache und austauscharme Sedimente vorherrschen.

Nach Definitionen aus dem Bereich der Waldforschung wurden Sickerwässer, die unter einem pH-Wert von 5 lagen, als versauert eingestuft. Nach Ulrich et al. (1989) gilt ein Boden als versauert, wenn der Äquivalentanteil der **M_b-Kationen** $\leq 80\%$ der **KAK_{pot}** (potenzielle Kationenaustauschkapazität) ist und der **pH-Wert (CaCl₂)** ≤ 5 ist.

Andere Autoren verwenden andere Kriterien oder Maßstäbe. In LWF (1998) beispielsweise wird die Basensättigung (BS) als einziges Maß verwendet und der Versauerungsgrad in Abhängigkeit von dem BS-Tiefenprofil in 5 Typen eingeteilt. UVM (1997) wiederum sieht Hinweise für eine zunehmende Bodenversauerung in einer Vielfalt von zeitlichen und räumlichen Änderungen der Bodenkennwerte, wie Abnahme der pH-Werte, Veränderungen der Austauscherbelegung, z.B. durch Abnahme der Basensättigung, selektive Versauerung im Bereich des Stammabflusses bei Buche, selektive Veränderung der Austauscherbelegung an den Aggregatoberflächen. Die Aufzählung ließe sich noch beliebig erweitern. Zur Bewertung innerhalb dieses Projektes wurde deshalb die o.g. Methode nach ULRICH gewählt.

Die **Basensättigung (BS)** beruht auf der Konzentration der Metallkationen in der Bodenlösung. Bei den Metallkationen werden in zwei Gruppen berücksichtigt:

1. M_b-Kationen (b von basic) und
2. M_a-Kationen (a von acidic).

Zu den M_b-Kationen zählen die Erdalkali- und Alkali-Ionen (K⁺, Na⁺, Ca²⁺, Mg²⁺). Sie wirken bei Freisetzung basisch, indem sie H₃O⁺-Ionen puffern, z.B. bei der Verwitterung von Silikaten. Außerdem lösen sich die Oxide dieser Kationen in Wasser unter Bildung alkalischer ("basischer") Hydroxide. M_b-Kationen werden verkürzt als „Basen“ bezeichnet. Von großer Bedeutung ist der Vorrat an austauschbaren M_b-Kationen, da diese einen wirksamen Puffer gegenüber Säurezufuhr darstellen. Je größer dieser Pool und je höher die BS, desto größere Säuremengen können durch Austausch am Feststoff im Untergrund zurückgehalten werden, ohne dass in der Bodenlösung nennenswerte Veränderungen des pH-Wertes auftreten. Ihr Äquivalentanteil an der gesamten KAK_{pot} in [%] heißt Basensättigung. Die Basensättigung wird nach Gl. 2-13 bestimmt (Schlichting u.a., 1995).

$$BS = \frac{S - Wert}{KAK_{pot}} \cdot 100 \quad (Gl. 2.13)$$

KAK_{pot} ... potentielle Kationenaustauschkapazität [mmol/kg] (Erläuterung s.u.), S-Wert ... Metallkationen (Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+) + NH_4^+

Zu den M_a -Kationen gehören Al^{3+} , Mn_{ges} , Fe_{ges} , Zn^{2+} und bei einigen Substraten auch H^+ ; sie werden auch als Säurekationen oder Kationensäuren bezeichnet

Die **effektive Kationenaustauschkapazität** KAK_{eff} beschreibt die Summe aller effektiv austauschbaren Kationen beim aktuellen pH-Wert des Bodens [mmol/kg].

$$KAK_{eff} = \sum \text{Kationenäquivalente beim aktuellen pH des Bodens} \quad (\text{Gl. 2.14})$$

Daneben gibt es die **potentielle Kationenaustauschkapazität** KAK_{pot} bei pH-Wert 7 - 8. Sie ist in sauren Böden häufig bedeutend größer als die KAK_{eff} . Die Bestimmung der KAK_{pot} wird nach der Methode nach Kappen/Schachtschabel (in Schlichting u.a., 1995) durchgeführt. Die KAK_{pot} ergibt sich zu:

$$KAK_{pot} = S - \text{Wert} + H - \text{Wert} \quad (\text{Gl. 2.15})$$

mit S-Wert bzw. H-Wert.

Die **Pufferkapazität** P_k entspricht der zutitrierten Säuremenge (Menge an Protonen), um eine pH - Abnahme vom Ist-pH-Wert (pH_1) auf den Ziel-pH-Wert (pH_2) zu erreichen. Daraus schließt man auf die Pufferkapazität des Materials des Untergrundes. Eine weitere Möglichkeit zur Ermittlung des Kennwertes ergibt sich indem man die Konzentrationsdifferenz der zutitrierten Säure ins Verhältnis zur Änderung des pH-Wertes setzt. Letzter Weg wesentlich kostengünstiger durchzuführen (keine Analyse der Kat- und Anionen zur Berechnung der A_{ci}).

$$PK = A_{ci}(pH_2) - A_{ci}(pH_1) = dC_A / dpH \quad (\text{Gl. 2.16})$$

Die **Säureneutralisationskapazität** SNK hängt von der Menge der Puffersubstanzen der Böden ab und ist ein quantitativer Ausdruck für ihre Pufferkapazität gegenüber Säuren. Sie ist gleich der Summe aller Metallkationen, die durch Anionen schwacher Säuren oder schwach saurer funktioneller Gruppen gebunden sind.

$$SNK = [A^-] + [OH^-] - [H^+] \quad (\text{Gl. 2.17})$$

mit $[A^-]$... Säureanion, $[OH^-]$... OH-Ionen, $[H^+]$... H^+ -Ionen, $[]$... Aktivitäten

Ulrich (1981a) und andere Wissenschaftler haben **Pufferbereiche bzw. -systeme** definiert. Die Auflistung (Tabelle 2-2) dieser Pufferbereiche mit Formelbeispielen und pH-Wert-Spannen ist zum Teil aus Hölscher & Walther (1986) entnommen; dort wird auf die Originalquellen (z.B. Ulrich, 1981a und 1981b; Van Breemen et al., 1983 und 1984) verwiesen. Die Formeln in der Tabelle sind Beispiele für die Reaktionen, nach denen die Pufferung der Säure ablaufen kann.

Die **Versauerungsfront** ist per Definition die Initialphase der Versauerung. Sie ist definiert als abwärts wandernder Tiefenbereich der Unterschreitung der Basensättigung von 80 % und Übergang (Grenzschicht) vom Silikat- in den Austauschpufferbereich bzw. der Basensättigung auf Werte < 80 % (Ulrich & Malessa, 1989; Malessa u.a., 1997). Oberhalb davon befindet sich eine wenige Dezimeter mächtige Zone, in der ankommende Protonen und Kationsäuren durch den Austausch mit M_b -Kationen gepuffert werden (Zone der Kationenaustauschpufferung). Es soll nicht unerwähnt bleiben, dass andere Autoren andere Kriterien zur Ermittlung der Versauerungsfront zugrunde legen (Warfvinge et al., 1993; Sverdrup et al., 1995).

Tabelle 2-2: Pufferbereiche, zusammengestellt aus Ulrich et al. (1981a) und Krieter (1991).

Karbonatpufferbereich	(pH = 8,0 - 6,2)
$\text{CaCO}_3 + \text{H}^+ \rightarrow \text{Ca}^{2+} \downarrow + \text{HCO}_3^-$	
$\text{Ca}^{2+}_{\text{ex}} + 2\text{H}^+ \rightarrow \text{Ca}^{2+} + 2\text{H}^+_{\text{ex}}$	
Beispiele für Pufferraten:	
Würmeiszeitliche Löss:	2 kmol H ⁺ /ha*a
Calluna Podsol (Geest):	0,2 kmol H ⁺ /ha*a
Schwarzwaldböden auf Granit, Ignimbrit und Gneis:	0,2-0,4 kmol H ⁺ /ha*a
Silikatpufferbereich	(pH = 6,2 - 5,0)
$\text{KAlSi}_3\text{O}_8 + \text{H}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{K}^+ \downarrow + \text{Al}(\text{OH})_3 + 3\text{SiO}_2 \downarrow$	
Beispiele für Pufferraten:	
lößbedeckter Buntsandstein:	0,5 - 0,7 kmol H ⁺ /ha*a
podsolige Braunerde (Solling):	0,14 kmol H ⁺ /ha*a
Kationen-Austauscherpufferbereich	(pH = 5,0 - 4,2)
$[\text{AlOOH}]_n (\text{Tonmineral}) + 0,5n \text{H}^+ + n\text{H}_2\text{O} \rightarrow [\text{Al}(\text{OH})_{2,5}^{0,5+}]_n (\text{Zwischenschicht}) + 0,5n \text{H}_2\text{O}$	
Beispiele für Pufferraten:	ca. 0,2 kmol H ⁺ /ha*a
gesamte Austauschkapazität:	7 kmol H ⁺ /‰Tongehalt*ha*1t/m ³ *dm
Al - und Fe - Oxid-Pufferbereich	(pH < 4,2)
$\text{Al}(\text{OH})_3 + 3\text{H}^+ \rightarrow \text{Al}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O}$	
Beispiele für Pufferraten:	
$\text{Fe}(\text{OH})_3 + 3\text{H}^+ \rightarrow \text{Fe}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O}$	0,2 kmol H ⁺ /ha*a pro 1 ‰Tongehalt
Die Pufferrate im Eisen-Pufferbereich kann bis zu 2 kmol H ⁺ /ha*a betragen.	

2.2 Regionalisierungsmethoden für Gebietsdaten

In der Regel muss die im Feld gewonnene Punktinformation aus Boden- oder Wasseranalysen oder von Sammelgefäßen auf die Fläche übertragen - also regionalisiert - werden. Im Folgenden werden ausgewählte Regionalisierungsmethoden vorgestellt. Die Methoden werden nachfolgend beispielhaft anhand von Daten des atmosphärischen Stoffeintrages angewendet und bewertet (siehe Kapitel 3). Die untersuchten Methoden sind die deterministische Methode des Inverse Distance Weighting (IDW) sowie die geostatistischen Methoden des Ordinary Kriging (OK) und External Drift Kriging (EDK). Weiterhin wurden prozessbasierte chemische Transportmodelle (CTM) untersucht (Siehe Abschnitt 2.3.1) und hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit bewertet (Abschnitt 2.3.1.2).

2.2.1 Deterministische Interpolationsmethoden

Die Grundlage der deterministischen Interpolationsmethoden ist das Prinzip der einfachen Mittelung. Die Genauigkeit der Ergebnisse dieser Methoden hängt allein von der verfügbaren Datendichte und der Verteilung der Dateninformation in der Fläche ab. Die IDW-Methode, beispielsweise, wichtet die Daten invers proportional zu der quadratischen Distanz d_i vom Schätzpunkt um einem nicht beobachteten Punkt u_i zu schätzen (Isaaks and Srivastava, 1989):

$$z_{IDW}^*(u) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{d_i^2} * z(u_i) / \sum_{i=1}^n \frac{1}{d_i^2} \quad (\text{Gl. 2.18})$$

mit $z_{IDW}^*(u)$ als Schätzwert am Punkt u , $z(u_i)$ als Beobachtungswert der Variable z am Beobachtungspunkt u_i , d_i als Distanz des Beobachtungspunktes i zum Schätzpunkt, und n als Anzahl der Beobachtungspunkte.

Im Unterschied zur einfachen arithmetischen Mittelung berücksichtigt diese Methode die Distanz zwischen den Punkten. Eine steigende Distanz zwischen Beobachtungspunkt und Schätzpunkt bedeutet einen sinkenden Einfluss des Beobachtungspunktes.

2.2.2 Geostatistische Interpolationsmethoden

Eine größere Anzahl von Methoden gehört zur Gruppe der Krigingmethoden, welche zu den geostatistischen Interpolationsmethoden gezählt werden. Als allgemeine Charakteristik berücksichtigen sie die räumliche Verteilung der Messwerte durch die Verwendung der Variogrammanalyse. Für eine stationäre Zufallsfunktion ist das Variogramm wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} 2\gamma(h) &= \text{Var}\{Z(u+h) - Z(u)\} \\ \gamma(h) &= C(0) - C(h), \forall u \end{aligned} \tag{Gl. 2.19}$$

mit $C(h)$ als stationäre Kovarianz, und $C(0) = \text{Var}\{Z(u)\}$ als stationäre Varianz. Allgemeiner gesagt, ist das Variogramm ein Maß der räumlichen Variabilität und die Variogrammdistanz misst den Grad der Unähnlichkeit zwischen einem unbeobachteten Punkt $z(u)$ und einem benachbarten Datenpunkt.

Ordinary Kriging (OK) (z.B. Matheron, 1971, zitiert in Bardossy, 1993; Deutsch und Journel, 1998) ist eine univariate Methode, die einen Wert an einem Punkt in einer Region schätzt für die ein Variogramm vorliegt. Dabei werden Daten der Nachbarschaft genutzt. OK ist ein exakter Interpolator, da an den Beobachtungspunkten der geschätzte und der beobachtete Wert identisch sind. In anderen Worten, die simulierte Parameterverteilung ist konditioniert. Die Stationarität der Zufallsfunktion wird angenommen. Der OK-Schätzer ist:

$$z_{OK}^*(u) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{(OK)}(u) z(u_i) \tag{Gl. 2.20}$$

mit $z_{OK}^*(u)$ als Schätzwert am Punkt u , $\lambda_i^{(OK)}(u)$ als Gewichte und $z(u_i)$ als Beobachtungswert der Variable z am Beobachtungspunkt u_i

Genauere Ergebnisse als mit dem univariaten OK können mit geostatistischen Verfahren, wie dem External Drift Kriging (EDK) (Ahmed and DeMarsily, 1987) erzielt werden. EDK ermöglicht die Berücksichtigung von instationären Bedingungen. Der EDK-Schätzer ist:

$$z_{EDK}^*(u) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^{(EDK)}(u) z(u_i), \text{ und} \tag{Gl. 2.21}$$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n \lambda_j^{(EDK)}(u) C_R(u_j - u_i) + \mu_0(u) + \mu_1(u) y(u_i) = C_R(u - u_i), \alpha = 1, \dots, n \\ \sum_{j=1}^n \lambda_j^{(EDK)}(u) = 1 \\ \sum_{j=1}^n \lambda_j^{(EDK)}(u) y(u_j) = y(u) \end{cases} \tag{Gl. 2.22}$$

mit den $\lambda_i^{(EDK)}$'s als Kriging-Gewichte, die μ 's als Lagrange-Parameter und C_R als Kovarianz.

Jedoch muss eine mit der Hauptvariablen gut korrelierte Driftvariable vorhanden sein. Auf diesem Weg kann die Informationsdichte erhöht werden. Bei EDK muss die räumlich variate

externe Driftvariable Y eine lineare Funktion des räumlich variaten Erwartungswertes E der Hauptvariable z am Punkt u sein. Das Trendmodell lautet dann:

$$E\{Z(u)|Y(u)\} = a + b * Y(u) \quad (\text{Gl. 2.23})$$

mit E als Erwartungswert, $Z(u)$ als Parameterwert der Zusatzinformation am Punkt u , a und b als Parameter und $Y(u)$ als die räumlich variate externe Driftvariable.

2.3 Numerische Modelle zum Stofftransport

Im Folgenden soll der Versuch unternommen werden unterschiedliche Arten von numerischen Modellen, die teilweise bereits in Managementsystemen eingesetzt werden, zu charakterisieren. Es werden Transportmodelle für den atmosphärischen Stoffeintrag, Modelle für die Gefahrenbeurteilung für den Pfad Boden – Grundwasser (Sickerwasserprognose), Modelle für den Stickstoffumsatz in der ungesättigten Zone und Transportmodelle für die gesättigte Zone bewertet. Im Ergebnis dieser Modellbewertung werden ein Boden- und ein Grundwassermodell ausgewählt, die dann im Rahmen der gekoppelten Modellierung (Kapitel 5) und Entscheidungsfindung (Kapitel 6) Anwendung finden.

2.3.1 Chemische Transportmodelle für den atmosphärischen Stoffeintrag

2.3.1.1 Modellbeschreibung

Es sind verschiedene chemische Transportmodelle (CTM) für verschiedene Zwecke verfügbar, die prinzipiell die Regionalisierung von Stoffdepositionen aus der Atmosphäre ermöglichen. Drei Modelle für typische Anwendungen wurden ausgewählt und im Folgenden kurz erläutert.

Das gekoppelte Modellsystem METRAS-MUSCAT wurde erstellt für die Simulation von reaktiven Substanzen in der Mesoskala. Es wurde im INTERREG-II-Projekt OMKAS (OMKAS, 2000) angewendet, um die Effekte von ausgewählten emissionsreduzierenden Maßnahmen im so genannten „Schwarzen Dreieck“ (die Grenzregion zwischen Deutschland, Polen und Tschechien) auf die Immissionen und Depositionen abzuschätzen. METRAS (Schlünzen et al., 1996) ist ein „3D nicht-hydrostatisches Meteorologiemodell“, das mit einem „Grundfolgenden Koordinatensystem“ arbeitet. MUSCAT (Knoth and Wolke, 1998) ist ein CTM, welches den Transport, Deposition und Umwandlung von Stoffen durch die Verwendung des chemischen Mechanismus Euro-RADM (Stockwell and Kley, 1994) berechnet. Berücksichtigte Randbedingungen sind u.a. Topographie und Landnutzung in hoher räumlicher Auflösung (OMKAS, 2000).

Das Ferntransportmodell EMEP (European Monitoring and Evaluation Programme for Investigations of the Transborder Transport of Air Pollution) (Erisman and Draaijers, 1995) gehört zu den deterministischen Lagrange-Modellen und wird für die Quantifizierung der Frachten der Substanzen SO_2 , NH_3 , NO , NO_2 , HNO_3 , NO_3^- , SO_4^{2-} und NH_4^+ verwendet, die grenzüberschreitend transportiert werden. Um eine Darstellung der Gesamtdosition (150 X 150 km Raster) zu erhalten, werden die Immissionskonzentrationen aus Emissionskarten (50 x 50 km Raster) berechnet.

Das Modell EDACS (European Deposition of Acidifying Components on a Small Scale) ermittelt die Trockendeposition für 6 Landnutzungsklassen unter Verwendung der Interferenz-

methode (van Leeuwen et al., 1996; Draaijers et al., 1996). In EDACS wird das EUTREND Modell (van Jaarsveld, 1995; Bleeker et al., 2000) genutzt um die rezeptorspezifische Ammoniak/Ammonium (NH_x)-Trockendeposition zu ermitteln. Die Substanzen SO_2 und SO_4^{2-} , die Aerosole (SO_x), NO , NO_2 (NO_x), HNO_3 und NO_3^- - Aerosol, NH_3 und NH_4^+ - Aerosole (NH_x) und Na^+ , Ca^{2+} , K^+ , Mg^{2+} - Aerosole werden berücksichtigt. Die Trockendeposition der basischen Kationen Na^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} und K^+ wird bestimmt aus der regionalen jährlichen Nassdeposition (Ergebnisse der Darstellung der Nassdeposition in einem 1x1 km Raster). Das EDACS-Ergebnis wird als Karte in einem 1x1 km Raster für die Landnutzungsklassen urbane, landwirtschaftliche Flächen, Nadel-, Laub- und Mischwald, wie sie von CORINE (Coordination of Information on the Environment) vorliegen. Die Gesamtdeposition wird dann in einem Raster von 10x20 km, durch Interpolation von gemessenen Daten der Nassdeposition, die von der Trockendeposition überlagert wird, bestimmt. Diese wird unter Verwendung eines Widerstandsmodells, z.B. EDCAS, berechnet.

2.3.1.2 Anwendbarkeit für die Regionalisierung

Der Vorteil der CTMs ist deren Möglichkeit der Simulation der Deposition mit einer hohen räumlichen und zeitlichen Auflösung. Beispielsweise ist des EDACS-Ergebnis ein Raster mit einer im Vergleich zur den Depositionsmessnetzen sehr hohen Auflösung. Die Berechnung erfolgt mit einem hohen Grad an Prozessbezogenheit. Im Vergleich dazu ist der Nachteil der sehr großen Menge an Eingangsdaten, z.B. nutzt EDACS 6-Stunden-Mittelwerte der meteorologischen Parameter Globalstrahlung, Temperatur, Luftfeuchte, Windgeschwindigkeit u.a. Weiterhin basiert EDACS nicht auf den Beobachtungsdaten der Messnetze sondern auf Immissionskonzentrationen, die wiederum mit dem EMEP-Modell berechnet wurden. Das EMEP-Modell – ein großskaliges Modell – verwendet die chemische Zusammensetzung des Niederschlages auf Tagesbasis an 106 Beobachtungsstationen in 25 europäischen Ländern.

Das Modell METRAS nutzt Emissionsdaten in der „höchsten Auflösung, die verfügbar ist“. Zusätzlich werden Anfangswerte für verschiedene Spezies benötigt. Das implementierte chemische Reaktionsschema ist entweder das kompakte EMEP-Schema mit 11 Reaktionen und 13 Spezies oder ein photolytisches Schema mit 173 Reaktionen und 73 Spezies. Das heißt, die gleiche Zeitauflösung wie beim bereits erwähnten EMEP-Modell, ist dafür erforderlich.

Diese Fakten zeigen, es gibt vielfältige Gründe warum die beschriebenen Modelle nicht für die Regionalisierung der Depositionsdaten geeignet sind:

- Die Depositionsdaten der existierenden Messnetze sind gegenwärtig nicht in der erforderlichen Zeitauflösung verfügbar.
- Die benötigten Parameter sind schwer zu ermitteln.
- Die Datenverarbeitung erfordert einen hohen Aufwand.

Weiterhin sind die genannten Modelle wissenschaftlich sehr anspruchsvoll, d.h. nur wenige Spezialisten sind überhaupt in der Lage diese Modelle zu betreiben. Außerdem muss erwähnt werden, dass die CTMs nicht für das Ziel der Regionalisierung von Depositionsdaten entwickelt wurden, sondern zur Verbesserung des Prozessverständnisses und für mathematische Simulationen zu Prognosezwecken. Wenn jedoch die Ermittlung der Gesamtdeposition das Ziel ist, gibt es aus unserer Sicht keine Alternative für die Verwendung der CTMs zur Ermittlung der Trockendeposition, die dann zu der interpolierten Nassdeposition addiert werden muss.

2.3.2 Modelle für die Sickerwasserprognose, Anwendung und Fazit

Nach dem Bundesbodenschutzgesetz (BBodSchG, 1998) basiert die Gefahrenbeurteilung für den Pfad Boden – Grundwasser auf den im Sickerwasser zu erwartenden mobilen Schadstoffkonzentrationen. Der Ort der Beurteilung einer von kontaminiertem Bodenmaterial eventuell ausgehenden Gefahr für das Grundwasser ist der Bereich des Übergangs von der ungesättigten in die gesättigte Zone (BBodSchV, 1999). Für den Fall, dass eine direkte Beprobung des Sickerwassers am Ort der Beurteilung nicht möglich ist, können die sich im weiteren Zeitverlauf einstellenden Stoffkonzentrationen und -frachten im Sickerwasser sowie der Schadstoffeintrag ins Grundwasser abgeschätzt werden (= Sickerwasserprognose). Nach BBodSchV (Anhang 1, 3.3) kann die Sickerwasserprognose auf der Grundlage von Materialuntersuchungen im Labor, von *in-situ* Untersuchungen oder durch Rückrechnung aus Grundwasseruntersuchungen im Abstrom erfolgen. Ist der Ort der Probennahme nicht mit dem Ort der Beurteilung identisch, dann kann zur Abschätzung des Stofftransports ins Grundwasser insbesondere die Abbau- und Rückhaltewirkung der ungesättigten Zone berücksichtigt werden.

Die Absicht dieses Abschnittes ist es Modelle zum Transport von gelösten Stoffen in der ungesättigten Zone vorzustellen, ohne dass dabei ein Anspruch auf Vollständigkeit erhoben wird.

Die Anlage 2-1 enthält eine Übersicht der recherchierten Modelle, generelle Informationen dazu sowie eine Auflistung von Prozessen, die die Modelle berücksichtigen bzw. nicht berücksichtigen. Es wird darauf hingewiesen, dass aus den zur Verfügung stehenden Unterlagen oder Internet-Informationen nicht immer klar hervorging, welche Prozesse tatsächlich mit dem jeweiligen Modell abgebildet werden können. Die Anlage 2-1 erhebt daher sowohl hinsichtlich der Zahl der aufgelisteten Modelle als auch der abgebildeten Prozesse, keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Die Internet-Adressen befinden sich in der Legende zur Tabelle.

Die meisten Modelle können in die Gruppe der prozessbezogenen Modelle eingeordnet werden, weil sie mathematische Beschreibungen von Einzelprozessen und deren Wechselwirkungen beinhalten.

Der primäre Unterschied zwischen den Modellen besteht jedoch in der Detailliertheit mit dem die fundamentalen Prozesse behandelt werden und in der Vollständigkeit der Zahl der Prozesse, die das jeweilige Modell berücksichtigt. Unterschiede bestehen auch in der Art und Weise, mit der zeitliche und räumliche Variationen der Prozesse Berücksichtigung finden.

Rao et al. (1982) nennen folgende Faktoren, auf die im Allgemeinen die Unterschiede zwischen Modellen zurückzuführen sind:

- Gegenwärtiger Stand des Systemverständnisses,
- Modellkonzept des Modellierers für die Systemprozesse,
- Modellannahme und Fehlerbreiten, die bei der Vereinfachung des Problems erlaubt werden und
- Zeit- und Raumskalen der angestrebten Modellanwendung.

Beim Vorhandensein von sehr dynamischen Prozessen, die für die Systembeschreibung relevant sind, wie z.B. der Auswaschungsprozess, oder zum Prozessstudium, sollte von instationären Verhältnissen ausgegangen werden. Der Wasserfluss wird dann oft mit einer Form der Richards-Differenzialgleichung beschrieben. Für die Stofftransportmodellierung wird, je nach Datenlage, mit der Konvektions–Dispersions-Gleichung oder mit einer dispersionsfreien Nä-

herung gerechnet. Der Stoffumsatz wird mit Reaktionskinetiken 0. und 1. Ordnung beschrieben.

Wie oben ausgeführt, sind für die Sickerwasserprognose - insbesondere für die Berücksichtigung der natürlichen Abbau- und Rückhaltewirkung der ungesättigten Zone - folgende Prozesse wichtig:

- **Sorption:** Das Modell rechnet mit einer der Gleichgewichts-Retardation entsprechenden Transportverzögerung.
- **Nichtlineare Sorption:** Es wird ein konzentrationsabhängiger Retardationsfaktor berücksichtigt, d.h. dass die Transportgeschwindigkeit von der Konzentration abhängt (in der Regel erfolgt bei höheren Konzentrationen ein rascherer Transport).
- **Sorptionskinetik:** Der effektive Retardationsfaktor ist eine Funktion der Verweilzeit des Sickerwassers und kann wesentlich kleiner als unter Gleichgewichtsbedingungen sein.
- **Abbau (Biodegradation):** Die Stoffkonzentration geht mit zunehmender Verweilzeit des Sickerwassers in der ungesättigten Zone zurück und selbst gering retardierte Stoffe treten am Ort der Beurteilung nur in deutlich reduzierter Konzentration auf.
- **Diffusion in der Gasphase:** Sie lässt einen Transport flüchtiger Stoffe selbst ohne Sickerwasser zu.
- **Makroporenfluss, kolloid- bzw. partikelgetragener Transport:** Dies führt am Ort der Beurteilung zu einem vorzeitigen Auftreten der Schadstoffe in erhöhten Konzentrationen.

Die Sorption und der Bioabbau von Einzelsubstanzen werden in den meisten gängigen Transportmodellen berücksichtigt. Die Modellierung des Abbaus und der Sorption von Einzelsubstanzen in Schadstoffmischungen und die diffusionslimitierte Sorptionskinetik ist nur selten möglich. Das Gleiche gilt für die raschen Transportprozesse auf bevorzugten Fließwegen und in Verbindung mit Partikeln. Damit fehlen bei den meisten Schadstofftransport-Modellen einige für die Sickerwasserprognose wesentliche Prozesse. Sie sind zum Teil noch Gegenstand der Forschung.

2.3.3 Modelle zum Stickstoffumsatz in der ungesättigten Zone

Die Komplexität des Nährstoffkreislaufes im Boden und die zunehmenden Forderungen nach genauen Vorhersagen über das Verhalten von Stickstoff im Hinblick auf den Pflanzenanbau und den Umweltschutz haben bewirkt, dass die Entwicklung von Simulationsmodellen zum Bodenstickstoff stark vorangetrieben wurde. Deshalb sind heute viele Stickstoffmodelle verfügbar und es ist schwierig einen vollständigen Überblick zu geben. Es soll hier deshalb eine Zusammenschau wesentlicher Entwicklungen gegeben werden.

Neben dem Versuch einer Klassifizierung der unterschiedlichen Modelltypen soll eine Einschätzung der Qualität und der gegenwärtigen Grenzen vorhandener Stickstoffmodelle gegeben werden. Weiterhin werden mögliche Wege zur Weiterentwicklung vorhandener Modellansätze unter verschiedenen Anwendungskriterien aufgezeigt.

2.3.3.1 Klassifizierung

Bereits Addiscott & Wagenet (1985) versuchten Stickstoffauswaschungsmodelle zu klassifizieren und verglichen dabei deterministische mit stochastischen, mechanistische mit konzeptionellen und numerische mit analytischen Modellen. Entsprechend dieser Klassifikation wird im Folgenden kurz auf die unterschiedlichen Modelltypen eingegangen.

Deterministische Modelle, wie z.B. von Groot & De Willigen (1991) and CEC (1991) gehen von der Annahme aus, dass die Systemprozesse durch eindeutige Systemparameter und Eingabedaten bestimmt werden und in einer eindeutig definierten Modellausgabe resultieren. Im Gegensatz dazu verwenden stochastische Modelle die Variabilität und/oder die Wahrscheinlichkeit der Systemprozesse. Dies resultiert in einer Wahrscheinlichkeitsverteilung der Parameter und/oder der Modell-Eingabegrößen sowie in einer Verteilungsfunktion der Ausgabegrößen (z.B. Jury & Gruber, 1989; Lee & Casey, 2005). Mechanistische Modelle berücksichtigen physikalische, chemische oder biologische Gesetze, die für das jeweilige Fachgebiet als wesentlich angesehen werden (z.B. Huwe & Van der Ploeg, 1989; Wagenet & Hutson, 1989; Rijtema et al., 1990). Dagegen fassen konzeptuelle Modelle die Prozessbeschreibungen in empirischen Gleichungen zusammen. Die Gleichungen berücksichtigen dann nicht mehr explizit die physikalisch-chemischen oder biologischen Gesetze (z.B. Addiscott, 1977; Williams et al., 1983). Numerische Modelle lösen die Systemgleichungen numerisch, hauptsächlich für instationäre Bedingungen, während analytische Modelle (z.B. Burns, 1974; Lee & In, 2005) analytische Lösungen für die Differenzen- oder Differentialgleichungen verwenden.

Natürlich kann auch dieser Klassifizierungsansatz keine scharfen Grenzen zwischen den Modelltypen ziehen. Die Grenzen sind eher fließend, da es eine Vielzahl von Mischformen gibt. Oft werden dabei z.B. numerische Ansätze für den Bodenwasserfluss mit konzeptuellen Ansätzen für den Stickstoffumsatz gekoppelt.

Die unterschiedlichen Modelltypen sind entsprechend ihrer Komplexität und Detailliertheit der Prozessbeschreibung für unterschiedliche Anwendungszwecke prädestiniert. So sind konzeptuelle Modelle, aufgrund ihrer relativen Einfachheit und der relativ geringen Anforderungen an die Eingangsdaten, eher für Managementanwendungen, wie z.B. die flächendeckende Düngungsberatung, geeignet. Sie werden im Folgenden als „Managementmodelle“ bezeichnet. Komplexere oder sehr detaillierte Beschreibungsansätze, wie mechanistische oder numerische Modelle, eignen sich hingegen eher für Forschungsaufgaben und zum Prozessstudium. Sie werden nachfolgend als „Forschungsmodelle“ bezeichnet. Die Schaffung praktikabler Management-Modelle erfolgt oft durch Abrüstung von Forschungsmodellen.

2.3.3.2 Qualität der Stickstoffmodelle

Eine objektive Einschätzung der Qualität von Modellen lässt sich nur anhand der Abweichung der Modellsimulation von den tatsächlichen Bedingungen durchführen. Bekannte umfangreichere Modellvergleiche wurden in den 80er und 90er Jahren durchgeführt. Aktuelle Modellvergleiche dieser Qualität sind nicht bekannt. Hinsichtlich der Durchführung derartiger Modellvergleiche haben sich insbesondere niederländische Forschungseinrichtungen hervorgetan. Bei einem Workshop des Research Institut Itel, 1980, in Wageningen wurden Modelle anhand der Simulationsergebnisse mit Standarddaten diskutiert (Frissel & Van Veen, 1981). Es wurden dabei sowohl Modelle zur Beschreibung des gesamten Stickstoffkreislaufes als auch solche zu einzelnen Prozessen, jeweils als Forschungs- und als Management-Modelle getestet.

Im Jahr 1990 wurde ein vergleichbarer Test im Rahmen eines Workshops am DLO-Institute for Soil Fertility Research in Haren durchgeführt (Verberne, 1991). Die hier getesteten Modelle wurden nach der Fähigkeit ausgewählt, die Verfügbarkeit von Bodenstickstoff für die Kulturpflanzen vorherzusagen. Im Rahmen dieses Workshops wurde eine Reihe von physikalisch-begründeten Modellen anhand des Vergleiches von simulierten und experimentellen Daten über Stickstoffaufnahme der Pflanzen und die Nitratauswaschung an drei verschiedenen Standorten auf der Basis verschiedener statistischer Merkmale geprüft. Die vier getesteten Modelle waren DAISY, ANIMO, EPIC und SWATNIT (alle zusammengefasst erläutert in Engel u.a., 1993). Das Qualitätskriterium war eine Vorhersagegenauigkeit des Mineralstickstoffgehaltes im Boden von ca. 20 kg N/ha zum Messwert. Die erzielten Ergebnisse waren sehr unterschiedlich. Dabei war die Genauigkeit der Modellvorhersage für die Stickstoffaufnahme durch die Pflanzen im Allgemeinen besser als für die Nitratauswaschung. Bei der Testung wurden bei allen Modellen hinsichtlich der Simulationsgenauigkeit keine großen Unterschiede deutlich.

Eine dritte Modellanalyse wurde auf dem Workshop in Haren von Otternacke & Kuhlmann (1991) vorgestellt. Die Anwendung dreier verschiedener konzeptioneller Modelle von Addiscott & Whitmore (1987) (Modell ADDISCOTT), Kersebaum & Richer (1991) (Modell HERMES) und Groot & De Willigen (1991) (Modell NWHEAT) wurden analysiert. Dazu wurden simulierte mit experimentell ermittelten Daten des Mineralstickstoffgehaltes im Boden im Frühjahr unter Getreide verglichen. Die Autoren schlossen aus den Testresultaten, dass die Ergebnisse der einzelnen Modelle noch zu stark variieren, um verlässliche Empfehlungen für die Stickstoffdüngung geben zu können.

Eine Untersuchung der Skalen der verfügbaren Stickstoffmodelle wurde von der Projektgruppe Elbe-Ökologie der Bundesanstalt für Gewässerkunde in Auftrag gegeben (BfG, 1997). Das Ziel der Studie war die Untersuchung der Eignung der verfügbaren Stickstoffmodelle für eine Beschreibung des Stickstoffhaushaltes im Wassereinzugsgebiet der Elbe. Dabei wurde auf Gebietseinheiten der Größe von 1 - 1000 km² („Mesoskala“) orientiert. Im Rahmen dieser kurzfristig angelegten Studie war es jedoch nicht möglich die Qualität der verfügbaren Modelle anhand des Vergleiches von Simulationsergebnissen und Feldmesswerten durchzuführen. So erfolgte eine Einschätzung der Modelle hinsichtlich ihrer strukturellen Eignung, die formulierten Anforderungen an eine mesoskalige Modellierung erfüllen zu können. Folgende Anforderungen wurden formuliert:

- Das Modellsystem soll mit allgemein verfügbaren Daten bzw. mit aus verfügbaren Daten abzuleitenden Größen zu betreiben sein.
- Eine Überprüfbarkeit der Modellergebnisse anhand von Messergebnissen muss gewährleistet sein.
- Für das Landnutzungsmanagement sollen konkrete Einflussfaktoren hinsichtlich der Reduzierung der diffusen Stoffeinträge gegeben werden können. Deshalb muss ein Kausalzusammenhang zwischen den möglichen Steuergrößen und dem Stickstoffaustrag in Gewässer abgebildet werden können.

Die Modelle, die nach diesen Kriterien untersucht wurden, waren: ASGi, CANDY, DYNAMIT, Meso-N, Expert-N, HERMES, MINERVA, SIMULAT, SWIM, WASMOD.

Die Arbeitsgruppe stellte fest, dass es „kein adäquates mesoskaliges Modell für die dynamische Stickstoffmodellierung mit den geforderten Anforderungen gibt“. Ergebnisse der Elbe-Ökologie Forschung sind z.B. in Kersebaum & Beblík (2001) enthalten.

2.3.3.3 Grenzen der Modelle

Bei der Modellierung des Stickstoffhaushalts des Bodens kristallisieren sich generell zwei Problemfelder heraus. Während zum einen allgemein angenommen werden kann, dass die physikalischen und chemischen Prozesse der Bodenwasserdynamik und der damit verbundenen Nitratauswaschung relativ gut erforscht sind, stellen die biologischen Prozesse, insbesondere bei der Denitrifikation und der Mineralisierung/Immobilisierung noch bedeutende Probleme dar (*Problemfeld: Prozessforschung*).

Zum anderen stellt die mathematische Beschreibung der sehr heterogenen physikalischen, chemischen und biologischen Bedingungen in der ungesättigten Bodenzone ein zwar unumstrittenes aber noch keineswegs gelöstes Problem dar (*Problemfeld: Heterogenität*). Im Folgenden sollen zunächst einige Aspekte des ersten Problemfeldes Prozessforschung aufgezeigt werden. Im zweiten Teil dieses Abschnitts wird auf die Frage der Heterogenität eingegangen.

Die Denitrifikation im Boden findet an Orten mit anaeroben Verhältnissen statt. Sowohl das Vorkommen dieser Orte als auch die Reduktionsraten hängen entscheidend vom Stoffwechsel der heterotrophen Mikroorganismen ab. Das größte Hindernis bei der quantitativen Beschreibung der Denitrifikation ist gegenwärtig die Lokalisierung des Auftretens anaerober Verhältnisse im Boden über Zeit und Raum.

Das gleiche Hindernis besteht prinzipiell bei der Beschreibung der Prozesse der Mineralisation und Immobilisierung. Deren modellhafte Umsetzung erfolgt entweder in Form von zwei getrennten, gegenläufigen Prozessen oder in Form einer Zusammenfassung zur Nettomineralisation. Dabei wurde häufig angenommen, dass die Mineralisationsrate vom organisch gebundenen Stickstoff im Boden abhängt. Zunehmend wird jedoch anerkannt, dass nur ein so genannter umsetzungsaktiver Teil der organischen Substanz von Bedeutung für die Mineralisierung ist. Trotz einer Vielzahl von Versuchen ist die Bestimmung dieser aktiven Fraktion immer noch problematisch.

Detailliertere Beschreibungen des Stickstoffmetabolismus infolge mikrobieller Stoffumsetzung haben zu Modellen geführt, die die organische Substanz im Boden in verschiedene Pools differenzieren. Diese sind definitionsgemäß durch eine potentiell gleiche Verfügbarkeit der organischen Komponenten für die Mikroorganismen gekennzeichnet. Jedoch besteht auch hier das Problem der fehlenden Methoden für die Identifizierung der verschiedenen Pools.

Damit sind theoretisch für die Modellentwickler weitere nützliche Konzepte zur Beschreibung des Stickstoffumsatzes in die Modelle integrierbar. Es fehlen jedoch die experimentellen Möglichkeiten um eine geeignete Datenbasis zu schaffen, die eine Validierung der neuen Modellansätze ermöglichen.

Neuere Modellansätze stellen eine Verbindung zwischen den verschiedenen organischen Fraktionen und der Größe von Bodenteilchen und/oder Aggregaten her und erlauben damit den Einfluss der Bodenmatrix auf bodenbiologische Prozesse abzubilden.

Auch detailliertere Modellansätze hinsichtlich des Einflusses der Pflanzen auf die Umsetzung der organischen Substanz sind rezente Weiterentwicklungen. Diese berücksichtigen die konti-

nuierliche Aufnahme von Nährstoffen und die gleichzeitige Ausscheidung von organischen Produkten aus den Pflanzenwurzeln. Sie quantifizieren die Wirkungen auf den Stoffwechsel der Mikroorganismen und dadurch auf die Mineralisation und Immobilisierung. Die Auswirkungen auf den Stoffumsatz können bei unterschiedlichen Pflanzenarten sehr unterschiedlich sein. Gleiches trifft auch auf die Wirkung unterschiedlicher Bodentypen hinsichtlich Mineralisierung und Immobilisierung zu. Für eine Ausweitung der Anwendung solcher Modelle auf unterschiedliche Bodentypen und Pflanzenbewuchs müssen messbare Parameter gefunden werden, die direkt den Zusammenhang zwischen Bodentyp bzw. Bewuchs und Mineralisierung/Immobilisierung der organischen Substanz des Bodens charakterisieren. Ein interessanter Ansatz ist z.B. das von Postma & Van Veen (Van Veen, 1993) vorgeschlagene Konzept der ökologischen Fraktionierung des Porenvolumens. Es beruht auf der Erkenntnis, dass die meisten mikrobiellen Umsatzprozesse in den Poren ablaufen, die bei einem bestimmten Feuchtezustand des Bodens wassergesättigt sind. Damit wird also die Porengrößenverteilung mit der mikrobiellen Aktivität verknüpft. Von besonderem Interesse sind dabei die Porenfraktionen, die nur den Mikroorganismen, nicht aber den räuberisch von den Mikroorganismen lebenden Organismen zugänglich sind. Die Poren, für die das Kriterium zutrifft, können z.B. eindeutig mit einer bestimmten Saugspannung im Boden und damit also mit einem Messwert charakterisiert werden.

Das zweite Problemfeld „Heterogenität“ ergibt sich daraus, dass die oben diskutierten Prozesse und Abhängigkeiten keineswegs örtlich und zeitlich homogen im Boden ablaufen. Vielmehr ist der Boden einschließlich der Porenverteilung und des Auftretens der Mikroorganismen sehr inhomogen. Physikalische Prozesse, wie die Wasserdynamik, wurden bereits in den 40er Jahren als ungleichmäßig erkannt und seit den 70er Jahren auch als solche mathematisch beschrieben. Insbesondere soll diesbezüglich der Makroporenfluss genannt werden, dessen Dynamik zwar mathematisch beschrieben ist, jedoch in gegenwärtigen Modellen bisher oft nur als pauschaler Bypass-Term berücksichtigt wird. Auch biologische Prozesse, wie Mineralisierung und Denitrifikation treten an bestimmten Stellen auf, den sog. „hot spots“, wobei nur ein kleiner Teil der gesamten Mikropopulation des Bodens beteiligt ist. In diesem „hot spots“ herrschen günstige physikalische und chemische Bedingungen, welche die biologische Aktivität ermöglichen.

Auch wenn die Heterogenität der physikalischen chemischen und biologischen Bodeneigenschaften heute unumstritten ist, wird sie in den gegenwärtig vorhandenen Modellen des Stickstoffkreislaufes kaum berücksichtigt. Dennoch ist für künftige Anwendungen der Modelle unter der Maßgabe einer verbesserten Genauigkeit der Simulationen eine Berücksichtigung der Heterogenität des Bodens unerlässlich.

2.3.3.4 Schlussfolgerungen

Obwohl Fortschritte in der Qualität der Prognosen durch die Modelle gemacht werden, ist die Fähigkeit die Stickstoffdynamik im Boden vorherzusagen derzeit noch nicht ausreichend, um für Düngungsempfehlungen eingesetzt werden zu können. Jedoch werden die Modellanwendungen nicht nur für solche, hinsichtlich der Genauigkeit sehr anspruchsvollen Fragestellungen benötigt. Auch die Abschätzung von Umweltbelastungen, die z.B. durch die erhöhte Zufuhr von Nährstoffen in natürliche Ökosysteme geschehen, ist von besonderer Bedeutung. Für die Vorhersage der dadurch ausgelösten hochkomplexen Wirkungen sind Modelle sicherlich ein unverzichtbares Hilfsmittel.

Zusammenfassend sind die wichtigsten Schlussfolgerungen, die sich aus den Recherchen ergeben haben, folgende:

- Entwicklung geeigneter Konzepte zur Identifizierung von Zusammenhängen zwischen Bodeneigenschaften und biologischer Aktivität um eine Übertragbarkeit der Umsatzprozesse auf verschiedene Bodentypen zu ermöglichen
- Schwerpunktmäßige Förderung der Entwicklung von stochastischen Modellen zur Berücksichtigung der Heterogenität des Bodens und der damit verknüpften Ungleichmäßigkeit der Messwerte. Das resultiert in einer Verteilungsfunktion der Ausgabegröße, die der Variabilität der Systemprozesse entspricht.
- Schaffung geeigneter experimenteller Datengrundlagen für eine solide Verifizierung neuer Modellansätze und für eine Validierung der vorhandenen Modelle bei Modellanwendungen

2.3.4 Modelle für die gesättigte Zone

Im folgenden Abschnitt werden Modellentwicklungen bei der Betrachtung von Strömungs-, Transport- und Reaktionsprozessen in der gesättigten Zone aufgezeigt. Einzelne Vertreter der unterschiedlichen „Programm-Gattungen“ werden kurz vorgestellt, wobei der Versuch gemacht wird, auch ihre Qualität zu beurteilen.

2.3.4.1 Aktueller Stand

Der Einsatz von Modellen zur Lösung von Grundwasserströmungs- und Stofftransportproblemen ist in vielen Anwendungsbereichen unverzichtbar geworden, z.B. Grundwassererkundung, Grundwasserbewirtschaftung, Planung und Steuerung von Wassergewinnungsanlagen, Ausweisung von Wasserschutzgebieten, Beurteilung von Eingriffen in den Grundwasserhaushalt infolge von Baumaßnahmen, Grundwasserschutz, Identifikation von Schadstoffquellen und Beurteilung hydraulischer Sanierungsmaßnahmen.

Es existieren eine Vielzahl kommerzieller Programme, die in der Lage sind auch komplexe Strömungs- und Transportaufgaben auf den unterschiedlichsten Skalenebenen und in drei Dimensionen zu lösen (Tabelle 2-3).

Die Beschreibung der Ausbreitung von Schadstoffen im Grundwasser ist eine komplexe Aufgabe. Das gleichzeitige und wechselwirksame Auftreten von physikalischen, chemischen und biologischen Prozessen muss im numerischen Modell nachgebildet werden. Für die Abbildung der Einzelprozesse, wie hydrodynamische Dispersion und Adsorption, existieren mathematische Konzepte. Die Beschreibung der chemischen und biochemischen Prozesse wie Desorption, Ionenaustausch, Oxidation/Reduktion, Lösung/Fällung, Abbau etc. und ihre Wechselwirksamkeit sind Gegenstand der Forschung.

Tabelle 2-3: Kurzbeschreibungen deterministischer Grundwassermodelle.

Grundwassermodell	Beschreibung
FEFLOW (Diersch u.a., 2004)	Finite Elemente Modell der Firma WASY, Deutschland. Ist weltweit eines der leistungsfähigsten Softwarepakete zur 2D- und 3D-Simulation von Strömungs-, Stoff- und Wärmetransportprozessen in gesättigten und ungesättigten porösen Medien. GIS basierte Datenaustausch-Schnittstelle und 3D-Visualisierung. http://www.wasy.de/deutsch/produkte/fefflow/
MODFLOW/MT3D (Harbaugh et al., 2000; Zheng, 2005; Zheng & Wang, 1999)	Modulares 3D-Grundwassertransportmodell des US Geological Survey. Ist weltweit das am weitesten verbreitete Grundwassermodell. 3D, blockzentriertes, finites Differenzen Grundwassermodell für stationäre und instationäre Simulationen. Simuliert die Strömung und den Transport in begrenzten und unbegrenzten durchmischten Aquifersystemen als auch Grundwasserneubildung, Evapotranspiration, Zufluss zu Brunnen, Drains und Oberflächengewässern. http://water.usgs.gov/cgi-bin/man_wrdapp?mf2k
PCGEOFIM (Sames, 1997)	Das Simulationsprogramm für Geofiltration und Geomigration PCGEOFIM® berechnet die Grundwasserströmung und den Transport von löslichen Stoffen im Lockergestein. Die Berechnung der Grundwasserströmung erfolgt mit der Finite-Volumen-Methode, die sich durch absolute Bilanztreue auszeichnet und die Möglichkeit eröffnet, das Gitternetz beliebig zu verfeinern. Die hydraulische Anbindung des Grundwassers an die im Einzugsgebiet vorhandenen Vorfluter und Standgewässer ist realisiert und die Oberflächenwasserströmung wird zusammen mit dem Grundwasser berechnet. Die Grundwasserneubildung wird ortsdiskret vorgegeben und zeitdiskret sowie flurabstandsabhängig bei der Simulation berücksichtigt. http://www.ibgw-leipzig.de/prod_software.html
ROCKFLOW (Kolditz et al., 2003)	Entwickelt von der Uni Hannover und der Uni Tübingen. Beschreibung des Mehrphasenflusses in geklüfteten Gesteinen. http://www.hydronech.uni-hannover.de/Projekte/Grundwasser/manuals/rf_win/rfman39.pdf
PHREEQC (Parkhurst & Appelo, 1999).	PHREEQC ist ein Computerprogramm, welches für die Beschreibung einer breiten Spanne aquatischer geochemischer Reaktionen geeignet ist. PHREEQC basiert auf einem aquatischen Gleichgewichtsmodell und hat die Fähigkeit zur (1) Berechnung von Komplexbildungs- und Sättigungsindex Reaktionen, (2) Ermittlung des Reaktionspfades und des konvektiven Transportes einschließlich der Berechnung spezieller irreversibler Reaktionen, Mischungsreaktionen, Oberflächenkomplexierungsreaktionen und Ionenaustauschreaktionen sowie (3) inverse Modellierung zur Identifikation von Parametern des Mineral- und Gastransfers, welcher sich in Unterschieden der Zusammensetzung der Wässer äußert. http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/
MIKE SHE (DHI Water and Environment, 2001)	MIKE SHE ist ein universelles Software Paket zur Simulation der wesentlichen hydrologischen Prozesse, die innerhalb des hydrologischen Wasserkreislaufes auf dem Lande geschehen. Es simuliert Wasserfluss, Wasserbeschaffenheit und Transport in ländlichen Einzugsgebieten und ist ein finites Differenzenmodell auf Einzugsgebietsskala. Es simuliert den 1D-Fluss und Transport für die ungesättigte Zone und für Vorfluter, den 2D-Fluss und Transport an der Bodenoberfläche und den 3D-Fluss und Transport für die gesättigte Zone. MIKE SHE beinhaltet auch Module für geochemische und biologische Abbaureaktionen in der gesättigten Zone. http://www.dhisoftware.com/mikeshe/

In den vergangenen Jahren wurde das Hauptaugenmerk bei der Modellentwicklung u.a. darauf gelegt, die reaktiven Stofftransportprozesse im Grundwasser zu berücksichtigen. Insbesondere sollte die modellhafte Beschreibung einer Gruppe von untereinander in Wechselbeziehungen stehenden Stoffen unter der Berücksichtigung eventueller mikrobiologischer Umsetzungsprozesse erreicht werden.

Diese Möglichkeit neben Strömung und Transport auch reaktive Stofftransportprozesse in einem Reaktions-Modul zu berücksichtigen, oder in eigenständigen Modellen zu simulieren, ist bereits mit einer Vielzahl von Ansätzen gegeben, dennoch auch heute noch Gegenstand der Forschung (z.B. Schäfer et al., 1998; Zheng, 2005).

Ein Einsatz in groß angelegten Feldstudien zur Verifizierung ist, ebenso wie ein Vergleich verschiedener Ansätze, in der Literatur wenig dokumentiert. Einige bekannte Modelle werden im nachfolgenden Kapitel vorgestellt. Generell gilt nach wie vor die Aussage, dass je komplexer die Strömungsbedingungen und je umfangreicher die Transport- und Reaktionsprozesse sind, desto unbestimmter ist das betrachtete System und desto schwieriger ist es, die natürlichen Vorgänge im Aquifer mittels einer mathematischen Modellierung nachzubilden. Schenk & Kaupe (1998) haben diesen Zusammenhang graphisch dargestellt (Abbildung 2-6).

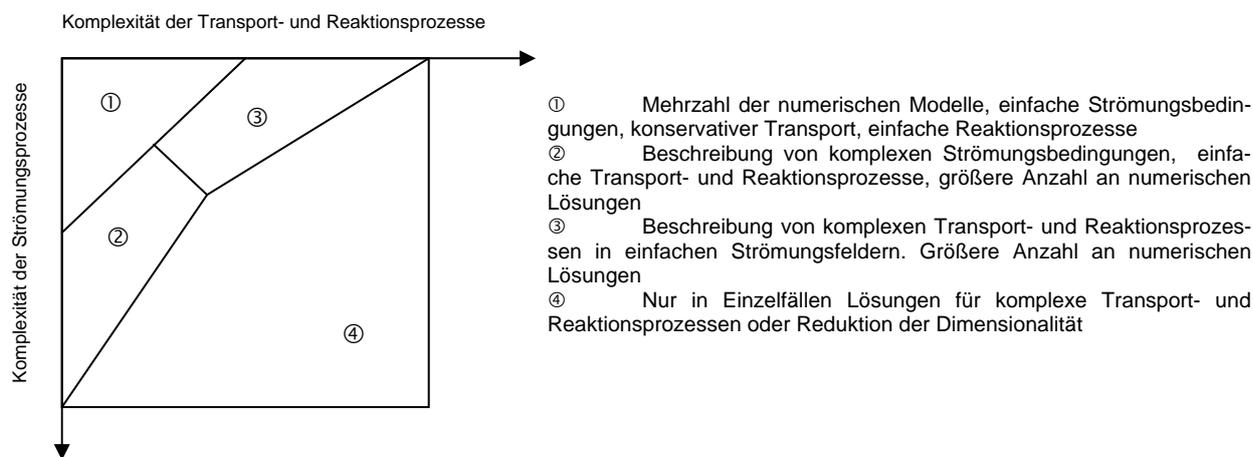


Abbildung 2-6: Möglichkeiten der mathematischen Modellierung in Abhängigkeit der Komplexität der Strömungs-, Transport- und Reaktionsprozesse (Schenk & Kaupe, 1998).

Die prinzipielle Notwendigkeit, diese Prozesse für z.B. Fragen der Sanierung, der Prognose der Rohwasserbeschaffenheit oder der Bewirtschaftung von Schutzgebieten zu untersuchen, zu identifizieren und zu mathematisieren, wird deutlich, wenn man die Vielzahl von Prozessen und Mechanismen betrachtet, die das Transportregime beeinflussen oder gar dominieren (Tabelle 2-4).

2.3.4.2 Modellierung hydrochemischer Transport- und Reaktionsprozesse

Die für die Modellierung hydrochemischer Transport- und Reaktionsprozesse zur Verfügung stehenden Modelle lassen sich in unterschiedliche Gruppen einteilen:

Die Gruppe der *thermodynamischen Gleichgewichtsmodelle* befasst sich mit Reaktionen von gelösten und festen Stoffen in wässriger Lösung, ohne eine Grundwasserströmung zu berücksichtigen. Hier seien Modelle wie z.B. PHREEQC (Parkhurst et al., 1980; Parkhurst & Appelo, 1999) und WATEQ4F (Ball & Nordstrom, 1991) genannt. Gleichwohl können diese Modelle an Strömungsmodelle oder Modelle zur Transportbeschreibung gekoppelt werden, um so z.B. den Transport von mehreren Komponenten zu simulieren.

Das Programm TReAC (Nitzsche, 1997) zur Modellierung des reaktiven Stofftransports im Boden und im Grundwasser arbeitet mit den Ergebnissen beliebiger Strömungsmodelle. Die geochemischen Reaktionen werden innerhalb von TReAC mit PHREEQE modelliert. Das

Programm kann zudem Sorption, Ionenaustausch und radioaktiven Abbau, sowie deren Nebenprodukte berücksichtigen.

Tabelle 2-4: Schadstoffspezifische Prozesse und Mechanismen, die bei Modellrechnungen berücksichtigt werden müssten (aus Schenk & Kaupe, 1998).

	Schwefel- verbindung		Stickstoff- verbindung		Salze	Schwer- metalle	Radio- nukleide	Organische Stoffe		Bak- te- rien & Vi- ren	
	Säure	SO ₄	Säure	NO ₃				vollst. löslich	schwer löslich		
					Dich- te >1	Dichte <1					
Transportmechanismen											
Konvektion	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Zweiphasenfluss (Wasser/Gesteinsmatrix)											
Mehrphasenfluss (flüssig/flüssig)					X	X			X	X	
Mehrphasenfluss (partikulärer Transport)							X				
Physikalische Prozesse											
Molekulare Diffusion	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	
Dispersion	X	X	X	X	X		X	X	X	X	X
Verdünnung	X	X	X	X	X	X	X	X			X
Filtration						X	X				X
Verdampfung											
Gasaustausch									X		
Radioaktiver Zerfall							X				
Dichteabhängiger Transport					X				X	X	
Chemische Prozesse											
Lösung/Fällung	X		X			X	X	X	X	X	
Sorption/Desorption		X		X	X	X	X				
Ionenaustausch	X		X								
Oxidation/Reduktion		X		X							X
Komplexbildung						X	X				
Abbau		X		X				X	X	X	
Biologische Prozesse											
		X		X				X	X	X	X

Die Gruppe der *kinetisch gesteuerten Reaktionsmodelle* gehören beispielsweise die folgenden Modelle:

- Das Multikomponenten Reaktions- und Transportmodell von Lensing et al. (1994) behandelt bakteriell katalysierte Redox-Prozesse. Es besteht prinzipiell aus einem Transportteil, einem chemischen und einem kinetischen Submodell. Der Transportteil des Modells löst die instationäre Differentialgleichung der Konvektion und der Dispersion, das reine chemische Submodell entspricht konzeptionell einem thermodynamischen Gleichgewichtsmodell.
- Das Modell Trabi von Schäfer (1992) bildet simultan die Auswirkung von Strömung, physikalischem Transport und heterotropher mikrobiologische Aktivität auf maximal 11 wechselwirkende chemisch-biologische Spezies nach. Grundlage des Transportmodells (Trabi = Transport und Biologie) ist Konvektion und Dispersion. Kern der Umsetzungen ist das aerobe und denitrifizierende Wachstum der Mikroorganismen, welches durch Monod-Kinetik ausgedrückt wird.
- Das reaktive Transportmodell TBC (Transport, Biochemie und Chemie) von Schäfer et al. (1998) löst die Gleichungen des reaktiven Transportes im Grundwasser für drei Dimensionen. Das Programm erlaubt dem Benutzer die Spezifizierung eines weiten Feldes möglicher biochemischer und chemischer Reaktionen. Es wurde entwickelt, um die Wirkung biologisch induzierter Schadensfall-Sanierungen simulieren zu können, und zwar für Säulenexperimente, für Redox-Prozesse, gekoppelt mit Kohlenstoffab-

bau, für biologische Abbauprozesse, sowie für einfache diagenetische Prozesse in Sedimenten.

2.3.4.3 Grenzen der Modelle bei der Anwendung

Thermodynamische Gleichgewichtsmodelle:

Die Güte der Ergebnisse von Modellrechnungen bei der Anwendung thermodynamischer Gleichgewichtsmodelle ist nach Hollerung (1990) vor allem abhängig von der Gültigkeit der dafür notwendigen Voraussetzungen im jeweiligen System. Folgende Fragen stellen sich:

- Ermöglicht das Modell alle wichtigen Prozesse hinreichend genau zu erfassen?
- Wie ist die Qualität des verwendeten Datenmaterials?

Nachfolgend werden einige Limitierungen bei der Anwendung von Gleichgewichtsmodellen genannt:

- Der für die Modellrechnung angenommene thermodynamische Gleichgewichtszustand des Grundwasserleiters trifft in der Realität nicht zu.
- Der Einfluss insbesondere mikrobiell gesteuerter Reaktionen, kann nicht als thermodynamisches Gleichgewicht formuliert werden. Am gravierendsten wirkt sich aus, dass häufig die genaue Stöchiometrie der ablaufenden Reaktionen nicht bekannt ist.
- Die Größe der thermodynamischen Konstanten ist unsicher. Nach Hollerung (1990) schwanken sie oft um ein oder zwei Größenordnungen.

Andere Untersuchungen, z.B. von Boening (1990) zur Verifikation thermodynamischer Gleichgewichtsmodelle anhand von Feld- und Laborversuchen, ergaben prinzipiell gute Übereinstimmungen mit von PHREEQE durchgeführten Berechnungen. Zur korrekten Modellierung der Ergebnisse der Versuche war jedoch in verschiedenen Konzentrationsbereichen der Ansatz variabler Gleichgewichtskonstanten notwendig.

Modelle mit kinetischem Ansatz:

Schäfer (1992) beschreibt für die Anwendung seines Modells „Trabi“ Grenzen bei der Simulation, die durch Erweiterungen des Gleichungssystems, also durch zunehmende Verfeinerung der Prozessbeobachtung durch die Implementierung, z.B. zusätzlicher Redoxreaktionen, nicht mehr überschritten werden können. Als wichtige Limitierung identifiziert er die heterogene räumliche Verteilung sowohl physikalischer wie auch chemisch-biochemischer Parameter im Untergrund. Es ist unmöglich, diese Verteilung als Input-Parameter in einem Modell zur Verfügung zu stellen. Schäfer spricht in diesem Zusammenhang von effektiven makroskopischen Ersatzparametern, die mit einem vertretbaren Aufwand aus Messungen zu bestimmen seien.

Weitere Limitierungen, die für jeden kinetischen Ansatz gelten, sind:

- Die Übertragung der im Laborversuch ermittelten kinetischen Konstanten von der Poren-Skala (Mikro-Skala) auf die Makro-Skala wie z.B. Einzugsgebiet oder Region ist zumindest problematisch.

- Die Identifikation von Reaktionskinetiken ist, je nach Stoffinventar und den zeitvarianten Änderungen im Grundwasserleiter, im Laborversuch und im Gelände eine äußerst komplexe Aufgabe und kann zudem eine lange Zeit in Anspruch nehmen.

2.3.4.4 Schlussfolgerungen

Prinzipiell liegt heute die Hauptaufgabe bei der Behandlung von Strömungs-, Transport- und Reaktionsprozessen in gesättigten porösen Medien nicht in der mathematischen Handhabung der grundlegenden Differentialgleichungen. Deren Aufbereitung und Übertragung auf Regionen sind bei den vorhandenen und zukünftigen Rechnerkapazitäten nicht mehr entscheidend. Die limitierende Größe bei der möglichst realitätsnahen Abbildung von Strömungs-, Transport- und Reaktionsprozessen ist die Beschaffung von Parametern und Randbedingungen, die den realen Bedingungen möglichst gut entsprechen.

2.4 Methoden der Entscheidungshilfe im Grundwassermanagement

Das Management von Wasserressourcensystemen bedeutet in allgemeinen verschiedene, oft konträre Bedürfnisse und Interessengruppen zu berücksichtigen. Die sozialen, gesundheitlichen und gesetzlichen Zwänge sind vielfältig und beeinflussen den Entscheidungsprozess vor allem hinsichtlich der Einbeziehung von unterschiedlichen Zielen, Entscheidungsträgern und Nutzern. Das Treffen von Entscheidungen unter solchen Bedingungen ist jedoch nicht einfach. Deshalb werden Entscheidungshilfen benötigt. Diese Instrumente können Managementstrategien, wie z.B. Systemanalysen und adaptives Management, als auch rechnergestützte Entscheidungshilfesysteme (engl.: Decision Support System (DSS)) sein (Loucks & Gladwell, 1999).

2.4.1 Entscheidungshilfe und Nachhaltigkeit

Das Prinzip der nachhaltigen Entwicklung hat sich beim Wasserressourcenmanagement zu einer zentralen Zielvorgabe herauskristallisiert, nach der die Effizienz von Managementmaßnahmen bewertet werden sollte. Allerdings ist die Definition der Nachhaltigkeit nicht einfach, da sich in ihr insbesondere das Verständnis ökologisch, ökonomischer und sozialer Zusammenhänge manifestiert.

Das Konzept der nachhaltigen Entwicklung wurde von der Brundtland-Kommission vorgestellt und wie folgt definiert: „Humanity has the ability to make development sustainable – to ensure that it meets the needs of the present without compromising the ability of future generations to meet their own needs.“ (WCED, 1987, zitiert aus Loucks & Gladwell, 1999).

Für das Management einer Wasserressource wird das Konzept der Nachhaltigkeit jedoch sehr schnell zu komplex und kompliziert. Weitere Beispiele, die die Facetten der Diskussion verdeutlichen, sind z.B. in Costanza (1993), Costanza & Pattern (1995), Clayton & Radcliff (1997), Loucks & Gladwell (1999) enthalten. Deshalb hat das Internationale Hydrologische Programm (IHP) eine, im Vergleich zur Brundtland-Kommission leicht geänderte Definition entwickelt, die besser für das Management von Wasserressourcensystemen geeignet ist: „Nachhaltige Wasserressourcensysteme sind jene, die so gestaltet und gesteuert werden, dass sie den Zielen der Gemeinschaft, jetzt und in der Zukunft, bei Erhaltung ihrer ökologischen

und hydrologischen Unversehrtheit, bestmöglich nützen.“ (Loucks & Gladwell, 1999). Diese Definition basiert auf folgenden Postulaten:

- Erneuerbare Ressourcen sollten nicht degradiert werden. Dieses Postulat beruht auf der Annahme, dass die zukünftigen Generationen genauso gute Ressourcen und ökologische Bedingungen nutzen wollen, wie wir sie gegenwärtig haben.
- Die gesamte Gemeinschaft wird zur Erhaltung der Nachhaltigkeit der Wasserressourcensysteme einbezogen, so dass Entscheidungen, die getroffen werden einen breiten Konsens haben. Es liegt in der Verantwortung der Manager alle Konsensteilnehmer auf dem Laufenden zu halten. Entsprechend den Änderungen in der Gemeinschaft und der Natur müssen Prioritäten und Ziele hinsichtlich der Wasserressourcen ebenfalls kontinuierlich geändert und angepasst werden.

2.4.2 Nachhaltigkeitsindikatoren

Die Auswirkungen von Managementmaßnahmen, insbesondere bei einem adaptiven Management, das zur Nachhaltigkeit führen soll, müssen sichtbar und auch kontrollierbar gemacht werden. Dazu werden Indikatoren benötigt. Indikatoren sind also bestimmte Signale eines komplexen Systems. Sie können auf verschiedenen Wegen identifiziert werden (Tabelle 2-5).

Tabelle 2-5: Beispiele für Nachhaltigkeitsindikatoren aus Industry Canada (1997).

Indikatorart	Beispiel
Variable	Gesamtmenge der organisch erzeugten Produkte in der Landwirtschaft
Funktion einer Variablen	Verhältnis von recycelter Menge einer Verpackung gegen Gesamtmenge
Qualitative Variable	Teilnahme oder Nichtteilnahme von Stakeholdern an Entscheidungsfindungen
Quantitative Variable	Energieverbrauch pro Jahr
Ranking Variable	Bestes oder schlechtestes Lehrprogramm
Indizes	Gewichtete Indikatoren

In Industry Canada (1997) werden Hunderte von Indikatoren aufgelistet, welche auf verschiedene Skalen - von global bis lokal - angewendet wurden. Auf lokaler Ebene sind vor allem 2 Projekte hervorzuheben: *Sustainable Seattle* und *United Kingdom – Sustainability Indicators Project*, aber sie erscheinen zu breit für den hier angestrebten Zweck zur Anwendung im Grundwassermanagement.

Cornforth (1999) diskutiert Indikatoren vom Standpunkt des Managers. Er schlussfolgert, dass die Indikatoren nicht nur zeigen müssen, ob die Entwicklungsrichtung zur Nachhaltigkeit führt, sondern dass sie auch sensitiv gegenüber den Managementmaßnahmen sind, so dass die Antwort (feedback) des Systems gegeben ist.

Das erste Mal, dass Indikatoren für die Umweltqualität auf komplexe Ökosysteme angewendet wurden war die Implementierung des „critical loads and critical levels“-Konzepts in der Europäischen Union (Wiggering and Rennings, 1997). Dieses Konzept bewertet die Wirkungen atmosphärischer Stoffeinträge auf die Ökosysteme. Das Konzept wurde im großskaligen Maßstab für Europa umgesetzt. Die Untersuchungen in zu „critical loads“ und „critical levels“ in Deutschland sind z.B. in Gauger u.a. (1997) vorgenommen worden. Gauger ermittelte diese Indikatoren für das Gebiet der gesamten Bundesrepublik. Auf der Basis dieser Indikatoren

wurden europaweite Reduktionsziele für die Emissionen bestimmter Stoffe in die Atmosphäre beschlossen.

In der Grundwasserbewirtschaftung haben sich in den 1990er Jahren vor allem drei Indikatoren etabliert. Diese sind Zuverlässigkeit (reliability), Belastbarkeit (resilience) und Verwundbarkeit (vulnerability) (Hashimoto et al., 1982; McMahon, 1993). Die „Zuverlässigkeit“ ist dabei die Häufigkeit oder Wahrscheinlichkeit mit der ein System sich in einem zufrieden stellenden Zustand befindet. „Belastbarkeit“ beschreibt, wie schnell das System in der Lage ist, sich nach einer Belastung zu erholen und „Verwundbarkeit“ ist die Gefahr eines Zusammenbruchs des Systems. Diese Indikatoren werden z.B. immer wieder für die Charakterisierung der Auswirkungen von Trockenzeiten verwendet. Eine Kombination dieser Indikatoren stellt Loucks (1997) vor und definiert einen so genannten Nachhaltigkeitsindex. Es zeigte sich aber, dass diese Indizes nicht immer ausreichend sind und insbesondere hinsichtlich der Definition von Verwundbarkeit sogar inkonsistent. Einige Autoren definieren Verwundbarkeit als mittleres Trockenheitsdefizit (Vaz, 1986; Loucks, 1997, Kjeldsen and Rosbjerg, 2001), andere wiederum als maximale Trockenheit (Moy et al., 1986). Ein weiteres Problem ist, dass diese Indikatoren nichts aussagen über die Eintrittswahrscheinlichkeit und die Schwere der Trockenheit. Trockenheiten mit kurzer Dauer und wenig Wasserdefizit gibt es z.B. öfter als schwere, lang andauernde Trockenheiten (Vaz, 1986; Maier et al., 2001). Peters et al. (2004) definiert deshalb den Indikator „Performance“ der sowohl Eintrittswahrscheinlichkeit als auch Schwere einer Trockenzeit berücksichtigt. Dieses Beispiel zeigt die Perspektiven der Entwicklung von Nachhaltigkeitsindikatoren.

Wie an den Beispielen gezeigt wurde, ist das Thema „Nachhaltigkeitsindikatoren“ selbst Forschungsobjekt. Es soll deshalb hier auf generelle Trends hingewiesen werden, die die Entwicklungsrichtungen aufzeigen. In Industry Canada (1997) wird auf die Entwicklung allgemeinerer Werkzeuge zur Messung der nachhaltigen Entwicklung hingewiesen, die in der Lage sind, das Verhalten von Systemen zu beschreiben. Die sind z.B.:

- Das mittlerweile gut bekannte „Ecological Footprint Model“, welches die Landfläche ausrechnet, die notwendig ist für eine nachhaltige Ressourcennutzung durch die Wirtschaft.
- „The Barometer of Sustainability“, bei dem ein gehobenes (gutes) Existenzniveau der Menschheit und der Ökosysteme individuell gemessen und verglichen wird und der
- „Genuine Progress Indicator“, bei dem versucht wird das GDP Konzept¹ hinsichtlich des sozialen Wohlstandes zu verbessern.

Gegenwärtig gibt es keinen Konsens, wie die Indikatoren für die Nachhaltigkeit auszuwählen sind, deshalb erfolgt die Auswahl der Indikatoren eher zufällig. Es wird außerdem deutlich, dass die Indikatoren oft eher den Zustand der Umwelt beschreiben als die Nachhaltigkeit. Weitere Untersuchungen sind nötig und es wird empfohlen für die künftige Entwicklung von Indikatoren neben Wissenschaftlern stärker auch Praktiker einzubeziehen.

¹ Seit der Einführung während des 2. Weltkriegs als Maß der Kriegsproduktionskapazität, wurde das Brutto-National-Produkt (engl.: „Gross National Product“; seit Änderung zu „Gross Domestic Product“ (dt.: Brutto-Inlands-Produkt) - GDP) zum Indikator für den ökonomischen Fortschritt einer Nation. Gegenwärtig wird es oft von Politikern, Ökonomen, internationalen Behörden und den Medien als eine primäre Maßzahl für die ökonomische Prosperität und Wohlstand einer Nation verwendet.

2.4.3 Entscheidungshilfen

Im weitesten Sinne ist eine Entscheidungshilfe irgendetwas zwischen einem Stift und einem Blatt Papier bis hin zu einem hoch entwickelten Computersystem, welches mehr oder weniger die Entscheidungen selbst trifft. Für rechnergestützte Systeme wird oft die Bezeichnung Entscheidungshilfesystem (DSS; engl.: Decision Support System), benutzt.

Die Bezeichnung DSS wird für viele unterschiedliche Systeme verwendet, wie z.B. Programmiersprachen, einfache Datensammlungen und Finanzplanungssysteme. DSS wurde, mehr oder weniger zu einem neuen Modewort. Die Ansichten, was ein DSS ist, unterscheiden sich - manchmal sind sie sogar völlig gegensätzlich (Alter, 1994).

Im Folgenden wird ein Versuch unternommen „Entscheidungshilfe“ zu definieren und den Unterschied zwischen Entscheidungshilfesystemen (DSS), Expertensystemen (ES) und Gruppen-Entscheidungshilfesystem (GDSS) herauszustellen. Wesentliche Teile der Definitionen wurden aus (Turban & Aronson, 1998) entnommen.

2.4.4 Entscheidungshilfemodelle

Die wichtigste Grundlage für die Entscheidungshilfe ist die Antwort auf die Frage, wie Entscheidungen gemacht werden. Der Entscheidungsprozess kann variieren aber er beginnt immer mit der Problemidentifikation und endet mit der Entscheidung. Ein allgemeines Entscheidungshilfemodell wird im Folgenden beschrieben (Abbildung 2-7).

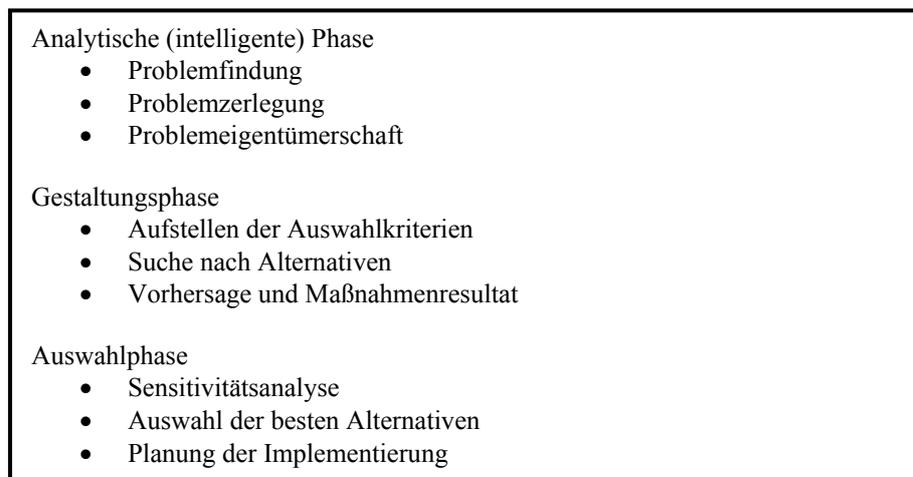


Abbildung 2-7: Entscheidungshilfemodell nach Turban & Aronson (1998).

Die **analytische Phase** wird auch als die intelligente Phase der Entscheidungsfindung bezeichnet. Sie zieht Prozesse der Kartierung und der Beobachtung der Umwelt nach sich, sowie verschiedene unterschiedliche Aktivitäten mit dem Ziel der Identifikation der Problemsituation. Danach wird das Problem, wenn möglich, in verschiedene Teilprobleme unterteilt. Ein stark unstrukturiertes Problem kann aus mehreren strukturierten Unterproblemen bestehen. Die analytische Phase mit der Analyse, ob das Problem oder die Teilprobleme innerhalb der Ordnung gelöst werden kann oder ob es zu anderen Ordnungen gehört. Dieser letzte Schritt wird Problemeigentümerschaft genannt.

Die nächste Phase ist die **Gestaltungsphase**. Sie beinhaltet die Generierung, Entwicklung und Analyse möglicher Lösungen. Hierbei müssen unterschiedliche alternative Lösungen der Probleme gefunden werden, es müssen verschiedene Szenarien vorhergesagt werden und Kriterien für die Wahl einer Lösung aufgestellt werden.

Letztlich wird die **Auswahlphase** erreicht und die aktuelle Entscheidung kann getroffen, sowie eine Planung für deren Implementierung aufgestellt werden. Natürlich ist der normale Entscheidungsweg nicht immer so geradlinig, wie hier gezeigt wurde. In Abhängigkeit von verschiedenen Vorkommnissen kann der Prozess unterbrochen und zu einem früheren Stadium zurückgeführt werden. Nachdem der gesamte Prozess beendet wurde, wird hoffentlich die beste Entscheidung getroffen oder, mehr realistisch, eine befriedigende Lösung gefunden.

2.4.4.1 Entscheidungshäufigkeit und Struktur eines Problems

Stabell (1994) geht noch weiter und diskutiert gewissermaßen das Thema der Entscheidungshäufigkeit. Eine einmalige Diskussion hat vollkommen andere Anforderungen an die Entscheidungshilfswerkzeuge als periodische Diskussionen. Das Gleiche gilt für die Auswirkungen von Entscheidungen (reversibel oder irreversibel) und die Länge des Entscheidungszyklus (Tage oder Jahre).

Für die Entscheidungsfindung ist weiterhin die Struktur des Problems wichtig, also ob ein Problem mehr oder weniger strukturiert ist. Ein vollkommen strukturiertes Problem (manchmal auch programmiertes Problem genannt) kann leicht mit Hilfe einer Routine oder einer Standardlösung gelöst werden. Das Problem ist eindeutig charakterisiert und es gibt ein klares Ziel. Andererseits sind hoch unstrukturierte (nichtprogrammierte) Probleme komplex und unscharf, wobei keine Standardlösung existiert. Stattdessen werden typischerweise unstrukturierte Probleme, wie z.B. die Auswahl einer Anzahl von Forschungs- und Entwicklungsprojekten, auf der Basis menschlicher Intuition gelöst. Zwischen diesen Extremen liegen die semi-strukturierten Probleme. Gerade bei diesen kann die Qualität der Entscheidung am meisten verbessert werden.

Die Implementierung einer rechnergestützten Entscheidungshilfe ist umso leichter je strukturierter das Problem ist. Im Extremfall eines vollkommen strukturierten Problems ist es sogar möglich, dass das Entscheidungssystem die Entscheidung allein finden kann. Je mehr das Problem unstrukturiert ist, desto komplizierter ist es allgemeine Ziele zu formulieren und zu charakterisieren welche spezifische Entscheidung unterstützt werden kann.

Wie kann nun die Konstruktion von Entscheidungshilfswerkzeugen für ein nachhaltiges Ressourcenmanagement erfolgen? Es ist sicherlich nicht zu bezweifeln, dass es sich bei einem nachhaltigen Ressourcenmanagement um ein hoch unstrukturiertes Problem handelt. Es ist deshalb sehr schwierig eine Rangfolge der unterschiedlichen Alternativen anhand einiger Nachhaltigkeitskriterien zu finden. Die Entscheidungswerkzeuge müssen deshalb sehr bescheiden und eher defensiv sein, also dem hoch unstrukturierten Problem angemessen. Andernfalls besteht ein hohes Risiko, dass das DSS versagt.

2.4.4.2 Entscheidungshilfswerkzeuge

Ein Entscheidungshilfswerkzeug arbeitet mit einem oder mehreren Teilen des oben beschriebenen Entscheidungsprozesses. Die hauptsächlichen Klassen von Entscheidungshilfswerkzeugen sind DSS, ES, EIS und GDSS (siehe Abbildung 2-8).

DSS – engl.: Decision Support System – dt.: Entscheidungshilfesystem
GDSS, GSS – engl.: Group (Decision) Support System – dt.: Gruppen-Entscheidungshilfesystem
EIS – engl.: Executive Information System – dt.: Vorstandsinformationssystem
ES – engl.: Expert System – dt.: Expertensystem

Abbildung 2-8: Hauptsächliche Klassen von Entscheidungshilfswerkzeugen.

In der Literatur werden auch andere Kurzbezeichnungen verwendet, die eher verwirrend sind, wie z.B. IDSS, IGDSS, ANN, KS etc. Weil die meisten von ihnen nur Varianten der Systems in Abbildung 2-8 sind, sollen diese hier nicht beschrieben werden. In Folgenden sollen die Klassen detaillierter erläutert werden.

DSS: Auch wenn es keine generell akzeptierte Definition eines DSS gibt, sollen hier zwei Definitionen aus den 70er Jahre aufgeführt werden:

1. Ein DSS ist ein „interaktives computerbasiertes System, welches des Entscheidungsträgern ermöglicht Daten und Modelle zur Lösung unstrukturierter Probleme zu nutzen“ [Gory & Scott Morton, 1971, aus Turban & Aronson, 1998].
2. „DSS koppelt die intellektuellen Ressourcen der Individuen mit den Möglichkeiten der Computer um die Qualität der Entscheidungen zu verbessern. Es ist ein computerbasiertes System für die Steuerung von Entscheidungsträgern, die sich mit semi-strukturierten Problemen beschäftigen.“ [Keen & Scott Morton, 1978, aus Turban & Aronson, 1998]

Beide dieser Definitionen sind sehr weit gefasst wobei die Bezeichnung DSS oft als eine Sammelbezeichnung für irgendwelche rechnergestützten Systeme genutzt wird, die die Entscheidungsfindung in einer Organisation unterstützen.

GDSS: Wichtigere Entscheidungen werden oft durch Gruppen getroffen. Eine Gruppe zu einer bestimmten Zeit an einen bestimmten Platz zu versammeln und sie zu einer Entscheidung zu bringen, ist schwierig und teuer. Auch wenn die praktischen Probleme oft leicht gelöst werden können, sind die resultierenden Diskussionen oft nur mittelmäßig. Es gibt dafür verschiedene Gründe. Ein besonders wichtiger ist jedoch, dass die Gruppenmitglieder nicht gleich gut informiert sind, so dass Teile der Gruppe dominieren. Abbildung 2-9 zeigt das Pro und Contra der Gruppenarbeit.

Die Grundidee des GDSS ist, das System zu beschleunigen und einige seiner Fehlfunktionen zu heilen. Es gibt mehrere verschiedene Techniken und Methoden, um dieses zu erreichen. Die bekanntesten sind die „Nominal Group Technology“ und die „Delphi Technik“ (Huber, 1994). Wichtig ist, dass das Ziel des GDSS eine Verbesserung der Produktivität und Effektivität des Entscheidungsprozesses ist. Gewöhnlich gibt es einen Gruppen-Vermittler, d.h. einen Menschen, der die Kontrolle über das Treffen ausübt. Er verfügt über verschiedene

Hilfsmittel und Techniken, wie z.B. Datenbanken und Modelle, und einige gruppensdynamische Werkzeuge, wie z.B. Abstimmungssysteme. In Abbildung 2-10 ist ein Modell eines GDSS dargestellt.

<p>Die Potenziale der Gruppenarbeit sind mehrere:</p> <ul style="list-style-type: none">• Gruppen sind besser als Individuen beim Problemverständnis, teilweise weil die Gruppe mehr Wissen besitzt als das Individuum• Gruppenmitglieder wollen Ihr Ego in die Entscheidungen einbringen• Die Gruppenmitglieder sind haftbar für Entscheidungen an denen Sie teilgenommen haben (können zur Verantwortung gezogen werden) <p>Es gibt aber auch einige Risiken für Fehlfunktionen innerhalb der Gruppe, z.B.:</p> <ul style="list-style-type: none">• Tendenz der von Gruppen riskantere Entscheidungen zu treffen als sie sollten• Sozialer Druck der Übereinstimmung welches in Gruppendenken resultieren kann
--

Abbildung 2-9: Pro und Contra von Gruppenarbeit.

Eine typische GDSS-Sitzung beginnt mit der Sammlung persönlicher Ideen, wie ein bestimmtes Problem gelöst werden könnte, z.B. alle Teilnehmer sammeln einige Minuten lang Ideen („brainstorming“). Danach werden die Ideen bewertet und eine davon priorisiert. Nach einiger Zeit erhält man auf diese Weise einen fertigen Aktionsplan, zu dem jeder die Möglichkeit hatte einen Beitrag zu liefern.

Nach Turban & Aronson (1998) ist GDSS „eines der ergiebigsten Gebiete der akademischen IS Forschung“ (IS = Informationssystem). Ein anderes Forschungsthema innerhalb der GDSS sind multikriterielle Entscheidungen, die durch Gruppen getroffen werden, z.B. Volapato (1994) und Jarke & Jelassi (1994).

EIS: Der Begriff EIS tritt in Verbindung mit größeren Betrieben auf und steht für Systeme, die:

- Geschäftsführungen und Managern schnelle und detaillierte Informationen in Texten und Grafiken bereitstellen
- ein extrem nutzerfreundliches Interface besitzen, welches den individuellen Entscheidungsstil entspricht und
- oft sehr eng mit dem ökonomischen Berichtssystem des Betriebes verbunden sind.

ES: Ein ES versucht auf unterschiedlichen Wegen das Wissen von Experten zu ersetzen. Das System ist ein Entscheidung treffendes und Problem lösendes Programm, welches ein Niveau erreichen kann, das vergleichbar oder besser ist als das eines Experten. Die Grundidee ist die Nutzung von angewandter künstlicher Intelligenz, um das Fachwissen eines oder mehrerer

Experten in einem Computer überführen. Der Softwarenutzer kann dann von dem System Beratung und Erläuterungen erhalten. ES sind oft in anderen Informationstechnologien integriert.

Um das richtige Entscheidungshilfswerkzeug auszuwählen muss der Nutzertypus bekannt sein. Systeme für Behörden, Spezialisten und Gruppenvermittler sind natürlich sehr unterschiedlich. Die unterschiedlichen Werkzeuge haben gemeinsam, dass sie auf verschiedene Datenbankanwendungen angewiesen sind. In Abbildung 2-11 ist ein konzeptionelles Bild eines typischen DSS zu sehen.

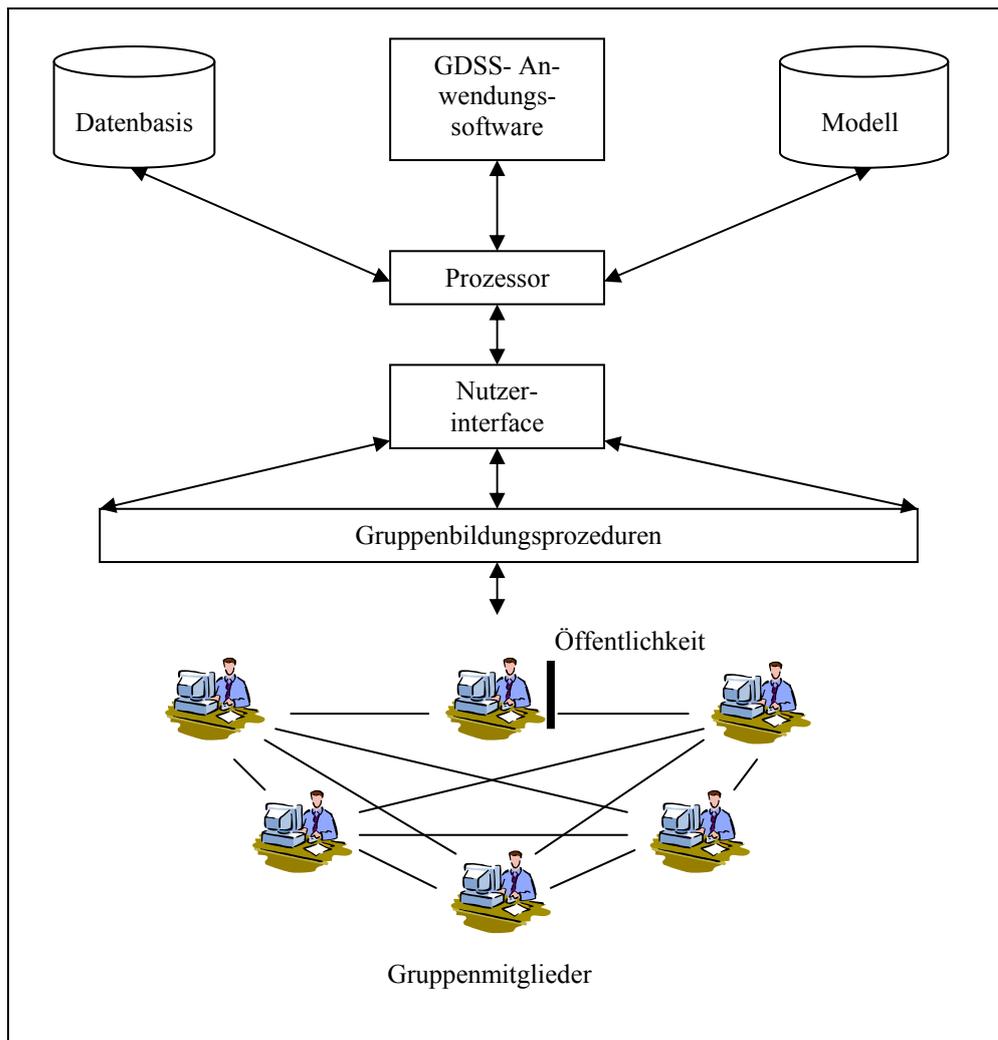


Abbildung 2-10: Modell eines GDSS nach Turban & Aronson (1998).

2.4.4.3 Konstruktion von Entscheidungshilfesystemen

Anwendungen von DSS sind oft kommerzieller Art, d.h. die Ergebnisse werden an kommerziellen Kriterien gemessen. Das kann erreicht werden, indem die Forschung in Richtung einer unternehmerischen Analyse orientiert wird. Um dies zu erreichen, müssen bei der Konstruktion von Entscheidungswerkzeugen einige wichtige Faktoren berücksichtigt werden, die im Folgenden diskutiert werden sollen.

Die Konstruktion eines DSS ist ein langwieriger und komplizierter Prozess. Ein wichtiger Grund dafür ist die Art der Probleme. Weil diese meist semi- oder unstrukturiert sind, ist zu Beginn selten gänzlich bekannt, welche Informationen der Manager benötigt. Deshalb werden die meisten DSS in einem iterativen Prozess konstruiert, bei dem zunächst erst einmal verschiedene Prototypen entstehen.

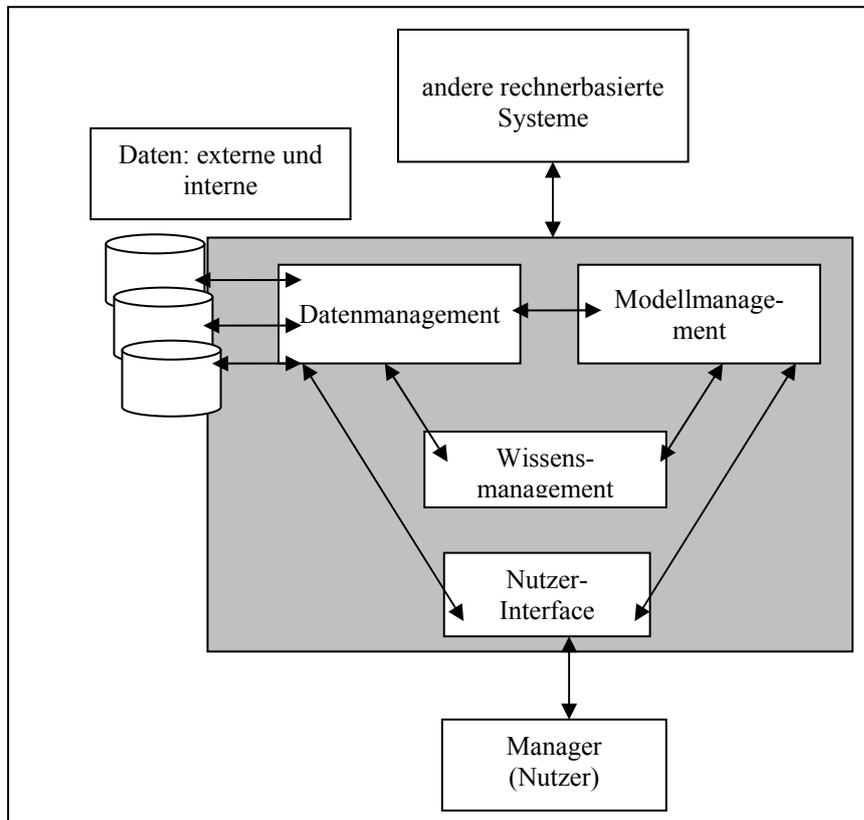


Abbildung 2-11: Typisches DSS nach Turban & Aronson (1998).

Ein allgemeiner Entwicklungsprozess eines DSS wird in Abbildung 2-12 gezeigt. Turban & Aronson (1998) weisen auf den sehr wichtigen Demonstrations- und Lernschritt (Schritt F in Abbildung 2-12) hin. Dies ist der Schritt bei dem der zunächst distanzierte „Betrachter“ zum „Nutzer“ werden kann, der Vertrauen in die Methode hat. Aus der organisatorischen Perspektive ist dieser Schritt damit entscheidend dafür, ob das System allgemein akzeptiert wird oder nicht. Um zu vermeiden, dass das System aus o.g. genannten Gründen, vergeblich implementiert wird, könnte man die Phase D (Design Phase) entsprechend verkürzen oder ganz weglassen. Stattdessen wäre es möglich fiktive Entscheidungshilfswerkzeuge zu konstruieren, mit denen man testen kann was der Nutzer überhaupt möchte. Danach kann die wirkliche Implementierung erfolgen. Ein Beispiel dafür ist das STORM-System in den Niederlanden, das über mehrere Entwicklungsphasen entstand. Ein Negativ-Beispiel ist das NELUP-System in England, welches frühzeitig beendet wurde (beide in Anlage 2-2 enthalten).

Locket et al. (1994) berichten von der Entwicklung großer und komplexer DSS und empfehlen die Anwendung von Prototypen, da die Arbeit mit einer „Big Bang“ - Anwendung für ein Projekt sehr gefährlich sein kann. Problematisch bei der Entwicklung großer Systeme ist, dass das Ziel in der Zukunft liegt und die Zukunft gewissermaßen unbekannt ist. Besser ist da ein evolutionärer Prototypen – Prozess. Er umfasst 4 Schritte:

1. Auswahl eines wichtigen Teilproblems, dass zuerst behandelt wird
2. Aufbau eines kleinen und nutzbaren Systems für Entscheidungsträger
3. Bewertung des Systems
4. Verfeinern, Ausweiten und Modifizieren des Systems

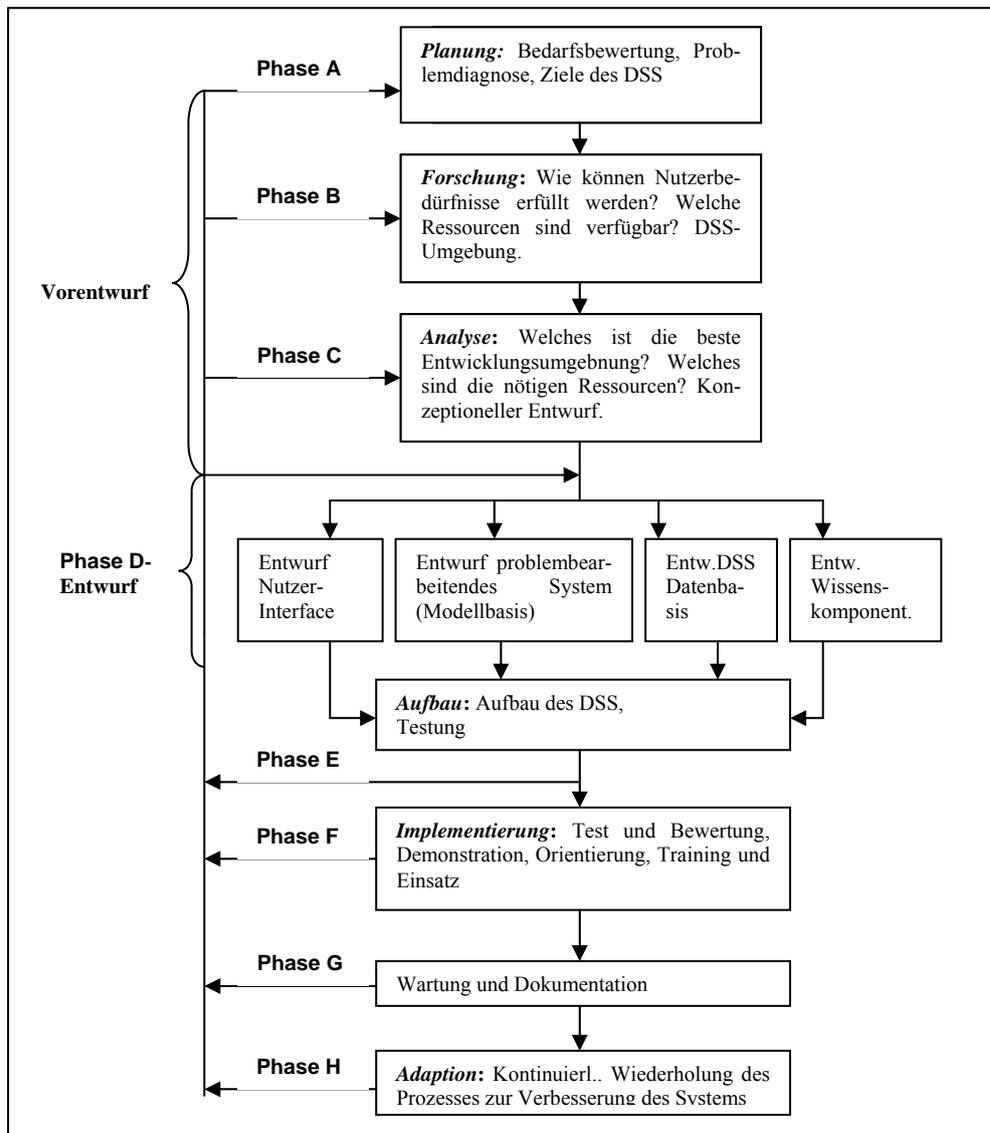


Abbildung 2-12: Der Entwicklungsprozess eines DSS nach Turban & Aronson (1998).

Dieser Prozess wird einige Male wiederholt, bis das System stabil arbeitet. Auf diese Weise spielt der Nutzer eine aktive Rolle im Gegensatz zur konventionellen Systementwicklung. Dies ist wegen der komplexen Entscheidungen notwendig. Nicht einmal der Nutzer weiß exakt welche Information er/sie benötigt und was wirklich einem nachhaltigen regionalen Management entspricht. Der Prototypen - Prozess wird auch als „quick and dirty“-Version eines Informationssystems bezeichnet. Wenn der evolutionäre Entwicklungsprozess erhalten bleiben soll, muss der Prototyp einigen Einschränkungen unterliegen. Die Zeit für jede Iteration muss kurz sein und die Kosten des ersten Prototyps müssen gering sein. Anderenfalls riskiert man als Endprodukt eine aufgeblähte, langsame und unsaubere Lösung.

Die Forschung an der DSS - Technologien fokussiert sich gegenwärtig auf Internet - Anwendungen, auf die Schaffung von Gruppen – DSS, auf die Implementierung von intelligenten kreativen Systemen und auf die Spezialisierung von DSS zur Anpassung an den eindeutige Einzelfälle. Einige der neuesten Entwicklungen beinhalten die mehrdimensionale Analyse, Client/Server - Architektur, Dokumentenmanagement und Datenarchivierung. Diese Entwicklung kann so interpretiert werden, dass die DSS - Forschung einen breiteren Anwendungsspekt für die Entscheidungsfindung bekommt. Dieser Prozess ist in der folgenden Tabelle 2-6 zusammengefasst.

Tabelle 2-6: Enge und breitere Betrachtung im Prozess der Entscheidungsfindung aus Turban & Aronson (1998).

Enge Betrachtungsweise	Breitere Betrachtungsweise
Die Wahl ist das Hauptproblem.	Unterstützung wird benötigt für andere Phasen des Entscheidungsprozesses
Entscheidungssituationen sind einzigartig.	Viele Entscheidungen wiederholen sich. Die Fähigkeit von früheren Entscheidungen zu strukturierten und unstrukturierten Problemen zu lernen ist wichtig.
Optimierung und Effizienz als Ziel	weitere Kriterien, wie Gerechtigkeit, Rechtmäßigkeit, menschliche Beziehungen und Leistungssteigerung werden einbezogen
Vertrauen auf rationale Faktoren	Bedeutung politischer und kultureller Normen etc. wird berücksichtigt
Einzelner Entscheidungsträger	Mehrere Entscheidungsträger

2.4.4.4 Entwicklung von Expertensystemen

Die Entwicklung eines Expertensystems ist keine leichte Aufgabe und viele ES - Projekte sind schon fehlgeschlagen. Um ein Versagen zu vermeiden, müssen zu allererst die Alternativen zu einem ES bewertet werden (Turban & Aronson, 1998):

Einbeziehung von Experten: Anstatt der Erstellung eines „Experten-Ersatzes“ können die Experten direkt genutzt werden.

Pauschalwissen: Durchführung von Bildungsprogrammen und Dokumentationen die den Expertenrat vermitteln

Konventionelle Software: Ist das Problem erst einmal gut definiert, kann die Lösung möglicherweise durch die Anwendung eines Standardpaketes erreicht werden.

Nach der Bewertung dieser Alternativen gibt es einige Erfordernisse für eine erfolgreiche Entwicklung eines ES. Darunter zählen:

- Die einbezogenen Experten können ihre Methoden der Problemlösung darlegen.
- Die Aufgabe ist nicht zu schwer, d.h. sie ist gut verständlich und klar definiert.
- Daten und Test sind verfügbar.

Ein anderes Problem ist die Auswahl der Experten und deren Motivierung zur Mitarbeit. In vielen geschäftlichen Projekten gibt es das Risiko für den Experten, dass sein eigener Markt kleiner wird, wenn er bei der Erstellung eines ES mitarbeitet. Wenn das Forschungsprojekt sich allerdings mit dem Thema Umweltressourcen beschäftigt, müsste dieses Risiko jedoch

klein sein. Es gibt heutzutage sicherlich nicht zu viele Experten, die sich mit Umweltmanagements befassen.

2.4.4.5 Erfolgsfaktoren für die Entwicklung von Entscheidungshilfen

Verschiedene Bewertungen und Übersichten beziehen sich aus der Bedeutung der Nutzerzufriedenheit. Der Nutzer muss überzeugt sein, dass das System gut ist, Zeit und Geld sparen kann oder generell bessere Entscheidungen treffen kann. Am besten ist alles Genannte zusammen.

Auf technischem Niveau muss die Komplexität niedrig sein, die Zuverlässigkeit hoch und das System muss ziemlich schnell sein. Jedes Problem mit Hardware, Netzwerken, Software und nicht standardisierten Methoden birgt das Risiko, dass das Interesse des Nutzers nachlässt.

Wer der Nutzer ist, ist anfänglich oft unbekannt. Die Lösung des Problems ist, den oder die potentiellen Nutzer in den Entwicklungsprozess einzubeziehen. Ein guter Dialog mit dem Nutzer macht das System sowohl für den Nutzer, als auch für den Entwickler interessant. Solch eine Entwicklungsmethode geht auch Hand in Hand mit der Prototypen - Entwicklung, die bereits diskutiert wurde.

Stabell (1994) diskutiert den Unterschied zwischen einem Werkzeug, das für eine spezifische Nutzergruppe entwickelt und einem, das für eine große Organisation entwickelt wurde. Letzteres muss stärker generalisiert sein. Da sich die Entwicklung an der Erstellung von Prototypen orientieren soll bedeutet das auch, dass die Entwicklung an der Verschiedenartigkeit der Nutzer orientiert sein sollte. Siehe z.B. Jamieson & Fedra (1996b) und McClean et al. (1995) für entsprechende Erfahrungen mit dem WaterWare- und dem NELUP-System.

2.4.5 Techniken der Entscheidungsfindung

Die Suche nach einem generellen Problemlöser, der alle Probleme lösen kann, wurde die Basis für eine intensive Forschung an „Künstlicher Intelligenz“ (AI, artificial intelligence). Das inspirierte auch die Nutzung von AI in Expertensystemen. Durch das Einbringen von Wissen in Computersysteme könnte das Fachwissen billig und breitenverfügbar werden. Aber diese Bemühungen haben sich als problematisch gezeigt. Dies kann z.B. an den vielen Einschränkungen gezeigt werden, die hinsichtlich der Fälle bestehen für die Expertensysteme nutzbar sind (Turban & Aronson, 1998).

Bis zum Beginn der 80iger Jahre basierten die meisten AI - Versuche auf Regeln. Die Regeln wurden aus Expertenwissen extrahiert. Riesbeck & Schank (1989) erkannten das Problem der Aufstellung von Regeln, die im Expertenwissen enthalten sind und entwickelten einen anderen Weg für Erstellung von AI - Anwendungen, der stattdessen auf Fällen basierte. Die Grundidee ist, dass die menschliche Erkenntnis mehr auf Fällen basiert, als auf Regeln. Beispielsweise wählt bei einer Stellenbesetzung der Manager nicht gerade denjenigen aus, der am anspruchsvollsten ist oder der die längste Berufserfahrung hat. Er wählt vielmehr denjenigen aus, der ihm als Ganzes das beste Gefühl gibt. Dies basiert auf früherer Erfahrung.

In Tabelle 2-7 sind verschiedene koexistierende, teilweise differierende Computertechnologien aufgeführt.

Tabelle 2-7: Existierende Technologien für die Entscheidungsfindung.

Technologie	Wann anwendbar?	Wann nicht anzuwenden?
Datenbank	Gut strukturierte, standardisierte Daten	Komplexe, schwach strukturierte Daten mit unscharfen Fragestellungen
Informationsrückgewinnung	Große Mengen von Textinformationen	Nicht-textliche komplexe Daten
Statistik	Große Mengen von gut verständlichen Daten mit gut formulierten Hypothesen	Erforschende Analyse von Daten mit abhängigen Variablen
Regelbasierte Systeme	Gut verständlich, stabil, begrenztes Problemgebiet und Rechtfertigung durch Regelbefolgung akzeptabel	Wenig verständliches Problemgebiet mit ständigen Änderungen
Neuronale Netzwerke	Klare numerische Daten für Mustererkennung oder Signalverarbeitung	Komplexe formale Daten oder wenn eine Rechtfertigung erforderlich ist
Fallbasiertes Schließen	Schwer verständliches Problemgebiet mit komplex strukturierten Daten die sich langsam mit der Zeit ändern und wenn Rechtfertigung erforderlich	Wenn Falldaten nicht verfügbar, oder wenn komplexe Anpassung erforderlich ist oder wenn eine exakte optimale Antwort erforderlich ist



Unerfahrener Mechaniker



Erfahrener Mechaniker, der sich an Fälle erinnert



Mechaniker, der neue Fälle lernt

Abbildung 2-13: Fall basiertes Schließen für einen Fahrzeugschlosser, aus Bergmann (1999).

Anhand der Übersicht über verschiedene DSS für die Umweltplanung (Anlage 2-2), kann festgestellt werden, dass die ES in der Mehrheit sind und dass sie für das regelbasierte Schließen genutzt werden. Aber die regelbasierte Technologie funktioniert nicht sehr gut bei komplexeren Problemen und deshalb enthalten die ES entweder ein sehr begrenztes Themengebiet oder sie sind nicht besonders erfolgreich (Kukuric & Hall, 1998). Kukuric beschreibt weiterhin einige generelle Ideen für die Nutzung der fallbasierten Technik beim Grundwasserqualitätsmanagement, aber es existiert noch kein Beispiel.

Das Konzept des fallbasierten Schließens soll im Folgenden beleuchtet werden. Es wird anschaulich in dem folgenden Cartoon beschrieben (Abbildung 2-13). Anwendungen des Konzeptes erfolgen nach dem so genannten „Kreislauf des fallbasierten Schließens“ (Abbildung 2-14). Jedes neue Problem sieht aus wie ein neuer Fall. Ähnliche Fälle werden von der Fall-Basis abgefragt. Anhand früherer Fälle wird eine neue Lösung angepasst. Diese neue Lösung wird getestet und die Erfahrungen werden in das System eingespeist. Auf diesem Weg wird das System mehr und mehr kompetent und enthält immer mehr Wissen. Natürlich ist die Implementierung nicht einfach auf Softwareniveau zu realisieren, aber es gibt heute bereits verschiedene Standardpakete, von denen einige sogar auf Internettechnologie und Java basieren.

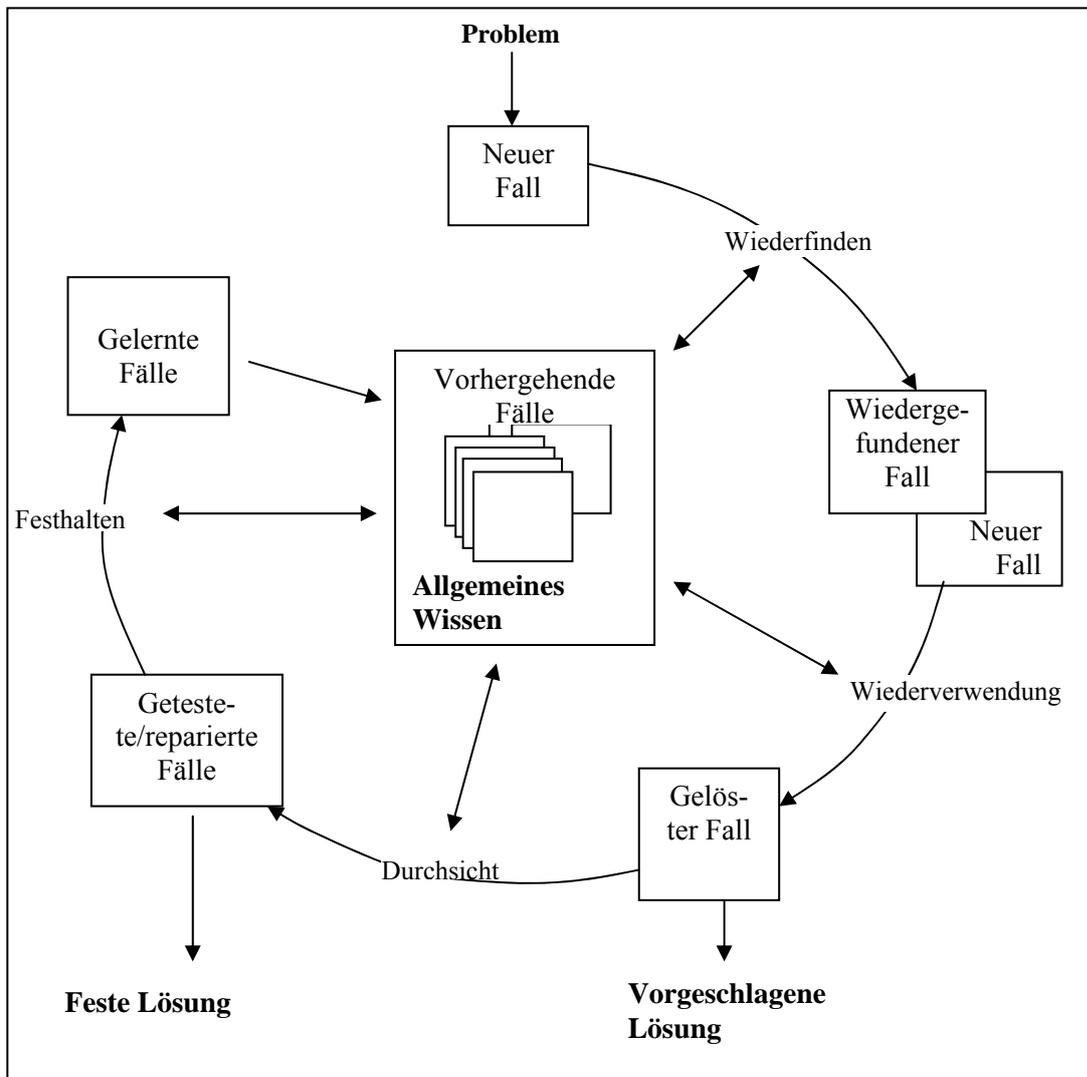


Abbildung 2-14: Der Kreislauf des fallbasierten Schließens (CBR-Circle), (Richter, 1998 aus Aamodt & Plaza, 1994).

Die industrielle Anwendung von fallbasiertem Schließen sind v.a. Informationsterminals für Kunden, Fehlersuche und Entscheidungsunterstützung (Watson, 1997, Bergmann, 1999). Im Bereich des Umweltmanagements konnten keine Anwendungen gefunden werden.

Verschiedene DSS wurden nach den folgenden Fragestellungen überprüft:

- Auf welchen Grundwassermodellen basiert das DSS?
- *Für welche Typen von Entscheidungen ist das DSS geschaffen worden? Sind es generelle oder spezielle Entscheidungen?*
- Welche Grundwasserkomponenten sind in dem DSS berücksichtigt?
- Welche Art von Unsicherheitsanalysen wird berücksichtigt?
- *Auf welchen Typ von Entscheidungstheorie stützt sich das DSS?*
- *Um welche Art von DSS handelt es sich?*
- *Ist das System nutzbar für einzugsgebietsbasiertes nachhaltiges Wassermanagement?*

(Bemerkung: Nur die *kursiv* gedruckten Punkte sind in folgenden weiter behandelt.)

Alle diesbezüglich untersuchten DSS sind in Anlage 2-2 aufgeführt. Die Systeme sind in alphabetischer Reihenfolge geordnet. Die letztlich entscheidende Frage, ob ein System für ein einzugsgebietsbezogenes nachhaltiges Wassermanagement geeignet ist, kann jedoch nur schwer beantwortet werden.

2.4.6 Entwicklungstrends von Entscheidungshilfen im Umweltbereich

Die Entwicklung des DSS-Konzepts im Bereich des allgemeinen Problemmanagements begann mit Datenbanken und wurde über ES und DSS bis hin zu EIS und GDSS fortgeführt (Turban & Aronson, 1998). Mit der schnellen Entwicklung der Rechentechnik und der grafischen Informationssysteme wurde es möglich immer komplexere Probleme zu bearbeiten. Inzwischen werden Umweltbelange, die lokale Punktquellen betreffen bis hin zu regionaler und auch globaler diffuser Verschmutzung betrachtet.

DSS für Umweltmanagement und die Planung natürlicher Ressourcen sind dieser Entwicklung gefolgt. Zuerst befassten sich die Systeme mit eng begrenzten und spezifischen Themen. Durch die zunehmende Einbeziehung von Expertenwissen in die Systeme konnten die Bewertungen billig und allgemein verfügbar werden.

Typische Themen für ES waren Sanierung und das Monitoring von kontaminierten und gefährdeten Standorten², Unterstützung bei der Wahl von Parametern für die Grundwassermodellierung³ und hydroelektrische Standorterkundungsmaßnahmen⁴ (siehe Anlage 2-2).

Der nächste Schritt wurde von Newell et al. (1990) durchgeführt. Mit Hilfe neuer Computertechnik entwickelten sie ein grafisches DSS für die Modellierung der Schadstoffmigration im Grundwasser (OASIS). Das neue System wurde um ein ES für die Aquiferklassifizierung und eine hydrogeologische Datenbasis (Aquifer Classification System and HGDB, siehe Anlage 2-2) herumgebaut.

² AERIS, ALEXIS, CORA, DPM, ESES-GW, Geophysics Expert System, HASP, HAWAMAX etc.

³ CAD HE, EXPAR, Expert ROKEY, EXSRM, FIESTA, KGM, mars, MODELEXPERT, QUAL2 ADVISOR, REGIS etc.

⁴ ARIANE, JOE, MHOES, YHYSIZE

Mit OASIS wurde es möglich stärker unstrukturierte Probleme zu lösen, wie z.B. mit EXPRES für die Modellierung und Risikoabschätzung von PestizidAuswaschungen in das Grundwasser (Crowe & Mutch, 1994). Weitere Beispiele sind WaterWare, das ein GIS und ein Modell für die Wasserressourcenbewertung u.a., kombiniert (Jamieson & Fedra, 1996a) und das DESERT-System für Managementaufgaben der Wasserbeschaffenheit (IIASA, 1996).

Der nächste Schritt war die Ausweitung des DSS zu einem multidisziplinären Ansatz. Hier war insbesondere die Forderung der „Nachhaltigkeit von Maßnahmen“ der treibende Faktor. Beispiele sind ECEMOD für die Analyse verschiedener politischer und ökonomischer Bedingungen in Wassereinzugsgebieten (VASTRA, 1998), Patuxent Wassereinzugsgebietsmodell innerhalb des GEM (General Ecosystem Model) mit integrierter Hydrologie, Ökonomie und Ökologie (Constanza et al., 1996), das LOIS-Projekt zu Nährstoffen, Schwermetallen, organischen Komponenten im Boden, Fließgewässern und Seen (Leeks & Jarvie, 1998), MODSS für die Vorhersage von Auswirkungen von Steuerungsmaßnahmen auf die Grundwasserbeschaffenheit und Ökonomie und das NELUP – System für die Landnutzungsplanung (O’Callaghan, 1995). Der jüngste bekannte Ansatz in dieser Gruppe ist das Elbe-DSS (Hahn u.a., 2005). Das Elbe-DSS dient zur Abschätzung von Auswirkungen von Maßnahmen und externen Szenarien auf die Themenfelder Gewässergüte, Gewässerzustand, Ökologie, Hydrologie, Hydraulik, Schifffahrt und Hochwasserschutz.

Die Diskussionen über einen einheitlichen Ressourcenpool und der Bedarf an gemeinsamen Visionen zur Gewinnung politischer Unterstützung für Veränderungen – und die langfristige Nachhaltigkeit – haben zu einer Entwicklung von GDSS geführt. Beispiele dafür sind STROM für das Auenmanagement (Schmidt, 1998), STEEL-DSS für das Hochwassermanagement über Internet (Ostrowski, 1997) und das CPSS für die Wasserressourcenplanung (Simonovic, 1996b).

Natürlich gibt es noch weiterhin Bedarf für ES und DSS auch wenn einige Beispiele von GDSS bereits existieren. Es soll hier erneut darauf hingewiesen werden, dass die Systeme sehr unterschiedlich sind, je nach dem vorhandenen Problem und damit oft nicht übertragbar.

2.4.7 Schlussfolgerungen für die Entscheidungsunterstützung und das Grundwassermanagement

Die gebräuchlichste Entscheidungsunterstützung basiert nicht auf Computersystemen. Um zu erreichen, dass ein DSS entwickelt wird, muss der Nutzen des Systems die Kosten übersteigen – und das ist z.B. bei einmaligen Entscheidungssituationen meist nicht der Fall.

Häufig zitierte Quellen von Grundwasser-Entscheidungsunterstützung sind Alan Freeze’s Artikel Freeze et al. (1990), Massmann et al. (1991), Sperling et al. (1992), Freeze et al. (1992), in denen ein Entscheidungsmodell zusammen mit Anwendungsbeispielen präsentiert wird. Beispiele sind eine Deponie-Abdichtung und die Wahl der Hangneigung eines Tagebaus. Das Modell hilft dabei das Risiko systematisch zu bewerten sowie Unsicherheiten und Kosten für verschiedene Managementalternativen zu prüfen. Die Gesamtkosten für die billigste Alternative werden mit Hilfe einer Optimierungsrechnung ermittelt.

Bisher wurde kein DSS gefunden, dass die Landnutzung mit dem Transport von diffusen Stoffeinträgen in der gesättigten Zone verknüpft. Typische DSS behandeln entweder die Wassermenge (z.B. AQUATOOL, SDDSS, Re-assessment of Management Strategies for a Multi

Purpose Reservoir), oder sie berechnen oder schätzen die Menge von Schadstoffen, die das Grundwasser erreichen werden (EXPRES, Rodda et al., 1999, Magette, 1989). Systeme für Grundwasser berücksichtigen entweder nur Grundwasserprobleme (OASIS) oder behandeln Punktquellen, wie z.B. Mülldeponien (siehe Anlage 2-2).

Die Kopplung der Landnutzung und des Stickstoffaustrages in der ungesättigten Zone mit einem Grundwassermodell und die Verbindung mit einem DSS sind bisher nicht erfolgt.

2.5 Grundwasserschutz in der Europäischen Union

2.5.1 Rechtliche Grundlagen

Die Gesetzgebung der Europäischen Union (EU) besteht hauptsächlich aus Verordnungen und Richtlinien, welche Teile der nationalen Gesetzgebung prägen. Verordnungen sind bindend in den Mitgliedsstaaten, auch wenn sie nicht in die nationale Gesetzgebung aufgenommen sind. Auf der anderen Seite sollen die Richtlinien in die nationalen Gesetze aufgenommen werden. Wenn eine Richtlinie nicht in nationale Gesetze implementiert wurde, ist sie trotzdem bindend, entweder direkt oder indirekt. Eine Richtlinie, die eindeutig ist und Rechte und Verantwortlichkeiten festlegt, hat einen direkten Effekt, d.h. sie ist bindend, auch wenn die nationale Gesetzgebung davon abweicht. Hingegen hat eine Richtlinie, die indirekt wirkt, doch immer noch eine gewisse bindende Wirkung, da alle legislativen Einrichtungen (Gerichte, Behörden Kommunalverwaltungen u.s.w.) verpflichtet sind die nationale Gesetze so anzuwenden, dass sie bestmöglich mit der Richtlinie übereinstimmen.

In der EU war es anfangs durchaus strittig, ob die Europäische Gemeinschaft (EG) tatsächlich Richtlinien auf dem Gebiet des Umweltschutzes erstellen kann (Jedlitschka in Beudt, 1997). In den Römischen Verträgen von 1957 ist deshalb auch kein eigentlicher Umweltschutz vorgesehen. Die Verträge fordern jedoch die „ständige Verbesserung der Lebens- und Arbeitsbedingungen“. Später wurde der Art. 100 bzw. Art. 235 EWG-Vertrag vom 23.03.57 herangezogen um eine Rechtsangleichung zur Vermeidung von Wettbewerbsverzerrungen innerhalb der EG zu erreichen bzw. um den Rat zu ermächtigen Vorschriften zu erlassen, um den gemeinsamen Markt zu verwirklichen, wenn der EWG-Vertrag die erforderlichen Befugnisse nicht vorsieht. Später wurden z.B. wichtige Handlungsgrundsätze, wie das Vorsorgeprinzip, die Bekämpfung von Beeinträchtigungen des Grundwassers und das Verursacherprinzip eingeführt. Im Art. 100a wird zudem festgelegt, dass der Rat von einem hohen Schutzniveau des Grundwassers auszugehen hat und dass strengere Vorschriften von Mitgliedsstaaten weiterhin angewendet werden können, wenn sie keine protektionistischen Maßnahmen darstellen.

Seit 1985 verfolgt die EU einen neuen Grundsatz, wonach das Gesetzwerk der Kommission (Verordnungen, Richtlinien) nur grundsätzliche Anforderungen regelt. Technische Bestimmungen werden in europäischen Normen festgelegt (CEN).

Wichtige Gesetze, die für das Management und den Schutz des Grundwassers in der EU bindend sind, sind folgende:

- Umweltverträglichkeitsprüfung bei bestimmten öffentlichen und privaten Projekten (85/337/EWG vom 27. Juni 1985) (Umweltverträglichkeitsprüfung)
- Richtlinie über Schutz des Grundwassers gegen Verschmutzungen durch bestimmte gefährliche Stoffe (80/68/EWG vom 17. Dezember 1979) (Grundwasserrichtlinie)

- Rats-Richtlinie für die Qualität von Wasser für die menschliche Ernährung (98/83/EC vom 3. November 1998) (Trinkwasserrichtlinie)
- Richtlinie zum Schutz der Gewässer vor Verunreinigungen durch Nitrat aus landwirtschaftlichen Quellen (91/676/EWG vom 12. Dezember 1991) (Nitratrichtlinie)
- Richtlinie über das Inverkehrbringen von PSM (91/414/EWG vom 15. Juli 1991) (Pflanzenschutzmittel)
- Richtlinie zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik (2000/60/EG vom 23. Oktober 2000) (Wasserrahmenrichtlinie)

Die Umweltverträglichkeitsprüfung spielt eine große Rolle beim Management und dem Schutz der Grundwasserressourcen. Der Term „Umweltverträglichkeitsprüfung“ beschreibt eine Methode und einen Prozess durch die Informationen über Umwelteinflüsse eines Projektes gesammelt werden. Diese werden durch die Behörden zur Festlegung der Auflagen für das Projekt verwendet. Ein wichtiger Bestandteil dieses Prozesses ist die Entscheidungsfindung.

Die Grundwasserrichtlinie und die neue Trinkwasserrichtlinie sind gleichermaßen wichtig, da Grundwasser zu großen Teilen die Trinkwasserversorgung deckt und oft direkt als Trinkwasser verwendet wird. Die Trinkwasserrichtlinie beinhaltet Qualitätsstandards für das Wasser, die sich an den Anforderungen für die Ernährung des Menschen orientieren. Die Hauptmerkmale der Grundwasserrichtlinie sind, dass keine Verschlechterung der Qualität erfolgen darf. Sie beinhaltet weiterhin zwei Listen von Substanzen (I und II), die nicht oder nur begrenzt in das Grundwasser eingeleitet werden dürfen.

Die Pflanzenschutzmittelrichtlinie legt u.a. einheitliche Grundsätze für die EU-weite Zulassung von Pflanzenschutzmitteln fest. Dabei ist es für den Schutz des Grundwassers wichtig, welche Grenzwerte bei ordnungsgemäßer Anwendung zugrunde gelegt werden. Dabei konnte die deutsche Position, einen Vorsorgewert von 0,1 µg/l einzuführen, nicht durchgesetzt werden. Maßstab sind jetzt die WHO-Werte. Die Richtlinie wurde auch nicht von der Generaldirektion XI – Umwelt, sondern von der Generaldirektion VI – Landwirtschaft erarbeitet. Sie orientiert sich leider an Artikel 43 EWG-Vertrag, der ausschließlich agrarmarktpolitischen Zielen dient. Im Gegensatz zu Art. 100a werden schärfere nationale Vorschriften ausgeschlossen. Damit besteht die Gefahr, dass derzeit auf nationaler Ebene verbotene Pflanzenschutzmittel EU-weit aus Gründen des Wettbewerbsschutzes wieder zugelassen werden müssen.

Die Nitratrichtlinie orientiert auf die Verringerung der Nitratreinträge aus der Landwirtschaft mit dem Ziel des Schutzes der Gewässer vor Eutrophierung und dem Schutz der Trinkwasserressourcen. Dabei sollen überall Grundanforderungen formuliert und durchgesetzt werden und es sollen regional - wo die Grundanforderungen nicht ausreichen – zusätzliche Anforderungen aufgestellt werden. Danach müssen die EU-Staaten die Regeln der guten fachlichen Praxis flächendeckend einführen – allerdings auf freiwilliger Basis für die Landwirte – und es müssen die Regeln der guten fachlichen Praxis in „gefährdeten Gebieten“ verbindlich vorgeschrieben werden und durch Aktionsprogramme ergänzt werden, wobei u.a. die Aufbringung von Wirtschaftsdung (u.a. Gülle) auf 170 kg/ha*a begrenzt wird (Ausnahmeregelungen sind möglich). Unter gefährdeten Gebieten versteht die Richtlinie dabei u.a. Grundwassereinzugsgebiete in denen eine Überschreitung des Nitratgrenzwertes für Trinkwasser (50 mg/l) besteht oder zu besorgen ist.

Das Ziel der Wasserrahmenrichtlinie ist der Schutz des Oberflächenwassers, der Mündungsbereiche der Flüsse und der Küstengewässer ebenso wie der Ozeane und des Grundwassers in

Gebiet der EU. Der Rahmen ist ein integrierter Ansatz der den Nutzwert des gesamten Wassers berücksichtigt, der im ökonomischen Bereich erzielt wird. Dabei wird unterschieden in Haushalt, Industrie und Landwirtschaft. Weiterhin soll das Wassermanagement auf Flussgebiete orientiert werden. Dabei sollen auf Steuerungsinstrumente zurückgegriffen und definierte Umweltqualitäts- und –quantitätsstandards eingehalten werden. Die Implementierung der Grundwasserressourcen in die Wasserrahmenrichtlinie der EU ist bisher noch nicht vollständig erfolgt. Für die Grundwasserqualität wird eine Vorbeugungsstrategie vorgeschrieben, welche ein Monitoring erfordert, um chemische Änderungen in der Zusammensetzung zu bemerken, und um anthropogen verursachte steigende Verunreinigungstrends verringern zu können. Die Sicherung der Grundwasserquantität wird durch die Reduktion der maximalen Grundwasserentnahme auf die Grundwasserneubildungsmenge erreicht.

2.5.2 EU-Grundwasseraktionsprogramm und Tochterrichtlinie über den Grundwasserschutz

Das EG-Ministerseminar der Umweltminister (26./27.11.1991) in Den Haag brachte, mit dem Beschluss des Grundwasseraktionsprogramms, einen erheblichen Fortschritt für den Schutz des Grundwassers in der EU (Jedlitschka in Beudt, 1997). Es wurde beschlossen, dass nicht verunreinigtes Grundwasser (GW) in seiner Beschaffenheit erhalten bleiben soll, eine weitere Schädigung von verunreinigtem GW verhindert werden soll und gegebenenfalls verunreinigtes GW und Boden saniert werden soll. Das Vorsorgeprinzip wurde bestätigt und das Subsidiaritätsprinzip hervorgehoben. Nach letzterem wird die Gemeinschaft - entsprechend Art. 130i - in Umweltfragen nur dann tätig, wenn genannte Ziele besser auf Gemeinschaftsebene als auf Ebene der einzelnen Mitgliedsstaaten lösbar sind. Die Maßnahmen sollen sich dabei auf Art. 130r der einheitlichen Akte stützen. Das Aktionsprogramm umfasst folgende Prioritäten in den nächsten Jahren:

- Grundwasserüberwachung, -bewertung, -darstellung in Karten und Berichten (mapping and monitoring)
- Grundwasserbewirtschaftung (sustainable management), Landnutzungsplanung, Schutzgebiete
- Landwirtschaft und Grundwasserschutz (gute fachliche Praxis, Begrenzung von Nitrat- und PSM-Einträgen)
- rechtliche und technische Regelung für Nutzung von Grundwasser (Entnahme) und den Umgang mit wassergefährdenden Stoffen
- Entwicklung von ökonomischen und finanziellen Instrumenten

Gut ein Jahr nach Inkrafttreten der EU-Wasserrahmenrichtlinie (WRRL) hat die Europäische Kommission die Arbeiten zu der Tochterrichtlinie über den Grundwasserschutz mit der Vorlage eines ersten Grundsatzpapiers aufgenommen (EUWID, 2002). Im Mittelpunkt des Papiers steht der chemische Zustand des Grundwassers, gestützt auf erste Analysen der Verschmutzungen der europäischen Grundwasserkörper. Die Grundwasserfrage war aufgrund großer Meinungsunterschiede zwischen EU-Parlament und Rat bei der Verabschiedung der WRRL weitgehend außen vor geblieben. Die Gremien hatten sich letztlich nur auf das Erstellen einer separaten Grundwasserrichtlinie (Tochterrichtlinie) geeinigt. Gemäß Artikel 17 der WRRL musste die EU-Kommission den Entwurf für die Tochterrichtlinie bis Ende 2002 vorlegen. Ende 2001 hatte die Kommission anlässlich des ersten Treffens eines von ihr einberu-

fenen Sachverständigengremiums ein erstes Themenpapier vorgelegt. Das Papier sollte die Diskussion über Konzepte und Begriffe eröffnen, die bei der Gestaltung des Grundwasserschutzes eine Rolle spielen. Es sollte nicht die Position der Kommission darstellen, sondern als Basis für die Entwicklung der Tochterrichtlinie dienen. Der endgültige Entwurf für die Grundwasserrichtlinie sollte auf dem zweiten Treffen des Gremiums im März 2002 festgelegt werden. Die ersten Elemente eines Rechtsvorschlages wurden jedoch erst im Juni 2002 und der grundlegenden Entwurf im Oktober 2002 vorgelegt.

Nach den Bestimmungen der Wasserrahmenrichtlinie sollen die EU-Mitgliedsstaaten Maßnahmen ergreifen, die die Erreichung eines guten Zustands der Grundwasserkörper bis zum Jahr 2015 ermöglichen. Entsprechend soll die Grundwasserrichtlinie laut dem Kommissionspapier Kriterien für die Beurteilung des guten chemischen Zustandes enthalten. Des Weiteren soll sie Kriterien zur Bestimmung signifikanter und anhaltender Aufwärtstrends bei der Verunreinigung von Grundwasser und Ansatzpunkte für die Trendumkehr festlegen.

Solange auf Gemeinschafts- und nationaler Ebene diese Kriterien fehlen, soll als Ausgangspunkt für die Trendumkehr ein Wert von 75 Prozent der derzeit im Gemeinschaftsrecht gültigen Qualitätsstandards für Grundwasser gelten.

Grundsätzlich empfiehlt die Kommission einen möglichst breiten und umfassenden Ansatz für die Grundwasserrichtlinie. Basierend auf einer Gefahrenanalyse der Grundwasserkörper soll die Richtlinie die verschiedenen regionalen Gegebenheiten sowie die in den Mitgliedsstaaten angewandten Schutz- und Sanierungspraktiken berücksichtigen. Zudem sollen alternative Strategien für verschiedene Arten von Verunreinigungen entwickelt und diskutiert werden. Weiterhin sollen insbesondere die Forderungen des Europäischen Parlaments berücksichtigt werden: das heißt, die Definition des „guten Zustandes“ zu verbessern und Qualitätsstandards für Grundwasserkörper festzulegen.

Für die Analyse der verschiedenen Arten von Grundwasserbelastungen schlägt das Themenpapier drei Klassen vor: Als Klasse I gelten unbelastete Grundwasserkörper, die durch Verschmutzungen aus Punkt- oder diffusen Quellen gefährdet sind. Klasse II bezieht sich auf belastete Grundwasserkörper, die einen signifikanten und anhaltenden Aufwärtstrend hinsichtlich der Verschmutzung aufweisen und zudem stetigen Belastungen aus diffusen Quellen ausgesetzt sind. Die dritte Klasse bezeichnet belastete Grundwasserkörper mit anhaltender Gefährdung durch Punktquellen.

Die Wasserrahmenrichtlinie schreibt für unbelastetes Grundwasser ein Nichtverschlechterungsgebot und das Prinzip der Verhinderung von Verschmutzungen an der Quelle vor. Die Richtlinie bietet aber keine eindeutige Definition für die Begriffe „unbelastetes Grundwasser“ und „Grundwasserkörper im natürlichen Zustand“. Für die Kommission besteht daher noch Unklarheit über die Ziele, die mit den Schutzmaßnahmen für unbelastete Gewässer erreicht werden sollen. Auch die Definition des guten chemischen Zustandes von Grundwasser in Anhang 5 der WRRL bietet für die Kommission in diesem Zusammenhang keine Hilfe, da sie sich ausschließlich auf Verunreinigungen durch Nitrate und Pestizide bezieht. Dies bedeutet, dass Grundwasserkörper mit einer ganzen Reihe von anderen Substanzen belastet sein könnten und trotzdem der Definition des guten Zustandes genügen, heißt es im Themenpapier.

Das Papier empfiehlt daher für die Klassifizierung von Grundwasser, die einschlägigen Bestimmungen der WRRL für Oberflächengewässer zu berücksichtigen. Die in Anhang 5 aufgeführte Definition eines hohen chemischen Standards für Oberflächengewässer könnte als Muster für die Definition eines solchen Standards für Grundwasserkörper dienen. Eine genau-

ere Konkretisierung des guten chemischen Zustandes für Grundwasser soll auch die Aufstellung einer Grundwasser-Typologie umfassen. Dieser Ansatz schafft nach Meinung der Kommission Klarheit über die Anwendungsbedingungen des Nichtverschlechterungsgebotes gemäß Artikel 4(b)I und bietet eine bessere Grundlage für die Zielvorgaben zur Verhinderung von Verschmutzungen. Die für Trinkwasser geltenden Qualitätsstandards sollen dagegen prinzipiell nicht für unbelastete Grundwasserkörper gelten. Dies könnte, so die Befürchtungen, als Einladung zum Verschmutzen innerhalb der Grenzen, die für den definierten Standard gelten, missverstanden werden.

Im Falle der belasteten Grundwasserkörper, die einen signifikanten und anhaltenden Aufwärtstrend hinsichtlich der Verschmutzung aufweisen und zudem stetigen Belastungen aus diffusen Quellen ausgesetzt sind (Klasse II), legt die WRRL lediglich für Nitrate und Pestizide Werte fest, die Maßnahmen zur Trendumkehr auslösen. Außerdem existieren keine Endwerte für die Trendumkehr oder Zielstandards für die Sanierung. Die Kommission fordert daher zur Vorbereitung der Grundwasserrichtlinie, die Schadstoffe, die EU-weit zu Verunreinigungstrends in Grundwasserkörpern führen, zu identifizieren. Zudem sollen Handlungspunkte für eine Trendumkehr sowie deren Endpunkte festgelegt werden.

Als kurzfristige Lösung schlägt die Kommission die Einigung auf eine Methode zur Festsetzung nationaler und regionaler Ansatzpunkte und Endziele für die Trendumkehr vor. Für natürlich vorkommende Substanzen sieht die Kommission die natürliche Hintergrundkonzentration der Substanz im Grundwasserkörper als möglichen Ansatzpunkt. Eine Trendumkehr soll dann bei Erreichung der doppelten Konzentration des Hintergrundwertes eingeleitet werden. Für synthetische Substanzen soll die doppelte Nachweisgrenze als Ansatzpunkt für die Trendumkehr dienen.

Als Endziele für eine Trendumkehr oder die Sanierung von Grundwasserkörpern empfiehlt das Themenpapier insbesondere in Trinkwassergewinnungsgebieten die Qualitätsstandards für Trinkwasser. Zudem sollen die Sanierungsziele den Austausch von Grundwasserkörpern mit dazugehörigen Oberflächengewässern berücksichtigen und sich deshalb an den Zielen und Standards für Oberflächengewässer orientieren. Im Falle belasteter Grundwasserkörper mit anhaltender Gefährdung durch Punktquellen (Klasse III) bietet die WRRL keinerlei Sanierungsziele für Schwermetalle, organische Substanzen oder andere Substanzen. Auch hier schlägt die Kommission als Sanierungsziel die Qualitätsstandards für Trinkwasser vor, insbesondere dann, wenn der betreffende Grundwasserkörper als Trinkwasserressource genutzt wird. Die Trinkwassergrenzwerte sollen jedoch nicht für den gesamten Grundwasserkörper gelten, sondern als Emissionsgrenzwerte für die Emissionen, die von einer kontaminierten Fläche ausgehen. Damit will die Kommission eine „Schadstoffauffüllung“ des gesamten Grundwasserkörpers bis zum laut Qualitätsstandard erlaubten Grenzwert verhindern. Auch hier soll die Interaktion des Grundwassers mit dem Oberflächengewässer berücksichtigt werden.

Gegenwärtig wird noch gearbeitet wissenschaftlich fundierte Grundlagen für die europaweite Bewertung der Grundwasserqualität in den Grundwasserkörpern bereitzustellen. Bei einem Workshop im Januar 2003 über das BASELINE-Projekt wurde hervorgehoben, wie schwierig es ist, einheitliche Qualitätsnormen für das Grundwasser festzulegen, und auf die Notwendigkeit verwiesen, die Merkmale von Grundwasserleitern und die anthropogene Belastung zu berücksichtigen (KOM, 2003). Im AquaTerra-Projekt (<http://www.attempto-projects.de/aquaterra/5.0.html>) werden insbesondere die Interaktionen zwischen Grund- und Oberflächenwasser auf verschiedenen Pfaden untersucht.

Die Kommission hat im September 2003 mit ihrem Vorschlag den Gesetzgebungsprozess eingeleitet. Am 28.4.2005 hat das Europäische Parlament (EP) seine Stellungnahme zu dem Vorschlag beschlossen, die nun dem EU-Umweltministerrat vorliegt und aktuell vom zuarbeitenden Gremium beraten wird. Im günstigsten Fall – d.h. der Rat der EU hat keine Einwände – tritt die Richtlinie spätestens in der 2. Hälfte dieses Jahres in Kraft. Im ungünstigsten Fall wird hiermit Mitte 2006 zu rechnen sein. Gegebenfalls muss der Vermittlungsausschuss angerufen werden (http://www.bund.net/lab/reddot2/pdf/grundwasser_im_euparl.pdf).

3. Vergleichende Bewertung von Regionalisierungsmethoden

3.1 Anlass und Ziel der Untersuchung

Die Beschaffenheit von Grundwasserressourcen ist, neben anderen Belastungsquellen auch abhängig von Stoffen, die über die Atmosphäre bzw. direkt über die Böden eingetragen werden und auf den aquatischen Bereich wirken. Um die Wirkung erfassen und bewerten zu können und um repräsentative raumbezogene Aussagen aus punktuell erhobenen Messdaten ableiten zu können, ist grundsätzlich eine integrale Betrachtung der Kompartimente Atmosphäre, Boden, unterirdische und oberirdische Gewässer notwendig. Bislang werden diese Kompartimente traditionell in sektoralen Messnetzen betrachtet. Dies hat vor allem historische Gründe, da die Messnetze der einzelnen Kompartimente unabhängig von einander entwickelt und aufgebaut wurden. Die Messstationen der Messnetze liegen ohne Bezug zueinander verteilt im Raum. Um die vorhandenen Messstandorte und die vorliegenden Informationen, z.B. Zeitreihen für einen chemischen Parameter an einem Messpunkt, nutzen zu können, besteht damit der Bedarf an Methoden für die Übertragung der am Punkt gewonnenen Informationen auf andere nicht beobachtete Punkte. In die Untersuchung sollen Methoden einbezogen werden, deren Anwendung nicht auf ein bestimmtes Kompartiment beschränkt ist. Damit ist die Möglichkeit einer integrierten (kompartimentübergreifenden) Bearbeitung gegeben.

Eine für diese Untersuchung geeignete Datenbasis wurde in dem von der Länderarbeitsgemeinschaft „Wasser“ geförderten Projekt „Konzept zur Verbesserung der flächenbezogenen Aussagen aus bestehenden Messnetzen im System Atmosphäre - Boden - Gewässer“ geschaffen (Binder u.a., 2002; Reinstorf et al., 2005). Am Beispiel von Beobachtungsdaten existierender Messnetze der atmosphärischen Deposition in Deutschland sollte eine möglichst exakte und mit akzeptablem Aufwand anwendbare Methode zur Regionalisierung von Punktwerten gefunden werden (Reinstorf et al., 2005). Die Untersuchung wurde beispielhaft für die Depositionsmessnetze in den Bundesländern Niedersachsen und Sachsen durchgeführt. Es wurden auch Spezialmessnetze verschiedener Institutionen berücksichtigt, die kleinere Regionen erfassen. Die untersuchte Datenbasis stammt aus dem Zeitraum 1995 - 98. Die Untersuchungen wurden anhand von Bulk-Depositionsdaten durchgeführt.

Das Ziel bestand darin, allgemein bekannte und verfügbare Regionalisierungsmethoden aber auch numerische Modelle für den Transport von chemischen Stoffen in der Atmosphäre (chemische Transportmodelle, CTMs) und ihre Eignung hinsichtlich Regionalisierung unter den gegebenen Bedingungen zu bewerten. Als Regionalisierungsmethoden wurden geostatistische und deterministische Verfahren untersucht. Wie in Kapitel 2 beschrieben, eignen sich die CTMs nicht für die Regionalisierung. Sie werden deshalb im Folgenden nicht weiter berücksichtigt. Im Folgenden werden die Grundlagen und die Ergebnisse überblicksweise dargestellt.

3.2 Beobachtungsnetze, Datenbasis und Daten-Preprocessing

In Deutschland gibt es ein Bundesmessnetz, das von Umweltbundesamt (UBA) betrieben wird. Es besteht aus 37 Stationen (Stand 2001) für das Monitoring des regionalen Schadstofftransportes. Weiterhin betreiben die Bundesländer Messnetze zu verschiedenen Zwecken, z.B. Lufthygiene, Dokumentation von Eintragspfaden oder Aufzeichnung von Stoffeinträgen, durch Ferntransport. Zusätzliche Betreiber auf lokaler und regionaler Skala sind z.B. in Gauger et al. (1997, 2000, 2002) dokumentiert.

Die Anzahl von verfügbaren Stationen beträgt 76 in Niedersachsen (Flächengröße: 47343 km², d.h. eine Station auf 623 km²) und 24 in Sachsen (Flächengröße: 18338 km², d.h. eine Station auf 764 km²). Die Standorte der Stationen sind in Abbildung 3-1 dargestellt.

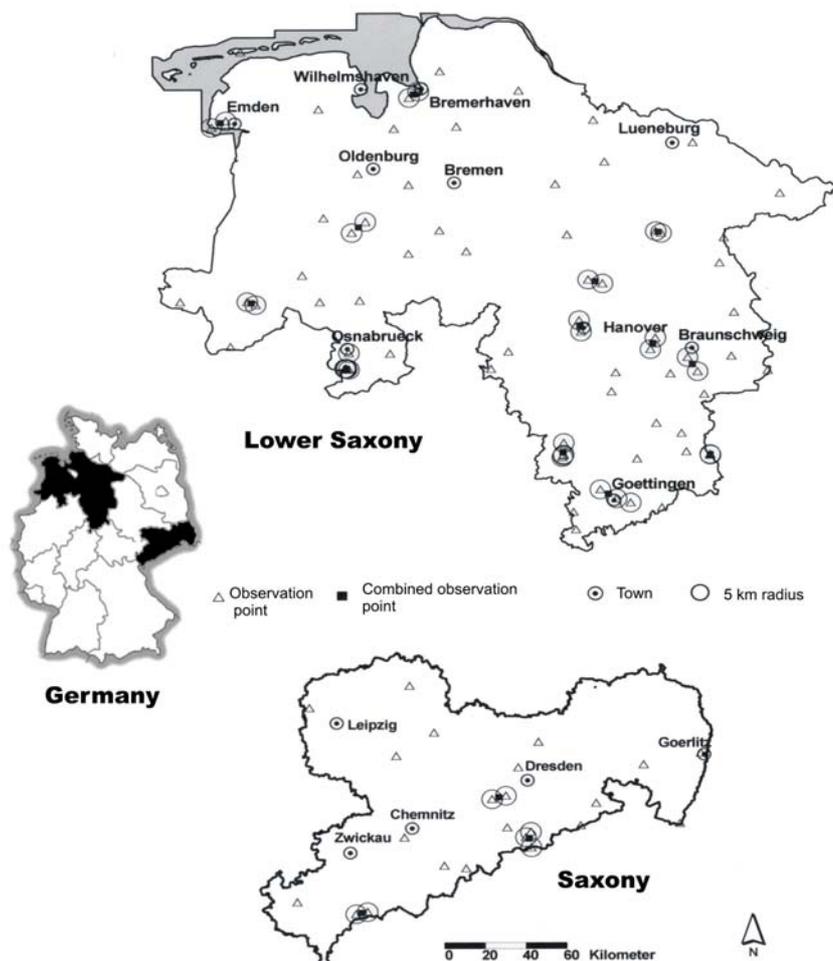


Abbildung 3-1: Depositionsmessnetze in Niedersachsen und Sachsen (Reinstorf et al., 2005).

Die beobachteten Stoffe sind generell NH_4^+ , NO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^- , Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , H^+ , Cd^{2+} , Pb^{2+} und die Niederschlagsmenge. Für diese Untersuchung wurden die folgenden Stoffe ausgewählt: NH_4^+ , SO_4^{2-} , NO_3^- , Na^+ , Pb^{2+} und Cd^{2+} in Niedersachsen und SO_4^{2-} in Sachsen. Die Auswahl der Stoffe erfolgte v.a. anhand der Anforderungen, die die begleitende Gruppe von Vertretern aus Wasserversorgungsunternehmen und Behörden formuliert haben und anhand der Quantität und Qualität der Datenbasis. Die Gesamtzahl der Messstationen, die für den Zeitraum 1995-98 vorlagen, war in Niedersachsen 44 für Ammonium, Sulfat und Natrium, 57 für Nitrat und 18 für Cadmium und Blei. In Sachsen konnten 19 Stationen für Sulfat genutzt werden.

Die Sammelmethode, die in den Bundesländern durchgeführt werden, können generell in wet-only und bulk untergliedert werden. Deshalb mussten, zum Erhalt einer konsistenten Datenbasis, alle wet-only Daten in bulk-Daten umgerechnet werden. Dies wurde nach Gauger et al. (2000) durchgeführt. Dabei wird wet-only durch einen parameterabhängigen Faktor erhöht (f_p , siehe Tabelle 3-1), basierend auf folgender Gleichung:

$$X_{p\text{-Bulk}}^* = X_{p\text{-Wet}} * 1/f_p \quad (\text{Gl. 3.1})$$

mit $X_{p\text{-Bulk}}^*$ als berechnete Menge der Substanz p im bulk-Sammler, $X_{p\text{-Wet}}$ als gemessene Menge von p im wet-Sammler und f_p als Faktor nach Tabelle 3-1 für p [-].

Tabelle 3-1: Anteile der wet-Deposition an der bulk-Deposition (f_p) aus simultanen Messungen (nach Gauger et al., 2002; ergänzt mit Daten von Van Leeuwen et al., 1996).

	NH_4^+	SO_4^{2-}	NO_3^-	Na^+	Pb^{2+}	Cd^{2+}
Mittelwert (f_p)	0.89	0.89	0.83	0.86	0.71	0.73
Standardabweichung	0.17	0.17	0.11	0.20	0.20	0.14
Zum Vergleich: Van Leeuwen et al., 1996						
Mittelwert	0.83	0.85	0.85	0.86	-	-
Standardabweichung	0.1	0.09	0.04	0.07	-	-

Sulfat wurde mit der so genannten "Seesalz-Korrektur" nach Gauger et al. (1997) korrigiert. Da Regenwasser Ionen enthält, die aus dem Meer stammen und in das Landinnere transportiert werden, wird der Gesamtbetrag um die Seesalzmenge korrigiert. Andernfalls würde der Seesalzeinfluss einen Trend erzeugen, der die Einträge anderer Quellen überlagert. Gleichung 3.2 basiert auf der Annahme, dass Natrium in Küstennähe zu 100 % aus Seewasser entstammt und das Verhältnis der Elementkonzentration im Meerwasser und im Seespray gleich ist. Die Annahmen treffen für Nord und Westeuropa (Gauger et al., 1997) und für die nasse Deposition in Mitteldeutschland (UN ECE, 1996) zu.

$$S_{SSC} = S_{dep} - Na_{dep} * \left(\frac{S_{SW}}{Na_{SW}} \right) \quad (\text{Gl. 3.2})$$

mit S_{SSC} als korrigierte Schwefeldeposition unter Berücksichtigung der Seesalz-Emission (SSC = sea salt corrected) in [$\text{moleq} * \text{ha}^{-1} * \text{a}^{-1}$], S_{dep} als Deposition von Schwefel in [$\text{moleq} * \text{ha}^{-1} * \text{a}^{-1}$], Na_{dep} als Deposition von Natrium in [$\text{moleq} * \text{ha}^{-1} * \text{a}^{-1}$] und S_{SW}/Na_{SW} als Konzentrationsverhältnis von Schwefel zu Natrium im Meerwasser, welches gleich 0.120 ist (UN ECE, 1996).

Die Daten aus den Messnetzen sind für verschiedene Zeitschritte verfügbar (Wochen, Monatsmittel oder Monatssummen). An einigen Messstationen sind die Datenreihen unvollständig. Speziell im Winter gibt es verschiedene Monate ohne Daten, z.B. infolge Verstopfung der Sammler durch Schnee. Um eine konsistente Datenbasis zu erzeugen, wurden die fehlenden Daten interpoliert. Dazu musste bis zu 6 % der Monatswerte innerhalb eines Jahres interpoliert werden. Mit dieser Datenbasis wurde eine Datenreihe der Depositionssummen erzeugt, indem die mittlere Konzentration eines Jahres mit der jährlichen Niederschlagsmenge multipliziert wurde. Eine monatliche Berechnung wurde nicht durchgeführt, da oft aufeinander folgende Monate Datenlücke aufwiesen, die interpoliert werden mussten. Insbesondere aufgrund dieser besonders unsicheren Zeiträume wurde entschieden, im Hinblick auf die Methoden, die verglichen werden sollten, nur Jahreswerte zu berücksichtigen.

Durch die Anwendung der Gleichung 3.3 (Gauger et al., 2002) wurde die Qualität der gemessenen Deposition geprüft. Dazu wurde die Ionenbilanz der Hauptionen in der Flüssigphase berechnet und geprüft, ob diese ausgeglichen ist.

$$\text{IonBalance} = \frac{(\text{NH}_4^+ + \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} + \text{K}^+ + \text{Na}^+ + \text{H}^+) - (\text{SO}_4^{2-} + \text{NO}_3^- + \text{Cl}^-)}{(\text{NH}_4^+ + \text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+} + \text{K}^+ + \text{Na}^+ + \text{H}^+) + (\text{SO}_4^{2-} + \text{NO}_3^- + \text{Cl}^-)} * 100$$

(Gl. 3.3)

Mit IonBalance als Ionenbilanz [%] und den Ionen in der Einheit [eq]. Wenn der Bilanzfehler 20 % überstieg wurde der Datensatz – d.h. alle Daten, die an einem Probenahmezeitpunkt an einer Station messen wurden – verworfen. Weniger als 2 % der Datensätze mussten auf diese Weise entfernt werden. Für die Anwendung der Methoden wurde angestrebt mindestens 30 Stationen mit konsistenten Datensätzen zur Verfügung zu haben. Dies konnte für alle Stoffe gewährleistet werden, außer für die Schwermetalle Pb^{2+} und Cd^{2+} in Niedersachsen (nur 18 Stationen) und für SO_4^{2-} in Sachsen (nur 19 Stationen).

3.3 Vergleich und Bewertung der Regionalisierungsmethoden

Es wurden eine Vielzahl von Verfahren untersucht und die am meisten geeigneten ausgewählt. Dies sind Ordinary Kriging (OK), External Drift Kriging (EDK) und Inverse Distance Weighting (IDW).

Für die Anwendung von OK und EDK muss zunächst eine Variogrammerstellung durchgeführt werden. Nachfolgend werden dann zuerst OK und IDW getestet und dann EDK (Abschnitt 3.3.2). Die verwendete Software ist STATGRAPHICS für die Datenanalyse, ArcVIEW (ESRI) für die Erstellung der Karten und für IDW und GEO-EAS (Englund and Sparks, 1991) für OK.

Für die Krigingverfahren wurden die optimalen Variogrammodelle durch Anpassung an die experimentellen Variogramme bestimmt. Die Anpassung war optimal, wenn die gewichteten Rest-Quadratsummen minimal waren. Das Variogrammodell wurde aus den folgenden Modellen ermittelt: exponentiell, sphärisch, linear, zirkular und Gauss. In den meisten Fällen war das sphärische Modell optimal (Tabelle 3-2).

zeigt die experimentellen Variogramme und die angepassten Modelle.

Tabelle 3-2: Variogrammodelle der Deposition (4-Jahresmittel: 1995-1998) und Parameter (Reinstorf et al., 2005).

Substanz	Modell	Nugget	Sill	Range [km]	Varianz
Niedersachsen					
SO_4^{2-}	Exponentiell	0.1	13.9	161	13.8
NO_3^-	Sphärisch	3.2	10.8	60	7.6
Na^+	Sphärisch	0.4	8.3	145	7.9
NH_4^+	Sphärisch	1.3	3.5	150	2.2
Pb^{2+}	Sphärisch	135	410	155	275.0
Cd^{2+}	Sphärisch	0.02	0.08	80	0.06
Sachsen					
SO_4^{2-}	Sphärisch	12	76	130	64

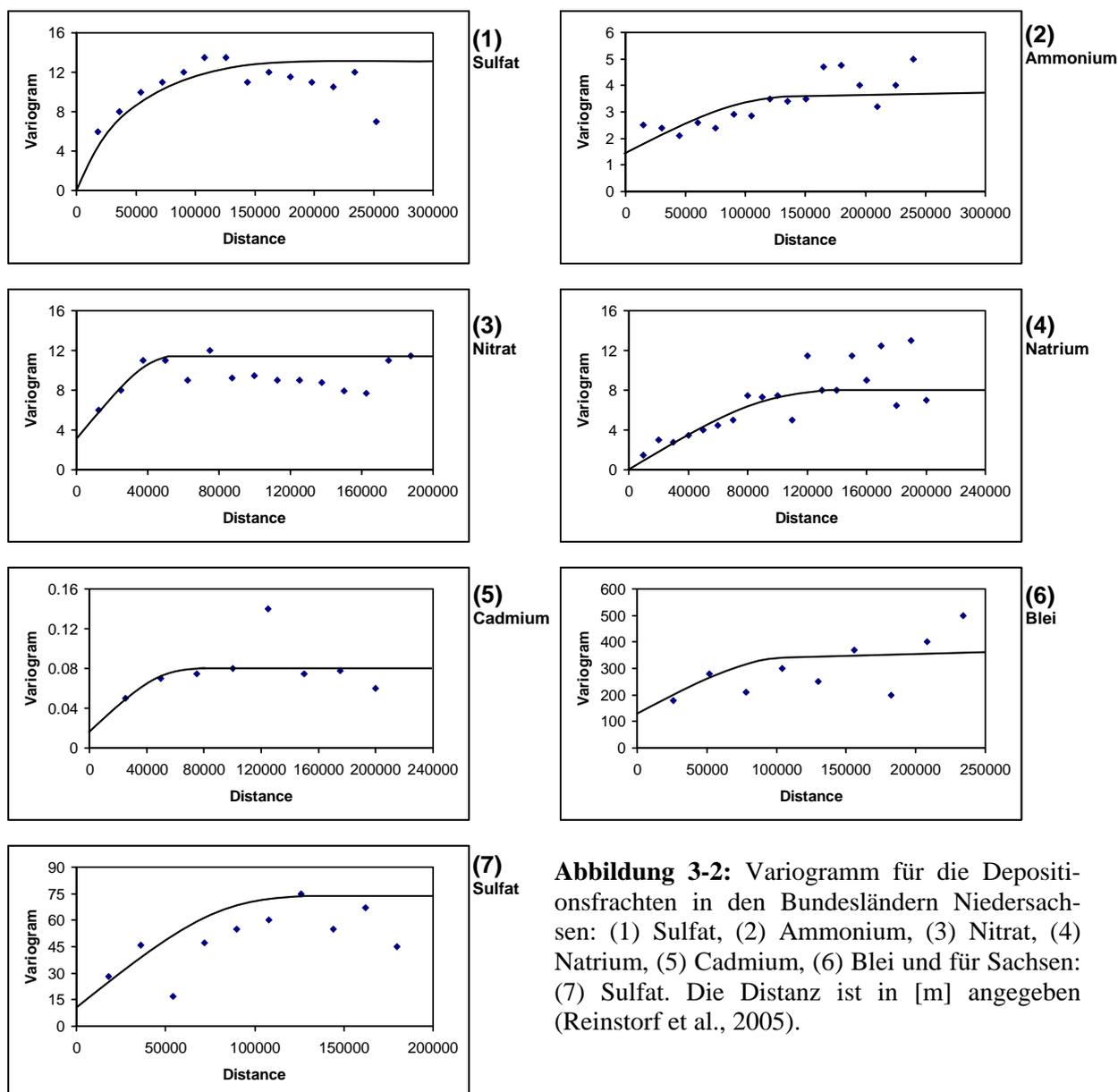


Abbildung 3-2: Variogramm für die Depositionsfrachten in den Bundesländern Niedersachsen: (1) Sulfat, (2) Ammonium, (3) Nitrat, (4) Natrium, (5) Cadmium, (6) Blei und für Sachsen: (7) Sulfat. Die Distanz ist in [m] angegeben (Reinstorf et al., 2005).

3.3.1 Kriterien für den Methodenvergleich

Zum Vergleich der Methoden ist die Kreuzvalidierung geeignet. Sie erlaubt einen objektiven Vergleich der Methoden. Zur Bewertung des Variogrammmodells (nach Davis (1987), zitiert in Sinowski (1995)) wird die Standardabweichung zwischen den interpolierten und den beobachteten Werten an den Beobachtungspunkten mit der berechneten mittleren Krige-Standardabweichung verglichen:

$$S(u_i) = \frac{\text{standarddeviation}}{s_0(u_i)} \quad (\text{Gl. 3.4})$$

mit *standarddeviation* als Standardabweichung zwischen den interpolierten und beobachteten Werten und $s_0(u_i)$ als berechnete mittlere Standardabweichung. Ein Variogrammmodell ist dann akzeptabel, wenn $S(u_i)$ zwischen 0.9 und 1.1 liegt. Dieses Kriterium ist beispielsweise geeignet für die Bewertung von Datenreihen kleinskaliger Untersuchungen. Sie wurde von Sinowski (1995) z.B. für die Bodencharakterisierung auf Untersuchungsflächen von 10 x 10

m angewendet. Für Depositionsdaten ist das Kriterium jedoch nur schwer einzuhalten. Deshalb wurde die beste Anpassung akzeptiert, die erreicht werden konnte. Große Varianzen resultieren von Ionenkonzentrationen, die über kürzere Distanzen variieren als die, die zwischen den Beobachtungspunkten liegen. Um diese Quelle räumlicher Variabilität zu verringern, benötigt man ein dichteres Messnetz und genauere Messmethoden.

Die Methode der Kreuzvalidierung kann auch genutzt werden, um die Genauigkeit eines einzelnen Interpolationsverfahrens einzuschätzen. In diesem Fall werden jeweils einige Daten weggelassen und aus den benachbarten Punkten neu bestimmt. Das heißt, wenn Daten beispielsweise an einem Bohrloch oder an einer Linie ausgerichtet sind, dann sollten alle Daten, die aus demselben Loch oder aus derselben Linie stammen, weg gelassen und neu geschätzt werden (Deutsch and Journel, 1998). Die Kreuzvalidierung sollte so umfassend ausgeführt werden, wie die aktuelle Schätzung der unbeprobten Punkte, d.h. jeder Datensatz sollte auf diese Weise einmal neu geschätzt werden.

Eine kontinuierliche Neuschätzung der Variogramme wurde jedoch nicht durchgeführt, da dies zu einem Problem geführt hätte, auf das Isaaks and Srivastava (1989) hinweisen. Dann wäre es nämlich auch nötig, simultan alle Modellparameter anzupassen, einschließlich des Typs der Funktion. Dies ist bisher in der Praxis nie erfolgreich durchgeführt worden.

Die mittlere Differenz zwischen beobachteten und simulierten Werten (Bias) und der mittlere quadratische Vorhersagefehler (MSPE) werden berechnet. Die Hauptkriterien für die Eignung der Interpolationsmethode sind:

- keine systematischen Fehler (Bias ist 0 oder nahe 0)
- die Fehler sind minimal (MSPE ist so klein wie möglich) und
- das Bestimmtheitsmaß (COD) (Härdle and Simar, 2003) ist maximal (nahe 1)

Die Gleichungen, die für die Fehlerberechnung verwendet wurden, sind folgende:

$$Bias = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (z^*(u_i) - z(u_i)) \quad (\text{Gl. 3.5})$$

$$MSPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (z(u_i) - z^*(u_i))^2 \quad (\text{Gl. 3.6})$$

$$COD = \frac{MSPE}{s_0^2} \quad (\text{Gl. 3.7})$$

mit s_0^2 als Gesamt-Varianz.

Zusätzlich zu der Emissionsmenge und den Stoffeigenschaften können die lokalen Expositionsverhältnisse einen wichtigen Einfluss auf die Deposition haben. Dies könnte eine Zusatzinformation darstellen (Driftvariable), die beim EDK genutzt werden kann. Die Voraussetzung dafür ist eine Korrelation zwischen der Driftvariablen und der Hauptvariablen. Folgende mögliche Driftvariablen wurden untersucht: geografische Höhe, Niederschlagsmenge und Windrichtung. Um mögliche Driftvariablen herauszufinden wurde eine Standard-Korrelationsanalyse durchgeführt.

3.3.2 Ergebnisse

Tabelle 3-3 zeigt die Fehler der zwei Methoden OK und IDW für alle untersuchten Stoffe für Niedersachsen und Sachsen. Sulfat wird dargestellt als Jahresmittel für 1995-98 für Niedersachsen und als 4-Jahresmittel für Sachsen.

Mit der Kreuzvalidierung für OK und IDW kann gezeigt werden, dass für OK, bei fast allen Stoffen der Bias und der MSPE kleiner und der COD größer ist (Tabelle 3-3). COD erlaubt den Vergleich von Ergebnissen für verschiedene Stoffe. Für Natrium wird bei OK ein maximaler COD von 0.58 erreicht.

Tabelle 3-3: Vergleich der Fehler für IDW und OK (Reinstorf et al., 2005).

Substanz	Jahr	Fehler				COD	
		Bias		MSPE		IDW	OK
<u>Niedersachsen (4-Jahresmittel)</u>		IDW	OK	IDW	OK		
NH ₄ ⁺	1995-98	0.13	0.02	1.63	1.74	0.43	0.34
SO ₄ ²⁻	1995-98	-0.02	0.05	2.90	2.70	0.37	0.45
NO ₃ ⁻	1995-98	0.20	0.11	3.54	3.29	0.11	0.23
Na ⁺	1995-98	-0.13	-0.30	5.96	5.90	0.57	0.58
Pb ²⁺	1995-98	1.32	0.04	20.62	18.39	0.63	0.29
Cd ²⁺	1995-98	-0.04	0.04	0.62	0.49	0.59	0.28
<u>Niedersachsen (Jahresmittel)</u>		IDW	OK	IDW	OK	IDW	OK
SO ₄ ²⁻	1995	0.49	0.43	3.71	3.71	0.40	0.40
SO ₄ ²⁻	1996	-0.26	-0.05	4.30	4.11	0.13	0.04
SO ₄ ²⁻	1997	0.02	0.06	4.27	4.15	0.30	0.34
SO ₄ ²⁻	1998	-0.01	0.08	4.82	4.37	0.00	0.18
<u>Sachsen (4-Jahresmittel)</u>		IDW	OK	IDW	OK	IDW	OK
SO ₄ ²⁻	1995-98	0.66	0.49	7.02	6.04	0.04	0.23

 zeigt kleinere Fehler bzw. höhere COD

Die CODs für die anderen Stoffe sind viel geringer, außer für Schwermetalle. Am Beispiel von Sulfat kann auch gezeigt werden, dass für Jahresmittel bei OK geringere Fehler vorhanden sind als bei IDW. Zusammengefasst liefert OK in den meisten Fällen genauere Ergebnisse als IDW.

Die Standard-Korrelationsanalyse mit den Stoffdepositionsfrachten, die zur Identifizierung geeigneter Hilfsvariablen des EDK durchgeführt wurde, zeigt, dass die geografische Höhe (ALT) nicht mit der Deposition (Hauptvariable) in Niedersachsen korreliert ist (siehe Tabelle 3-4). In Gegensatz dazu scheint die Niederschlagsmenge (P) sowohl in Niedersachsen als auch in Sachsen korreliert zu sein. Jedoch wurde P bereits bei der Berechnung der Stoffdepositionsfrachten verwendet, so dass es sich hier um eine Scheinkorrelation also keine echte Zusatzinformation handelt.

Tabelle 3-4: Korrelationsmatrix für die Hilfsvariablen Höhenlage (ALT) und Niederschlag (P) für die Stoffdeposition in Niedersachsen und Sachsen (Reinstorf et al., 2005).

Parameter	ALT	NH ₄ ⁺	SO ₄ ²⁻	NO ₃ ⁻	Na ⁺	Pb ²⁺	Cd ²⁺	P
Lower Saxony								
ALT	1	-0.07	0.55	0.57	-0.27	0.07	0.38	0.59
P	0.59	0.34	0.75	0.81	0.03	0.73	0.97	1
Saxony								
ALT	1	-	0.68	-	-	-	-	0.86
P	0.86	-	0.84	-	-	-	-	1

Die Untersuchung der Abhängigkeit zwischen Windrichtung (WD) und Deposition wurde auf der Basis von Windfeldern durchgeführt, d.h. anhand der häufigsten Windrichtungen aller 38 Stationen in Niedersachsen. Es wurde ein relativ gleichförmiges Windfeld gefunden, d.h. die Verteilung der häufigsten Windrichtungen variiert nicht signifikant an den verschiedenen Stationen. Deshalb wurden 7 Stationen, die repräsentativ für die Fläche des Bundeslandes sind ausgewählt um detaillierte Untersuchungen durchzuführen. Die Korrelationsanalyse zwischen WD und Deposition zeigte keine Korrelation, d.h. unterschiedlich hohe Depositionen können bei einer WD erfolgen. Deshalb kann auch die WD nicht als Driftvariable verwendet werden.

Es kann geschlussfolgert werden, dass keine verwendbare Zusatzinformation für das EDK-Verfahren gefunden werden konnte. Es soll jedoch erwähnt werden, dass die WD wahrscheinlich nützliche Informationen für prozessbezogenen Depositionssimulationen liefert.

Hinsichtlich des Vergleiches zwischen OK, IDW und EDK kann geschlussfolgert werden, das OK die besten Ergebnisse bei der vorliegenden Datenbasis liefert. Im Folgenden wird die Verifikation der Datenregionalisierung mit OK erläutert.

3.4 Verifikation

Streng genommen ist die Verifikation der OK Daten nicht möglich. Dies kann eigentlich nur erfolgen, wenn die „wahren“ Daten bekannt sind. Die einzige zuverlässige Information, die verwendet werden kann, sind die beobachteten nassen oder trockenen Depositionsfrachten. Da jedoch OK eine konditionierte Methode ist, d.h. die OK-Daten an den Messpunkten sind immer gleich den beobachteten Daten, kann eine Verifikation nur mit Hilfe einer anderen unabhängigen Datenbasis durchgeführt werden. Um dies zu leisten, kann die Datenbasis von Gauger et al. (2002), die für das Umweltbundesamt (UBA) aufgebaut wurde, verwendet werden. Da die Datenbasis keine bulk-Deposition enthält, kann nur die nasse Deposition für die Verifikation genutzt werden. Auf diese Weise wird mindestens 70 % der Gesamtdeposition berücksichtigt. Die Datenbasis wird im Folgenden als „UBA-Datenbasis“ bezeichnet.

Die UBA-Datenbasis ist in 3 Teile untergliedert (a) Niederschlagsmonitoring, (b) Depositionsdaten des bulk- (wet-only und trockenen) Kronendurchlasses und des Stammabflusses von Laubwald und (c) Depositionsdaten des bulk-Kronendurchlasses von Nadelwald.

Bulk-Deposition, Kronendurchlass und Stammabfluss sind Basis-Inputs für das Vegetationsbilanzmodell (CBM). Die Anwendung des CBM ermöglicht die Berechnung von trockener, Wolken-, Nebel- und Gesamtdeposition für Waldstandorte unter Berücksichtigung von Aus-

tauschprozessen. Einen Überblick über die Vegetationsmodell-Berechnungen gibt Draaijers et al. (1998). Nasse und trockene Depositionsdaten, umgerechnet zu Nassdepositionsflüssen, werden für die Darstellung der nassen Deposition verwendet. Kronendurchlass- und Stammabflussdaten werden zur Anwendung des CBM verwendet, um die Trocken- und die Gesamtdosition zu berechnen.

Die Verifikation wurde mit den Nassdepositionen von SO_4^{2-} , NO_3^- , NH_4^+ und Na^+ für Niedersachsen und SO_4^{2-} für Sachsen durchgeführt. Dazu wurde ein gleichmäßiges Raster von 50 x 50 km ohne Berücksichtigung von Messstationen für beide Bundesländer angelegt. Für Niedersachsen ergab sich dadurch ein Netz mit 22 Knoten und für Sachsen mit 15 Knoten. Für jeden Knoten wurde der Depositionswert aus der Datenbasis entnommen und die statistischen Werte Mittelwert, Standardabweichung und prozentuale Abweichung zwischen OK- und UBA-Daten berechnet (Tabelle 3-5). Weiterhin wurde eine Korrelationsanalyse durchgeführt (Abbildung 3-4).

Tabelle 3-5: Vergleich der UBA-Methode und der OK-Methode: Mittelwert in kg/ha*a bzw. für Pb^{2+} und Cd^{2+} in g/ha*a, Standardabweichung und prozentuale Differenz [%] der wet-Deposition für Niedersachsen und Sachsen (Reinstorf et al., 2005).

Substanz	Methode	Mittelwert der wet-Deposition	Mittelwert der bulk-Deposition	Standardabweichung	Prozentuale Differenz zu UBA ^(*)
Niedersachsen					
SO_4^{2-}	UBA	23.21	26.1	4.73	
	OK	21.55	24.1	3.7	-7.2
NO_3^-	UBA	21.20	25.5	3.32	
	OK	19.51	23.4	3.02	-8.0
NH_4^+	UBA	9.39	10.5	1.91	
	OK	10.14	11.4	1.49	8.0
Na^+	UBA	10.63	12.4	10.04	
	OK	13.57	15.7	10.39	27.7
$\text{Pb}^{2+(**)}$	OK	31.65	44.6	12.94	-
$\text{Cd}^{2+(**)}$	OK	1.36	1.9	0.51	-
Sachsen					
SO_4^{2-}	UBA	19.06	21.4	3.26	
	OK	20.95	23.5	4.73	10.0

^(*) Prozentuale Abweichung zu UBA = (((Mittelwert der wet-Deposition der OK-Methode)

* (100)) / (Mittelwert der wet-Deposition der UBA-Methode)) - 100.

^(**) UBA-Daten sind nicht verfügbar für die Substanzen Pb^{2+} und Cd^{2+} .

Tabelle 3-5 zeigt, dass die beiden Methoden ähnliche Ergebnisse liefern. Die Standardabweichung hat ebenfalls die gleiche Größenordnung. Die prozentuale Differenz zwischen den Methoden ist kleiner als 10 %, außer für Natrium mit ungefähr 28 %.

Im Hinblick auf die relativ kleine Abweichung kann man sagen, dass die OK-Methode generell eine konsistente Datenbasis erzeugt. Und die Daten, die mit OK geschätzt wurden plausibel im Vergleich zu den Daten nach der UBA-Methode sind.

3.5 Diskussion

Die Eignung der diskutierten Regionalisierungsmethoden für das Wasserressourcenmanagement hängt immer vom spezifischen Ziel und der verfügbaren Datenbasis ab. Generell kann die Feststellung „geeignet“ oder „nicht geeignet“ nur gemacht werden, wenn man die Vor- und Nachteile der Methoden diskutiert. Die Eignung der Methoden für unterschiedliche Zwecke im Wasserressourcenmanagement wird im Folgenden bewertet.

Es kann festgestellt werden, dass die Monitoringmessnetze in den deutschen Bundesländern hinsichtlich einer gleichmäßigen Verteilung der Standorte innerhalb der Landesflächen (Abbildung 3-1), der Sammelmethode und der beobachteten Stoffe optimiert wurden. Das zeigt, dass die Abschätzung von repräsentativen bundeslandbezogenen Depositionsdaten durchgeführt werden kann. In Falle der Bestimmung von repräsentativen Daten für ein Teilgebiet eines Bundeslandes wird jedoch das Problem des Datenmangels deutlich.

Hinsichtlich der Interpolationsmethoden soll zuerst das deterministische Verfahren IDW und danach OK und EDK diskutiert werden. IDW ermöglicht die Schätzung der Stoffdeposition aus der Atmosphäre für nicht beobachtete Flächen mit geringem Aufwand an Rechnerkapazität (UBA, 1995). Die Interpolation ist unabhängig von der Beobachtungsskala. Die Genauigkeit wird nur durch die Dichte und die Verteilung der Beobachtungspunkte beeinflusst. IDW ist eine Interpolationstechnik bei der Interpolationsschätzungen auf der Basis von Werten der Nachbarpunkte, gewichtet nur durch die Distanz zwischen den Punkten, gemacht werden. IDW macht keine Annahmen hinsichtlich räumlicher Beziehungen, außer der Annahme, dass Werte von Punkten, die nahe beieinander liegen, größeren Einfluss auf den Interpolationspunkt haben, als weiter entfernte.

Unter Berücksichtigung der Dichte der Beobachtungsnetze, der Datenmenge und der hohen Variabilität der Deposition in Zeit und Raum kann eine Anwendung der Methode für Gebiete kleiner als ein Bundesland und mit höherer zeitlicher Auflösung als Jahresmittel nicht empfohlen werden. Mit diesen Einschränkungen ist die Regionalisierung möglich. Die Genauigkeit ist relativ hoch und akzeptabel.

Die geostatistischen Verfahren OK und EDK haben den Vorteil der räumlichen Korrelation der bewerteten Parameter. Dies wird durch ein Variogramm repräsentiert. Wie durch die Kreuzvalidierung demonstriert wurde, können präzisere Ergebnisse mit derselben Datenbasis durch Kriging erreicht werden, als mit der o.g. IDW-Methode. Das setzt eine räumliche Korrelation der berücksichtigten Parameter voraus. Dies kann jedoch angenommen werden, z.B. für Daten mit einem hohen Anteil an Nassdeposition, da mit größer werdender Entfernung von der Quelle die Konzentration gesetzmäßig sinkt. Es wurde demonstriert, dass die verwendete Datenbasis diese Bedingungen erfüllt.

Außerdem beeinflusst die räumliche Korrelation der berücksichtigten Depositionsparameter die Genauigkeit der Interpolation. Unter Berücksichtigung der verfügbaren Datenbasis, die theoretisch zu klein ist, um harte räumliche Analysen, z.B. Variogrammanalysen, durchzuführen, kann die Anwendung von OK auf Flächen kleiner als Bundesländer und in Zeitschritten kleiner als ein Jahr nicht empfohlen werden. Für eine bundesweite Ermittlung der nassen Deposition in Deutschland, ist die OK-Methode bereits angewendet worden um Critical Loads und Critical Levels (Gauger et al., 1997; Köble et al., 1997) abzuschätzen.

Genauere Ergebnisse als mit der univariaten OK-Methode können mit multivariaten geostatistischen Verfahren, wie EDK erzielt werden, vorausgesetzt, dass eine Variable existiert, die

gut mit dem untersuchten Parameter korreliert und gleichzeitig die Informationsdichte erhöht. Erfolgreiche Anwendungen dieser Methode wurden z.B. in Literaturquellen zur Interpolation von Niederschlagsdaten (z.B. Bardossy, 1993; Haberlandt and Kite, 1998), von Bodenfeuchtedaten (z.B. Lehmann, 1995) und von Temperaturen (z.B. Hudson and Wackernagel, 1994) gefunden. Hinsichtlich der Regionalisierung von Depositionsdaten mit geostatistischen Verfahren einschließlich Zusatzinformationen, konnten keine Literaturquellen gefunden werden.

Beim Vergleich der unterschiedlichen Methoden und der Datenerfordernisse kommt man zum Ergebnis, dass OK am besten für die Regionalisierung mit akzeptabler Genauigkeit und Anwendbarkeit für das Wasserressourcenmanagement geeignet ist. Ein Kartensatz für Niedersachsen und Sachsen auf der Basis dieser Methode wurde erstellt (Abbildung 3-3). Die Karten basieren auf einem Raster von 10 x 20 km. Die Mittelwerte der wet- und bulk-Deposition werden in Tabelle 3-5 gezeigt.

Wie in Abbildung 3-3 gezeigt wird, hat die Deposition von Nitrat und Ammonium in Niedersachsen die gleichen Verteilungsmuster. Diese Stoffdepositionen, die durch die landwirtschaftliche Nutzung und die Viehhaltung verursacht werden, sind gut mit der landwirtschaftlichen Aktivität korreliert. Während die höchsten Nitratdepositionen außerhalb der Städte vorliegen, ist Ammonium homogener verteilt. Dies liegt an der größeren atmosphärischen Mobilität von gasförmigem Ammonium. Die hohe Dichte der Tierhaltung im Westen von Niedersachsen wirkt sich sehr deutlich auf die Ammoniumdeposition aus. Der Stickstoffeintrag in Form von Ammonium ist zweimal höher als durch Nitrat.

Die Sulfatdeposition korreliert mit der Stickstoffdeposition in Niedersachsen. Es kann angenommen werden, dass Sulfat hauptsächlich aus landwirtschaftlichen Quellen stammt, z.B. sulfathaltigem Dünger, aber auch durch Verbrennung von fossilen Brennstoffen emittiert wird. Weiterhin zeigen die Depositionsmuster aller erwähnten Stoffe niedrigere Depositionen nahe der Nordseeküste.

Natrium zeigt demgegenüber eine steigende Deposition in NW-Richtung an, was möglicherweise auf den Meereseinfluss zurückzuführen ist und damit andeutet, dass die Seesalzkorrektur verbessert werden kann. Cadmium- und Bleidepositionen haben hot spots im nördlichen Teil von Niedersachsen und korrelieren mit den Standorten der Häfen und Werften. Ebenso werden höhere Depositionen im Süden beobachtet, die mit den Standorten der metallverarbeitenden Industrie korrelieren.

Die Situation in Sachsen ist durch steigende Sulfatdeposition in SO-Richtung charakterisiert. Der Einfluss der Emissionen aus der tschechischen Republik wird damit deutlich. Hier, im so genannten Schwarzen Dreieck, sind extrem hohe Sulfatkonzentrationen speziell in den Wintermonaten bekannt.

3.6 Schlussfolgerungen

Der Vergleich der verschiedenen Regionalisierungsmethoden zeigt, dass OK die beste Methode hinsichtlich Genauigkeit und Anwendbarkeit ist. Deshalb wird diese Methode empfohlen. In Vergleich zu IDW liefert OK genauere Ergebnisse, was die Kreuzvalidierung zeigte. Im Vergleich zu EDK ist OK weniger komplex und benötigt keine weitere Information (Zusatzinformation). Als Ergebnis der Untersuchung wurden die Karten der Depositionsfrachten für Sulfat, Nitrat, Ammonium, Natrium und die Schwermetalle Blei und Cadmium auf der Basis der OK-Methode erstellt.

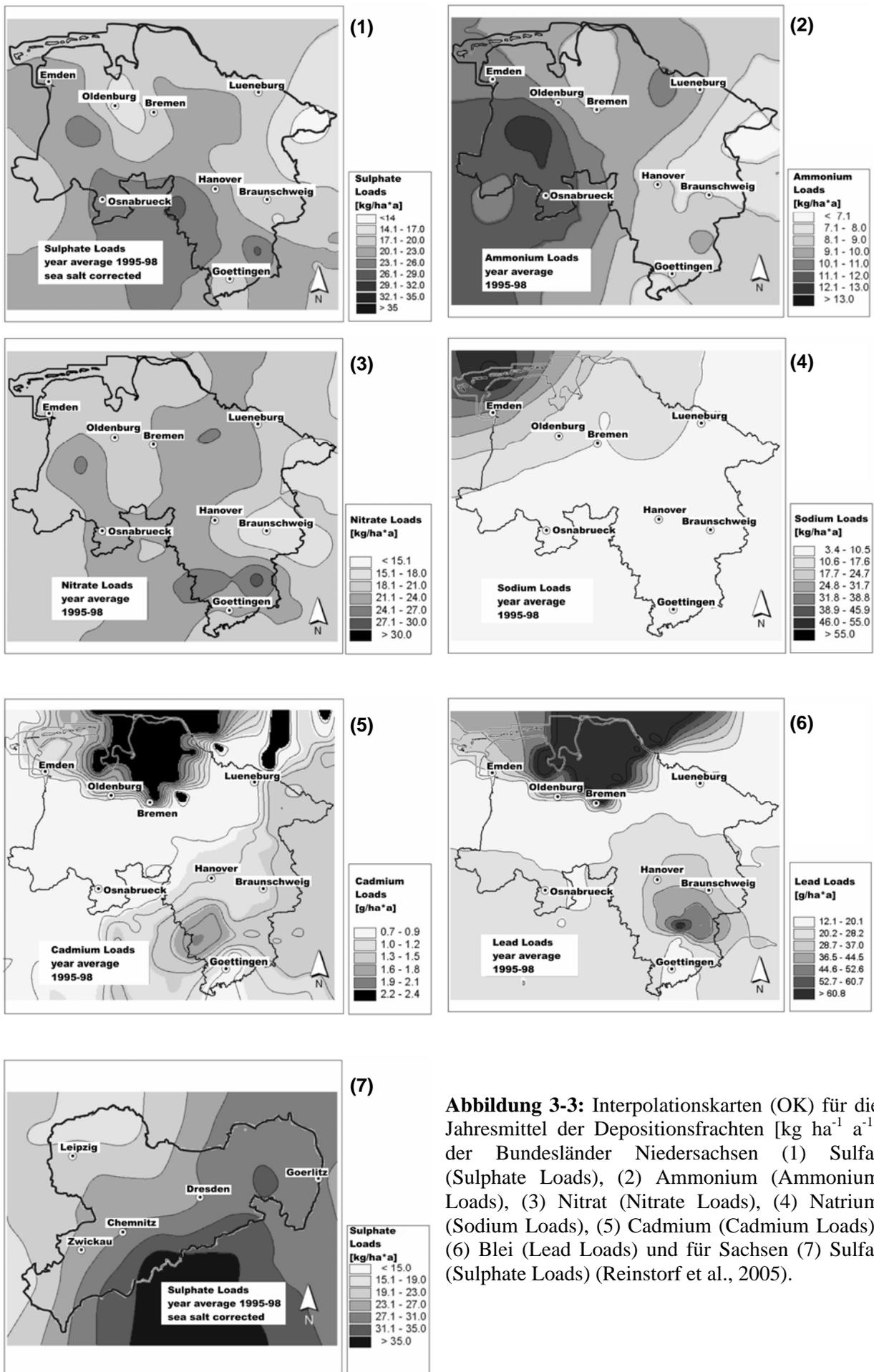


Abbildung 3-3: Interpolationskarten (OK) für die Jahresmittel der Depositionsfrachten [kg ha⁻¹ a⁻¹] der Bundesländer Niedersachsen (1) Sulfat (Sulphate Loads), (2) Ammonium (Ammonium Loads), (3) Nitrat (Nitrate Loads), (4) Natrium (Sodium Loads), (5) Cadmium (Cadmium Loads), (6) Blei (Lead Loads) und für Sachsen (7) Sulfat (Sulphate Loads) (Reinstorf et al., 2005).

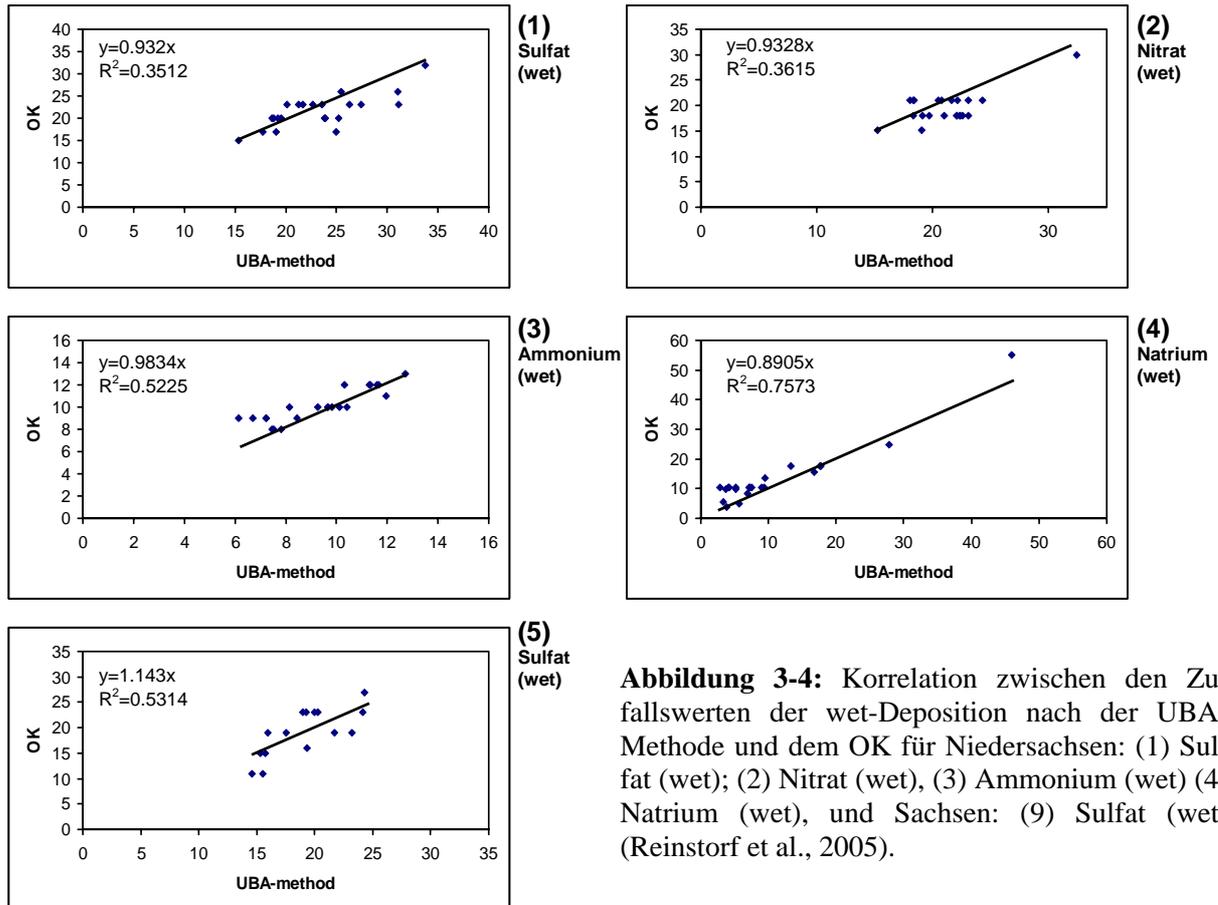


Abbildung 3-4: Korrelation zwischen den Zufallswerten der wet-Deposition nach der UBA-Methode und dem OK für Niedersachsen: (1) Sulfat (wet); (2) Nitrat (wet), (3) Ammonium (wet) (4) Natrium (wet), und Sachsen: (9) Sulfat (wet) (Reinstorf et al., 2005).

Hinsichtlich der Regionalisierung von Boden- bzw. Aquiferdaten können im Wesentlichen die gleichen geostatistischen oder deterministischen Interpolationsverfahren verwendet werden. Die Eignung und Anwendbarkeit hängt jedoch vom konkreten Anwendungsfall ab und kann deshalb von den Aussagen bzgl. der atmosphärischen Deposition abweichen. Die generellen Aussagen die für die CTMs (Kapitel 2) getroffen wurden, sind auch bei den Boden- und Grundwassermodellen zutreffend. Das Problem einer unzureichenden Datenbasis ist auch hier immanent. Allerdings sind bei Boden- und Grundwassermodellen die Anzahl und die konzeptionelle Breite größer, so dass beispielsweise einfache konzeptionelle Modelle durchaus zu Regionalisierungszwecken verwendet werden können und auch bereits Anwendung gefunden haben.

Das nächste Kapitel befasst sich mit der Interpretation von Beschaffenheitsdaten des Bodenwassers und des Grundwassers. Hier sind nicht nur die atmosphärische Deposition, sondern auch die bei der Landnutzung emittierten Substanzen relevant. Die Interpretation wird anhand von Beschaffenheitsdaten des Untergrundes im Einzugsgebiet des Wasserwerkes Thülsfeld des Oldenburgisch Ostfriesischen Wasserverbandes (OOWV), welches sich im nordwestlichen Niedersachsen befindet, durchgeführt.

4 Interpretation von Beschaffenheitsdaten des Boden- und Grundwassers – Fallbeispiel Thülsfeld

Am Beispiel des Einzugsgebietes der Brunnengalerie A des Wasserwerkes Thülsfeld soll die Identifizierung der Art der im Untergrund stattfindenden Stoffumsatzprozesse erfolgen. Es wird dargelegt, wie die Interpretation anhand von leicht gewinnbarer Informationen aus der Wasserbeschaffenheitsanalyse und aus Bohrdaten durchgeführt werden kann. Die Ergebnisse werden aus Punktinformationen gewonnen. Der Bearbeitungsmaßstab ist also die Mikroskala. Vor der Interpretation erfolgt eine kurze Beschreibung des Untersuchungsgebietes.

4.1 Das Einzugsgebiet des Thülsfelder Wasserwerkes

Das Wasserwerk Thülsfeld mit dem Standort Augustendorf liegt etwa 25 km nordwestlich von Cloppenburg im Emsland (Abbildung 4-1). Der Landschaftscharakter ist geprägt durch die Lage am Übergang der Hunte-Leda-Moorniederung in die Cloppener Geest (Schmithüsen, 1962).

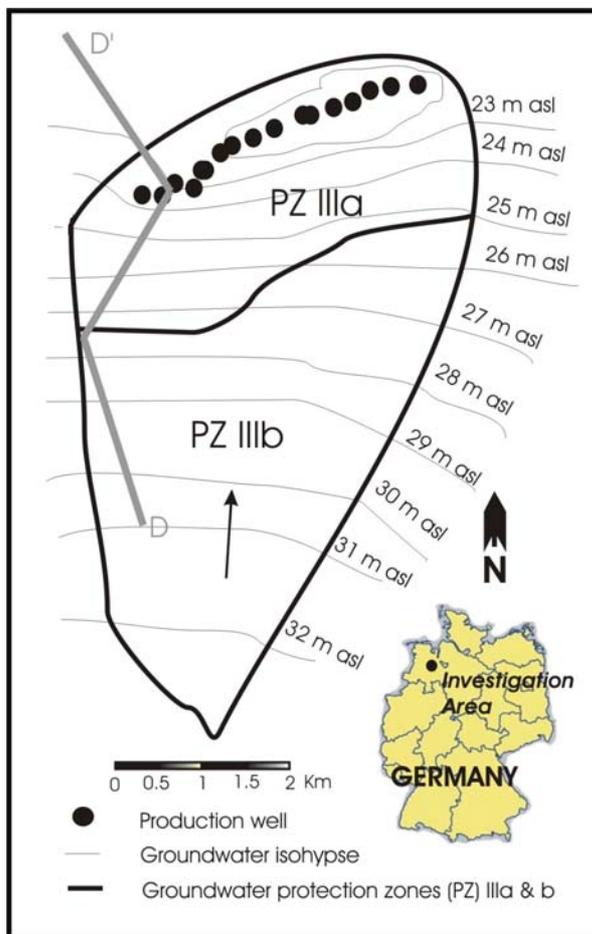


Abbildung 4-1: Einzugsgebiet der Wasserfassung A des Wasserwerkes Thülsfeld mit Grundwassergleichen und Verlauf des geologischen Schnittes D-D'.

Das Einzugsgebiet (EG) ist geprägt durch eine fast ebene Geländeoberfläche mit Höhen von selten mehr als 20 m NN. Das EG liegt im maritimen Klimabereich mit Niederschlagsmengen von 700 – 800 mm/a. Harms (1987) ermittelte folgende Grundwasserneubildungsraten (GWN) nach den Verfahren von Renger/Strebel und Dörhöfer/Josopait (Tabelle 4-1).

Das EG wird zu ca. 60 % von landwirtschaftlicher Nutzfläche, zu 35 % von Wald und zu 5 % von Siedlungsfläche bedeckt.

Tabelle 4-1: Grundwasserneubildungsraten (GWN) im Einzugsgebiet Thülsfeld (Harms, 1987).

Fläche	GW-Flurabstand [m]	GWN [mm/a]
Acker	> 2	330
Wald	> 4	300
Wald	3 – 4	290
Wald	> 3	275

Die Brunnengalerie A mit 17 Förderbrunnen (F1 – F17), ist von einer Waldfläche umgeben, die sie vor direkten anthropogenen Einflüssen, wie z.B. durch die Landwirtschaft, schützen soll.

Die landwirtschaftlich genutzte Fläche schließt sich im Süden an diese Waldfläche an und dehnt sich bis zum südlichen Rand des Einzugsgebietes aus. Im Gebiet der Ackerflächen ist eine größere Anzahl von Pegeln zur Beobachtung der Grundwasserbeschaffenheit in verschiedenen Tiefen installiert. Zur Auswertung standen die Daten der 16 in Abbildung 4-2 eingezeichneten Pegel zur Verfügung.

Die Tiefenlagen der Filteroberkanten von 14 Pegeln sind in Tabelle 4-2 enthalten. Alle Pegel sind über eine Länge von 2 m verfiltert. Weiterhin standen eine Multilevelmessstelle (SGM) und der Staffelpiegel P335/336/337 zur Verfügung, die eine tiefenorientierte Betrachtung des Aquifers ermöglichten.

Tabelle 4-2: Lage der Filteroberkanten der Pegel im Einzugsgebiet der Brunnengalerie A.

	P 183	P 248	P 335	P 336	P 337	P 369	P 370	P 377	P 378	P 389	P 481	P 482	P 483	P 484
FOK [m uGOK]	43	12	13	23	33	8	22	10	12	57	7.5	9	9	9

Die SGM-Messstelle umfasst 7 Beobachtungspunkte in den Tiefen 5,6 m, 10,6 m, 15,6 m, 20,6 m, 25,6 m, 30,6 m und 35,6 m uGOK. Der Staffelpiegel besteht aus den Pegeln P 335 (FOK = 13 m uGOK), P 336 (FOK = 23 m uGOK) und P 337 (FOK = 33 m uGOK).

Der Hauptgrundwasserleiter besteht bis in eine Tiefe von 100 m uGOK (Mächtigkeit ca. 70 m im Süden bis ca. 120 m im Norden) überwiegend aus glazi-fluviatilen Sanden der Elster-Kaltzeit und den darunter liegenden präelsterzeitlichen und pliozänen Feinsanden (Abbildung 4-3). Der Grundwasserleiter (GWL) ist im Allgemeinen relativ homogen, teilweise sind geringmächtige schluffige oder kiesige Lagen eingeschaltet. Örtlich, vor allem im südlichen Teil des Gebietes, ist der GWL durch lehmige Zwischenschichten gegliedert. Die untere Begrenzung der GWL ist durch einen Übergangsbereich aus präelster-pliozänen Sanden mit zunehmend ansteigendem Schluffgehalt gekennzeichnet.

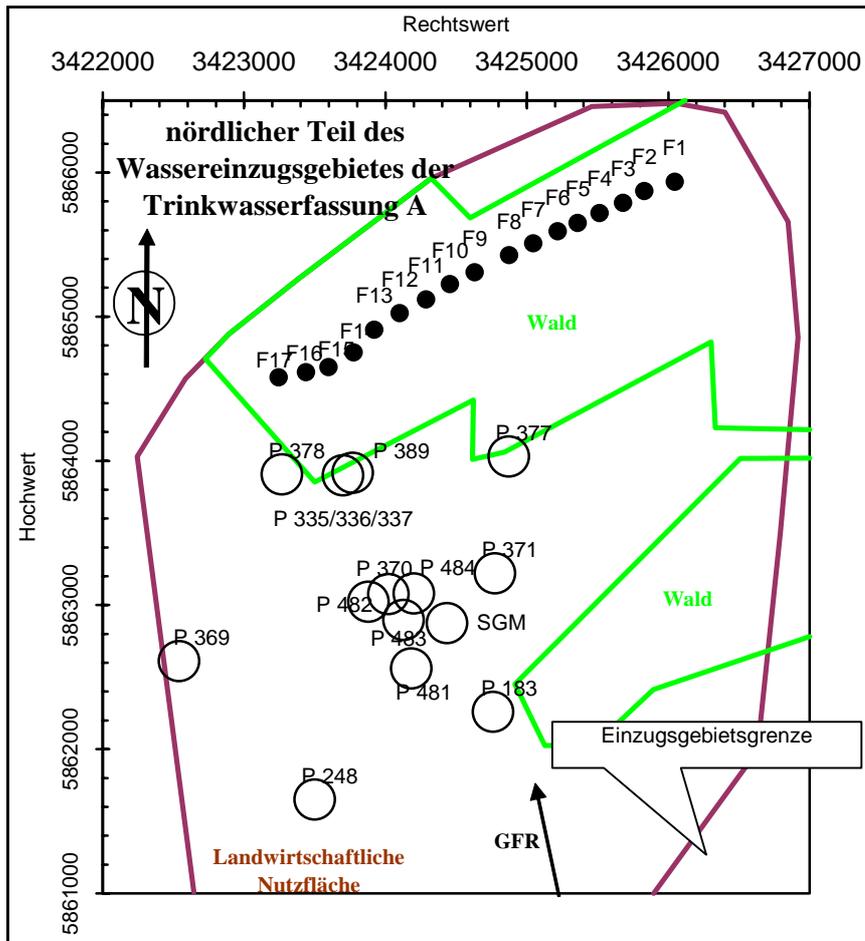


Abbildung 4-2: Gebietsübersicht mit Lage der Pegel (○).

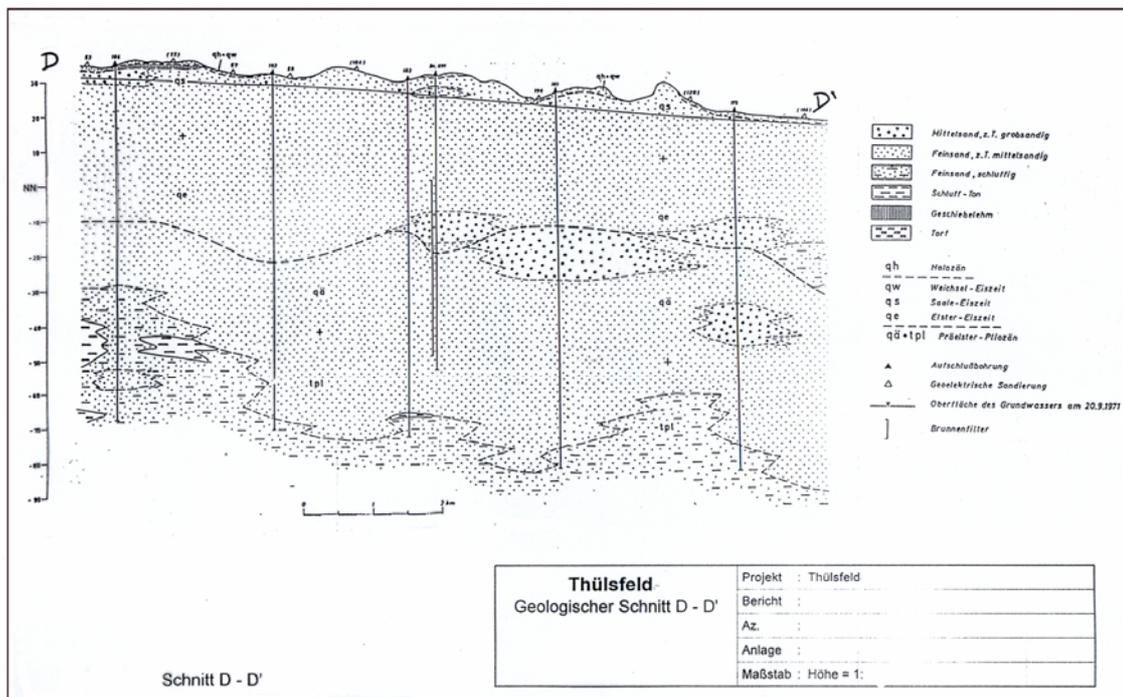


Abbildung 4-3: Geologischer Schnitt D-D' durch das Untersuchungsgebiet (Fassung A). Die Schnittführung D-D' ist in Abbildung 4-1 ersichtliche.

Nach oben ist der GWL vor allem durch fein- und mittelsandige Böden gekennzeichnet. Nur vereinzelt und in erster Linie im Süden des EG's sind lehmige bis sandig-lehmige Substrate anzutreffen. Die Böden sind sehr stark durch anthropogene Einflüsse geprägt. Sie sind basen- und nährstoffarm und sind für eine längerfristige landwirtschaftliche Nutzung nur durch entsprechende Düngungsmaßnahmen geeignet. Weit verbreitet sind Podsolböden. In südlichen Teil, wo Geschiebelehm oberflächennah ansteht, treten Pseudogleye auf.

Die Grundwasseroberfläche ist im Allgemeinen frei. Nur unter der Geschiebelehmdecke im Süden kann gespanntes GW auftreten. Nach NLF (1982) ergaben sich bei nur einer Bohrung im Gebiet gespannte Verhältnisse. Nach NLF (1990) erfolgt der GW-Strom in nördliche Richtung. Ein Grundwassergleichenplan ist in Abbildung 4-1 dargestellt. Die GW-Flurabstände liegen im Einzugsgebiet der Galerie A bei 3-10 m. Der mittlere Grundwasserstand wurde mit 5,5 m uGOK bei einer Amplitude von 30 cm ermittelt.

Seit 1963 wird das Wasserwerk Thülsfeld mit der Fassungsreihe A durch den Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverband (OOWV) betrieben. Die Situation in den 80er Jahren war durch stetig steigende Nitratgehalte in den Vorfeldmessstellen gekennzeichnet. Konzentrationen bis zu 300 mg/l im Anstrombereich der Fassungen wurde an mehreren Pegeln gemessen. Um den steigenden Trend zu stoppen, und um langfristig die Qualität des geförderten Trinkwassers zu sichern, führt der OOWV seit 1993 jährlich eine Zusatzberatung der Landwirtschaft im Interesse des Gewässerschutzes durch. Durch einfache Maßnahmen wie Zwischenfruchtanbau und die Düngungsberatung auf Basis der N_{min} -Methode soll vor allem der Nitratreintrag stark reduziert werden. Außerdem wurde zu Beginn der 90er Jahre ein Programm zur Aufforstung in der Schutzzone der Galerie A gestartet. Dazu wurden landwirtschaftlich genutzte Flächen im fassungsnahen Anstrombereich aufgekauft und der Forstverwaltung zur Aufforstung übergeben.

4.2 Beispielhafte Ermittlung des dominierenden Nitratreduktionsprozesses anhand von Wasserproben

4.2.1 Nitratsituation und Möglichkeiten der Prozessidentifizierung

Um die Art der Nitratreduktionsprozesse in einem Aquifer zu analysieren, gibt es eine Vielzahl an Untersuchungsmethoden. Generell lassen sich direkte und indirekten Untersuchungsmethoden unterscheiden.

Zu den direkten Methoden zählen die Ermittlung der Nitratelimination in situ z.B. durch eine Isotopenfraktionierung (^{15}N -Technik) oder Gasmessung (zum Beispiel: Acetylen-Inhibierungs-Technik (AIT)), beziehungsweise der Nachweis der beteiligten Bakterienstämme an entsprechenden Gesteinsproben. Eine weitere Möglichkeit der Identifikation der ablaufenden Prozesse besteht in der Durchführung von Batch- oder Säulenversuchen.

Indirekt kann man Nitratumsatzprozesse anhand von Veränderungen der Beschaffenheit des Grundwassers auf seinem Fließweg identifizieren. Dafür nutzt man vor allem die Reaktionsstöchiometrie der mikrobiellen Umsatzprozesse. So ist bei einer lithotrophen Denitrifikation mit einem Anstieg der Sulfatkonzentration und bei der organotrophen Denitrifikation mit einem Anstieg der Hydrogenkarbonatkonzentration bei gleichzeitiger Abnahme des Nitrates zu rechnen.

Es soll im Folgenden der dominierende Nitratumsatzprozess des Aquifers anhand von Grundwasserbeschaffenheitsdaten aus dem Einzugsgebiet der Brunnengalerie A identifiziert werden.

Zur Verfügung stehen dazu die Ergebnisse von Grundwasserprobenahmen des OOWV der letzten 10 Jahre sowie eigene Messungen die am Institut für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden durchgeführt wurden. Des Weiteren stehen für diese Untersuchung Arbeiten von Kölle (1991) und Walther et. al (2001) zur Verfügung. In beiden Arbeiten wurden Untersuchungen über die tiefenorientierte Nitratreduktion des Aquifers mit Hilfe eines Staffelbrunnens beziehungsweise einer Multilevelmessstelle vorgenommen.

4.2.2 Beschaffenheit des Aquifers

Die Beschaffenheit des Aquifers wurde beim Bau der tiefenorientierten Messstelle SGM und am Staffelbrunnen P 335/336/337 durch Probenahmen von Dr. Kölle bis in eine Tiefe von 35 m uGOK genauer untersucht. Im Folgenden wird einen kurzer Überblick über die gewonnenen Ergebnisse gegeben. Detailliertere Informationen sind in Kölle (1991) und Walther et al. (2001) enthalten.

Die Ergebnisse der *Kornverteilung* zeigen einen homogenen Aufbau des Aquifers bezogen auf das dominierende Gesteinsmaterial. Über die gesamte untersuchte Tiefe besteht der Aquifer aus pleistozänen Feinsanden, die einen geringen Anteil an Mittelsanden aufweisen. Der Feinkornanteil des Untergrundes ist sehr gering. Die ermittelten Durchlässigkeitsbeiwerte (k_f) liegen zwischen $1 \cdot 10^{-4}$ m/s und $4,5 \cdot 10^{-5}$ m/s. Der Aquifer kann also als gut durchlässig eingestuft werden.

Nur im südlichen Teil des Einzugsgebietes kommt es zu einer teilweisen Überlagerung der Sande mit Geschiebemergel. Die k_f -Werte sind in den dortigen oberen Schichten des Bodens dementsprechend niedriger.

Alle Proben der SGM-Messstelle wurden hinsichtlich des *Glühverlustes* untersucht. Mit Hilfe des Parameters Glühverlust lassen sich die organischen Bestandteile quantifizieren. Es wurde in jeder Probe organisches Material - vermutlich Kohle - in partikulärer Form gefunden.

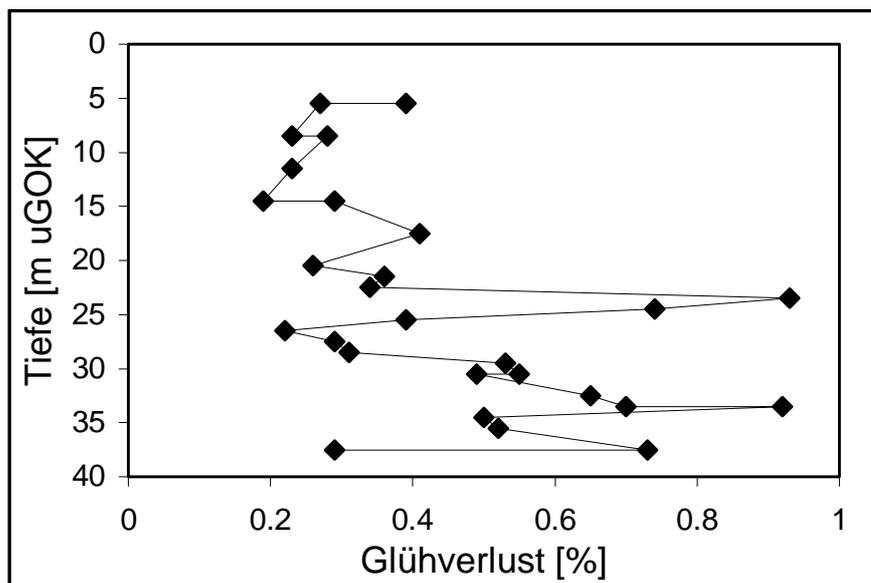


Abbildung 4-4: Tiefenprofil des Glühverlusts (gestörte Proben, SGM) (aus Walther et. al 2001).

Bis in eine Tiefe von 20 m uGOK bewegen sich die Werte des Glühverlustes zwischen 0,2 % und 0,4 % (siehe Abbildung 4-4). Danach kommt es zur Ausbildung eines Maximums von 0,93 % in 24 m uGOK. Ein zweites Maximum wird in einer Tiefe von 33 m uGOK mit 0,92 % erreicht. In Bezug auf den Parameter Glühverlust ist der Aufbau des Aquifers nicht homogen.

In weiteren Untersuchungen an den Proben der SGM-Messstelle wurden auch die *Gesamtgehalte an Kohlenstoff, Stickstoff und Schwefel* ermittelt. In Abbildung 4-5 sind die Ergebnisse der Kohlenstoffuntersuchungen aufgetragen.

Prinzipiell ist der Kurvenverlauf des organischen (C_{org}) und des gesamten Kohlenstoff-Gehaltes (TC) gleich. Der Verlauf der beiden Kurven, insbesondere die Lage der Maxima bei 22 – 23 und 32 – 33 m uGOK korrespondiert sehr gut mit dem vorher bestimmten Glühverlust. Der Gehalt an organischem Kohlenstoff bewegt sich zwischen 125 mg/kg und 3130 mg/kg, der Gesamt-Kohlenstoff-Gehalt liegt zwischen 125 mg/kg und 3420 mg/kg.

Für die meisten Proben beträgt der Anteil des organischen Kohlenstoffes am Gesamtkohlenstoff über 90 %. Als Näherung kann also davon ausgegangen werden, dass der vorhandene Kohlenstoff in organischer Form vorliegt.

Wie in Abbildung 4-6 zu erkennen ist, zeigen auch die beiden Kurven des Gesamtschwefelgehaltes (S_{tot}) und des Gesamtstickstoffgehaltes N_{tot} einen ähnlichen Kurvenverlauf wie die vorangegangenen Untersuchungen.

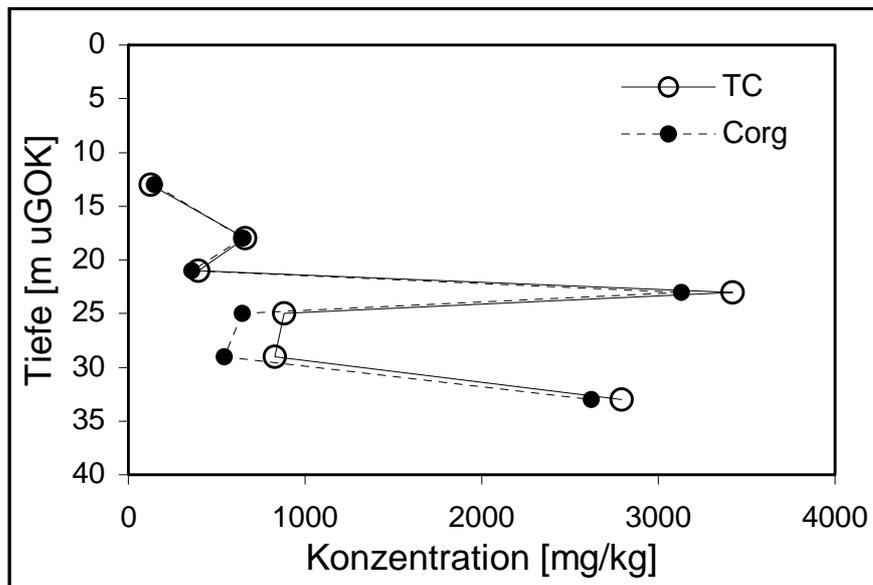


Abbildung 4-5: Tiefenprofil Corg und TC (SGM) (aus Walther et al., 2001)

Die Werte des Gesamtstickstoffs liegen zwischen 50 und 130 mg/kg, die Werte des Gesamtschwefels reichen bis zu 663 mg/kg. Die Maxima sind deutlich in einer Tiefe von 22 - 23 und 32 - 33 m uGOK ausgeprägt.

Da ein erhöhter Schwefelgehalt meist auf pyrithaltiges Gestein (in Verbindung mit Braunkohle) schließen lässt, wurde eine entsprechende Untersuchung an der Probe aus 32 - 33 m uGOK vorgenommen. Dabei wurde ein Pyritgehalt von 200 - 300 mg/kg gefunden. Leider konnten Schwefelgehalte unter 100 mg/kg aufgrund der Analysetechnik nicht bestimmt werden.

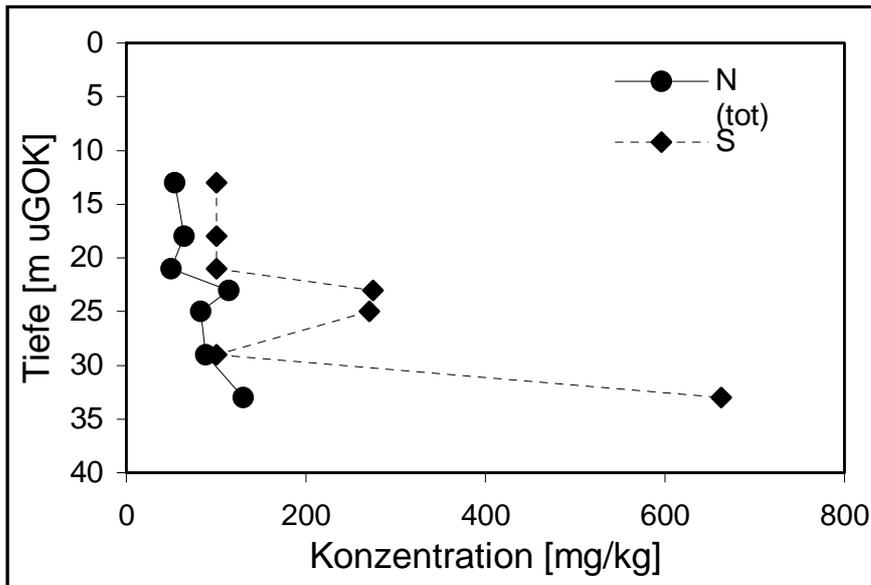


Abbildung 4-6: Tiefenprofil N(tot) und S(tot) (SGM) (aus Walther et al., 2001)

Die an der SGM-Messstelle ermittelten Gesteinsparameter wurden auch bei den Untersuchungen am Standort des Staffelbrunnens gefunden. Auch hier kann organisches Material (Braunkohle) über die gesamte Tiefe gefunden werden. Einen Braunkohle-Peak wurde in einer Tiefe von 21 - 24 m uGOK mit 16,6 g/kg nachgewiesen. In der zweiten interessanten Tiefe von zirka 30 m uGOK wurde ein Maximum des Pyritgehaltes von 330 mg/kg gefunden. Kölle (1991) geht von einer Gesamtmächtigkeit des Pyritdepots von 9 bis 10 m aus, weil zu erwarten ist, dass bereits die ab 21 m beobachtete „Kohleschicht“ pyrithaltig ist.

Da die beiden Messstellen (SGM und Staffelbrunnen) fast 1,3 km auseinander liegen (vergleiche Abbildung 4-2), aber trotzdem denselben Aquiferaufbau zeigen, wird davon ausgegangen, dass der Aquifer großflächig von einer organischen Material enthaltenden Kohleschicht in einer Tiefe von 21 - 24 m uGOK durchzogen wird.

In zirka 30 m Tiefe existiert außerdem eine weitere pyrithaltige Schicht. Über die horizontale Ausdehnung dieser Schicht kann nur spekuliert werden, solange keine weiteren Gesteinsansprachen im Gebiet vorgenommen werden. Je nach ihrer Entstehung kann es sich um großflächige oder auch zungenförmige Schichten handeln. Mit ziemlich großer Sicherheit kann man aber davon ausgehen, dass sich die beiden Schichten zwischen und in der Umgebung der beiden tiefenorientierten Messstellen befinden.

Die Werte der Schwermetalle sind über die gesamte beprobte Tiefe als unauffällig zu bewerten.

4.2.3 Beschaffenheit des Grundwassers

Die Grundwasserbeschaffenheitsdaten der einzelnen Messstellen sind in Anlage 4-1 aufgeführt.

Im gesamten Einzugsgebiet werden die für Grundwasser typischen Temperaturen von 8 - 10 °C gemessen. Mit pH-Werten zwischen 4 und 6 ist das Grundwasser im sauren bis schwach-sauren Milieu anzusiedeln. Das Redoxpotenzial bewegt sich in den Grenzen von 200 – 390 mV.

Bei den Wasserinhaltsstoffen gibt es zum Teil erhebliche Konzentrationsunterschiede, einmal horizontal zwischen den einzelnen Brunnen, aber auch vertikal. Die vertikale Verteilung der Wasserinhaltsstoffe kann jedoch nur an den beiden tiefenorientierten Messstellen untersucht werden, wobei der Abstand der Beobachtungspunkte im Staffelbrunnen von 10 m nur grobe Untersuchungen zulässt.

a) Vertikale Verteilung der Wasserinhaltsstoffe (SGM, Staffelbrunnen)

Der Aquifer ist abgesehen von einem Teilbereich bis in Tiefen von 10,6 – 15,6 m uGOK sauerstoffreich, d.h. er weist Konzentrationen über 5 mg/l auf (Abbildung 4-7).

Im oberflächennahen Grundwasser sind die Nitratwerte relativ gering. In einer Tiefe von 15,6 – 20,6 m uGOK ist dann jedoch ein Konzentrationspeak zu beobachten. Zwischen 20,6 und 25,6 m uGOK sinken die Nitratwerte auf wenige Milligramm und ab 30,6 m uGOK ist kein Nitrat mehr im Grundwasser vorhanden. Vergleicht man diesen Bereich der Nitratreduktion mit dem Aufbau des Aquifers (Abschnitt 4.2.2) in dieser Tiefe, so stellt man fest, dass sich genau in dieser Zone (21 – 23 m uGOK) eine kohlehaltige Schicht befindet. Es liegt also nahe, dass es durch diese Schicht zu Nitratreduktionsprozessen kommt. Sauerstoffarmut in der betreffenden Tiefe und das vorhandene organische Material wären die Grundvoraussetzungen für eine stattfindende Denitrifikation. Nur durch eine Denitrifikation können Nitratkonzentrationen in dieser Größe (über 100 mg/l) abgebaut werden. Im Abschnitt 4.2.6.1ff werden die Nitratreduktion und vor allem der sie dominierende Prozess genauer untersucht.

Die Konzentrationsverläufe vieler anderer Wasserinhaltsstoffe (SO_4^{2-} , Cl^- , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , Mn) verhalten sich ähnlich wie der Verlauf des Nitrats. Geringere Werte im oberflächennahen Grundwasser werden von einem Peak in 15,6 – 20,6 m uGOK gefolgt, bevor die Werte wieder abnehmen. Die elektrische Leitfähigkeit, welche ein Indikator für die Menge der gelösten Salze im Grundwasser ist, verhält sich demnach genauso wie der Konzentrationsverlauf der wichtigsten Salze (Cl^- , Ca^{2+}). Von oberflächennahen 200 $\mu\text{S}/\text{cm}$ steigt sie auf Werte bis zu 400 $\mu\text{S}/\text{cm}$ in 15,6 m uGOK, und fällt dann kontinuierlich auf Werte von 80 – 150 $\mu\text{S}/\text{cm}$ in 35,6 m uGOK ab.

Der Gesamt-Eisen-Gehalt liegt über die gesamte Tiefe unterhalb der Nachweisgrenze.

a) Horizontale Verteilung

Wie man an der SGM-Messstelle beziehungsweise am Staffelpiegel P 335/336/337 erkennen kann, kommt es zu einer stark tiefendifferenzierten Stoffverteilung. Bei einer flächenbezogenen Betrachtung kommt es also darauf an, dass nur Pegel mit annähernd gleicher Filtertiefe verglichen werden.

Beachtet man die unterschiedliche Filterlage der einzelnen Pegel, so sagen sie in Bezug auf die Wasserinhaltsstoffe das Gleiche aus. Nitrat kann bis in 20 m Tiefe beobachtet werden, nur wenige Meter tiefer ist das Grundwasser dagegen nitratfrei.

Eine Ausnahme bildet der Pegel 183. Obwohl er in einer Tiefe von 43 m uGOK verfiltert ist, werden immer noch Nitratgehalte bis zu 20 mg/l gemessen. Auffällig sind auch seine hohen Sauerstoffgehalte, die mit 5 mg/l für solche Tiefen untypisch sind. Wahrscheinlich ist hier davon auszugehen, dass es bei diesem Pegel infolge unzureichender Abdichtungen oder anderer Einflüsse zu hydraulischen Kurzschlussströmungen kommt.

4.2.4 Grundwasseraltersbestimmung

Im November 2000 beziehungsweise im Februar 2001 wurden Grundwasserproben aus insgesamt 17 in verschiedenen Tiefen verfilterten Messstellen im Untersuchungsgebiet mit dem Ziel einer Grundwasserdatierung entnommen. Die Ergebnisse sind in Oster (2001) dokumentiert. Die Datierung wurde anhand der in den Proben enthaltenen Fluorchlorkohlenwasserstoff- (F11 (CCl_3F), F12 (CCl_2F_2), F113 ($\text{C}_2\text{Cl}_3\text{F}_3$)) und Schwefelhexafluoridgehalten (SF_6) vorgenommen. Die Methodik und die Auswertung sind in Anlage 4.3 enthalten.

4.2.5 Auswertung der Grundwasserbeschaffenheitsdaten

Die Auswertung der Grundwasserbeschaffenheitsdaten erfolgt vor dem Hintergrund einer vermuteten Denitrifikation in diesem Gebiet. Natürlich ist davon auszugehen, dass sich beim Abbau des Nitrats einige Prozesse überlagern können. Ziel soll sein den dominierenden Prozess zu finden.

Geht man von einer stattfindenden Denitrifikation aus, so können zwei Arten unterschieden werden. Zum einen die organotrophe Denitrifikation, bei der als Reaktionsprodukt Hydrogencarbonat entsteht, zum anderen die lithotrophe Denitrifikation, bei der es zur Sulfatbildung kommt.

Eine Grundvoraussetzung für den Ablauf einer vollständigen Denitrifikation ist ein nahezu sauerstofffreies Grundwasser. Bei Sauerstoffgehalten zwischen 1 und 5 mg/l kann es vereinzelt schon zur Denitrifikation kommen, über 5 mg/l ist eine Denitrifikation dagegen ausgeschlossen.

In Abbildung 4-7 sind die Sauerstoffgehalte aller Messstellen bis zu einer Tiefe von 10 m uGOK aufgeführt.

Deutlich ist zu erkennen, dass große Teile des Einzugsgebietes bis in 10 m Tiefe sauerstoffgesättigt sind. An der SGM-Messstelle werden erhöhte Sauerstoffgehalte bis in eine Tiefe von 15 – 20 m uGOK gemessen. Inwieweit dies auch auf die anderen Messstellen zutrifft, kann aufgrund der zu geringen Messstellentiefe nicht gesagt werden. Es wird davon ausgegangen, dass die Sauerstoffgehalte unterhalb der Beobachtungstiefen stark abnehmen.

Es gibt jedoch auch einen Bereich, in dem in 10 m Tiefe schon keine nennenswerten Sauerstoffgehalte mehr gemessen werden können (siehe eingerahmter Bereich in Abbildung 4-7). Davon betroffen sind die Pegel P 483, P 484 und P 377. Auffällig ist die scharfe räumliche Abgrenzung dieses Gebietes. Die Pegel P 482, P 481, P371 und die SGM-Messstelle, die sich nur wenige Meter in Anströmrichtung entfernt befinden, weisen dagegen die schon angesprochenen hohen Sauerstoffgehalte auf. Es kommt also im Bereich der Pegel P 483, P 484 und P 377 schon in den oberen Boden- beziehungsweise Grundwasserschichten zu reduzierenden Prozessen, die den gesamten Sauerstoff aufbrauchen. Zur Identifikation dieser Prozesse sind leider keine brauchbaren Informationen vorhanden. Interessant ist jedoch, dass sich die Grenzen des sauerstoffarmen Grundwassers mit den Grenzen des dortigen Versuchsstandortes decken. Die Ackerfläche über der sauerstofffreien Zone (P 483, P 484) wird seit 1993 durch den Landwirt Högemann ökologisch bewirtschaftet. Sinnvoll wären weitere Boden-, Grundwasser- und Bewirtschaftungsuntersuchungen in diesem Gebiet. Inwieweit es sich bei der sauerstofffreien Zone um ein zusammenhängendes Gebiet, oder um

lokale Sauerstoffzehrungen handelt, kann auch nur durch weitere Untersuchungen ermittelt werden.

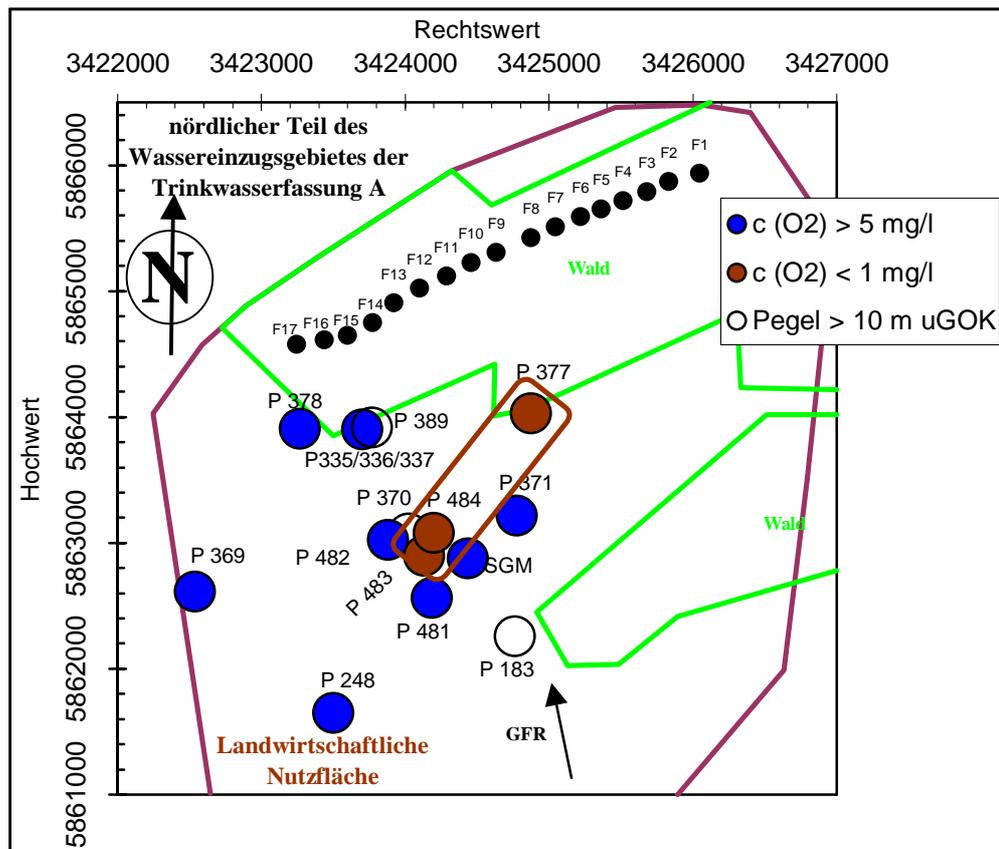


Abbildung 4-7: Sauerstoffgehalte der flachen Pegel (0 bis 10 m uGOK).

Unter dem Gesichtspunkt der Denitrifikation müssen also zwei Gebiete getrennt voneinander betrachtet werden. Während es in dem sauerstofffreien Gebiet schon in geringer Tiefe zur Denitrifikation kommen kann, ist im übrigen Gebiet erst ab einer Tiefe von 15 – 20 m uGOK mit der Denitrifikation zu rechnen.

Wie im Abschnitt 4.2.6.1 festgestellt wird, hat sich in 10 – 15 m Tiefe ein Nitrat-Peak gebildet (beobachtet am SGM), der in 20 – 25 m uGOK fast vollständig abgebaut wird. Um das Nitratverhalten im Gebiet zu bewerten, gibt es nun zwei mögliche Vorstellungsansätze. Der erste Ansatz geht davon aus, dass es im Anströmbereich der SGM-Messstelle ein Feld oder Gebiet gibt, welches übermäßig mit Nitrat gedüngt wird. Da das Nitrat hauptsächlich durch die Grundwasserströmung in der gesättigten Bodenzone verlagert wird, könnte es dadurch zu einer Unterströmung nitratarmen Wassers mit nitratreichem Wasser kommen. Als Ergebnis kann man dann den vorliegenden Peak in der Tiefe messen. Gegen diese Theorie spricht allerdings, dass sich der Nitrat-Peak in vertikaler Richtung (siehe nachfolgendes Kapitel) nach unten verlagert. Dies würde bedeuten, dass sich die Fläche mit dem erhöhten Nitratreintrag von der SGM-Messstelle in Strömungsrichtung entfernt.

Im zweiten Ansatz behandelt man das Nitratproblem vereinfacht als eine Funktion der Fläche und der Zeit. Kommt es auf einer landwirtschaftlich genutzten Fläche zum Zeitpunkt t_0 zu einem erhöhten Nitratreintrag (vergleiche Abbildung 4-8), so verlagert sich dieser Konzentrationspeak mit der Zeit und der Grundwasserströmung sowohl horizontal als auch vertikal. Beobachtet man ein Teilchen, so würde es sich auf dem Stromfaden nach unten bewegen.

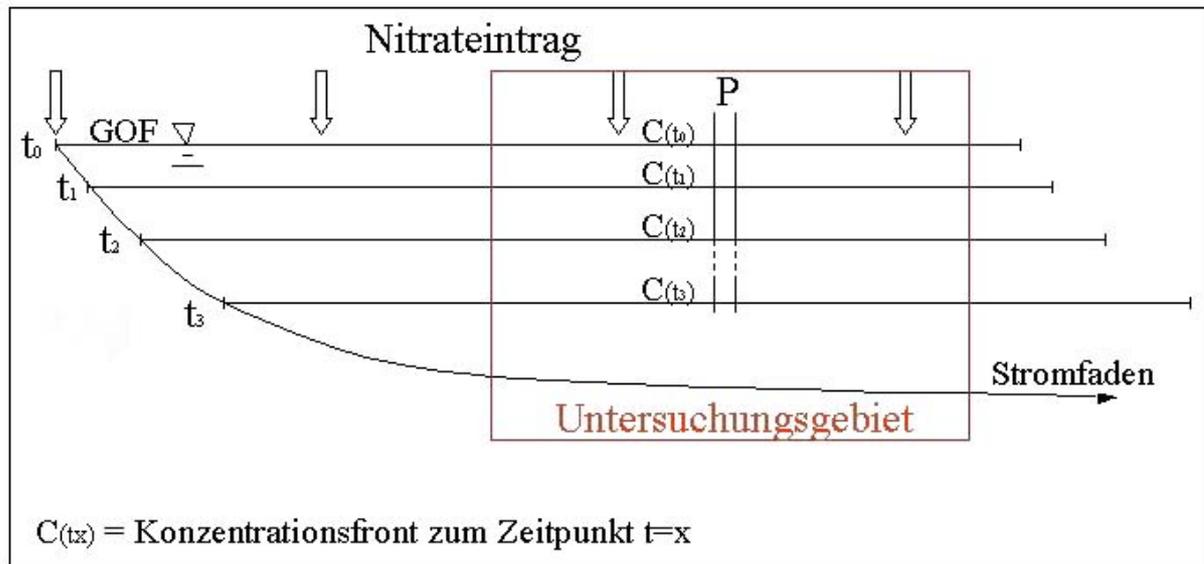


Abbildung 4-8: Vertikale Konzentrationsfrontverschiebung.

Der Konzentrationspeak verlagert sich demnach über die gesamte Fläche nach unten. Durch die horizontale Grundwasserströmungskomponente wird dieser gleichzeitig horizontal verschoben. In dem angeführten Beispiel findet eine Verschiebung nach rechts statt. Betrachtet man aber nur einen Pegel, so verlagert sich der Konzentrationspeak scheinbar nur vertikal. Die Verschiebung in horizontaler Richtung ist nicht sichtbar. Am Pegel P würde man also zum Zeitpunkt t_2 eine erhöhte Nitratkonzentration messen, da der Peak zu diesem Zeitpunkt den verfilterten Bereich erreicht. Zum Zeitpunkt t_3 hat der Peak den verfilterten Bereich dann schon wieder verlassen, die Nitratkonzentrationen im Pegel sinken wieder.

Genau dieses Phänomen kann man im Einzugsgebiet der Trinkwasserfassung A beobachten. In den Jahren 1996/97 treten in den meisten der 10 m tiefen Pegel, die sauerstoffgesättigt sind, sehr hohe Nitratkonzentrationen auf. Graphisch ist dies mit Jahresdurchschnittswerten der Pegel P 335, P 369, P 371, P 378, P 481 und P 482 in Abbildung 4-9 dargestellt.

Bei relativ gleich bleibenden Sauerstoff- und Sulfatkonzentrationen springt die Nitratkonzentration 1996 von 140 mg/l auf 205 mg/l. In Einzelfällen wie am Pegel P 369 wurden Spitzenwerte von 300 mg/l gemessen. Die Pegel werden also von einem Nitrat-Peak durchwandert. Von einem flächendeckend hohen Nitratintrag muss ausgegangen werden, da viele Pegel gleichzeitig betroffen sind. Auch der beobachtete Peak in der SGM-Messstelle passt damit in diese Theorie. Er liegt in etwa in der zu erwartenden Tiefe. Ein punktueller Eintrag wie in Ansatz eins kann daher ausgeschlossen werden.

Eine tiefenorientierte Bewertung des Nitratabbaus kann also vorgenommen werden. Da die Beobachtungspunkte der SGM-Messstelle in einem Abstand von 5 m angeordnet sind, ist sie besser zur Auswertung geeignet als der Staffelbrunnen, der Abstände von 10 m aufweist. Qualitativ sind die Konzentrationsverläufe an beiden Messstellen aber gleich.

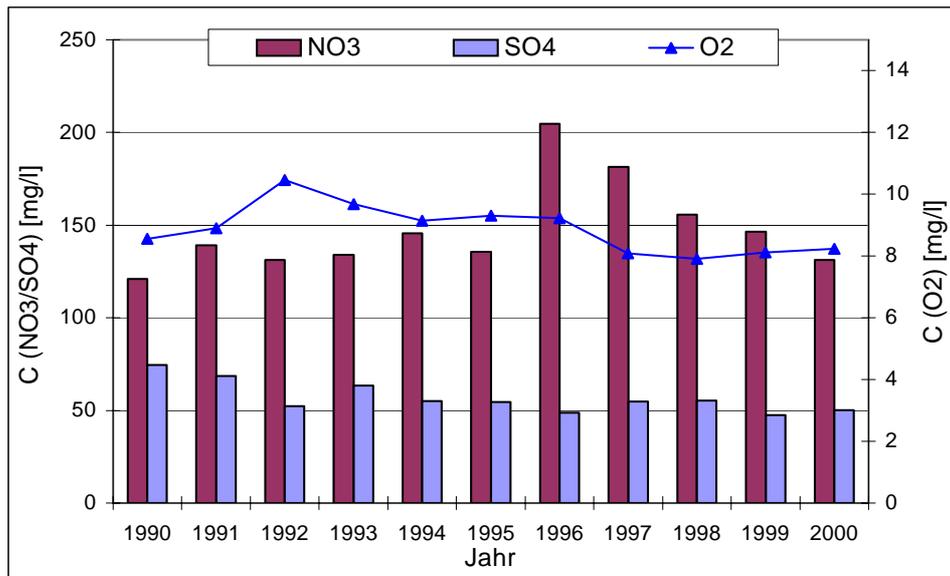


Abbildung 4-9: Konzentrationsverlauf der flachen Pegel (10 m uGOK)

Da die SGM-Messstelle erst 1999 installiert worden ist und nur Messwerte der nachfolgenden 2 Jahre vorliegen, muss noch eine weitere Vereinfachung getroffen werden. Um zwei Messwerte miteinander zu vergleichen, die aus 2 unterschiedlichen Tiefen stammen, muss für eine genaue Untersuchung auch die Zeit beachtet werden, die das Grundwasser mit dem darin enthaltenen Nitrat von einem Punkt zum anderen benötigt. In diesem Fall würde sich bei einem Abstand von 5 m und einer mittleren vertikalen Grundwasserfließgeschwindigkeit von 1 m/a eine zeitliche Differenz von zirka 5 Jahren ergeben. An einem konkreten Beispiel heißt dies nach der Gleichung 0. Ordnung $dc = c_0 \cdot dt$, das Grundwasser mit der Nitratkonzentration c_0 in 15,6 m uGOK befindet sich nach 5 Jahren mit der Nitratkonzentration c_1 in 20,6 m Tiefe. Aus der Nitratkonzentrationsänderung Δc könnte man jetzt direkte Rückschlüsse auf eine stattgefundenen Reduktion ziehen. Im vorliegenden Fall von 2 Jahren ist das aber nicht möglich, es können deshalb nur qualitative Aussagen getroffen werden.

4.2.6 Tiefenorientierte Betrachtung einzelner Wasserinhaltsstoffe

Wie schon erwähnt, weist das Grundwasser an der SGM-Messstelle bis in eine Tiefe von 15,6 m uGOK Sauerstoffgehalte über 5 mg/l auf. Danach sinkt der Gehalt an Sauerstoff, bis er zwischen 20,6 und 25,6 m uGOK vollständig aufgebraucht wird.

Die wichtigsten Wasserinhaltsstoffe zur Identifikation einer Denitrifikation sind Nitrat, Sulfat und Hydrogencarbonat. Deren Konzentrationsverläufe mit der Tiefe für jeweils 4 Probenahmezeitpunkte sind in den folgenden Diagrammen (Abbildung 4-12) dargestellt.

Zum Vergleich wurden Messtermine ausgewählt, die in einem Abstand von etwa einem halben Jahr lagen.

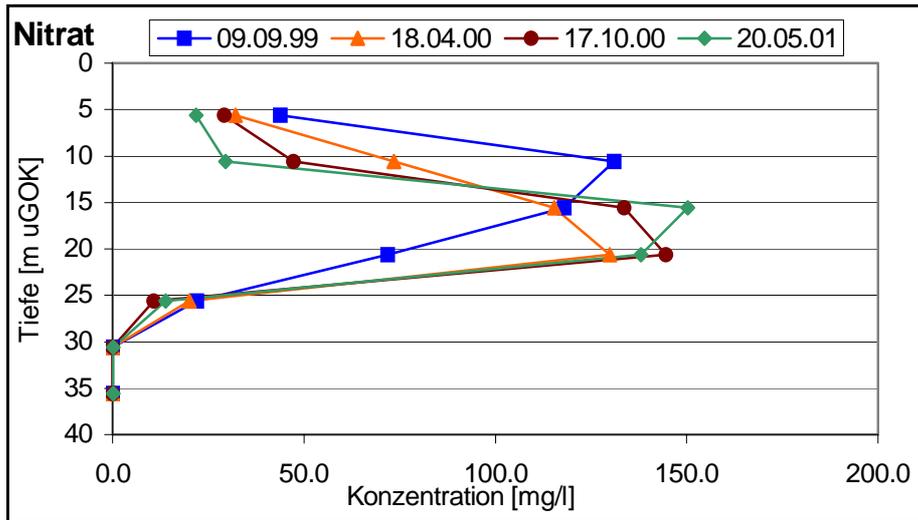


Abbildung 4-10: Tiefenprofil der Nitratkonzentration an der SGM-Messstelle.

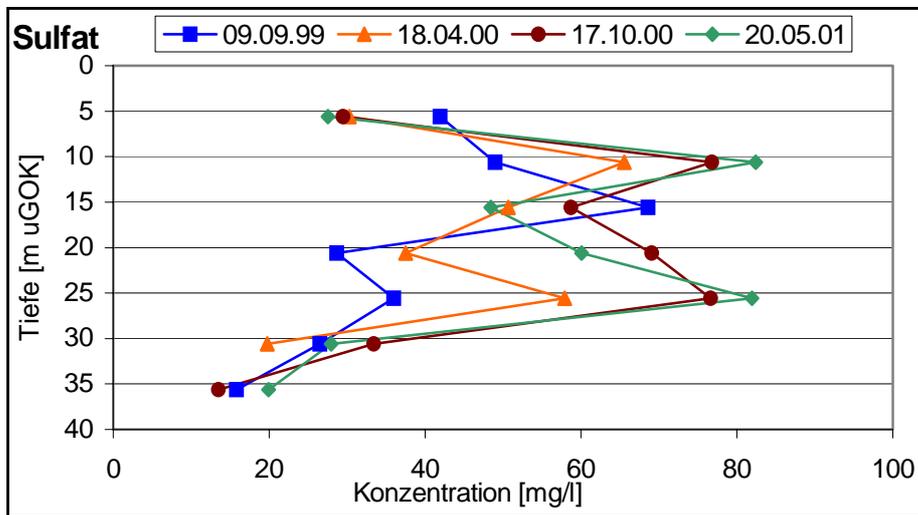


Abbildung 4-11: Tiefenprofil der Sulfatkonzentration an der SGM-Messstelle.

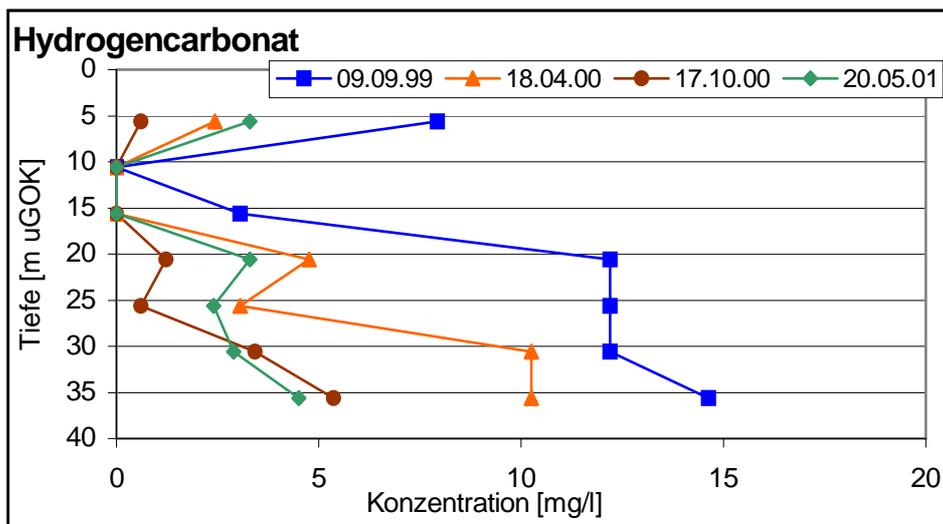


Abbildung 4-12: Tiefenprofil der Hydrogencarbonatkonzentration an der SGM-Messstelle.

4.2.6.1 Nitrat

Die Nitratgehalte der Messpunkte in 5,6 und 10,6 m Tiefe sind über den gesamten betrachteten Zeitraum rückläufig. Die Abnahme in 10,6 m Tiefe von 130 mg/l auf 30 mg/l ist extrem. Der Rückgang des hohen Nitratgehaltes in den oberen Grundwasserschichten ist als Erfolg der 1993 in Kraft getretenen landwirtschaftlichen Zusatzberatung zu werten. Da der Messpunkt in 5,6 m Tiefe direkt an der Grundwasseroberfläche liegt, sind die Auswirkungen der Grundwasser schonenden Bewirtschaftung hier zum ersten Messtermin am 09.09.99 schon sichtbar. Bei einer Dauer von 3 Jahren, die das Sickerwasser bis zum Erreichen der Grundwasseroberfläche benötigt, hätten erste Auswirkungen also schon 1996 beobachtet werden können. Da das Grundwasser bis zum nächsten Messpunkt 5 m in vertikaler Richtung zurücklegen muss, benötigt es weitere 3 – 4 Jahre (aus der Differenz der Grundwasseralter der beiden Messpunkten ermittelt), um diesen zu erreichen. Am ersten Messtermin waren die Messwerte in 10,6 m Tiefe mit 130 mg/l noch sehr hoch, aber schon ein halbes Jahr später waren sie auf 75 mg/l gesunken. Dieser zweite Messpunkt wurde also gerade von dem nitratärmeren Wasser erreicht, wodurch sich dieser extreme Rückgang in nur 1,5 Jahren erklären lässt.

In 15,6 m Tiefe verhält sich die Nitratkonzentration genau umgekehrt, sie steigt stetig an. Diese Tatsache im Zusammenhang mit den sinkenden Messwerten des darüber liegenden Messpunktes zeigt, dass sich ein Konzentrationspeak nach unten verlagert. Ab dem Erreichen des Maximums an diesem Messpunkt in 15,6 m Tiefe werden dann auch hier die Messwerte in Folge der Düngungsberatung sinken.

In 20,6 m uGOK schwanken die Nitratkonzentrationen in Abhängigkeit des Eintrags der zur Zeit der Entstehung dieses Grundwassers statt fand, bleiben aber mit Werten bis zu 145 mg/l hoch.

In der darunter liegenden Schicht geschieht nun das eigentlich Interessante bezogen auf die Denitrifikation. Innerhalb von 5 m wird fast das gesamte Nitrat reduziert. In 25,6 m Tiefe sind gerade noch 10 – 20 mg/l Nitrat vorhanden. In 30,6 m Tiefe ist dann das gesamte Nitrat aufgebraucht. Da der Messpunkt in 25,6 m Tiefe nicht exakt an der Grenzschicht zum nitratfreien Wasser liegt, sondern technisch bedingt dort angelegt wurde, ist davon auszugehen, dass das Grundwasser schon wenig tiefer nitratfrei ist. Es ist sehr unwahrscheinlich, dass die geringe Nitratkonzentration von wenigen mg/l noch einmal 5 m benötigt, um abgebaut zu werden.

4.2.6.2 Sulfat

Die Sulfatkonzentrationen sind am ersten Messpunkt ebenfalls rückläufig. Mit einem Messwert von 21 mg/l am letzten Messtermin ist die Konzentration als gering einzuschätzen. Die Schwankungen der Sulfatgehalte im Grundwasser zwischen den Tiefen 5,6 und 20,6 m uGOK sind auf unterschiedlich hohen Eintrag in der Vergangenheit zurückzuführen. Interessant ist, dass es zwischen den Messpunkten in 20,6 und 25,6 m uGOK, also in dem Bereich, in dem das gesamte Nitrat reduziert wird, immer zu einer Erhöhung der Sulfatkonzentration kommt. Nach der allgemeinen Gleichung der Denitrifikation über Pyrit (Gleichung 4.1) ist dies auf eine lithotrophe Denitrifikation zurückzuführen.



Mit dem ersten Reaktionsschritt wird aus Pyrit Eisen als Eisen(II)-Ionen mobilisiert. Diese Eisen(II)-Ionen werden wiederum durch Nitratreduktion zu Eisen(III)-hydroxid umgewandelt, welches dann ausfällt.

Bei der Quantifizierung des entstandenen Sulfats entsteht jedoch dasselbe Problem, wie es in der Einführung zum Abschnitt 4.2.6 schon für Nitrat erläutert wurde. Ohne die Ausgangssulfatkonzentration des Grundwassers zu kennen, mit der es den Messpunkt in 20,6 m uGOK 5 Jahre vorher verlassen hat, kann man keine Rückschlüsse auf die Menge des entstanden Sulfats am Messpunkt in 25,6 m uGOK ziehen.

Unterhalb von 25,6 m uGOK nimmt dann die Sulfatkonzentration kontinuierlich bis auf 10 – 20 mg/l ab. Es ist davon auszugehen, dass es sich hierbei um eine Desulfurikation handelt, die sich bei totaler Nitratfreiheit des Grundwassers an eine Denitrifikation anschließt.

4.2.6.3 Hydrogencarbonat

Die Hydrogencarbonat-Konzentration nimmt bis in 10,6 m Tiefe ab, bleibt dann relativ konstant bei Werten um 0 mg/l und steigt dann bis in eine Tiefe von 20,6 m wieder an. Dieser Anstieg lässt sich aber nur schwer auf eine Denitrifikation zurückführen, da zum einen in dieser Tiefe noch Sauerstoff im Grundwasser vorhanden ist, zum anderen fehlt das benötigte organische Material (Elektronendonator). Außerdem sind die Nitratkonzentrationen in 20,6 m Tiefe noch so hoch, dass eine schon stattgefunden Reduktion ausgeschlossen werden kann.

In der interessanten Tiefe von 20,6 – 25,6 m Tiefe nimmt die Hydrogencarbonat-Konzentration zu jedem der vier Messtermine ab. Bei einer stattfindenden organotrophen Denitrifikation müsste aber gerade hier Hydrogencarbonat entstehen. Demnach wird die organotrophe Denitrifikation als potenzielle Nitratsenke ausgeschlossen.

Der Wiederanstieg der Hydrogencarbonat-Konzentration ab 25,6 m uGOK ist nach der Gleichung 4.2 auf eine Desulfurikation zurückzuführen. Dies steht im Einklang mit der Feststellung, dass in diesem Bereich die Sulfatkonzentrationen rückläufig sind. Die Desulfurikation ist z.B. nach folgender vereinfachten Reaktionsgleichung möglich:



Diese Reaktion kann meist nur in tiefen Grundwasserleitern beobachtet werden, da sie einen vollständigen Aufschluss von Sauerstoff und Nitrat erfordert.

4.2.7 Anionenäquivalentkonzentrationen

Über eine Bilanzierung der im Grundwasser enthaltenen Anionen und Kationen kann man eine qualitative Bewertung einer Grundwasseranalyse vorgenommen werden.

Die wichtigsten Anionen sind Hydrogencarbonat, Sulfat, Chlorid, Nitrat und Phosphat. Zu den wichtigsten Kationen zählen die Alkalimetalle Natrium und Kalium sowie die Erdalkalimetalle Kalzium, Magnesium, Barium und Strontium. Eisen, Mangan und andere Metalle (Schwermetalle) sind normalerweise nur in Spuren nachweisbar. Die Bilanz zwischen Anionen und Kationen muss "stöchiometrisch" ausgeglichen sein. Das ist der Fall wenn der Fehler in der Ionenbilanz kleiner als 5 % ist.

Für die SGM-Messstelle und den Staffelbrunnen sind Ionenbilanzen für einzelne Messtermine ermittelt worden. Der Fehler der Bilanzierung bewegt sich in den meisten Fällen im Rahmen der angestrebten 5 %. Nur in Ausnahmefällen kam es an einzelnen Messpunkten zu Abweichungen von über 10 %.

In den vorliegenden Ionenbilanzen sind nur die Anionen Hydrogencarbonat, Sulfat, Chlorid und Nitrat relevant, da sie in größeren Konzentrationen vorkommen. Durch den Vergleich der Anteile der einzelnen Anionen an der Summe der Äquivalentkonzentrationen können Aussagen über die Art einer stattfindenden Denitrifikation getroffen werden.

Dazu werden die Anteile der Äquivalentkonzentrationen der 4 Anionen an der Summe der Äquivalentkonzentrationen für jeden Messpunkt über die Tiefe dargestellt. Die Anteile der einzelnen Anionen werden aufsummiert auf einer Skala von 0 – 100 % dargestellt (Abbildung 4-13 und Abbildung 4-14).

Das Verhalten der Anionen soll am Beispiel eines Messtermins im August 1999 beschrieben werden. Qualitativ war das Ergebnis der einzelnen Messtermine immer dasselbe. Dies ist in Anlage 4-2 dokumentiert.

Der Anteil des Nitrats dominiert in den oberen Grundwasserschichten gegenüber den anderen Anionen. Ab einer Tiefe von 20,6 m uGOK geht der Anteil aber stark zurück, in 30,6 m uGOK ist das Nitrat dann nicht mehr nachweisbar. Wie im vorhergehenden Kapitel schon erwähnt, ist davon auszugehen, dass das Nitrat schon in einer Tiefe von 27 m uGOK aufgebraucht sein wird.

Durch den Abbau des Nitrats wird die gesamte Äquivalentkonzentration der Anionen geringer, die prozentualen Anteile von Hydrogencarbonat, Sulfat und Chlorid nehmen deshalb zu. Beim Vergleich der Messpunkte in 20,6 und 25,6 m Tiefe fällt auf, dass der Sulfatanteil fast im gleichen Maße zunimmt, wie der Anteil des Nitrats abnimmt. Gegenüber den Anteilen von Hydrogencarbonat und Chlorid nimmt er viel stärker zu.

Der Anteil des Hydrogencarbonats erhöht sich an den Messpunkten in 20,6 und 25,6 m Tiefe allein durch die Abnahme der Anionen (vor allem Nitrat) insgesamt. Erst ab 25,6 m Tiefe ist eine echte Zunahme des Hydrogencarbonat-Anteils zu verzeichnen, bei gleichzeitiger Abnahme des Sulfatanteils (vergleiche Abbildung 4-13 und Abbildung 4-14).

Dieses Verhalten der Anionen kann in beiden Messstellen nachgewiesen werden und stimmt mit dem Ergebnis des vorangegangenen Kapitels überein.

Es muss davon ausgegangen werden, dass es in einer Tiefe von 20,6 – 25,6 m uGOK zu einer lithotrophen Denitrifikation kommt, da der Anteil des Sulfats stark zunimmt, der des Hydrogencarbonats dagegen nicht. Die Zunahme des Hydrogencarbonats ist erst in den darunter liegenden Grundwasserschichten zu beobachten, was bei einer gleichzeitigen Abnahme des Sulfatanteils auf eine Desulfurikation zurückzuführen ist.

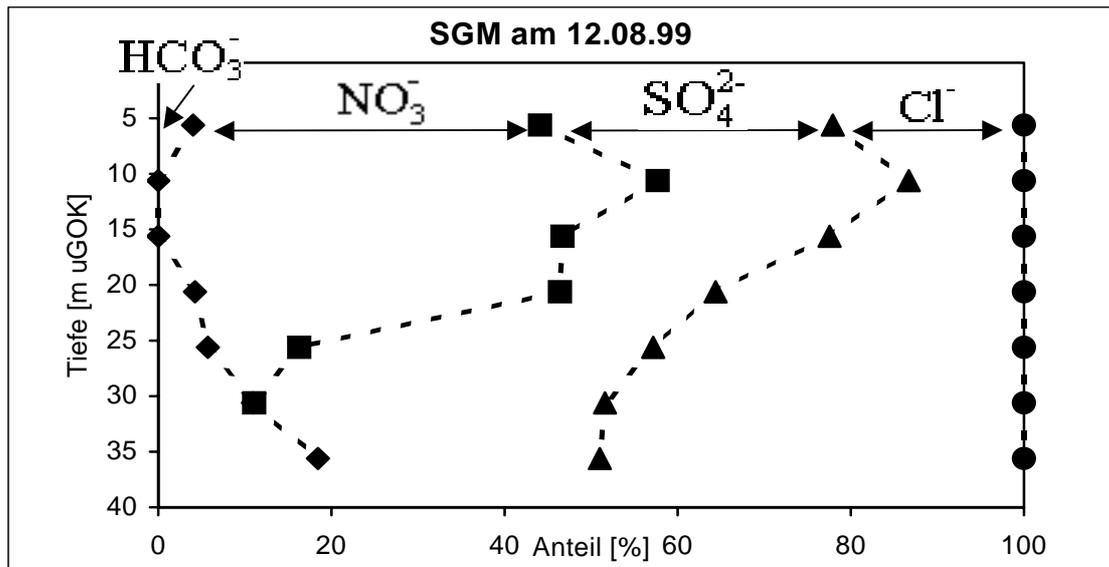


Abbildung 4-13: Anteile der Äquivalentkonzentrationen der Anionen Hydrogencarbonat, Nitrat, Sulfat und Chlorid an der Summe der 4 Anionen (SGM).

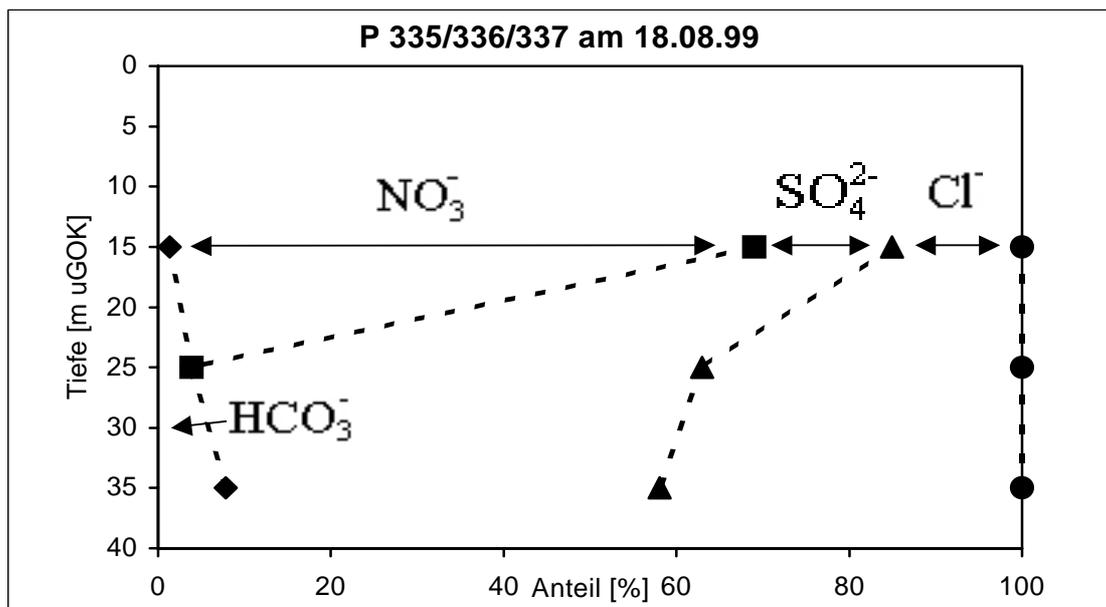


Abbildung 4-14: Anteile der Äquivalentkonzentrationen der Anionen Hydrogencarbonat, Nitrat, Sulfat und Chlorid an der Summe der 4 Anionen (Staffelbrunnen).

4.2.8 Chlorid-Sulfat-Diagramme

Kölle (1991) entwickelte auf der Grundlage einer großen Datenbasis zur Chemie niedersächsischer Grundwässer eine Klassifizierung von Grundwässern anhand ihrer Chlorid- und Sulfatgehalte. Beim Eintragen der Grundwässer in ein Chlorid-Sulfat-Diagramm (vergleiche Abbildung 4-15) ergeben sich vier Bereiche, um die sich die meisten Grundwässer gruppieren. Die Grundwässer dieser vier Bereiche lassen sich nach den folgenden Merkmalen unterscheiden.

- Durch Ionensorption geprägte Grundwässer

- Typ 1: reduzierende, sauerstoff- und Nitrat freie Grundwässer mit einem relativ hohen Eisen- und Mangangehalt
- Typ 2: oxidierende, sauerstoff- und Nitrat enthaltende Grundwässer mit höheren Chloridgehalten als Typ 1
- Quellwässer: zeichnen sich durch das für Quellwässer typische Chlorid/Sulfat-Verhältnis von 0,5 / 1 aus
- Durch chemo-lithotrophe Denitrifikation geprägte Grundwässer zeichnen sich durch einen Sulfatüberschuss aus

Die Messwerte des Thülsfelder Aquifers wurden mit Hilfe dieser Sulfat-Chlorid-Diagramme klassifiziert. Dazu wurden wieder die Ergebnisse von vier Messterminen im Abstand von jeweils einem halben Jahr (gleiche Messtermine wie in Abschnitt 4.2.6.1) ausgewählt und in das Sulfat-Chlorid-Diagramm eingetragen.

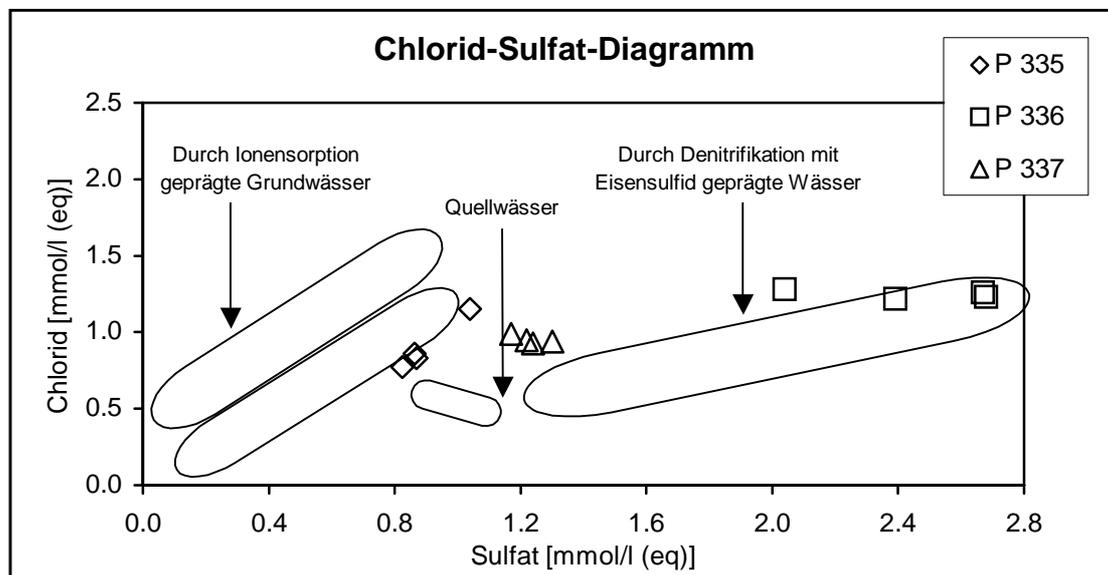


Abbildung 4-15: Messwerte des Staffelbrunnens im Chlorid-Sulfat-Diagramm.

Die in Abbildung 4-15 dargestellten Messwerte des Staffelbrunnens (P335, P336, P337) passen gut in die Kölle'sche Theorie. Am Pegel P 335 (13 m uGOK) findet noch keine Denitrifikation statt, da noch genügend Sauerstoff in dieser Tiefe vorhanden ist. Am Pegel P 337 (33 m uGOK) ist die Denitrifikation schon abgeschlossen und auch ein Großteil des entstandenen Sulfats schon wieder abgebaut. Deshalb liegen die Messwerte dieser beiden Pegel im Bereich der durch Ionensorption geprägten Grundwässer beziehungsweise der Quellwässer.

Der Pegel P 336 (23 m uGOK) liegt dagegen im Bereich der durch Eisensulfide geprägten Grundwässer. Dies steht im Einklang mit der in dieser Tiefe festgestellten lithotropen Denitrifikation.

Das Ergebnis des Staffelbrunnens darf jedoch nicht überbewertet werden, denn anhand der Messwerte der SGM-Messstelle wird auch die Unsicherheit dieser Klassifikation deutlich (Abbildung 4-16).

Wie zu erwarten liegen die Messwerte von SGM 6 und SGM 7 (30 und 35 m uGOK) eindeutig nicht im Bereich der durch Denitrifikation geprägten Grundwässer. In diesen Tiefen ist die Denitrifikation schon abgeschlossen und auch das Sulfat schon weitestgehend

abgebaut. Die Messwerte der Grundwässer der anderen fünf Tiefen liegen mehr oder weniger verteilt über alle vier Grundwasserklassen, sind also nicht eindeutig interpretierbar. Das Grundwasser von SGM 5 (25 m uGOK), wo die untere Begrenzung der denitrifizierenden Schicht zu erwarten wäre, kann sich nicht signifikant von den anderen Messwerten in Richtung der durch Denitrifikation gekennzeichneten Grundwässer abheben. Der flache Messpunkt SGM 2 (10 m uGOK) zeigt dagegen erwartungsgemäß wieder eine deutliche Denitrifikationsbeeinflussung an.

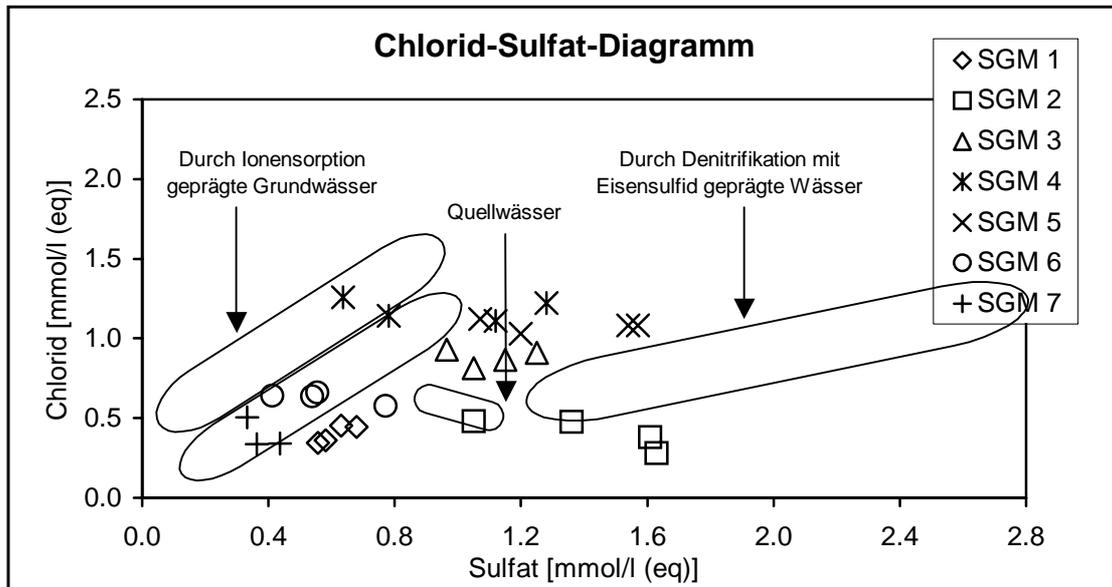


Abbildung 4-16: Messwerte der SGM-Messstelle im Chlorid-Sulfat-Diagramm.

Zur Interpretation bedarf es einiger Überlegungen, die das Diagramm betreffen. Die Grundlage dafür, dass ein Grundwasser in einem Chlorid-Sulfat-Diagramm als denitrifizierend eingestuft wird, beruht auf der Tatsache, dass durch lithotrophe Denitrifikation geprägte Grundwässer einen erhöhten Sulfatgehalt aufweisen. Zu bedenken ist dabei aber, dass umgekehrt nicht alle Grundwässer mit einem erhöhten Sulfatgehalt durch lithotrophe Denitrifikation geprägt sind.

Sulfat kann auf verschiedenen Wegen in das Grundwasser gelangen. Zum einen kann es aus geogenen Quellen, wie Gips- und Kohlelagerstätten ausgewaschen werden oder durch die Verwitterung sulfidischer Erze oder durch Denitrifikation über Pyrit entstehen. Zum anderen kann es aber auch als Dünger - sulfathaltige Dünger sind zum Beispiel Bittersalz oder Kaliumsulfat - auf den Boden aufgetragen werden. Durch Auswaschungsprozesse gelangt es dann ebenfalls ins Grundwasser. Wird ein so mit Sulfat kontaminiertes Grundwasser in ein Chlorid-Sulfat-Diagramm eingezeichnet, kann fälschlicherweise die Annahme entstehen, dass ein denitrifizierendes Grundwasser vorliegt. Das Problem der Chlorid-Sulfat-Diagramme besteht also darin, dass es zu Fehlinterpretationen kommen kann, wenn sulfathaltige Grundwässer nicht nach der Herkunft des Sulfats unterschieden werden.

In dem hier vorliegenden Fall befinden sich die Grundwassermessstellen inmitten einer landwirtschaftlichen Nutzfläche, die über lange Zeit intensiv genutzt wurde. Nachweislich sind neben nitrathaltigen auch sulfathaltige Dünger eingesetzt worden, wodurch es zu erhöhten Sulfateinträgen in das Grundwasser kam. Die hohen Sulfatgehalte bis in eine Tiefe von 20,6 m uGOK können demnach im Wesentlichen auf anthropogenen Eintrag zurückgeführt werden, da im Einzugsgebiet keine entsprechenden geogenen Quellen, wie z.B.

Gipslagerstätten, vorhanden sind. In der Tiefe von 20,6 bis 25,6 m uGOK kommt es dann zu einer Überlagerung des durch die Denitrifikation entstandenen Sulfats mit dem anthropogen eingetragenen. Das Grundwasser dieser Tiefe ist nach der Altersbestimmung (Anlage 4-3) zwischen 20 und 30 Jahren alt. Somit ist es in einem Zeitraum von 1970 – 80 entstanden und enthält damit noch nicht so hohe Sulfatkonzentrationen. Diese sind erst in den nächsten Jahren zu erwarten.

Vergleicht man jetzt jedoch die Sulfatkonzentrationen in 25,6 m Tiefe mit der in 10,6 m Tiefe (Abbildung 4-11) am Termin 20.05.2001, so stellt man fest, dass die Konzentrationen mit rund 82 mg/l gleich groß sind. Dadurch wird deutlich, dass der Sulfatgehalt in 25,6 m Tiefe aus zwei Komponenten bestehen muss, zum einen aus einem anthropogenen Anteil, zum anderen aus dem Endprodukt der lithotropen Denitrifikation. In den kommenden Jahren ist infolge der hohen Stoffkonzentrationen an Nitrat und Sulfat, die sich noch auf die reduzierende Schicht zu bewegen, mit höheren Sulfatwerten in 25,6 m Tiefe zu rechnen.

Abschließend kann festgehalten werden, dass eine Klassifikation der Grundwässer mit Hilfe eines Chlorid-Sulfat-Diagramms nur bei Differenzierung zwischen geogener bzw. anthropogener Sulfatquelle, eindeutige Klassifizierungen erlaubt. Auch müssen eventuelle Fehlerquellen, z.B. eine geogene Sulfatquelle in Form von Gipslagerstätten, vorher ebenfalls ausgeschlossen werden.

4.2.9 Vergleich der tiefenorientierten Betrachtungen mit den Einfachpegeln

Alle Pegel im Einzugsgebiet unterstützen die in den vorangegangenen Kapiteln aufgestellte Theorie.

Dass in den oberen sauerstoffgesättigten Grundwasserschichten kein Nitratabbau stattfindet, belegen die hohen Nitratgehalte von bis zu 300 mg/l. In den tieferen Schichten unter 25 m uGOK ist das Nitrat dagegen nicht mehr zu finden. Es muss demnach ein Abbau im dazwischen liegenden Bereich stattfinden.

In dem Gebiet, in welchem sauerstoffreiches Grundwasser schon in geringer Tiefe anzutreffen ist, weisen die Pegel deutlich niedrigere Nitratwerte auf. Ob man hier von einer Denitrifikation schon in den oberen Grundwasserschichten ausgehen kann, ist aufgrund der zu geringen Datenbasis nicht zu klären. Auf jeden Fall kann davon ausgegangen werden, dass die stark rückläufigen Nitratgehalte in den Pegeln P 483 und P 484 in erster Linie auf die landwirtschaftlichen Umstellungen des sie umgebenden Ackerlandes durch den Ökolandwirt Högemann zurückzuführen sind.

4.2.10 Gegenüberstellung der Ergebnisse

Kölle (1991) kommt in seinen Untersuchungen zum Nitratabbauvermögen des Aquifers Thülsfeld zu dem Ergebnis, dass Nitrat auch durch Ionensorptionsprozesse aus dem Grundwasser entfernt wird. Jedoch konnte er nicht nachweisen, dass Nitratkonzentrationen von mehreren 100 mg/l tatsächlich sorbiert werden können.

Die lithotrophe Denitrifikation wird von Kölle hauptsächlich aufgrund einer zu geringen Differenz der Sulfatkonzentrationen zwischen den Pegeln P 335 und P 336 (vertikaler Abstand 10 m) ausgeschlossen, da beim Abbau großer Nitratmengen auch eine stöchiometrisch große Menge an Sulfat entstehen muss. Hierin liegt das eigentliche Problem:

Es ist nicht möglich, zwei Konzentrationen aus unterschiedlicher Tiefe direkt miteinander zu vergleichen, zumal wenn wie hier die Tiefendifferenz 10 m beträgt. Der Altersunterschied der beiden Wässer beträgt nach der Grundwasserdatierung (Anlage 4-3) zirka 20 Jahre. Da der Düngereintrag im Gebiet vor allem in den achtziger und Anfang der neunziger Jahre stark anstieg, ist das jüngere der beiden Wässer auf jeden Fall stärker anthropogen mit Sulfat belastet, als das ältere. Um die beiden Wässer in Bezug auf die lithotrophe Denitrifikation direkt miteinander vergleichen zu können, muss man von beiden den Anteil des anthropogen eingetragenen Sulfats abziehen. Da das junge Wasser nur anthropogen eingetragenes Sulfat enthält, ergibt sich also ein Sulfatgehalt von null, bezogen auf die Denitrifikation. Das 20 Jahre ältere Wasser besitzt einen viel geringeren Anteil an anthropogen eingetragenen Sulfat und enthält in der Summe doch mehr Sulfat als das jüngere Wasser. Nach dem Abzug des anthropogenen Sulfatanteils bleibt also immer noch ein hoher Sulfatgehalt übrig, der auf die stattgefundene lithotrophe Denitrifikation zurückzuführen ist.

Im letzten Teil seines Berichts geht Kölle dann auch auf die Möglichkeit einer stattfindenden Denitrifikation über Pyrit ein, da der Aquifer pyrithaltig und eine lithotrophe Denitrifikation somit nahe liegend ist.

INCO (2001) kam zu dem Ergebnis, dass im Thülsfelder Aquifer eine organotrophe Denitrifikation stattfinden muss. Im Wesentlichen basiert dieses Ergebnis auf durchgeführten Batch- und Säulenversuchen. Bei der Auswertung der Daten der SGM-Mesststelle wurde ebenfalls eine organotrophe Denitrifikation identifiziert. Dies beruht auf einer beobachteten Verschiebung des Verhältnisses zwischen der Nitrat- und der Hydrogencarbonat-Konzentration. Anhand dieser Messwerte kann aber zu keinem Messtermin ein Anstieg der Hydrogencarbonat-Konzentrationen im Bereich der stattfindenden Denitrifikation, zwischen 20,6 und 25,6 m uGOK, festgestellt werden (vergleiche Abschnitt 4.2.7). Im Gegenteil, die Hydrogencarbonat-Konzentrationen in diesem Bereich sind fast immer rückläufig. Eine Verschiebung zum Hydrogencarbonat ist nur bei einem erhöhten Anteil der Äquivalentkonzentration von Hydrogencarbonat an der Summe der Äquivalentkonzentrationen zu verzeichnen. Diese Verschiebung erfolgt aber nur deshalb, weil die Menge der Anionen insgesamt abnimmt. Somit wird der Anteil der einzelnen Äquivalentkonzentrationen relativ größer. Eine echte Hydrogencarbonat-Zunahme ist erst mit dem Abbau des Sulfats zu erkennen, ist also die Folge einer Desulfurikation.

Die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit führen letztendlich zu dem Ergebnis, dass der Nitratabbau im Aquifer Thülsfelde durch eine lithotrophe Denitrifikation dominiert wird und untergeordnet eine organotrophe Denitrifikation abläuft. Untermuert wird dies auch noch durch die im Aquifer herrschenden pH-Werte von 4 - 6 und einem Redoxpotential von 200 bis 390 mV. Vergleicht man diese Werte mit dem pH/ E_h -Diagramm in Abbildung 4-17, so liegen sie genau im Bereich der lithotropen Denitrifikation. Zusammen mit den in Abschnitt 4.2.2 identifizierten Schichten, die organisches Material in Form von pyrithaltiger Braunkohle enthalten, bietet der Aquifer ideale Bedingungen für eine lithotrophe Denitrifikation.

4.3 Beispielhafte Ermittlung des Versauerungsstatus und der Auswirkungen von Aufforstung auf den Nitratreintrag in das Grundwasser

Zu Beginn der 90er Jahre begann der OOWV im Schutzgebiet der Brunnengalerie A des Wasserwerkes Thülsfeld mit Aufforstungsmaßnahmen. Zweck dieser Maßnahmen war der Schutz der Grundwasserressource vor landwirtschaftlichen Nährstoffeinträgen. Nach ca. 10

Jahren sollte eine Erfolgskontrolle durchgeführt werden, die zum einen die Auswirkungen der Aufforstung auf den Stickstoffaustrag aus dem Boden und zum anderen die Auswirkungen auf die Versauerung von Boden und Grundwasser aufzeigt. Nachfolgend ist die Untersuchung überblicksweise dargelegt. Ausführlich ist sie in Reinstorf u.a. (2002) enthalten.

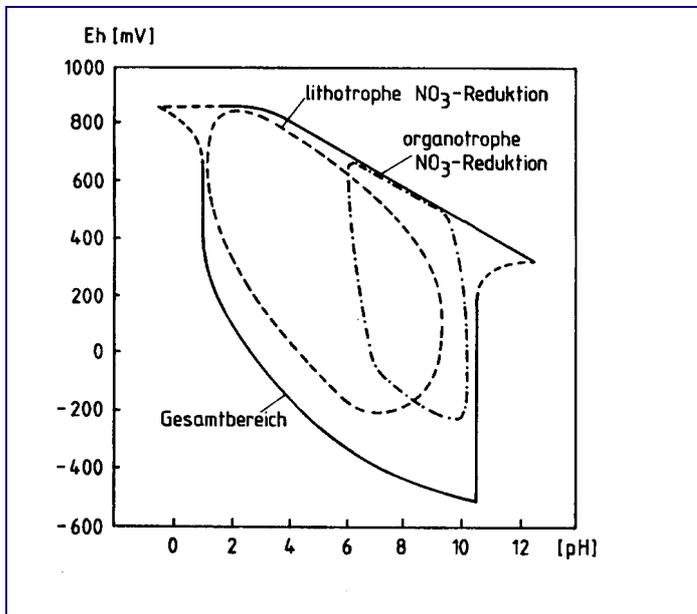


Abbildung 4-17: pH/Eh-Beziehung des Grundwassers und mögliche Reaktionen, in Anlehnung an Becking et al. (1960) (aus Walther, 1999).

4.3.1 Einführung

In der Aufforstung von ackerbaulich genutzten Grundwassereinzugsgebieten wird allgemein eine der Maßnahmen gesehen, die Emissionen aus der ackerbaulichen Bodennutzung nachhaltig zu vermindern. Dies betrifft vor allem Stickstoff in der Form von Nitrat aber auch die Hauptnährstoffe Phosphor und Kalium und die Begleitonen Chlorid und Sulfat zu. Nach Literatursauswertungen, liegt zum Beispiel die Auswaschung von Nitrat bei Laub- und Nadelholzbeständen im Mittel bei $< 10 \text{ mg/l NO}_3^-$ (Reinstorf, 1995). Im Einzelfall wurden aber auch bis 31 mg/l Nitrat gemessen. Es ist auch bekannt, dass im Bodensickerwasser unter Ulmen, Eschen, Pappeln, die symbiotisch Stickstoff der Luft entziehen, Konzentrationen bis $100 \text{ mg NO}_3^-/\text{l}$ auftreten können.

Ackerböden haben im Pflughorizont (0 - 30 cm) überwiegend organisch gebundene Stickstoffvorräte, die in mineralischen Böden um 3000 kg N / ha , aber auch bis 14000 kg N / ha liegen können. Diese Vorräte wurden in den vergangenen Jahrzehnten zur Steigerung der Bodenfruchtbarkeit systematisch aufgebaut. Aus diesen Vorräten wird auf der einen Seite zu ca. 20 - 70 % die Versorgung der Ackerfrüchte abgedeckt. Die Entzüge werden auf der anderen Seite über die Düngung wieder aufgefüllt. Wird die Ackernutzung aufgegeben, stehen den Mikroorganismen im ehemaligen Pflugbereich weiter diese Vorräte zur Verfügung, die sie jährlich aus der organisch gebundenen Form zu einem Anteil von ca. 5 % des gesamten Vorrates zu Ammonium und Nitrat mineralisieren. In dieser Bindungsform erfolgte die Ernährung der Pflanzen für die jedoch nun kein Bedarf mehr besteht. In dieser Form werden jetzt die mineralisierten Vorräte sukzessive mit dem Sickerwasser in die Tiefe

verlagert bis der Stickstoffvorrat des Bodens mit der neuen Vegetationsdecke in einem Gleichgewicht steht.

Bei der Anpflanzung von jungen Baumbeständen besteht anfangs nur ein geringer Stickstoffbedarf. Die Stickstoffvorräte des Bodens würden deshalb weiter über Jahre durch das mobilisierte Nitrat das Grundwasser belasten. Deshalb wird gleichzeitig neben der Anpflanzung der Baumbestände ein Unterbewuchs angebaut, der den überschüssigen Stickstoff des ehemaligen Ackerbodens verwertet. Zu dieser Vorgehensweise hatte sich der OOWV vor einigen Jahren bei der Umwandlung von Ackerflächen entschlossen.

Bei Aufforstung ist die Nährstoff - Auswaschung abhängig vom:

- Unterwuchs, z. B. Bodendecker, Buschvegetation vom
- Alter der Baumbestände und von der
- Art des Bestandes (Laub-, Nadelholz, Mischwald).

Die Baumart und die Bodenart sowie der Bodentyp sind nach vorliegenden Kenntnissen von eher untergeordneter Wirkung.

Aus vielen Untersuchungen aus dem Bereich der Waldforschung ist bekannt, dass Baumbestände in Abhängigkeit von der Baumart Luft getragene Stoffe auskämmen, die dann staubförmig oder mit dem Niederschlag auf dem Boden deponiert und mit dem Sickerwasser in die Tiefe verlagert werden können. Von Bedeutung für den Stoffhaushalt sind auf der einen Seite besonders die Stickstoff- und Schwefelverbindungen, die über Nitrat und Sulfat das Grundwasser belasten können und gleichzeitig als Säurebildner wirken und auf der anderen Seite Luft getragene Metalle, die bei sinkenden pH-Werten mobilisiert und ebenfalls in die Tiefen transportiert werden können. Hinzu kommt, dass durch eine Verringerung der pH-Werte bodenbürtige Metalle wie Eisen, Mangan, Nickel verstärkt freigesetzt werden können. Das Ziel der Untersuchungen war festzustellen, inwieweit die vermuteten Auswirkungen der Aufforstungen im Gebiet der Fassung A des Wasserwerkes Thülsfeld nachweisbar sind. Das sind zusammengefasst:

- Die Höhe der Nitratbelastung unmittelbar nach der Aufforstung und der Verlauf der nächsten Jahre und
- eine eventuell vorhandene Versauerungstendenz, die sich auf die Sickerwasserbeschaffenheit nachteilig auswirkt.

4.3.2 Das Untersuchungskonzept

Im Rahmen der Sicherung der GW-Qualität wurden seit Beginn der 90er Jahre im Gebiet des Wasserwerkes Thülsfeld im Anstrom der Förderbrunnen der Fassung A (Abbildung 4-18) durch den OOWV landwirtschaftliche Flächen aufgekauft, um sie von der Forstverwaltung wieder aufforsten zu lassen. Andere Maßnahmen waren z.B. das Überführen von landwirtschaftlichen Flächen zur extensiven Nutzung bzw. Förderung des ökologischen Landbaus in der Schutzzone III der Galerie A. Diese Maßnahme soll auf längere Sicht hin die Stoffauswaschungen aus diesen Flächen vor allem an Nitrat und anderen Ionen vermindern. So soll die Grundwasserqualität nachhaltig gesichert werden.

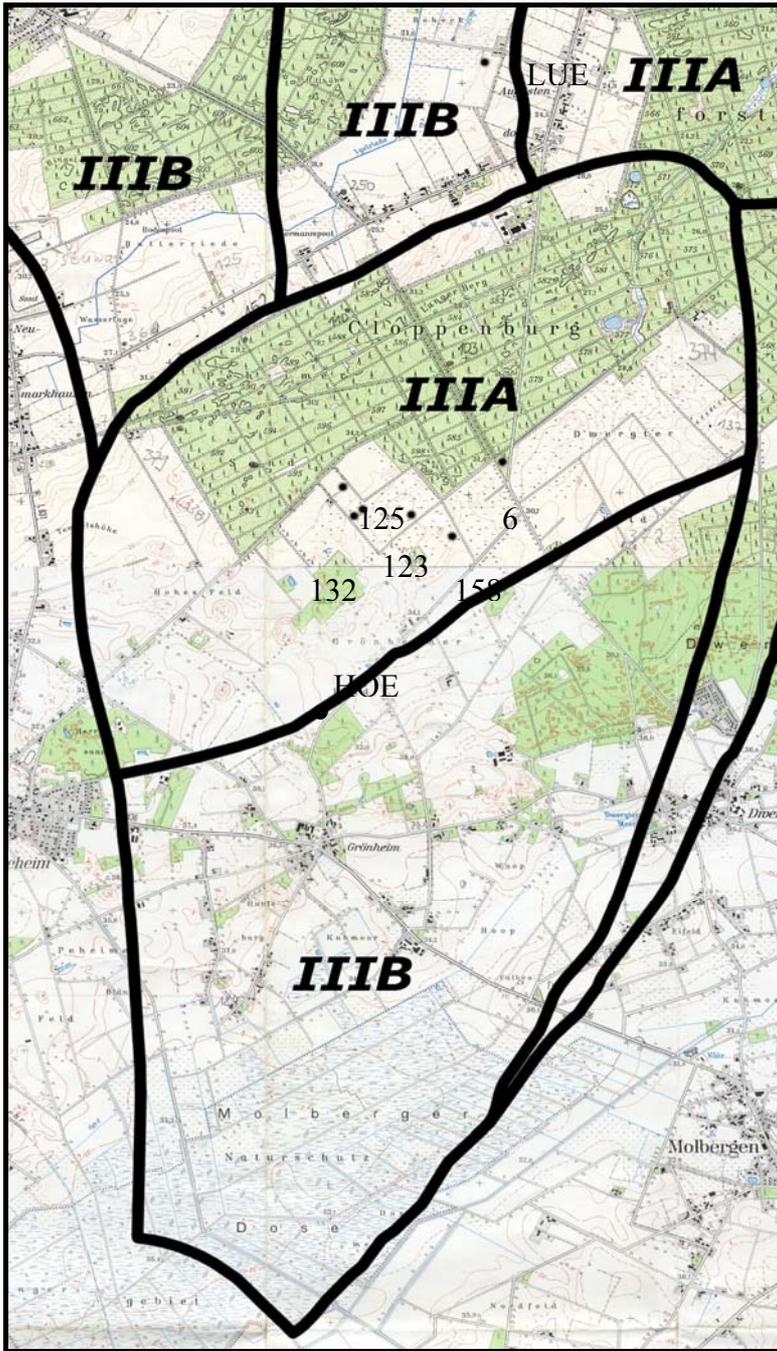


Abbildung 4-18: Übersichtskarte des Untersuchungsgebietes mit Probenahmepunkten.

Die Auswirkungen der Aufforstung sowohl auf den Nitrataustrag der entsprechenden Flächen als auch erste Anhaltspunkte zu möglichen Versauerungstendenzen sollen untersucht werden. Da für die Durchführung nur geringe finanzielle Mittel und wenig Zeit zur Verfügung standen, war die Beobachtung einzelner Aufforstungsflächen über einen längeren Zeitraum, z.B. mehrere Jahre mit wiederholten Untersuchungen an den gleichen Standorten, nicht möglich.

Es wurde deshalb folgendes Untersuchungskonzept vorgeschlagen:

Die Untersuchungen sollen an mehreren Standorten auf unterschiedlich alten Aufforstungsflächen durchgeführt werden. Damit konnten die Untersuchungen an neu aufgeforsteten und an bis zu 9 Jahre alten Beständen durchgeführt werden. Dies wird als *Dendro-Chronosequenz* bezeichnet. Die Untersuchung des Altbestandes im Bereich der

Fassung A, als Vergleichsfläche, sollte auf Wunsch des OOWV nicht erfolgen. Es wurde deshalb eine konventionell landwirtschaftlich und eine ökologisch bewirtschaftete Fläche hinzugezogen. Insgesamt ermöglicht die beschriebene Vorgehensweise eine Aussage über den Zeitraum von 9 Jahren Aufforstungsgeschichte in Thülsfeld.

Es muss erwähnt werden, dass folgende Annahmen getroffen werden mussten:

- Der durch die Dendro-Chronosequenz geschaffene Untersuchungszeitraum von 10 Jahren Dauer ist für die abschließende Beurteilung von Versauerungserscheinungen noch zu kurz.
- Die unterschiedliche Zusammensetzung der Jungbestände konnte nicht berücksichtigt werden. Es musste angenommen werden, dass diese keinen Einfluss ausübt.
- Die durchaus vorhandene Bodenheterogenität der unterschiedlichen Standorte musste vernachlässigt werden.

Es wurden 5 aufgeforstete Flächen unterschiedlichen Alters (3- (Fläche 132), 5- (Fläche 123), 7- (Fläche 158) und 9-jährig (Flächen 6 und 125)) und zwei Ackerflächen HOE und LUE als Vergleichsflächen zur näheren Untersuchung ausgewählt. Die Lage der Flächen ist in Abbildung 4-18 eingezeichnet. Die Fläche HOE wird ökologisch landwirtschaftlich bewirtschaftet, die Fläche LUE konventionell. Es wurden Bohrsondierungen im Juli/September 2000, im Mai 2001 und im Oktober 2001 durchgeführt, um Aufschluss über den Aufbau der ungesättigten Zone bis zum Grundwasser zu erlangen und gleichzeitig Bodenproben für die weitere Bearbeitung im Labor zu gewinnen. Aus Kostengründen wurden jedoch nicht alle Flächen an allen Terminen beprobt. Folgende Beprobungen wurden durchgeführt (Tabelle 4-3).

Es wurden 6 Temporärpegel zur Entnahme von Grundwasserproben mit Teufen zwischen 7 – 9 m errichtet.

Alle angewendeten Methoden sind in Abschnitt 2.1.5 erläutert.

4.3.3 Zusammenfassende Bewertung der Ergebnisse

Die nachfolgende Bewertung erfolgt auf der Basis der Untersuchungen an der Gleichgewichtsbodenlösung. Es werden die Bewertungskriterien nach Ulrich (1981a) angewendet.

Für die anstehenden Laborversuche wurden 6 Tiefen bei jeder Bohrung festgelegt, von denen das Material untersucht werden sollte. Es wurden die gleichen Tiefen bei jeder Fläche ausgewählt. So ergab sich folgende Tiefeneinteilung:

- 0,0 - 0,5 m
- 0,5 - 1,0 m
- 1,0 - 2,0
- 2,5 - 3,5
- 4,0 - 5,0
- letzte Schicht je nach Tiefe der Bohrung

Die auf den untersuchten Flächen vorliegenden **Sedimente** setzen sich zu größten Teil aus Feinsand, geringen Mengen Mittelsand und Schluff zusammen. In einzelnen Tiefen konnten bei den Probenahmen schluffreichere Schichten von geringer Mächtigkeit gefunden werden. Diese Zusammensetzung entstand hauptsächlich durch die verschiedenen Eiszeiten, die dieses Gebiet beeinflussten und Gesteinsmaterial ablagerten (pleistozäne Sande und Flugsande). Aufgrund der Entstehungsgeschichte sind diese Materialien arm an Feinmaterial, wie Ton und

Schluff, an Carbonaten und Silicaten was sich negativ auf das Puffervermögen und den Basenvorrat auswirkt.

Tabelle 4-3: Beprobungstermine und Anzahl der Bohrsondierungen.

4.3.3.1 Probennahmetermin	25.07.00¹⁾	13./ 27.09.00¹⁾	22.05.01	17.10.01	Bemerkungen:
Fläche					Aufforstung in
125	2x			2x	1991 (Alter: 9a)
158	1x	1x		2x	1993 (Alter: 7a)
123		2x	1x		1995 (Alter: 5a)
132		2x	1x		1997 (Alter: 3a)
6		2x	1x		1991 (Alter: 9a)
HOE		2x			Kartoffel
LUE			1x		Mais

¹⁾ Termine zusammengefasst zu „2000“

Das **Grundwasser** wurde nur auf der Ackerfläche HOE in ca. 4,50 m Tiefe und auf Fläche 6 in ca. 5,80 m Tiefe in Form von Klopfwasser angetroffen. Zu den Probennahmeterminen konnte jedoch kein Wasser aus dem installierten temporären Pegel entnommen werden. Bei den anderen Flächen wurde das Grundwasser nicht erreicht.

Entsprechend der vorgefundenen und mittels Siebung bestätigten Gesteinsverteilung, liegen die **k_f-Werte** im Größenbereich von 10^{-4} ... 10^{-5} m/s, was auf eine gute Durchlässigkeit des Gesteinsmaterials hindeutet.

Die ermittelten **Wassergehalte** (w_a) des Bodenmaterials haben meist das Maximum in der obersten Bodenschicht und fallen dann rasch mit zunehmender Tiefe ab. Oft ist in der letzten Schicht aber ein Wiederanstieg zu erkennen (w_a -Werte von 16...20 %), der auf anstehendes Grundwasser hindeutet. Das erbohrte Material der Ackerflächen HOE und LUE besitzt aufgrund von Beregnungsmaßnahmen im Vergleich zu allen anderen Flächen durchgehend relativ hohe Wassergehalte (11,8...20,9 % bzw. 20,1...36,5 %).

Organisches Material findet sich aufgrund der Streu- und Humusbildung in bedeutendem Umfang ausschließlich in der obersten Bodenschicht (0...0,5 m). Hier liegen die Werte des Glühverlustes bei 3,0...5,2 %. In den tiefer liegenden Schichten sinken sie in den meisten Fällen auf Werte unter 1 % ab. Der höchste Wert liegt in der obersten Schicht der Ackerfläche HOE mit 5,2 %; bei den aufgeforsteten Flächen mit 4,6 % in der ersten Schicht der 9 Jahre alten Fläche 6. Mit 3,0 % weist die jüngste aufgeforstete Fläche 132 (3 Jahre alt) den geringsten Glühverlust im Oberboden auf. Die Fläche LUE wurde nicht untersucht.

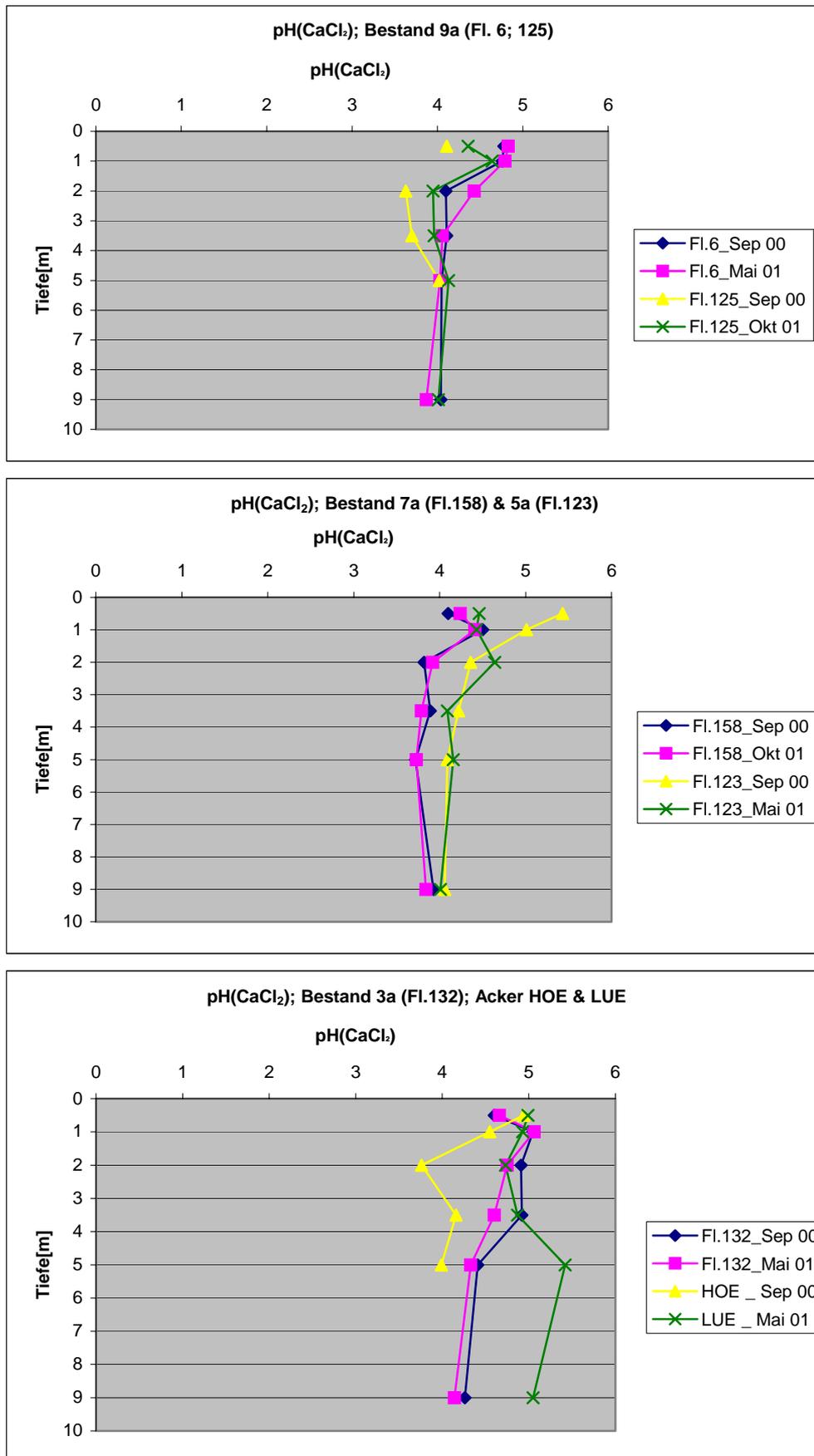


Abbildung 4-19: Tiefenprofile der pH(CaCl₂)-Werte aller Untersuchungsflächen.

Erste Hinweise auf eine mögliche vorhandene Versauerung eines Bodens lassen sich anhand der gemessenen **pH(CaCl₂)-Werte** der Bodenlösung finden (Abbildung 4-19). Dabei zeigen sich unterschiedliche Verhältnisse bei den einzelnen beprobten Flächen. Generell sollte das typische Versauerungsprofil oben geringere pH-Werte aufweisen als in der Tiefe. Wenn jedoch eine Bodenmelioration stattgefunden hat, z.B. Kalkung, kann der Boden an der Oberfläche höhere pH-Werte aufweisen als in der Tiefe. Dies könnte die eindeutige Abnahme der pH-Werte mit zunehmender Tiefe auf den Flächen 123, 6 und der Ackerfläche HOE erklären. Im Bohrprofil der Fläche 158 sinken die pH-Werte ebenfalls bis in eine Tiefe von 5,0 m, steigen aber innerhalb der letzten Schicht wieder an, um etwa 0,2 pH-Einheiten.

Fläche 132 hingegen zeigt eine Zunahme um knapp 0,4 pH-Einheiten von der ersten (0,0 bis 0,5 m) zur zweiten Bodenschicht (0,4 bis 1,0 m). In den darunter liegenden Schichten kommt es wieder zum Absinken der pH-Werte. Bei Fläche 125 ist innerhalb der oberen drei Schichten (0,0 bis 2,25 m) eine Abnahme der Werte zu verzeichnen, bis in 5,0 m Tiefe aber wieder ein Anstieg auf ca. pH 4,02, bleibt damit aber noch deutlich unter dem pH des Mutterbodens von 4,11.

Die niedrigsten pH-Werte zeigt über alle Tiefen die 7 Jahre alte Aufforstungsfläche 158 (deren Werte von 4,98...4,36 reichen), gefolgt von der 9 Jahre alten Fläche 6. Trotz des gleichen Zeitpunktes der Aufforstung 1991 zeigt Fläche 125 Werte die im Mittel etwa 0,5 pH-Einheiten höher liegen, als die der Fläche 6. Dies wird auf Unterschiede bei der früheren Bewirtschaftung und räumliche Heterogenitäten bei der Bodenentwicklung zurückgeführt. Es lässt sich also feststellen, dass sich das Material aller Bohrungen, zum größten Teil schon im mäßig sauren Bereich befindet. Damit wird es bei weiter voranschreitender Versauerung zur verstärkten Mobilisierung von Aluminium und später auch der festgelegten Schwermetalle kommen. Das hätte dann entsprechende Auswirkungen auf die Trinkwassergewinnung aus den Grundwasservorräten zur Folge.

Genauere Aussagen über Vorgänge der Versauerung lassen sich anhand der Zusammensetzung der in der Bodenlösung (so genannte Gleichgewichtsbodenlösung, GBL) vorhandenen Ionen und der Belegung der Austauscheroberflächen der Festgesteinmatrix mit Basen (Basensättigung) finden. Dies ist ausführlich in Reinstorf et al., 2002 beschrieben. Hier soll nicht auf die Bewertung der metallischen „Nichtnährstoff“-Kationen eingegangen werden, sondern nur auf die Nährstoff-Anionen und -Kationen.

Ein auf allen Flächen ähnliches Verhalten zeigen ebenfalls die basischen Kationen, vor allem **Calcium** (Ca²⁺) und **Kalium** (K⁺). Während bei Calcium eine Abnahme der Werte in der Gleichgewichtsbodenlösung (GBL) mit zunehmender Tiefe festzustellen ist, nehmen bei Kalium die Werte, abgesehen von einem leichten Rückgang bei 0,5 bis 1,0 m Tiefe, beständig mit der Tiefe zu. Können die niedrigeren Werte in den oberen Schichten durch die Nährstoffaufnahme der gepflanzten Bäume und des Unterwuchses zurückzuführen sein? Benecke et al. (1992) stellten ebenfalls nach Vorbehandlung (Fräsen, teilweise Kalkung) von aufzuforstenden Flächen niedrige Kalium-Konzentrationen in der Bodenlösung im Oberboden und erhöhte Kalium-Konzentrationen in tieferen Schichten fest und schlossen auf einen „abklingenden Kalium-Freisetzungs- und Auswaschungsschub“. Möglicherweise ist dieser hier im Zusammenhang mit landwirtschaftlicher NPK-Düngung in der Vergangenheit zu sehen. Die höheren Ca²⁺-Werte im oberen Teil des Profils fallen zusammen mit den dort ebenfalls hohen HCO₃⁻-Werten, die auch mit zunehmender Tiefe zurückgehen. Dies kann entweder durch Pufferreaktionen von CaCO₃ herbeigeführt werden, bei denen Ca²⁺ und HCO₃⁻ in die Bodenlösung freigesetzt werden. Reaktionen dieser Art laufen aber nur in kalkhaltigen Böden ab (Restgehalte aus der landwirtschaftlichen Nutzung?). Eine andere Möglichkeit ist die Kohlensäureproduktion durch CO₂-Atmung im Wurzelraum bei der

HCO_3^- entsteht und ausgewaschen werden kann. Dies erfolgt oft mit basischen Kationen wie Ca^{2+} .

Natrium und Magnesium zeigen nicht so starke Gehaltsschwankungen in der Bodenlösung im Profilverlauf. Magnesium weist von den basischen Kationen auf allen Flächen die niedrigsten Werte in der GBL auf. Bei den basischen Kationen besitzt die Fläche 123 (außer bei K^+) von allen aufgeforsteten Flächen die höchsten Werte in der GBL. Gleichzeitig zeigen sich hier auch hohe KAK_{ges} und Basensättigungswerte.

Auffällig ist das Verhalten von **Sulfat**, bei dem in allen Bohrprofilen steigende Werte mit größerer Tiefe zu beobachten sind. Der Maximalwert auf den aufgeforsteten Flächen wurde mit 11,8 mg/L in Tiefe 4,0 bis 5,0 m auf Fläche 132 gemessen. Unter der Ackerfläche lag der Maximalwert bei 11,5 mg/L in 4,0 bis 5,5 m Tiefe. Ähnliche Ergebnisse stellten, wie schon beim Verhalten von Kalium, Benecke et al. (1992) bei ihren Untersuchungen auf Aufforstungsstandorten fest, d.h. eine Zunahme der Sulfatwerte mit der Tiefe. Teilweise konnten sie es auf eine Kalidüngung (K_2SO_4) auf einzelnen untersuchten Flächen, Sulfateinträge und eine mögliche Auflösung von Al-Hydroxosulfat Verbindungen zurückführen, was allein aber nicht die Menge an Sulfat erklären konnte.

Erklärungen für die Zunahme der Sulfatwerte in der Bodenlösung mit der Tiefe könnten u.a. die Adsorption von Sulfat an im oberen Teil der Profile vorhandenen Eisen- und Aluminiumoxiden (u.a. Linkersdörfer & Benecke, 1987), Auswaschung von mobilem SO_4^{2-} , vor allem im Winterhalbjahr (geringe Adsorption bei pH-Werten über 5), das sich nun in diesen Tiefen befindet, Aufnahme im oberen Boden als Nährstoff für die Pflanzen- und Baumbestände.

Ammonium (NH_4^+) ist meist mit dem höchstem Wert in der GBL der obersten Schicht (bis 0,5 m) zu finden. Im restlichen Profil sinken die Werte dann auf niedriges Niveau ab. Aber es ist zumindest im ganzen Profil nachweisbar (Verlagerung in die Tiefe wegen guter Durchlässigkeit des Bodenmaterials.). Ausnahme bildet die Ackerfläche HOE mit Maxima in der obersten Schicht (0,0 bis 0,3 m) und in der letzten Schicht (4,0 bis 5,5 m), was wahrscheinlich auf die eingesetzten organischen Düngemittel zurückzuführen ist.

Nitrat (NO_3^-) zeigt ein uneinheitliches Verhalten (Abbildung 4-20); teilweise Maximum in der obersten Schicht und Absinken auf niedrige Werte mit der Tiefe, teilweise ist aber auch ein Wideranstieg in den unteren Schichten zu erkennen (Flächen 125, 158, 132). Es lässt sich jedoch zeigen, dass die NO_3^- -Konzentrationen auf den 9 Jahre alten Flächen 6 & 125 im Vergleich zu den 7 & 5 Jahre alten Flächen 158 & 123 niedriger sind. Auf der 3 Jahre alten Fläche 132 und auf HOE und LUE sind die Konzentrationen gravierend höher (teilweise ca. doppelt so hoch) als auf allen anderen untersuchten Flächen. Die Nitratprofile von 132 und HOE sind im oberen Bereich (bis 3 m Tiefe) ähnlich. In der Tiefe zeigt sich auf Fläche 132 jedoch ein Konzentrationsmaximum, während die Werte auf Fläche HOE stark sinken. Dies liefert noch einen Anhaltspunkt für eine verstärkte N-Auswaschung nach der Aufforstung. Die Werte von LUE liegen im Oberboden mehr als doppelt so hoch im Vergleich zu HOE, ab 1 m Tiefe sind die Konzentrationen ähnlich.

Insgesamt gesehen befinden sich die Werte der beiden Stickstoffverbindungen Nitrat und Ammonium auf den 9, 7 und 5 Jahre alten Bestandesflächen mit Konzentrationen von durchweg < 20 mg Nitrat/l (bezogen auf Feldkapazität (Fk)) und Ammonium $< 1,6$ mg/l (bezogen auf GBL) in der Schicht 0 - 0,5 m auf niedrigem Niveau. Relevante Nitratkonzentrationen konnten nur bei LUE mit 307 mg/l (bezogen auf Fk) und bei HOE mit 48,8 mg/l in 0 - 0,5 m Tiefe gefunden werden.

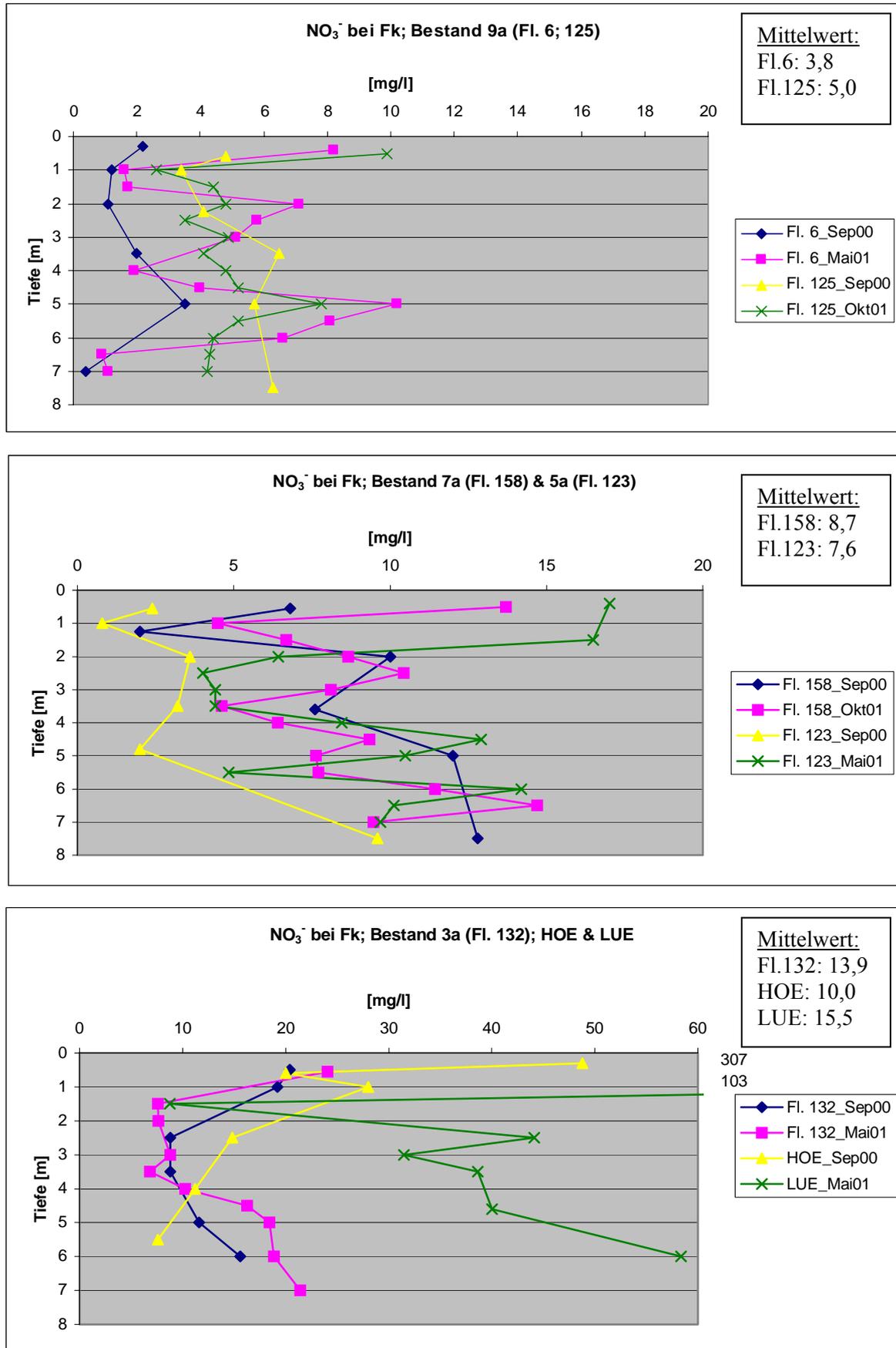


Abbildung 4-20: Tiefenprofile der Nitratkonzentrationen aller Untersuchungsflächen; „Fk“ bedeutet „Feldkapazität“.

Erklären lässt sich das für die Bestandesflächen nur durch einen zügigen Abbau bzw. Pflanzenaufnahme beider Verbindungen im Oberboden der aufgeforsteten Flächen, bzw. durch eine verstärkte Pflanzenaufnahme in der Vegetationszeit, besonders im Falle des Nitrat, dessen Gehalte in der Bodenlösung maßgeblich u.a. durch den Pflanzenentzug mitbestimmt werden (Mengel, 1984).

Eine Zusammenschau der Werte aller Ionen in der GBL der Ackerfläche HOE zeigt ein differenziertes Bild. Zu erwarten sind hier durchgehend höhere Konzentrationen der einzelnen Ionen als auf den nicht bewirtschafteten Aufforstungsflächen. So ist es hier aber nicht bei allen im Labor bestimmten Ionen der GBL. Höhere Werte auf der Ackerfläche treten nur bei Cl^- (4,7 mg/l), NO_3^- (12,2 mg/l), Na^+ (4,4 mg/l) und bei SO_4^{2-} auf. Aber gerade bei den wichtigen basischen Kationen Ca^{2+} , Mg^{2+} und K^+ finden sich im Vergleich mit den anderen Flächen nur durchschnittliche Werte. Möglicherweise liegt das an der „ökologischen“ Bewirtschaftungsweise, die allein auf organische Dünger setzt bzw. auch am höheren Nährstoffbedarf der Kulturpflanzen und Ernteverlusten.

In der folgenden Tabelle 4-4 wird ein zusammenfassender Überblick über die Schwankungsbreiten der Konzentrationen ausgewählter Nährstoffe gegeben.

Tabelle 4-4: Schwankungsbreiten der Konzentration ausgewählter Ionen in der Gleichgewichtsbodenlösung (GBL) bzw. bei Feldkapazität, im Falle von Nitrat [mg/l].

Fläche	Konzentrationen [mg/l]						
	$\text{NH}_4^{+1)}$	NO_3^-	$\text{PO}_4^{3-1)}$	$\text{P}_{\text{ges}}^{1)}$	$\text{K}^{+1)}$	$\text{Cl}^{-1)}$	$\text{SO}_4^{2-1)}$
	bei Fk						
125	1,06...0,09	25,4...2,8	1,99...u.N.	-	6,1...3,4	2,8...0,8	9,0...3,2
6	0,655...0,048	12,6...1,0	1,46...u.N.	0,46...0,05	7,25...1,2	2,2...0,3	8,7...1,2
158	1,55...0,077	14,7...2,0	3,6...u.N.	1,5...u.N.	6,7...0,94	3,5...0,7	11,3...2,2
123	0,573...0,05	16,5...0,8	2,2...u.N.	1,15...u.N.	7,3...2,3	1,4...0,6	10,0...1,5
132	0,391...0,071	24,0...8,8	3,3...u.N.	1,5...u.N.	11,0...3,9	1,4...0,3	11,8...3,0
HOE	0,784...0,083	48,8...7,6	1,22...u.N.	0,39...u.N.	8,75...2,1	4,7...1,5	11,5...4,7
LUE	3,62...0,11	307,0...8,8	-	0,23...u.N.	15,7...3,95	7,2...3,0	17,6...6,6

¹⁾ Konzentrationen in GBL

u.N. ... unter Nachweisgrenze

Es kann festgestellt werden dass, unter Berücksichtigung vorhandener Standortheterogenitäten und unterschiedlicher Bestandesstrukturen auf den Aufforstungsflächen, sich bei zunehmendem Baumalter ein Trend mit abnehmenden Werten der **Basensättigung anhand der GBL-Untersuchung** abzeichnet (Abbildung 4-21). So sind bei den ältesten untersuchten Beständen kaum BS-Werte > 40 % zu finden. Die jüngsten Bestände ähneln in der BS den Ackerstandorten und haben im Mittel ca. 40 %. Die niedrigsten Werte der Basensättigung finden sich auf den Flächen Nr. 125 (9 Jahre alter Bestand) und 158 (7 Jahre alter Bestand) mit Werten von rund 7,2...36 % BS. Die höchsten Werte auf der Fläche 123 (5 Jahre alter Bestand) und Fläche 132 mit rund 39,2...66,2 % BS.

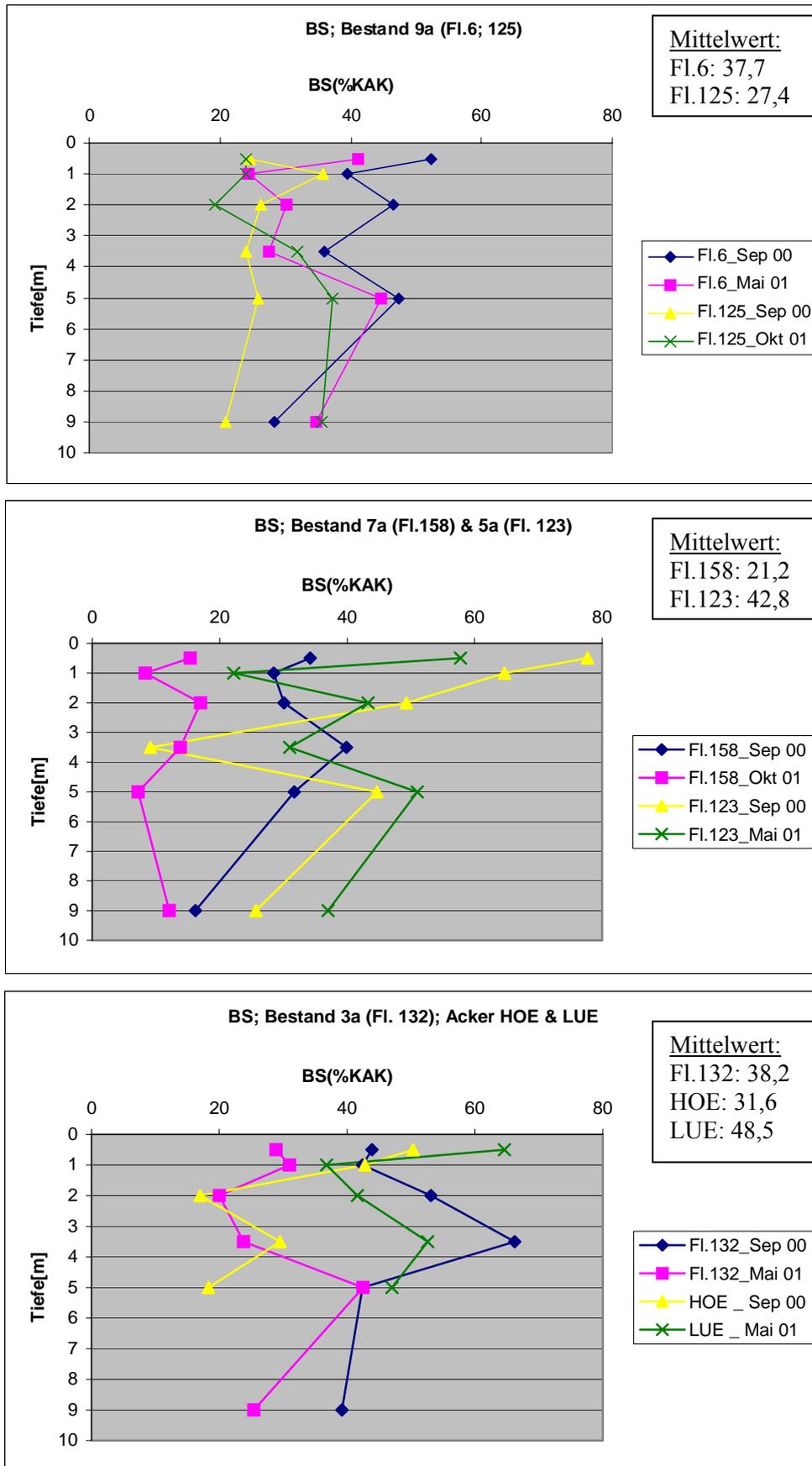


Abbildung 4-21: Tiefenprofile der Basensättigung aller Untersuchungsflächen.

Geht man davon aus, dass Böden mit Werten der Basensättigung von unter 80 % als versauert anzusehen sind (so genannte „Initialphase“ der Versauerung d.h. Übergang vom Silicat- zum

Austauschpufferbereich; nach Ulrich & Malessa 1989, Malessa 1997), dann befinden sich selbst die Ackerböden HOE und LUE schon in der Anfangsphase der Bodenversauerung (Basensättigung bei ~18..65 %). Das die Werte der Basensättigung auf diesen ehemals landwirtschaftlich genutzten Flächen schon nach ein paar Jahren teilweise so gering ausfallen ist überraschend. Erklärungen für diese Tatsache dürften einerseits die von vornherein geringe „Basenausstattung“ des Gesteins sein und andererseits wohl auch an der guten Durchlässigkeit des Gesteins liegen, die schnelle Stoffverlagerungen mit dem Sickerwasser begünstigt. Die Unterschiede bei den Werten der KAK_{pot} und der Basensättigung erklären sich mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht hauptsächlich aus dem unterschiedlichen Alter der aufgeföresteten Bestände sondern eher aus ihrer vorherigen Bewirtschaftungsgeschichte und Unterschieden bei der bodengeschichtlichen Entwicklung (z.B. durch verschiedene Höhenlagen die hier nicht berücksichtigt wurden).

In engem Zusammenhang mit der BS steht die **Pufferkapazität (PK)** der Böden. Die ermittelten Werte (Reinstorf u.a., 2002) zeigen ein ähnliches Verhalten und weisen insbesondere im Oberboden bei den älteren Beständen niedrigere Werte in Vergleich zu den jüngeren Beständen auf. Es kann geschlussfolgert werden, dass sich die PK des Oberbodens nach ca. 9 Jahren dem niedrigen Niveau des Unterbodens angeglichen hat.

Die in Reinstorf u.a. (2002) dargestellten **Ionenanteile** an der Ionensumme zeigen mit zunehmendem Alter des Aufförestungsbestandes einen abnehmenden Nitratanteil. Gleichzeitig nimmt die Bedeutung von Sulfat und Chlorid zu. Auf der Kationenseite hat jeweils Kalium einen relativ hohen Anteil, insbesondere in den unteren Tiefen, oben sind jeweils relativ hohe Calciumwerte charakteristisch. Auffällig sind die hohen Aluminiumkonzentrationen in Tiefen bis zu 3,5 m aber vor allem auch in den ersten 0,5 m.

Abschließend soll erwähnt werden, dass es natürlich günstiger wäre, zeitliche Verläufe von bodenchemischen Prozessen auf den gleichen Flächen über längere Zeiträume (z.B. mehrere Jahrzehnte) durchzuführen. So könnten Standortheterogenitäten eher vernachlässigt werden. Die Ergebnisse zeigen jedoch, dass die gewählte Vorgehensweise durchaus plausible Aussagen zu Veränderungen oder Versauerungserscheinungen liefert. Natürlich wird das Nitratproblem auf den aufgeföresteten Flächen in der naher Zukunft an Bedeutung verlieren, andererseits werden Versauerungserscheinungen an Bedeutung gewinnen (z.B. sind die Bäume heute noch viel zu klein, um schon einen spürbaren „Auskämmeffekt“ für Luftschadstoffe aufzuweisen). Bestätigt wird diese Tatsache durch Untersuchungen von Kubiniok & Müller (1993, 1994) auf Aufförestungsflächen ehemaliger Ackerstandorte, bei denen deutliche Bodenveränderungen sich erst nach 60 bis 80 Jahren bemerkbar machen würden (jüngste untersuchte aufgeförestete Ackerflächen bei deren Untersuchungen waren rund 30 Jahre alt!).

4.3.4 Aufförestung als Grundwasserschutz

Es ist sinnvoll durch Extensivierungsmaßnahmen und Landnutzungsänderungen die Belastung der Grundwasserressourcen durch Stoffeinträge der Landwirtschaft (Dünger, Gülle, PBSM etc.) zu verringern. Dabei ist zu überlegen, welcher Nutzung die ehemals landwirtschaftlichen Flächen zugeführt werden sollen. Vor allem im Hinblick darauf, wie die zukünftige Nutzung den Stoffhaushalt des Gebietes beeinflusst bzw. ob das Grundwasser dadurch be- oder entlastet wird.

Für die Aufförestung ehemaliger Ackerflächen sprechen die im Gegensatz zu intensiv genutzten Ackerflächen geringeren Stoffausträge aufgrund wegfallender Düngemaßnahmen und verringerter Erosionsgefahr. Wälder spielen im Kohlenstoffkreislauf eine bedeutende

Rolle und wirken dem Treibhauseffekt entgegen und, nicht zu vergessen, haben Wälder eine wichtige Bedeutung als Erholungsgebiete.

Ehemalige Ackerflächen eignen sich aufgrund der großen Nährstoffvorräte i.a. gut für die Aufforstung. Auch weisen sie im Vergleich zu anderen Landnutzungsformen noch relativ günstige pH-Werte aufgrund früherer Dünge- und Kalkungsmaßnahmen auf. Dies ist vor allem für Laubbaumbestände günstig, die anspruchsvoller als Nadelbaumarten sind. Außerdem besitzen Laubbäume im Gegensatz zu Nadelgehölzen besser abbaubare Streu und Wurzeln, was sich günstiger auf die Bodeneigenschaften auswirkt.

Es wird zwar nicht bestritten, dass in Waldgebieten nicht mehr mit dem Eintrag von Düngemitteln und PBSM wie in der konventionellen Landwirtschaft zu rechnen ist. In Regionalverband Neckar-Alb (1998) wird aber darauf hingewiesen, dass z.B. seit Mitte der 80er Jahre die Nitratwerte unter Waldbeständen deutlich höher als die unter Grünland sind, was dort auf die atmosphärische Deposition, Bewirtschaftungs- und Kalkungsmaßnahmen zurückgeführt wird. Als größter Nachteil von Waldbeständen in Wasserschutzzonen wird die Eigenschaft der Bäume angesehen, Schadstoffe in der Atmosphäre auszufiltern, was eine Anreicherung im Bestandsniederschlag zur Folge hat und eine Belastung des Bodens. Zu bemerken ist ebenfalls, dass unter Wald die Grundwasserneubildung aufgrund der Interzeption und der höheren Evapotranspiration geringer ist als z.B. unter Grünland (Regionalverband Neckar-Alb, 1998; Dohrenbusch, 1996). Mittels Modellrechnungen konnte gezeigt werden, dass unter Fichtenwäldern im Vergleich zu Brachland der Abfluss um mehr als die Hälfte und die GW-Neubildung um ein Drittel niedriger lagen. Unter Laubwäldern war der Rückgang nicht ganz so stark (Meuser, 1990, aus Dohrenbusch, 1996). Es kommt in jedem Fall zu einem Rückgang des nutzbaren Wasserdargebots.

Kritisch äußern sich auch Haas et al. (1998) in Bezug auf Aufforstungsmaßnahmen zum Zwecke des GW-Schutzes. Fazit ihrer Untersuchungen (die sich leider nur auf das Problem der Nitratbelastung beschränkten) war, dass unter aufgeforsteten Ackerflächen eine höhere Gefährdung des GW durch Nitrataustrag vorliegt. Es wurden in mehreren Fällen hohe Nitratkonzentrationen festgestellt (150 bis 600 kg Nitrat-N in 0 bis 150 cm Bodentiefe, 50 bis 1150 mg Nitrat/l im Sickerwasser), wobei jüngere Bestände geringere Nitratwerte als ältere Bestände aufwiesen. Fragen blieben aber dahingehend offen, welche Anteile die ehemalige Ackernutzung, atmosphärischer Eintrag und Aufkonzentrierung in Wäldern an den hohen Nitratwerten haben. Empfohlen wird die Neuanpflanzungen so vorzunehmen, dass sich eine möglichst dichte Strauch- und Krautschicht entwickeln kann, die die im Boden vorliegenden Stickstoffvorräte zehrt und so einem Austrag von Nitrat entgegenwirkt. Als Alternative zu Aufforstungen wird Wiesennutzung vorgeschlagen, die in den Untersuchungen von Haas et al. (1998) den geringsten Nitrataustrag aufzuweisen hatte. Zu ähnlichen Ergebnissen kamen auch Brückner u.a. (aus Rehfuss, 1990), die eine 80jährige Fichten-Erstaufforstung unter anderem mit einer intensiv bewirtschafteten Wiese auf Braunerden verglichen. Dabei fanden sich unter der Wiese die günstigeren bodenchemischen Verhältnisse mit höheren pH-Werten, Basensättigung und Nährelementvorräten.

Verschiedene andere Autoren, wie z.B. Rees & Ribbens (1995) oder Bulfin (1993) betonen das Risiko der Bodenversauerung aufgrund der Aufforstung vormals freier Flächen. Rees & Ribbens konnten in ihren Untersuchungen in Südwestschottland den Einfluss von bewaldeten aufgeforsteten Flächen auf die Wasserqualität (untersucht in Fließgewässern des Gebietes) deutlich nachweisen. So konnten, im Vergleich zu unbewaldeten oder wenig bewaldeten Flächen, Zusammenhänge zwischen Flächen mit hohem Waldanteil und niedrigeren pH- bzw. Ca^{2+} -Werten und gestiegenen Al^{3+} - und TOC-Werten aufgezeigt werden.

Auf das Problem der Versauerung, vor allem auf Standorten mit pleistozänen Sanden wie wir sie im Untersuchungsgebiet finden, weist der DVWK hin (Dohrenbusch, 1996). Auch hier

wird empfohlen, vor einer Aufforstung den hohen Stickstoffvorrat im Boden durch eine Grünlandnutzung abzubauen, um so Nitrataustrag und Versauerung vorzubeugen.

Die Niedersächsische Forstverwaltung (NFV) sieht die Aufforstung ehemals landwirtschaftlich genutzter Flächen mit Laubbaumarten zum Zwecke des GW-Schutzes als sinnvollste Alternative, z.B. im Vergleich zur Grünlandnutzung. Diese Variante bietet nach Meinung der NFV die Möglichkeit einer über einen längeren Zeitraum düngereis, schadstofffreien und bodenentlastenden Nutzung. Außerdem wäre die „Auskämmwirkung“ von Laubwaldbeständen in den ersten 2 Jahrzehnten des Wachstums aufgrund der noch nicht so großen Höhe der Bäume gering (Müller-Using, aus Scheffer, 1996).

Als beste Variante stellte sich heraus, vor der Aufforstung einer Fläche einige Zeit Grünlandnutzung zu betreiben, um den meist überschüssig vorhandenen N-Vorrat abzubauen und dann erst mit der Baumanpflanzung zu beginnen bzw. gleichzeitiger Anbau von Hilfspflanzendecke und neu gepflanzten Bäumen zu deren Schutz, dem schnelleren Aufbau einer Humusschicht und dem Unterdrücken unerwünschter Unkräuter. Diese kann durch andere Maßnahmen, wie Fräsen oder Kalkausbringung, unterstützt werden. Das Problem der Versauerung bleibt natürlich weiterhin bestehen, falls keine Einschränkung der atmosphärischen Schadstoffemission in Zukunft erfolgt.

Zusammenfassend wäre folgendes hinsichtlich einer optimalen Standortgestaltung festzuhalten:

- Wahl standorttypischer Baumarten, möglichst Laubbaumarten zur Aufforstung
- Anlegen einer Hilfspflanzendecke (Unterdrückung unerwünschter Gräser und Krautarten, Bindung überschüssiger Nährstoffe und Entfernen durch Mähen möglich) oder mehrjährige Grünlandnutzung vor der Anpflanzung der Bäume
- Aufforstungsflächen nicht zu klein wählen, möglichst an bereits existierende Wälder anschließen
- Meliorationsmaßnahmen; vor allem bei starker Bodenversauerung durch Tiefpflügen und damit Zufuhr von SNK aus dem Untergrund
- Kalkung (auf sandigen Lehm bis Tonböden) (*Bem.: Dies wurde jedoch in der Vergangenheit sehr kontrovers diskutiert.*), Zufuhr leicht verwitterbarer Silikate auf sandigen Böden (Wasserspeicherleistung erhöhen)

4.4 Schlussfolgerung und Ausblick

Das Ziel der Arbeiten war die Kontrolle der Auswirkungen von Aufforstungen im Schutzgebiet der Fassung A des Wasserwerkes Thülsfeld. Es sollten die Auswirkungen auf den Stoffaustrag (insbesondere Nitrat) und die Versauerung untersucht werden.

Es wurden die Aufforstungsflächen 6, 125, 158, 123, 132 und die Ackerflächen HOE (ökologisch) und LUE (konventionell) untersucht. Damit wurde ein Altersspektrum zwischen 3 und 9 Jahre alten Waldbeständen erfasst. Die Ackerflächen wurden zum Vergleich beprobt.

Anhand der durchgeführten Untersuchungen konnten besonders hohe Stickstoffgehalte, wie man sie auf ehemaligen landwirtschaftlich genutzten Flächen in den ersten Jahren nach der Aufforstung erwarten könnte, nicht nachgewiesen werden (Siehe Abbildung 4-20). Es kann angenommen werden, dass mineralisierter Stickstoff, z.B. Nitrat, nur unmittelbar zu Beginn der Aufforstung in größeren Mengen ausgewaschen wurde (etwa nur im ersten Jahr) und dann durch die üppige und schnellwüchsige Unterbodenvegetation gut zurückgehalten wurde. Auf

der 3 Jahre alten Aufforstungsfläche 132 wurden lediglich nur leicht höhere Nitratwerte als auf den älteren Aufforstungsflächen gefunden. Insgesamt blieben die gemessenen Nitrat- und auch die Ammoniumwerte auf sehr niedrigem Niveau, d.h. bei Nitrat < 20 mg/l (bezogen auf die Feldkapazität (Fk)) und bei Ammonium $< 1,6$ mg/l (bezogen auf die Gleichgewichtsbodenlösung (GBL)). Die Ausnahme bildet die Flächen LUE, auf der bis zu 307 mgNO₃/l (bezogen auf Fk) und $4,5$ mgNH₄/l (bezogen auf GBL), jeweils im obersten Horizont, gemessen wurden. Die Werte auf der konventionell bewirtschafteten Fläche LUE liegen damit im Oberboden etwa 10mal so hoch, wie die Werte der aufgeforsteten Flächen. In der Tiefe unterscheiden sich die Werte nicht mehr so stark (3-4mal höher, d.h. zwischen 30 und 60 mg/l). Auf der Fläche HOE liegen die Werte im Oberboden mit $48,8$ mg/l deutlich unter denen von LUE. In der Tiefe sind die HOE-Werte gleich denen der Forstflächen.

Hinsichtlich der Stickstoffausträge auf den Aufforstungsflächen ist also auf mittelfristige Sicht eine Reduzierung im Vergleich zu konventioneller Landwirtschaft zu erwarten. Eine Alternative wäre auch die ökologische Bewirtschaftung, so wie sie derzeit auf der Fläche HOE praktiziert wird. Bei den hier gemessenen sehr geringen N-Konzentrationen ist jedoch zu beachten, dass nur ein Probenahmetermin zur Auswertung zur Verfügung stand, welcher zudem im September lag, also in einer Zeit in der allgemein mit geringen Austrägen zu rechnen ist. Untersuchungen des Sickerwassers über einen Zeitraum von 2 Jahren in einem anderen Projekt (Weller et al., 2002) haben auf der gleichen Fläche im Mittel 42 mgNO₃/l im Sickerwasser unterhalb der Wurzelzone gezeigt. Damit wäre die Waldvariante in jedem Fall günstiger als die derzeit praktizierten landwirtschaftlichen Bewirtschaftungsvarianten.

Aufgrund der relativ geringen Basenausstattung des Gesteins im Untersuchungsgebiet ist der Boden sehr anfällig für saure oder Säure bildende Einträge aus der Atmosphäre. Es ist in naher Zukunft nicht mit einer gravierenden Reduktion der anthropogenen Emissionen zu rechnen, so dass der atmosphärische Stoffeintrag für die aufgeforsteten Flächen der dominierende Eintragspfad sein wird. Der aufwachsende Wald wird, infolge seiner Auskämmwirkung, steigende Einträge über diesen Pfad bedingen. Dabei ist jedoch die gewählte Variante der Aufforstung mit Laubbäumen in jedem Fall dem Nadelwald vorzuziehen. Der Vergleich der untersuchten Flächen zeigt hinsichtlich der Versauerungskriterien pH(CaCl₂) und Basensättigung (BS), dass die Böden auf allen Flächen nach den Kriterien von Ulrich et al. (1989), bis in die erreichten Sondierungstiefen von 7 - 9 m, versauert sind (Abbildung 4-19 bis Abbildung 4-21). Einzige Ausnahmen bilden die Flächen LUE bzw. 123 (September 2000), die bei den pH-Werten noch über $4,7$ im gesamten Profil bzw. im oberen Meter liegen. Bei diesen liegt auch die BS am höchsten. Auffällig ist, dass Fläche 123 eine deutlich bessere Basenausstattung besitzt als LUE. Es zeigt sich auch, dass sich die Versauerung auf den älteren Aufforstungsflächen, beurteilt anhand der Basensättigung und der Pufferkapazität, deutlicher auswirkt. Auch wenn sich bisher kein sicherer Nachweis erbringen lässt, kann man sehen, dass Basensättigung und pH(CaCl₂)-Werte tendenziell niedriger als auf den Vergleichsflächen liegen.

Zu beachten ist, dass die oberen 50 cm des Bodens keine oder geringe Versauerungserscheinungen aufweisen, während die darunter liegenden Tiefen versauert sind. Dieses ist untypisch für den Prozess der Versauerung, der von der Bodenoberfläche nach unten verläuft. Der Grund dafür sind wahrscheinlich die durchgeführten Bodenmeliorationen, z.B. mit Kalk, die bei der Neuanpflanzung durchgeführt wurden. In jedem Fall sind derartige Maßnahmen zu empfehlen.

Eine Bekräftigung der Einschätzung der Versauerungszustandes lässt sich anhand der Aluminiumkonzentrationen ablesen. Diese sind bis in Tiefen von 3,5 m als toxisch ($> 0,4$ mg/l) für Bodenlebewesen und Pflanzenwurzeln anzusehen. Extrembeispiel dafür ist die Fläche 6, bei der bis in 3,5 m Al-Werte zwischen 1 und 2,2 mg/l gemessen wurden. Weiteres Extrembeispiel ist der Wert von 15,4 mg Al^{3+} /l auf der Fläche 125. Auch hier sind bis in 2,25 m Tiefe die Werte über 0,4 mg/l. Die günstigsten Verhältnisse sind diesbezüglich auf den landwirtschaftlich genutzten Standorten zu finden. Für die vorgefundenen hohen Aluminiumwerte sind sehr wahrscheinlich Versauerungsvorgänge, die mit Podsolierungserscheinungen einhergehen, verantwortlich. Es ist jedoch zu beachten, dass diese Werte nicht mit der Sickerwasserkonzentration gleichgesetzt werden können, da hier die Gleichgewichtsbodenlösung untersucht wurde. Es ist zu erwarten, dass die Werte im Sickerwasser höher sind. Eine Sickerwasseruntersuchung wäre deshalb auf jeden Fall zu empfehlen.

Die vom OOWV derzeit durchgeführten Maßnahmen dienen also nach aktuellem Wissensstand dem nachhaltigen Grundwasserschutz hinsichtlich des Kriteriums Nitrat. Eine Versauerungstendenz deutet sich an, ist aber bisher nicht eindeutig nachzuweisen.

Mit dem Konzept dendro-chronologischer Untersuchungen, d.h. Untersuchung vergleichbarer Flächen mit unterschiedlichem Bestandesalter, wie es in Projekt durchgeführt wurde, konnten erste bewertbare Aussagen zur derzeitigen Situation hinsichtlich Nitrataustrag und Versauerung sowie hinsichtlich erwarteter Entwicklungstrends getroffen werden. Einschränkungen der Zuverlässigkeit, wie in Abschnitt 4.3.2 beschrieben, sind aber in Kauf zu nehmen. Zur Absicherung der Prognosen sollten erneute Untersuchungen nach einen Zeitraum von 3-5 Jahren durchgeführt werden.

5 Gekoppelte Modellierung

Die in diesem Kapitel vorgestellten Arbeiten wurden im Rahmen eines INCO-Copernicus-Projektes der Europäischen Union mit Partnern aus Polen, Bulgarien, Niederlande und Deutschland erarbeitet. Die Projektleitung lag beim Institut für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden. Für das Teilprojekt „Integrierte Modellierung“ war der Autor verantwortlich. Anwendungen verschiedener Boden- und Grundwassermodelle wurden in den 3 Untersuchungsgebieten in Bulgarien, Polen und Deutschland durchgeführt. Die Modellkopplung und die Modellanwendungen im Untersuchungsgebiet in Deutschland wurden vom Autor selbst durchgeführt. Das hydrogeologische Strukturmodell wurde von Matthias Pätsch (Doktorand) aufgebaut und das Bodenmodell HERMES von Dorothea Weller (Doktorandin) erstellt.

Das Ziel des Teilprojektes „Modellierung“ bestand in der Schaffung eines integrativen Ansatzes zur Modellierung der ungesättigten und gesättigten Zone im Einzugsgebietsmaßstab. Eine Dokumentation der Modellierung und der Ergebnisse gibt der Abschlussbericht an die EU (INCO, 2002). Eine zusammenfassende Darstellung des gesamten Projektes ist in Mioduszewski et al. (2005) enthalten.

Im Rahmen der Arbeiten erfolgte eine Bewertung von kommerziellen Modellen und Shareware hinsichtlich der Eignung für die Modellierungszielstellung und insbesondere zur Kopplung. Dabei wurden die Modelle SWAT, ANIMO, FLOTRANS, MODFLOW, HERMES und WAVE ausgewählt. Die Modellkopplung wurde für verschiedene Modellkombinationen durchgeführt. Die Modellkombinationen SWAT/ANIMO/FLOTRANS/MODFLOW wurden in Polen angewendet, die Kombinationen WAVE/MODFLOW/MT3D in Bulgarien und die Kombination HERMES/MODFLOW/MT3D in Deutschland. Eine Beschreibung aller Modelle ist in Anlage 5-1 enthalten. Im folgenden Abschnitt wird die Bewertung für alle betrachteten Modelle, die Modellkopplung zwischen HERMES und MODFLOW sowie die Anwendung der gekoppelten Modelle vorgestellt.

5.1 Modellauswahl und -bewertung

Die Modellbewertung wurde im Hinblick auf die Simulation des Stickstoffmetabolismus in der ungesättigten bzw. in der wassergesättigten Zone sowie hinsichtlich der Möglichkeiten der Modellkopplung zur integrativen Beschreibung der Prozesse in der Interaktion der Zonen durchgeführt. Es stand die Frage im Vordergrund inwieweit die relevanten Prozesse zur Vorhersage der Grundwasserbeschaffenheit berücksichtigt werden.

Die Bewertung der im Modellvergleich aufgeführten Modelle (Anlage 5-2) führt zu den folgenden zusammengefassten Schlussfolgerungen:

- Keines der Modelle liefert eine Gesamtbeschreibung der Umsatzprozesse in allen 4 Kompartimenten des Wasser- und Stofftransportes, d.h. Vegetations-, Boden-, Kapillarwasser- und Grundwasserzone
- Es gibt eine Vielzahl von Modellen, die die Umsatzprozesse in der ungesättigten Zone beschreiben, jedoch mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad.
- Es gibt kein Modell, das explizit die Umsatzprozesse in der gesättigten Zone beschreibt. Jedoch besteht die Möglichkeit die Effekte des Stoffumsatzes als Prozesse 0. oder 1. Ordnung für Abbau/Produktion zu berücksichtigen. Damit ist auch die Kopplung zwischen den Lösungen aufeinander folgender Reaktionen 1. Ordnung möglich. Die Mög-

lichkeit ist in der Literatur beschrieben, z.B. Van Genuchten (1985), Böttcher, u.a. (1989).

- Alle Modelle liefern die Möglichkeit zur so genannten „losen“ Modellkopplung. Die Modelle werden dabei separat für die vadose und die gesättigte Zone berechnet. Die Kopplung erfolgt dabei durch Übergabe der Daten der Ein- bzw. Ausgabedateien der einzelnen Modelle in einem geeigneten Zeitschritt. Eine Veränderung der Programm selbst muss dabei nicht erfolgen.

Die praktische Umsetzung der Modellkopplung wird im folgenden Abschnitt 5.2 erläutert.

5.2 Kopplungskonzept und Modellkopplung

Dieser Abschnitt erläutert die Durchführung der Modellkopplung und die praktische Anwendbarkeit des neuen Modellwerkzeugs für die integrative Beschreibung der Prozesse über die Kompartimentgrenzen der gesättigten und ungesättigten Zone. Damit erfolgt eine Berücksichtigung des Wasser- und Stofftransportes in beiden Zonen als kontinuierlicher Prozess. Die Anwendungsanleitung besteht aus zwei Teilen:

1. Das Konzept für die Modellkopplung und
2. Instruktionen für die Anwendung der Transformationsprogramme

Das Konzept der Modellkopplung wird in Abschnitt 5.2.1 erklärt. Danach erfolgt in Abschnitt 5.2.2 die Erläuterung der Regionalisierungsprozedur. Die Regionalisierungsprozedur enthält den Aufbau des konzeptionellen Modells des Untersuchungsgebietes, die räumliche und zeitliche Optimierung der Modellkopplung und Definition der Zeiträume des Datenaustausches während der gekoppelten Berechnung. Zum Schluss werden in Abschnitt 5.2.3 die Schritte der Modellkopplung selbst gezeigt.

5.2.1 Konzept

Das hier vorgestellte Konzept beschreibt die Vorgehensweise für die Kopplung des Bodenmodells HERMES und des Grundwassermodells MODFLOW/MT3D. Ein allgemeines Strukturmodell ist in Abbildung 5-1 ersichtlich.

Die Modelle, die die Wasserbewegung und die Stoffumsätze in der ungesättigten Zone simulieren, sind meist eindimensional und berücksichtigen die Prozesse nur in vertikaler Richtung (Abbildung 5-2). Diese Modelle werden im Konzept als *Lokale Boden Modelle* (LSM) bezeichnet. Abhängig von den spezifischen Bedingungen und den Fähigkeiten der verwendeten Modelle kann die untere Randbedingung der LSM in die ungesättigte Zone, in die Kapillarzzone oder in den oberen Teil der gesättigten Zone gelegt werden. Üblicherweise werden an dieser Grenze die Grundwasseroberfläche, freie Entwässerung oder ein bestimmter Fluss angenommen. Diese Parameter werden als Funktion der Zeit berücksichtigt und sie können entweder aus Messungen bestimmt oder über empirische Funktionen berechnet werden. Sie können aber auch dem Output des Grundwassermodells entnommen werden, speziell dann wenn die Grundwasserstände die untere Randbedingung bilden.

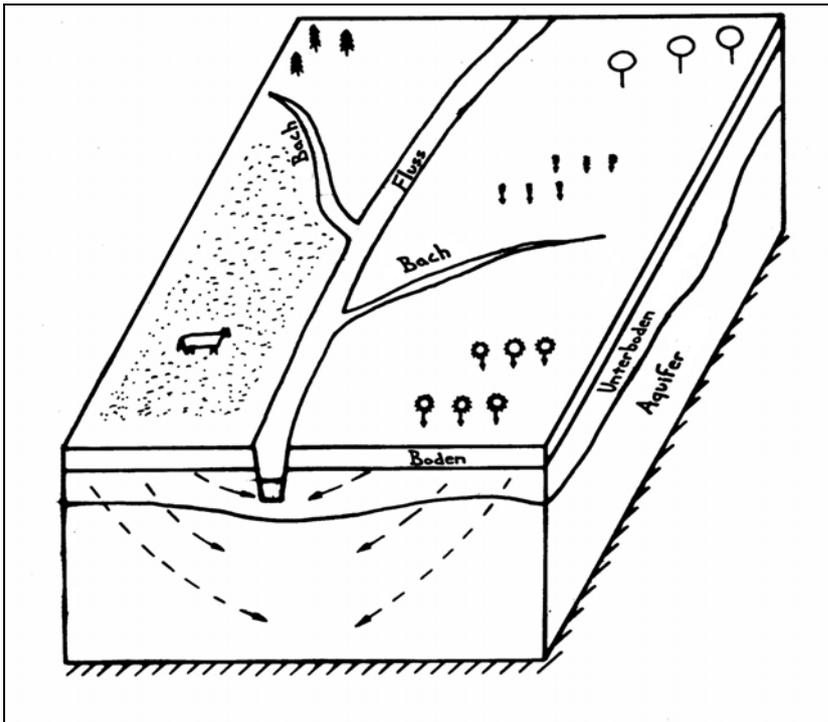


Abbildung 5-1: Allgemeines Strukturmodell für das Untersuchungsgebiet.

Die Modelle, die die gesättigte Zone beschreiben, repräsentieren die hydraulischen und Massentransferprozesse auf der Feld- und regionalen Skale. In dem Konzept werden diese Modelle als *Regionale Grundwassermodelle* (RGWM) bezeichnet. Die obere Randbedingung der RGWM ist die Grundwasseroberfläche. An diesem Rand berücksichtigen die RGWM die Grundwasserneubildung und den Wasseraufstieg. Diese müssen als Eingangsgrößen angegeben werden, sowohl für den Wasser- als auch für den Stofffluss. In dem Konzept wird vorgeschlagen alle diese Größen aus den Output-Daten der LSM zu erzeugen.

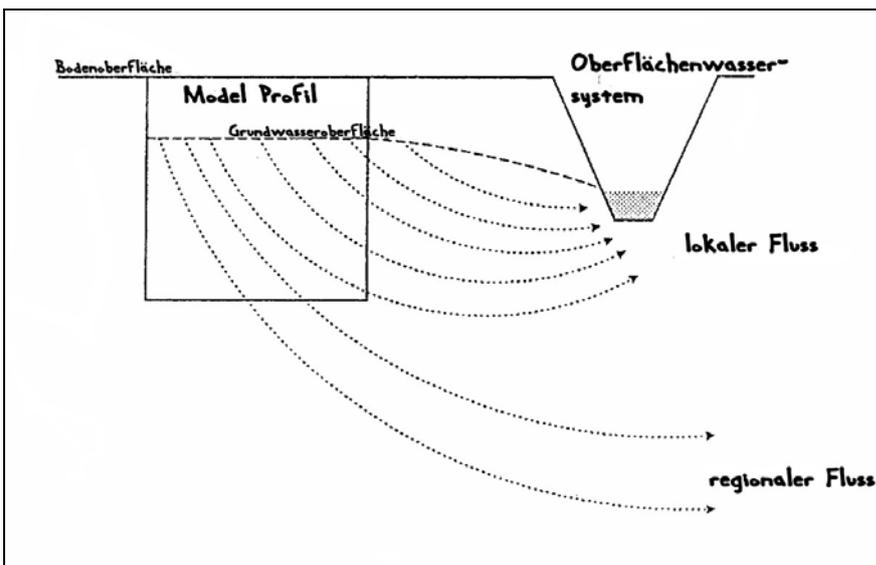


Abbildung 5-2: Grundwassersystem mit lokalen und regionalen Flüssen (nach Groenendijk und Kroes, 1999).

LSM und RGWM sind kompartimentspezifische Modelle und werden in der Regel unabhängig voneinander angewendet. Die Kopplung der Modelle ermöglicht es auch den Wasser- und

Stofftransport in der ungesättigten und gesättigten Zone als ein gekoppeltes System zu behandeln, wie es in der Realität vorliegt. Die korrekte Anwendung für die Kopplung eines lokalen Modells mit einem regionalen Modell wird durch einen 2-Wege-Austausch von Information über die Wasser- und Stoffflüsse durch die untere Modellgrenze des LSM und die obere Grenze des RGWM beschrieben. Dies wird erreicht durch kontinuierliche Aktualisierung der oberen Randbedingung des RGWM und Berücksichtigung der im Raum verteilten Prozesse Grundwasserneubildung, Wasseraufstieg und Stoffauswaschung.

5.2.2 Regionalisierungsmethode

Vor der Simulation mit dem gekoppelten Modell sollte, zur Minimierung der notwendigen Rechenoperationen und zur Verbesserung des Input/Output-Datentransfers, eine Regionalisierungsprozedur durchgeführt werden. Sie beinhaltet zwei Schritte. Der erste Schritt besteht aus dem Aufbau eines Konzeptmodells des Untersuchungsgebietes. Die Zielstellung dabei ist die Vorbereitung der notwendigen Eingangsdateninformation für die RGWM und LSM durch Festlegung:

- der Grenzen des Untersuchungsgebietes,
- der hydrogeologische Charakteristika
- des numerischen Gitters und
- der Eingangsdaten für die Modelle

Zur Reduzierung der Anzahl der LSM ist eine vorausgehende Unterteilung des Gebietes des regionalen Modells in repräsentative Teilgebiete günstig. Für diese Gebiete muss nur jeweils ein LSM aufgebaut werden (Abbildung 5-3). Die Anzahl der repräsentativen Teilgebiete ist abhängig von:

- der Homogenität der Bodentypen, die im Gebiet vorkommen
- den chemischen und hydrologischen Bedingungen
- der Vegetation und
- der Landnutzung und der Landbewirtschaftung

Der zweite Schritt zielt auf eine Zeitoptimierung der Kopplungsprozedur. Die strikte Anwendung der Kopplung erfordert die Verbindung der Modelle für jeden Zeitschritt. Dies ist jedoch nicht effizient. Außerdem sind die Prozesse im regionalen Maßstab im Vergleich zum lokalen Maßstab langsam. Damit ist es sinnvoll die Kopplung zwischen LSM und RGWM nicht für jeden Berechnungsschritt, sondern für vorher bestimmte Austauschzeiträume durchzuführen. Die Definition von interessierenden Austauschzeiträumen hängt ab von:

- der Schwankung des Grundwasserspiegels infolge großräumiger Grundwasserneubildung
- den Perioden von Tiefenversickerung des Bodenwassers
- den Perioden des Wasseraufstiegs und Höhe der Kapillarwirkung
- den Auswaschungsperioden der Agrochemikalien
- den Entwicklungsstadien der vorhandenen Ackerfrüchte und
- den spezifischen Landnutzungsbedingungen der Region

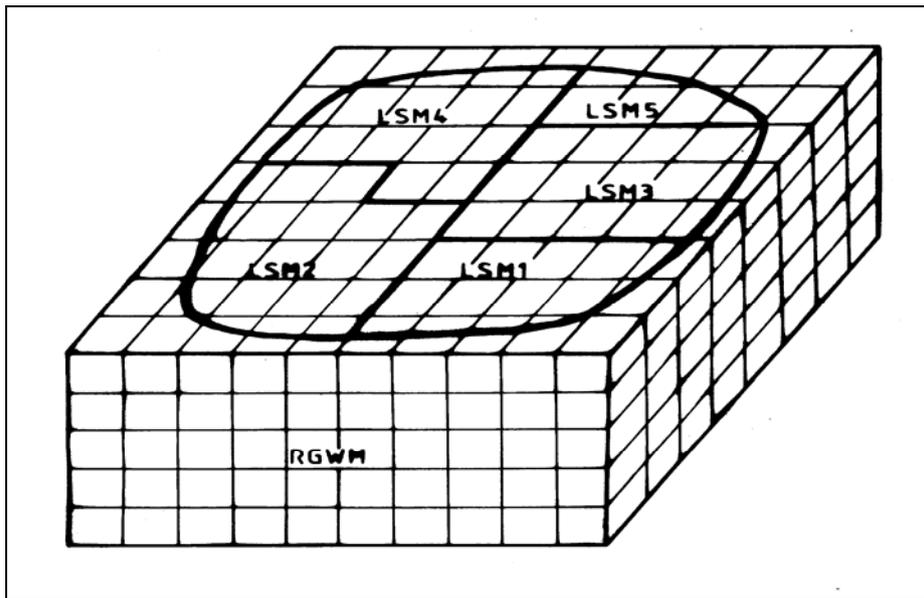


Abbildung 5-3: Schematisierter Überblick über das regionale Grundwassermodell (RGWM) mit verteilten lokalen Bodenmodellen (LSMs).

5.2.3 Methodik der Modellkopplung

Die Prozedur besteht aus 3 Schritten. Im Folgenden werden diese Schritte dargelegt.

1. Berechnung mit LSMs für eine Austauschperiode:
 - Einlesen der notwendigen Parameter für die lokalen Bodenmodelle
 - Aktualisierung der Eingangsdaten der LSMs auf der Basis der Ergebnisse, die während einer ersten Berechnung mit RGWM berechnet wurden oder Verwendung von Ergebnissen einer früheren Austauschperiode
 - Vorbereitung der Anfangsbedingungen der LSMs
 - Berechnung mit LSMs für die aktuelle Austauschperiode
 - Erhalten der Resultate des Wasser- und Massentransfers an den unteren Rändern
 - Aufzeichnen der erhaltenen Output-Daten für Speicherung, Weiterverarbeitung, Austausch und Visualisierung
2. Berechnung mit RGWM für die aktuelle Austauschperiode unter Berücksichtigung der Output-Information der LSMs:
 - Einlesen der nötigen Parameter für RGWM
 - Aktualisierung der Input-Daten des RGWM unter Verwendung der Output-Daten der LSMs für die aktuelle Austauschperiode
 - Bestimmung der Anfangsbedingungen des RGWM
 - Berechnung der Dynamik des regionalen GW-Systems für die aktuelle Austauschperiode
 - Aufzeichnen der erhaltenen Output-Daten für Speicherung, Weiterverarbeitung,

Austausch und Visualisierung

3. Kontrolle

- Überprüfung, ob das Ende der Berechnungsperiode erreicht ist
- wenn das Ende der gesamten Berechnungsperiode nicht erreicht ist, wird mit dem ersten und dem zweiten Schritt der nächsten Austauschperiode fortgefahren
- zur Sicherung der Kontinuität des Prozesses der Modellrechnung muss der Nutzer die erhaltenen Daten am Ende jeder Austauschperiode als Anfangswerte der nächsten übergeben
- wenn das Ende der Periode erreicht ist, stoppt die Prozedur

Die Anleitung für die Anwendung des Transformationsprogramms ist in Anlage 5-3 enthalten. Der Quelltext des Programms ist in Anlage 5-4 ersichtlich.

5.3 Simulation mit gekoppelten Modellen

5.3.1 Ungesättigte Zone

5.3.1.1 Grundlagen zur Modellierung mit dem Modell HERMES

Das Modell HERMES benötigt als Eingabedaten tägliche Daten des Niederschlages, die mittlere, maximale und minimale Temperatur der Luft, die mittlere Bodentemperatur in den Tiefen 10 und 20 cm, die Windgeschwindigkeit, das Sättigungsdefizit der Luft um 14:30 Uhr, die Sonnenscheindauer und die Globalstrahlung. Außer den Niederschlagsdaten wurden alle Daten am Wasserwerk Thülsfeld erhoben. Die Klimadaten wurden vom DWD bereitgestellt. Die vollständige Datenbasis ist in INCO (2002) enthalten.

Die Ermittlung der bodenhydraulischen Parameter erfolgte anhand der ermittelten Korngrößenverteilung. In einer Kalibrierungsperiode wurden die Modellparameter in physikalisch sinnvollen Grenzen angepasst, so dass die Anpassung der Bodenfeuchteberechnungen an die Messwerte verbessert wurde. HERMES berücksichtigt Bodentypen, wie sie nach AG Bodenkunde (1994) definiert sind. Intern wird dabei jeder Bodentyp mit einem spezifischen hydraulischen Parametersatz verknüpft. Eine manuelle Veränderung der Parameter ist möglich.

Der organische Kohlenstoffgehalt wurde im Labor bestimmt. Wenn notwendig, wurden die Werte linear mit der Tiefe interpoliert. Die Bodentypen sind in Tabelle 5-1 aufgeführt. Die maximale Wurzeltiefe wird mit 1,5 m angenommen.

Die o.g. Daten wurden verwendet um die aktuelle Landnutzung zu modellieren. Der Modellierungszeitraum beginnt am 1. März 1999, dem Erntedatum der Winterfrucht, und endet am 29. Juni 2001. Dieser Zeitraum wurde als Kalibrierungs- und Verifizierungszeitraum verwendet. Die geringe Anzahl an Messungen, insbesondere für den Wassergehalt, ist ein Problem. Trotzdem wurde der Zeitraum 25.08.1999 – 02.08.2000 als Kalibrierungszeitraum definiert. Innerhalb dieses Zeitraumes gibt es eine Periode von wöchentlichen Messungen für gelöste Inhaltsstoffe zwischen 13.05.2000 und 02.08.2000. Die Periode zwischen 02.08.2000 und 29.06.2001 wurde als Verifizierungszeitraum verwendet.

Tabelle 5-1: Bodentypen im HERMES Modell, Fallbeispiel Thülsfeld.

Bodentyp	Tiefe [cm]	Niveau der Lage- rungsdichte (nach AG Bodenkunde, 1994)	Gehalt an org. Kohlenstoff [%]
Sand, schluffig	0-30	2	2.12
Sand, mittel und fein	30-50	2	1.21
Sand, wenig schluffig	50-60	2	0.87
Sand, mittel	60-70	3	0.38
Sand, schluffig	70-100	3	0.02
Sand, mittel und fein	100-200	3	0.01

5.3.1.2 Anfangswerte

Die erforderlichen Anfangswerte für die Simulation sind Bodenfeuchte, Nitratkonzentration und mineralisierter Stickstoff in den Tiefen 0-30 cm, 30-60 cm und 60-90 cm. Die Berechnungen werden für die Tiefen: 0,5 m, 1 m, 1,5 m und 2 m durchgeführt. Diese Tiefen korrespondieren mit den Tiefen der installierten Saugkerzen und Tensiometer. Eigene Messdaten für den März 1999 waren verfügbar. Es wurden weiterhin Daten aus der Literatur (Landwirtschaftskammer Weser-Ems & Landwirtschaftsamt Cloppenburg, 1998, 1999) verwendet. Die Anfangswerte sind in der folgenden Tabelle 5-2 aufgeführt.

Tabelle 5-2: Anfangswerte für die Modellsimulation mit HERMES, Fallbeispiel Thülsfeld.

Da- tum	Gehalt an N _{min} [kgN/ha] in 0-30cm	Gehalt an N _{min} [kgN/ha] in 30-60cm	Gehalt an N _{min} [kgN/ha] in 60-90cm	Nitratkonzentration [mg/l]	Volumetr. Wasserge- halt [cm ³ /cm ³] in 0-30cm	Volumetr. Wasserge- halt [cm ³ /cm ³] in 30-60cm	Volumetr. Wasserge- halt [cm ³ /cm ³] in 60-90cm
2.3.99	38,8	5,5	7,9	für 50 cm: 23,0 für 100 cm: 28,0 für 150 cm: 14,5 für 200 cm: 4,0	0,317	0,179	0,189

Die Eingangsdaten der landwirtschaftlichen Nutzung auf dem Testfeld wurden direkt vom Landwirt Högemann bezogen (Tabelle 5-3).

Die Erntemenge des Winterroggens musste in der Modellsimulation berechnet werden, da er zu Meliorationszwecken untergepflügt wurde und deshalb keine Mengenangaben verfügbar waren.

5.3.1.3 Modellergebnisse für den Bodenfeuchtegehalt

Das Modell HERMES erzeugt eine Output-Datei mit Bodenfeuchtegehalten für die Tiefen 0 - 30 cm, 30 - 60 cm und 60 - 90 cm. Die Ergebnisse wurden mit den Messungen des Feuchtegehaltes in den Bodenproben verglichen. Tensiometermessungen waren nicht verfügbar. Abbildung 5-4 zeigt den Vergleich der modellierten Feuchtegehalte mit den Messwerten. Um die Modellreaktion auf Niederschläge zu sehen, wurde der Tagesniederschlag ebenfalls dar-

gestellt.

Tabelle 5-3: Eingangsdaten der landwirtschaftlichen Nutzung.

Fruchtart	Datum der Aussaat	Datum der Ernte	Erntemenge [dt/ha]	Verbleib der Ernterückstände	Düngung
Winterroggen	1.9.98	1.3.99	1	eingepflügt	
Tritikale ¹⁾	1.4.99	15.8.99	23	eingepflügt	15.4.99, 25 dt/ha Geflügung
Winterroggen	12.9.99	3.3.00	1	eingepflügt	
Kartoffeln	5.4.00	25.8.00	240	eingepflügt	18.3.00, 140 dt/ha Schweinemist 26.6.00 25 mm Bewässerung
Winterroggen	2.9.00	1.3.01	1	eingepflügt	
Tritikale	1.4.01	15.8.01	23	eingepflügt	14.5.01, 25 dt/ha Geflügung

¹⁾ Tritikale sind eine Kreuzung zwischen Roggen und Weizen.

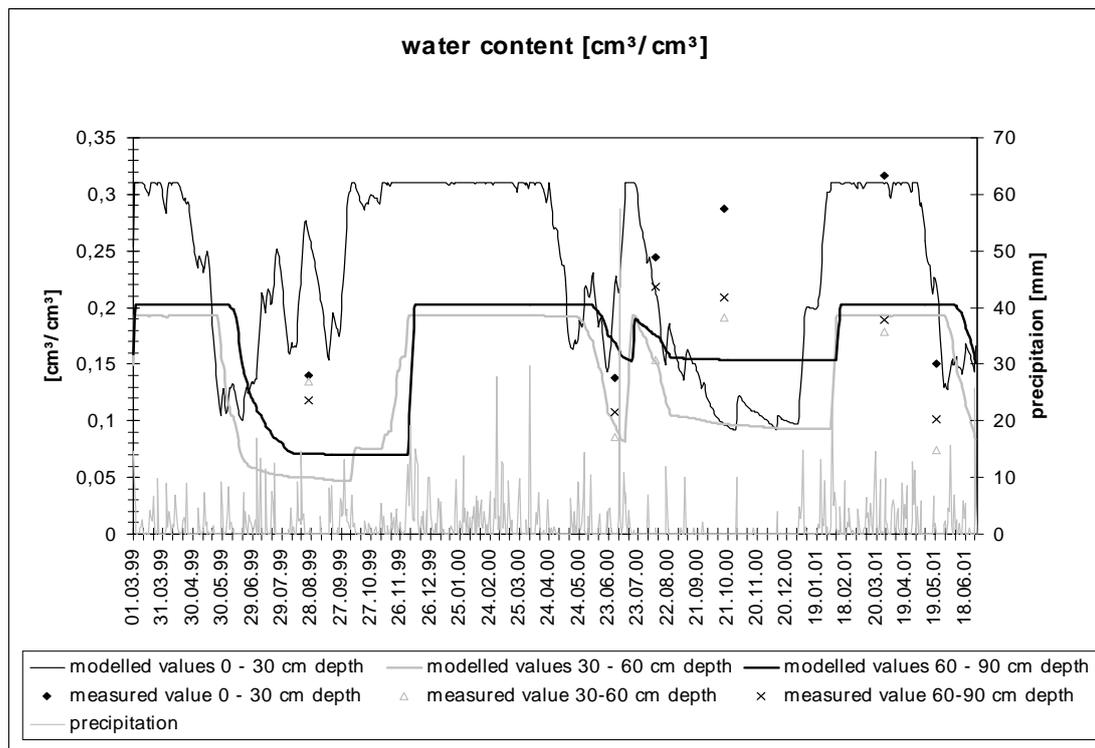


Abbildung 5-4: Simulierte und gemessene Bodenfeuchtegehalte, Modell HERMES.

Trotz der geringen Messdatendichte ist erkennbar, dass HERMES in der Lage ist, den generellen Verlauf zu beschreiben. Die sich ausbildenden Plateaus der Feuchte sind typisch für den im Modell verwendeten Kapazitätsansatz, bei dem stets bis zur Feldkapazität der entsprechenden Bodenschicht aufgefüllt werden muss, bevor eine Versickerung erfolgen kann. Die

Reaktion auf Niederschläge sinkt erwartungsgemäß mit steigender Tiefenlage der Berechnungspunkte. Im Juni und August 2000 konnte eine besonders gute Anpassung der Simulation erreicht werden. In der Tiefe 0 - 30 cm wurde dies im Mai 2001 erreicht, jedoch reagieren hier die Wassergehalte in den tieferen Horizonten zu langsam. Die hohen gemessenen Wassergehalte im Oktober 2000 müssen kritisch gesehen werden, da die Niederschläge keine so hohen Werte begründen. Landwirt Högemann bestätigte, dass in diesem Zeitraum keine Bewässerung erfolgte. Der Kalibrierungszeitraum ist die Periode mit hoher Messwertdichte der gelösten Spezies zwischen Mai und August 2000. Zur Quantifizierung der Anpassungsgüte der Simulationswerte an die Messwerte wurde der mittlere absolute Fehler verwendet. Die Definition ist Folgende:

$$F=1/n \cdot \sum (| \text{modVal} - \text{measVal} |)$$

mit F ... mittlerer absoluter Fehler, n ... Anzahl der Messungen, modVal ... berechneter Wert, measVal ... gemessener Wert

Tabelle 5-4 zeigt die Fehlergrößen. Die modellierten Zeitreihen im Vergleich zu den Messwerten werden später in diesem Abschnitt dargestellt.

Tabelle 5-4: Mittlere absolute Fehler des Wassergehaltes (gemessen - berechnet) mit HERMES für verschiedene Tiefen.

Tiefe [cm]	Gemessene Werte des Wassergehaltes [cm ³ /cm ³]			Anzahl der Messungen	Mittlerer absoluter Fehler [cm ³ /cm ³]
	Mittelwert	Minimum	Maximum		
0-30	0.213	0.138	0.317	6	0.08
30-60	0.136	0.074	0.191	6	0.05
60-90	0.157	0.101	0.218	6	0.05

Die prozentuale Angabe des mittleren absoluten Fehlers F auf der Basis der mittleren gemessenen Werte beträgt ca. 43 % in 0 - 30 cm, ca. 40 % in 30 - 60 cm und ca. 50 % in 60 - 90 cm. Das ist ein relativ unfriedigendes Ergebnis, kann aber vor dem Hintergrund der geringen Messwertdichte akzeptiert werden.

5.3.1.4 Modellierung der Ergebnisse der Nitratkonzentration

Die Nitratkonzentration in HERMES kann für ausgewählte Tiefen berechnet werden. Für das Fallbeispiel Thülsfeld wurde die gleichen Tiefen gewählt, wie die Einbautiefen der Saugkerzen und Tensiometer: 50 cm, 100 cm, 150 cm und 200 cm. Die Abbildung 5-5 zeigt die modellierten und gemessenen Nitratkonzentrationen

Die gemessenen Nitratkonzentrationen sind relativ gering, meist unter 40 mg/l. Sie zeigen jedoch schnelle Änderungen, die von HERMES nicht gänzlich nachvollzogen werden können. Wie für die Wasserflüsse ist dies auf das verwendete Kapazitätsmodell zurückzuführen, welches die Dynamik des Sickerwassers nicht vollständig nachvollziehen kann. Insgesamt kann festgestellt werden, dass eine Abschätzung des Konzentrationsverlaufes in HERMES vollzogen werden kann.

Die Tabelle 5-5 zeigt den mittleren absoluten Fehler der Nitratkonzentration. Die schlechteste

Anpassung wurde in der Tiefe 50 cm gefunden, wo der Fehler ca. 103 % beträgt. In 100 cm beträgt der Fehler 64 % der mittleren gemessenen Konzentration. Nur in der Tiefe 150 cm gelang eine gute Anpassung mit ca. 34 % Fehler.

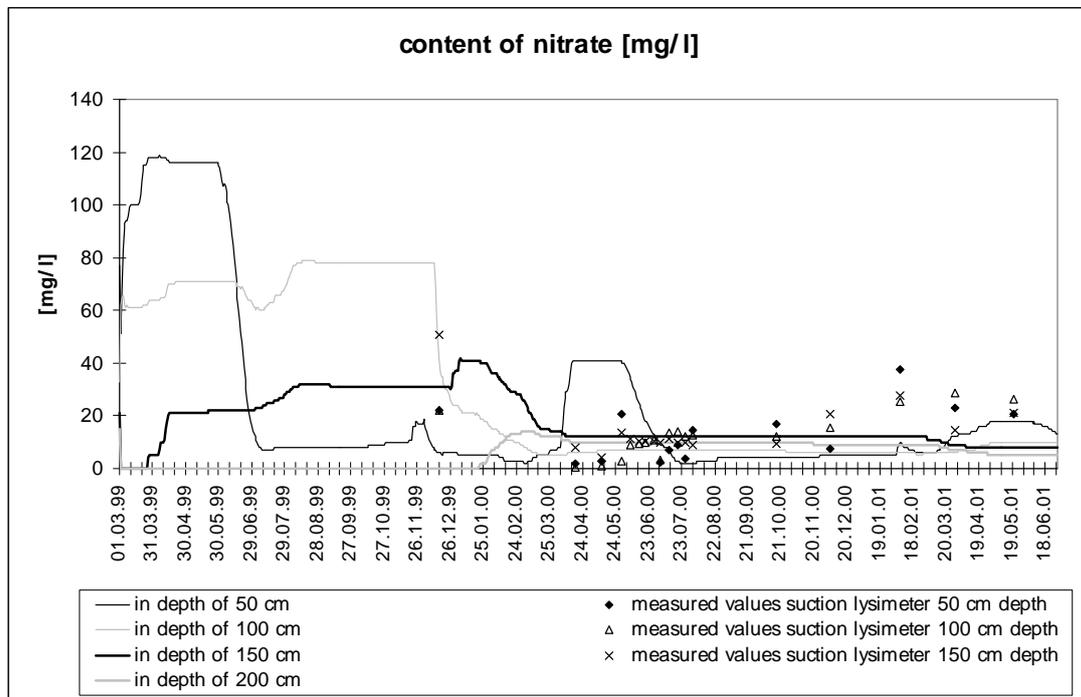


Abbildung 5-5: Simulierte und gemessene Nitratkonzentrationen, Modell HERMES, Fallbeispiel Thülsfeld.

Tabelle 5-5: Mittlere absolute Fehler der Nitratkonzentration; mit HERMES modellierte Tiefenprofile.

Tiefe [cm]	Nitratkonzentrationen [mg/l]			Anzahl der Messungen	Mittlerer absoluter Fehler [mg/l]
	Mittelwert	Minimum	Maximum		
50	13.6	1.9	37.8	14	14.06
100	12.7	0.3	28.6	18	8.16
150	14.6	4.4	50.6	18	5.22
200	0.4	0.0	0.7	2	9.65 ¹⁾

¹⁾ nur zwei Messwerte

In HERMES gibt es nur wenige Möglichkeiten der Parametervariation. Die wichtigsten Werte für die Modellierung der Nitratkonzentration und auch für die Modellierung des mineralisierten Stickstoffs sind die Anfangswerte des mineralisierten Stickstoffs im Boden. Änderungen des Gehaltes an organischem Kohlenstoff oder organischem Stickstoff sind nicht sensitiv.

5.3.1.5 Simulation von Szenarien

5.3.1.5.1 Aufstellung der Szenarien

Es wurden Szenarien berechnet, um zu zeigen, wie sich Änderungen der Landnutzung auf die Auswaschung von Stickstoff und auf die Grundwasserqualität auswirken. Die Basis dieser Berechnungen ist die Modellierung der aktuellen Landnutzung. Die Szenarien betrafen die Art der Ackerfrüchte und die Düngung. Dafür werden 4 Szenarien entwickelt:

- **Szenario 1:** originale Ackerfrucht ohne Winterfrucht: Winterroggen, Triticale, Kartoffeln, Triticale, Düngung wie im Originalfall
- **Szenario 2:** originale Ackerfrucht mit Winterfrucht: Winterroggen, Triticale, Winterroggen, Kartoffeln, Winterroggen, Triticale, deutlich höhere Düngermenge, nur Nutzung von organischem Flüssigdünger (Gülle), typisches Beispiel für intensive Landnutzung
- **Szenario 2a:** originale Ackerfrucht ohne Winterfrucht: Winterroggen, Triticale, Kartoffeln, Triticale, ungefähr die gleiche Menge von organischen Flüssigdünger wie in Szenario 2 jedoch kein Düngereinsatz während Brache, Beispiel für intensive Landnutzung, Brache während Winterperiode
- **Szenario 3:** nach Winterroggen Änderung zu permanentem Grasland, keine Düngung

Die Tabelle 5-6 zeigt die Düngung und den ausgewaschenen Stickstoff für die 4 Szenarien und zum Vergleich der Originalfall (siehe aktuellen Stand der Landnutzung). Nur der ausgewaschene Stickstoff, der einen Einfluss auf die Grundwasserqualität hat, soll hier diskutiert werden.

Die Tabelle zeigt, dass die Menge an ausgewaschenem Stickstoff im Originalfall gleich groß wie nach Änderung zu permanentem Grünland (Szenario 3) ist. Der Grund dafür liegt in der gegenwärtig extensiven Landnutzung des Testfeldes (ökologischer Anbau). Es kann erwartet werden, dass die Stickstoffauswaschung in den folgenden Jahren sinkt, da kein zusätzlicher Dünger ausgebracht wird.

Der deutlichste Einfluss ist in Szenario 1 zu sehen, wo der einzige Unterschied zur Originalvariante die Brache im Winter ist. In diesem Szenario einer moderaten Düngung von 168 kgN/ha ergibt sich eine Auswaschung von 80 kgN/ha. Diese repräsentiert einen Anstieg von 47 kgN/ha im Vergleich zur Originalvariante ohne Änderung der Düngung. Bemerkenswert ist, dass die Steigerung der Düngung in Szenario 2 keinen so hohen Anstieg der Auswaschung bewirkt, solange das Feld im Winter bestellt ist, z.B. mit Winterroggen. Trotz der höheren Düngermengen von 262 kgN/ha wird nur 62 kgN/ha ausgewaschen.

Die Kombination von einer hohen Gülledüngung und Brache im Winter bewirkt nur eine geringe Steigerung der Stickstoffauswaschung im Vergleich zu Szenario 1: 88 kgN/ha werden ausgewaschen, während 290 kgN/ha infolge Düngung auf des Feld ausgebracht werden.

Die Schlussfolgerung aus diesen Szenarien ist, dass Bracheperioden vermieden werden sollten. Für den Untersuchungsfall ist dies der wichtigste Punkt hinsichtlich des Grundwasserschutzes. Zusammen mit einer moderaten Düngung, die an die Bedürfnisse der Pflanzen angepasst ist, kann auf diesem Wege die Stickstoffauswaschung in das Grundwasser minimiert werden.

Tabelle 5-6: Szenarien, die für die Testfelder berechnet wurden.

Fall- beispiel	Art der Ackerfrucht	Düngung	Summe an ak- tivem N [kgN/ha] aus der Düngung	N- Auswaschung [kgN/ha]
Realfall der Land- nutzung	Winterroggen, Triticale, Winterroggen, Kartof- feln, Winterroggen, Tri- tikale	15/4/99 25 dt/ha Ge- flügeldung 18/3/00 140 dt/ha Schweinemist	168	33
Szenario 1	Originale Ackerfrucht jedoch ohne Winter- frucht: Winterroggen, Triticale, Kartoffeln, Triticale	Wie der Originalfall: 15/4/99 25 dt/ha Ge- flügeldung 18/3/00 140 dt/ha Schweinemist	168	80
Szenario 2	Originale Ackerfrucht, mit Winterfrucht: Winterroggen, Triticale, Winterroggen, Kartof- feln, Winterroggen, Tri- tikale	15/4/99 20 m ³ /ha Rindergülle 10/9/99 13 m ³ /ha Schweinegülle 18/3/00 20 m ³ /ha Rindergülle 30/9/00 13 m ³ /ha Schweingülle	292	62
Szenario 2a	Originale Ackerfrucht jedoch ohne Winter- frucht: Winterroggen, Triticale, Kartoffeln, Triticale	15/4/99 20 m ³ /ha Rindergülle 20/6/99 10 m ³ /ha Schweinegülle 18/3/00 20 m ³ /ha Rindergülle 15/4/01 20 m ³ /ha Rindergülle	290	88
Szenario 3	Nach Winterroggen Än- derung zu permanentem Grünland (Gras)	Keine Düngung	0	36

Modellperiode 30/6/99 – 29/6/01 Szenarios 1 – 2a, Modellperiode 5/6/99 – 4/6/01 Szenario 3, Anzahl der Tage: 731

5.3.1.5.2 Berechnungen für die Regionalisierung der Nitratauswaschung

Ein Ziel ist die Anwendung des Modells auf regionaler Maßstabsebene, z.B. bis 10 km². Die realen Daten für die Landnutzung und die Düngung für diese Flächengröße waren nicht verfügbar. In Deutschland sind diese Daten aus Gründen des Datenschutzes nicht zugänglich. Deshalb müssen für die Berechnungen spezielle Annahmen getroffen werden. Eine wichtige Basis für die Berechnungen waren die Berichte zur landwirtschaftlichen Zusatzberatung (Landwirtschaftskammer Weser-Ems & Landwirtschaftsamt Cloppenburg, 1998, 1999). Der Weg zur Verteilung der Fruchtfolgen über das Gesamtgebiet und die Bestimmung der Mittelwerte wurde in INCO (2002) ausführlich beschrieben. Hier werden nur die Ergebnisse gezeigt.

Sechs unterschiedliche Fruchtfolgen wurden modelliert. Es wurden Fruchtfolgen ausgewählt die typisch für die Region und aus landwirtschaftlicher Sicht sinnvoll sind. Die Hauptquelle der Informationen war Verlagsunion Agrar (1993), insbesondere für die Düngung. Tabelle 5-7 zeigt die verwendeten Eingangsdaten für die verschiedenen Berechnungen.

Für verschiedene Berechnungen ist die ausgewaschene Stickstoffmenge in Tabelle 5-8 aufgeführt. Die Multiplikation mit dem Flächenanteil der Ackerfrucht und die nachfolgende Summation der Werte aus 6 Berechnungen führt zu einer mittleren Auswaschungsmenge für Stickstoff von ungefähr 82 kgN/ha*a und 311 mm/a Sickerwasser.

Tabelle 5-7: Fruchtfolgen, Aussaat, Ernte und Düngung als Input in HERMES für das Einzugsgebiet der Brunnenfassung A.

Nr.	Fruchtfolge	Aussaatdatum	Erntedatum	Erntemenge	Ernterückstände	Düngung
1	Winterweizen	15.10.98	12.8.99	65 dt/ha	eingepflügt	
	Winterroggen	2.9.99	-	0	Komplett eingepflügt	
	Sommergerste	20.3.00	12.8.00	40 dt/ha	eingepflügt	18.3.00 11 m ³ /ha Rindergülle 28.4.00 40 kgN/ha Nitrokalk
2	Winterroggen	6.10.98	12.8.99	45 dt/ha	eingepflügt	
	Mais	14.4.00	27.8.00	65 dt/ha	eingepflügt	20.4.00 20 m ³ /ha Rindergülle 15.6.00 20 m ³ /ha Rindergülle
3	Mais	15.4.98	24.8.99	65 dt/ha	eingepflügt	
	Mais	30.4.00	24.8.00	65 dt/ha	eingepflügt	4.5.00 40 kgN/ha Nitrokalk 20.6.00 15 m ³ /ha Rindergülle 20.7.00 6 m ³ /ha Schweinegülle
4	Permanentes Grünland	2.9.98	2.6.99	40 dt/ha	Nur Mähen des Grases	15.3.00 50 kgN/ha Nitrokalk
	10.9.99		40 dt/ha			
	2.6.00 (nur mähen)		40 dt/ha			
5	Winterweizen	18.10.98	25.8.99	65 dt/ha	eingepflügt	
	Wintergerste	20.9.99	25.7.00	55 dt/ha	eingepflügt	30.9.99 30 kgN/ha Nitrokalk 15.3.00 7 m ³ /ha Schweinegülle 28.5.00 7 m ³ /ha Rindergülle
6	Sommergerste	18.3.98	12.8.99	40 dt/ha	eingepflügt	
	Winterroggen	6.10.99	12.8.00	45 dt/ha	eingepflügt	2.11.99 11 m ³ /ha Rindergülle 15.3.00 8 m ³ /ha Schweinegülle

Als Input in MT3D wird die Nitratkonzentration im Sickerwasser benötigt. Die mittlere Inputkonzentration für das Grundwasser wurde wie folgt berechnet:

$$c \text{ NO}_3^- [\text{mg/l}] = N_{\text{leached}} [\text{kgN/ha}] \cdot 4.43 \cdot 100 / \text{Sickerwasser} [\text{mm}]$$

mit $c \text{ NO}_3^-$... Nitratkonzentration, N_{leached} ... Menge an ausgewaschenem Stickstoff und Sickerwasser ... Menge von Sickerwasser.

Auf diesem Weg wurde eine mittlere Nitratkonzentration im Sickerwasser von 116,8 mg/l ermittelt.

Tabelle 5-8: Stickstoffauswaschung und Sickerwassermenge für verschiedene Fruchtfolgen, berechnet mit HERMES für das Einzugsgebiet der Brunnenfassung A.

Berechnungs-nr.	Fruchtfolge	N-Auswaschung [kgN/ha·a]	Sickerwassermenge [mm/a]	Flächengewichtetes Mittel der Ackerfruchtverteilung
1	Winterweizen – Winterroggen – Sommergerste	63	367	0.20
2	Winterroggen – Mais	89	385	0.04
3	Mais - Mais	172	391	0.24
4	Permanentes Grünland	16	240	0.09
5	Winterweizen – Wintergerste	78	357	0.20
6	Sommergerste – Winterroggen	74	352	0.10

5.3.2 Gesättigte Zone

5.3.2.1 Grundlagen zur Modellierung mit dem Modell MODFLOW/MT3D

Für die Grundwassermodellierung wurden die folgenden Daten erhoben: Ausbaudaten und Schichtenverzeichnisse der Brunnen, geologischen und geografische Daten des Einzugsgebietes als Basis für die Ermittlung von hydraulischer Leitfähigkeit, Transmissivität (Daten vom OOWV); Ergebnisse von Pumptests (Daten vom OOWV), Grundwasserneubildungsrate (Daten vom Niedersächsischen Landesamt für Bodenforschung (NLFb)), Stichtagsmessungen der Grundwasserstände für die Kalibrierung des Modells (Daten vom OOWV), Grundwasserförderung (Daten vom OOWV), Grundwasserfließrichtung (Daten vom OOWV). Die Ergebnisse der eigenen Datenerhebungen sind in INCO (2002) enthalten. Zusätzlich wurde die Altersverteilung des Grundwassers (OSTER, 2001) einbezogen. Die Quantifizierung des Nitrateintrages in das Grundwasser wurde mit dem Modell HERMES (Siehe Abschnitt 5.3.1) durchgeführt. Die Strömung wurde mit MODFLOW und der Transport mit MT3D berechnet.

5.3.2.2 Strömungsmodell

5.3.2.2.1 Modellstruktur und Diskretisierung

Das Modellgebiet wird am westlichen und östlichen Modellrand durch den Verlauf der Trinkwasserschutzzone 3 begrenzt. Im Norden bildet die Begrenzung die 20 m-Grundwasserpotentiallinie und im Süden der Beobachtungspiegel P 184.

Die Gauss-Krüger-Koordinaten des Modellgebietes sind:

X =	21.900 m	bis	27.500 m;	Breite = 5.600 m
Y =	60.400 m	bis	67.600 m;	Länge = 7.200 m
Z =	-60 m ü.NN	bis	40 m ü.NN;	Höhe = 100 m

Das hydrogeologische Strukturmodell besteht aus vier Schichten mit den folgenden z-Koordinaten:

Schicht 1	GOK bis 10 m ü.NN
Schicht 2	10 m ü. NN bis -10 m ü.NN

Schicht 3 -10 m ü.NN bis -30 m ü.NN

Schicht 4 -30 m ü.NN bis -60 m ü.NN

Die Wahl der Diskretisierung des Berechnungsnetzes erfordert, auch im Hinblick auf die geplante inverse Modellierung, zusätzliche Untersuchungen bzgl. der Auswirkungen der räumlichen Diskretisierung auf die Genauigkeit des Modellergebnisses. Die Vorgehensweise ist in Anlage 5-14 dargelegt. Aufgrund dieser Sensitivitätsanalyse wurde die vertikale Diskretisierung des Modells auf 1,0 m mächtige Schichten festgelegt, bis in eine Tiefe von 21 m uGOK. Der deutlich höhere Rechenaufwand bei einer Mächtigkeit der Schichten von 0,5 m mit einem nicht wesentlich genaueren Ergebnis wäre nicht gerechtfertigt. Für die horizontale Rastergröße auf den Testfeld Högemann (siehe Abbildung 5-6) bis hin zu den Förderbrunnen (siehe Abbildung 5-8) wurden Schrittweiten von 50 m gewählt.

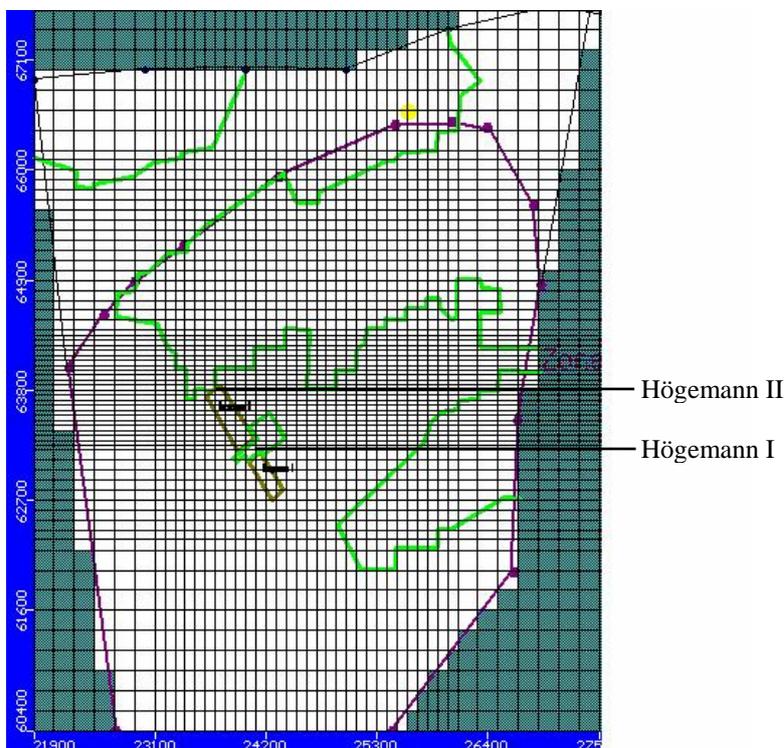


Abbildung 5-6: Das Modellgebiet in der Draufsicht mit den Feldern von Bauer Högemann I und II und übrige landwirtschaftliche Flächen und der Ausdehnung der Waldflächen.

Das Berechnungsgitter wurde vertikal auf insgesamt 26 Schichten festgelegt. Zu beachten ist dabei, dass MODFLOW/MT3D für die gesättigte Zone konzipiert sind. Die obere Grenze des Modells ist also nicht die Geländeoberkante, sondern der Grundwasserspiegel. Aufgrund des Süd-Nord-Gefälles würden bei einem horizontalen Verlauf der Schichten und einer Mächtigkeit von 1,0 m die obersten Zellen im nördlichen Bereich des Modellgebiets trocken fallen. Dies stellt aber ein Abbruchkriterium des Transportmodells dar. Deshalb sind die Schichten parallel zum Grundwasserspiegel ausgerichtet. Die Schichten 2 – 19 sind 1,0 m mächtig und reichen bis in eine Tiefe von 8 m ü.NN an der SGM-Messstelle. Der durch das Nitrat belastete obere Aquiferbereich wird vollkommen durch diese 1,0 m mächtigen Schichten abgedeckt. Danach nimmt die Mächtigkeit bis zur 26. Schicht zu. Das Ergebnis ist das folgende Gitternetz für die Berechnung (Abbildungen Abbildung 5-6 und Abbildung 5-7).

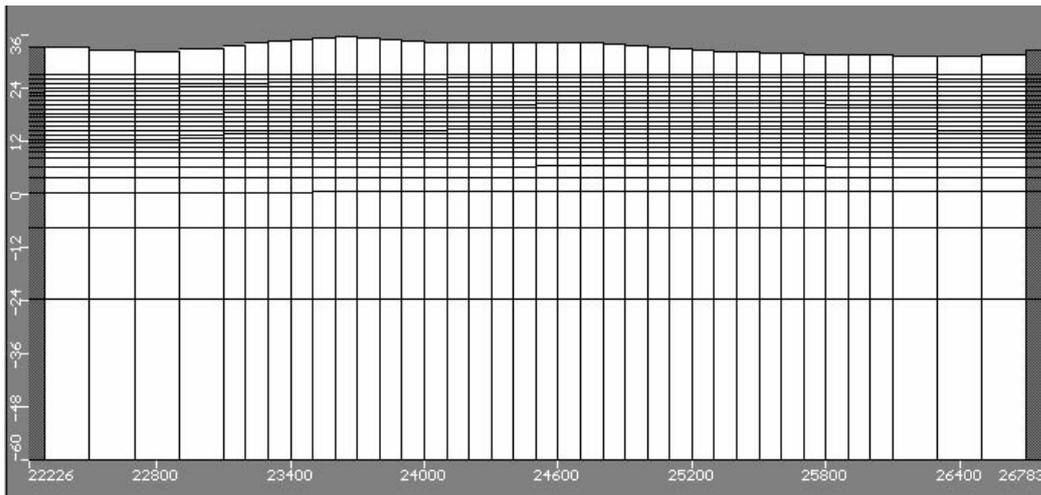


Abbildung 5-7: Vertikale Diskretisierung des Modellgitters (West-Ost-Schnitt).

5.3.2.2 Randbedingungen und Parametrisierung

Die hydrologischen Randbedingungen im Modell wurden wie folgt definiert:

- Nord: vorgegebene Piezometerhöhe von 20 m ü.NN (Randbedingung 1. Art). Durch langjährige Beobachtungen war festgestellt worden, dass die 20 m NN - Grundwasserpotentiallinie unabhängig von den Förderbrunnen immer die gleiche Lage besitzt
- Süd: General Head Boundary mit einer Piezometerhöhe von 31 m ü.NN (Sonderform aus Randbedingung 1. und 2. Art)
- West: Grundwasserspiegel ergibt sich entlang der Randstromlinie (Sonderfall der Randbedingung 2. Art)
- Ost: Grundwasserspiegel ergibt sich ebenfalls entlang der Randstromlinie (Sonderfall der Randbedingung 2. Art)

Die Eigenschaften des Aquifers sind aufgrund seiner Homogenität bezogen auf das dominierende Gesteinsmaterial weitestgehend einheitlich für das gesamte Modellgebiet. Bei den Durchlässigkeitsbeiwerten werden leicht variierende Werte nach Wocköck (1991) verwendet. Demnach wird der Aquifer in Zonen gleicher Durchlässigkeitsbeiwerte eingeteilt, die für die Schichtmächtigkeit als konstant angenommen werden. Diese Zonierung ist in Anlage 5-6 dargestellt.

Die Aquiferparameter sind folgende (Wocköck, 1991):

Durchlässigkeitsbeiwert:	$k_{x,y,z} = 3,6 \cdot 10^{-4}$ bis $9,3 \cdot 10^{-5}$	[m/s]
Spezifischer Speicherkoeffizient:	$S_s = 1 \cdot 10^{-4}$	[1/m]
Speicherkoeffizient:	$S_y = 0,2$	[-]
Nutzbare Porosität:	$n_e = 0,2$	[-]

Die zweidimensionale Verteilung der Grundwasserneubildung (GWN) wurde Wocköck (1991) entnommen. Die Daten wurden nach der Methode von Dörhöfer & Josopait (1980) bestimmt. Diese Methode berücksichtigt den Einfluss von Niederschlag, Boden, Vegetation, Tiefenlage des Grundwasserspiegels und den Landoberflächenabfluss. Die Ergebnisse sind

langjährige Mittelwerte. Die mittleren Werte für das gesamte Modellgebiet liegen zwischen 235 und 375 [mm/a]. Im Norden des Modellgebietes ist die GWN größer als im Süden. Die Zonen der GWN sind in Anlage 5-6 dargestellt.

Die mittlere Förderrate der Brunnenfassung A beträgt ca. $5,6 \cdot 10^6 \text{ m}^3/\text{a}$. Die Rate ist unterteilt in 17 Einzelraten (F1 ... F17) entsprechend den Informationen von Wasserwerk. Die mittlere Kapazität der Einzelbrunnen beträgt 60 bis 70 m^3/h . Anhand der Betriebsstunden wurde die Förderrate der Einzelbrunnen berechnet. Die Lage der Brunnengalerie ist in Abbildung 5-8 ersichtlich.

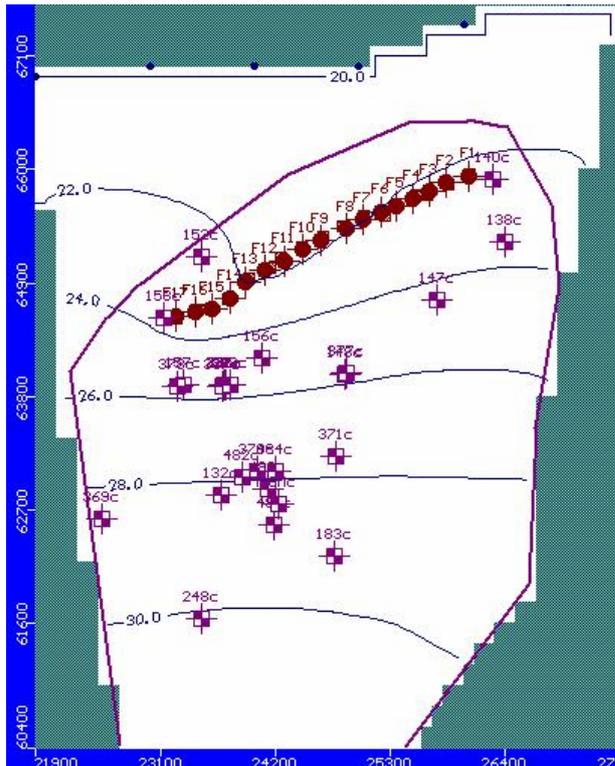


Abbildung 5-8: Das Modellgebiet in der Draufsicht mit Lage der Brunnengalerie, Gütepegeln und berechneten Äquipotenziallinien der GW-Stände.

In Juni 1999 wurde eine Stichtagsmessung an 33 Grundwasserbeobachtungsrohren durchgeführt (INCO, 2002). Eine Karte mit den Grundwassergleichen der Jahre 1999 und 2000 ist in INCO (2002) enthalten. Die Analyse der Förderraten zeigt nahezu konstante Werte. Auf dieser Basis kann der Grundwassergleichenplan als stationär angenommen werden. Als Randbedingung im Norden wurden die Wasserstände vom Juni 1999 angenommen. Diese Messung wurde auch als Vergleichsgröße für die berechneten Piezometerhöhen verwendet.

5.3.2.2.3 Ergebnis der Kalibrierung des Strömungsmodells

Die Modellierung der Grundwasserströmung des Aquifers Thülsfeld wurde für den vereinfachten stationären Fall durchgeführt und auf eine Stichtagsmessung des Grundwasserspiegels vom 23.06.1999 kalibriert. Der durch das Modell berechnete Grundwassergleichenplan ist in Abbildung 5-8 dargestellt.

Die Grundwassergleichen verlaufen von Süden bis in die Mitte des Modellierungsgebietes

relativ gleichmäßig und parallel. Die Grundwasserfließrichtung ergibt sich somit in nördliche Richtung. Deutlich zu erkennen ist dann der Einfluss der Brunnengalerie im nördlichen Teil des Modellierungsgebietes.

Um die Lage des im Modell berechneten Grundwasserspiegels mit dem realen Grundwasserspiegel zu vergleichen, wurden die berechneten gegen die gemessenen Höhen des Grundwasserspiegels im folgenden Scatter-Diagramm (Abbildung 5-9) aufgetragen. Unter dem Scatter-Diagramm sind die berechneten Fehler dargestellt.

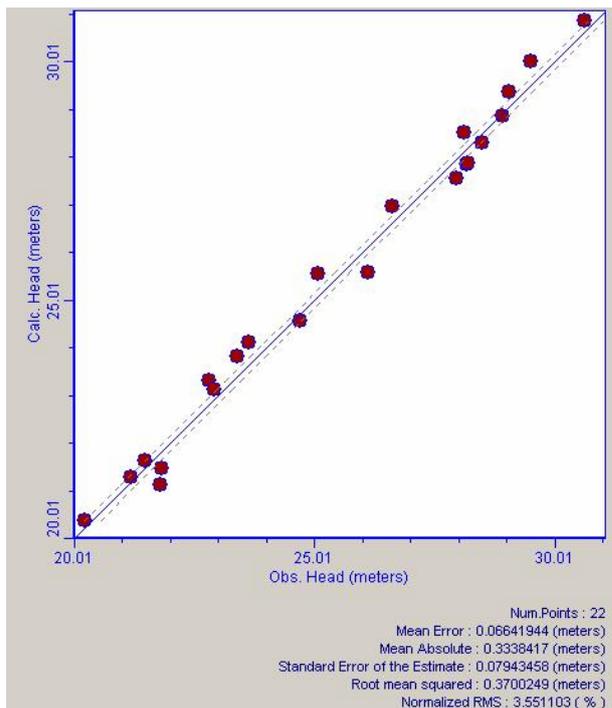


Abbildung 5-9: Vergleich der gemessenen (Obs. Head) und berechneten (Calc. Head) Piezometerhöhen.

Die Fehler wurden wie folgt berechnet:

Mittlere Fehler

$$me = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_{calc} - X_{obs})_i$$

Mittlere absoluter Fehler

$$mae = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |X_{calc} - X_{obs}|_i$$

Standardschätzfehler

$$S.E.E. = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_{calc} - X_{obs})_i^2 - \left[\sum_{i=1}^n (X_{calc} - X_{obs})_i \right]^2}{n-1}}$$

Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers

$$RMS = \frac{1}{n} \sqrt{\sum_{i=1}^n (X_{calc} - X_{obs})_i^2}$$

standardisierter RMS

$$NormalizedRMS = \frac{RMS}{(X_{obs})_{max} - (X_{obs})_{min}}$$

mit X_{obs} ... gemessene Werte, X_{calc} ... berechnete Werte, n ... Anzahl der Datenpaare.

Bei einer vollständigen Übereinstimmung der gemessenen und berechneten Werte müssten alle Datenpunkte exakt auf der 45°- Linie liegen. Die Kalibrierung des Grundwasserströmungsmodells für den Aquifer Thülsfeld kann mit einem mittleren Fehler von ca. 7 cm als akzeptabel eingeschätzt werden. Auch eine mittlere absolute Differenz zwischen den berechneten und gemessenen Piezometerhöhen von 0,33 m bedeutet eine gute Kalibrierung des Modells.

5.3.2.3 Transportmodell

5.3.2.3.1 Grundlagen und Annahmen

Die Simulation des Transportes wurde mit dem Modell MT3D durchgeführt. Infolge der geringen verfügbaren Daten zum Stoffumsatz im Grundwasser mussten einige Annahmen hinsichtlich der Eingangsdaten und Parameter getroffen werden, die im Folgenden genannt werden.

- Der Nitrateintrag in das Grundwasser wurde, entsprechend des Kopplungskonzeptes, gleichgesetzt mit der Nitratkonzentration, die mit dem Modell HERMES simuliert wurde.
- Die hydrodynamische Dispersion ist unbekannt. Sie wird auf der Basis von Literaturdaten (z.B. <ftp://ihlww.boku.ac.at/Bodenphysik/Beispiele/Beispiel19.pdf>) für sandige Sedimente mit $\alpha_L = 10$ cm (longitudinal) and $\alpha_T = 1$ cm (transversal) festgelegt.
- Auf der Grundlage von Literaturdaten wurde sie mit 10 cm für die longitudinale und 1 cm für die transversale Richtung angenommen.
- Aufgrund der Sauerstoffkonzentrationsmessungen im Aquifer konnten in den Tiefen von 0 – 15 m uGOK 2 Zonen unterschieden werden: eine Zone mit hohen und eine Zone mit niedrigen Sauerstoffgehalten (Abbildung 5-10). In der sauerstoffreichen Zone geschieht keine Nitratreduktion. In der sauerstoffarmen Zone kann die Reduktion von Nitrat beginnend von der GW-Oberfläche postuliert werden. Die Probenahmetiefen sind in Anlage 5-8 ersichtlich.
- In dem Aquifer, der als relativ homogen hinsichtlich der physikalischen Eigenschaften charakterisiert ist, gibt es zwei Schichten mit höheren Pyritgehalten. Sie liegen zwischen 21 - 24 m und 30 - 35 m uGOK. Es wird angenommen, dass diese Schichten sich über das gesamte Gebiet erstrecken. Das erscheint nach der Genese sinnvoll, jedoch gibt es dazu bisher keine systematischen Erkenntnisse. Die obere Schicht 21 - 24 m uGOK stellt die untere Grenze des Nitrats im Grundwasser dar. In der sauerstoffreicheren Zone unterhalb dieser Schicht wurde kein Nitrat mehr nachgewiesen, d.h. in der Schicht wird das Nitrat komplett reduziert.
- Der Nitratabbau kann durch eine Reaktion 1. Ordnung beschrieben werden (siehe Kapitel 4).

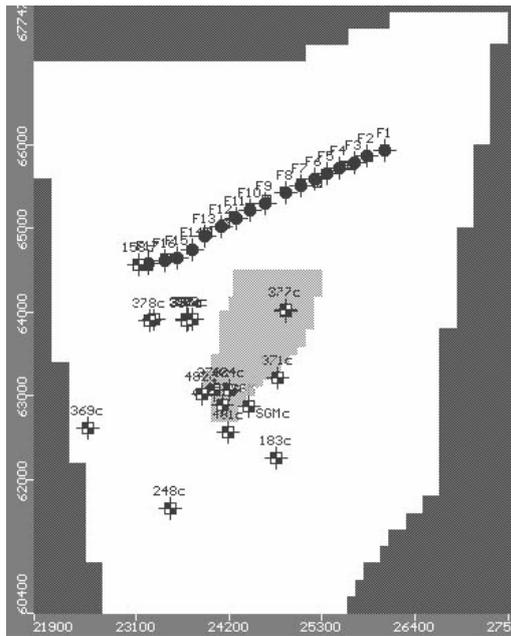


Abbildung 5-10: Lage der Zone mit geringem Sauerstoffgehalt. (Die Zone ist hellgrau gekennzeichnet.)

5.3.2.3.2 Kinetik der Nitratreduktion

Neben der notwendigen Berücksichtigung von zwei Zonen mit unterschiedlichen Sauerstoffkonzentrationen (dies wird im Kapitel 4 erläutert), mussten die Abbaukonstanten (k -Werte) bestimmt werden. Unter der Annahme, dass Nitrat den begrenzenden Faktor hinsichtlich der Nitratreduktion darstellt, kann der Abbau des Nitrats als eine Reaktion 1. Ordnung beschrieben werden.

Beim Abbau 1. Ordnung ist die Konzentrationsänderung des Nitrats pro Zeiteinheit proportional zur eigenen Konzentration. Diese sinkt dabei exponentiell mit der Zeit ab. Die Gleichung lautet:

$$-\frac{dc_{NO_3}}{dt} = k_{NO_3} * c_0 \quad (\text{Gl. 5.1})$$

mit der Abbaurate $-dc_{NO_3}/dt$, der Anfangskonzentration c_0 und der Reaktionskonstanten k_{NO_3} . Integriert man diese Gleichung, so ergibt sich Gleichung 5.2, mit der sich die Konzentration des Nitrats nach einer bestimmten Zeit t bestimmen lässt.

$$c_{NO_3} = c_0 \exp[-k_{NO_3} * t] \quad (\text{Gl. 5.2})$$

Damit MT3D diese Gleichung lösen kann, muss vorher noch die Reaktionskonstante k ermittelt werden.

Dazu ist auf die bereits gewonnenen Erkenntnisse über den Nitratumsatz zurückzugreifen. Unter den in Abschnitt 4.2 festgelegten Voraussetzungen kann von der Modellvorstellung einer vertikalen Nitratreduktion ausgegangen werden. Setzt man nun die Nitratkonzentrationen aus verschiedenen Tiefen mit dem dazugehörigen Grundwasseralter in Beziehung, so erhält man eine Änderung der Nitratkonzentration in Abhängigkeit von Zeit und Tiefe. Die Reaktionskonstante ergibt sich zu

$$k_{NO_3} = -\frac{dc_{NO_3}}{dt} * \frac{1}{c_0} \quad (\text{Gl. 5.3})$$

Da es im betrachteten Aquifer zwei verschiedene Zonen bezogen auf die Nitratreduktion gibt, müssen auch zwei verschiedene k-Werte berechnet werden

Im Bereich des Aquifers, in dem die Sauerstoffgehalte bis in eine Tiefe von 15 – 20 m uGOK noch sehr hoch sind, kommt es erst beim Eintritt des Grundwassers in die ab 20 m uGOK beginnende reaktive Schicht zu einer relevanten Nitratreduktion. Für die tiefendifferenzierte Gegenüberstellung werden die Messwerte der SGM-Messstelle und des Staffelbrunnens verwendet. Man setzt also die Nitratkonzentrationen direkt über der reaktiven Schicht (SGM 4 und P 335) ins Verhältnis zu den Nitratkonzentrationen unter dieser Schicht (SGM 5/6/7 und P336/337). Wichtig ist, dass jeweils der Messtermin mit dem größten Konzentrationsgradienten zwischen den Messpunkten verwendet wird, um die größtmögliche Reaktionskonstante zu erhalten.

In Tabelle 5-9 sind die entsprechenden Nitratkonzentrationen der Messtermine 17.10.2000 (SGM) und 23.06.1997 (Staffelbrunnen) dargestellt.

Tabelle 5-9: Nitratkonzentration im Vergleich zum Grundwasseralter.

Messpunkt	Grundwasseralter [a]	Konzentration [mg/l]	Reaktionszeit [a]
SGM 4	16	145	0
SGM 5	24	10	9
SGM 6	36	0	21
P 335	13	286	0
P 336	32	0	17
P 337	50	0	35

Die Abbaufunktionen mit den auf dieser Grundlage berechneten Reaktionskonstanten sind in Abbildung 5-11 dargestellt.

Da die Reaktionskonstante abhängig ist von der Ausgangskonzentration und Nitrat hier der limitierende Faktor ist, ergibt sich eine Reaktionskonstante an der SGM-Messstelle von mindestens $k = 0,4 [1/a]$ und am Staffelbrunnen von mindestens $k = 0,5 [1/a]$.

Da man an beiden Messstellen von der gleichen reaktiven Schicht ausgeht, kann man im Transportmodell $k = 0,5 [1/a]$ setzen, da er an der SGM-Messstelle nur aufgrund der geringeren Ausgangskonzentration niedriger ist.

Für den Bereich des Aquifers, in dem schon die oberen Schichten sauerstoffarm sind, kann ein k-Wert von $k = 0,2 [1/a]$ angesetzt werden. Da sich die hier bestimmten k-Werte auf die Reduktion des Nitrats beziehen, sind sie als Ergebnis aller Abbaureaktionen zu sehen. Im Modell wird die Adsorption des Nitrats deshalb nicht gesondert angesetzt.

Auch hier sei noch einmal darauf hingewiesen, dass man korrekterweise zwei Konzentrationen zum gleichen Termin aus unterschiedlichen Tiefen nicht direkt miteinander vergleichen kann. Es wäre nämlich auch möglich, dass beispielsweise die hohe Konzentration von 286 mg/l Nitrat in P 335 auf dem Weg zu P 336 nicht vollständig abgebaut werden kann. Dies wäre aufgrund der zeitlichen Verzögerung (siehe Tabelle 5-9) aber erst 17 Jahre später zu überprüfen. Deshalb kann der hier beschriebene Weg als eine erste Näherung des k-Werts angesetzt werden.

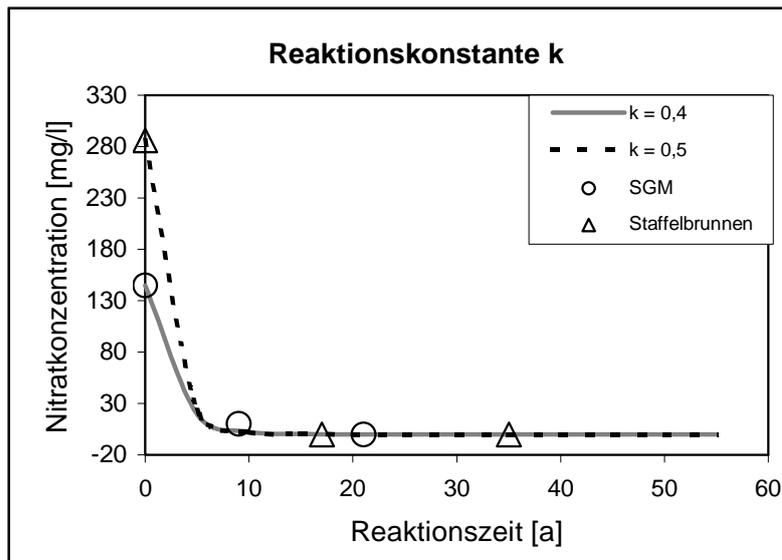


Abbildung 5-11: Ermittlung der Reaktionskonstanten der Nitratreduktion.

5.3.2.3.3 Parametrisierung, Kalibrierung und Berechnungsszenarien

Das Transportmodell MT3D wurde parametrisiert und kalibriert. Die verwendeten Parameter sind in Tabelle 5-10 aufgeführt.

Tabelle 5-10: Parameter des MT3D Modells.

Parameter	Wert
k-Wert für die Zone mit niedriger Sauerstoffkonzentration (k_l) = Schicht 1-14	0.2 [1/a]
k-Wert für die Zone mit hoher Sauerstoffkonzentration ($k_{h,1}$) = Schicht 1-14	0 [1/a]
k-Wert für die Zone mit hoher Sauerstoffkonzentration ($k_{h,2}$) = Schicht 15 – 26 (reaktive Schicht)	0.5 [1/a]
Longitudinale Dispersivität (α_l)	10 [cm]
Transversale Dispersivität (α_T)	1 [cm]
Diffusion	0 [m ² /d]

Für die Kalibrierung wurden 12 Beobachtungsbrunnen ausgewählt, für die längerfristige Zeitreihen der Konzentrationsmessungen verfügbar sind (Tabelle 5-11). Damit ist die Möglichkeit der instationären Modelleichung gegeben.

Zur Modellierung des Nitratumsatzes im Aquifer Thülsfeld wird nur die Randbedingung 3. Art berücksichtigt, d.h. Vorgabe eines Gesamtflusses mit einer entsprechenden Konzentration (Recharge, Infiltration). Der damit vorgegebene Eintrag wird als so genannter Concentration-Recharge (CR) in das Grundwasser eingetragen.

Die Anwendung für das Transportmodell MODFLOW/MT3D wurde für das gesamte Untersuchungsgebiet durchgeführt. Die Berechnung wurde als quasi-instationäre Anwendung durchgeführt, d.h. alle Anfangswerte und die Parameter blieben unverändert. Es ist jedoch möglich variable Inputdaten zu verwenden, wenn gewünscht und vorhanden.

Tabelle 5-11: Beobachtungsbrunnen, die für die Kalibrierung von MT3D genutzt wurden.

Brunnen Nr.	Brunnen Nr.
183	371
248	377
335	389
336	140
337	147
370	148

Die Modellanwendung wurde für 2 Szenarien des CR durchgeführt (Szenarien 1 und 2a; siehe Abschnitt 5.3.1). Diese wurden ausgewählt, da sie die Extremfälle repräsentieren. Der *Status quo* ist das Szenario 1. Szenario 2a erzeugt die höchsten Stickstoffausträge unter den Feldern von Bauer Högemann. Die Tabelle 5-12 zeigt die Inputdaten des CR.

Tabelle 5-12: Nitratkonzentrationen der GWN [mg/l] in den Szenarien 1 und 2a.

Gebiet	Szenario 1	Szenario 2a
Testfeld Högemann I und II	42	102
Übrige landwirtschaftliche Nutzfläche	117	117
Wald	5	5

5.3.2.4 Ergebnis der Kalibrierung und der Simulation

Um die Anpassungsgüte des Transportmodells zu testen, wurde nach der in Abschnitt 5.3.2.2.3 beschriebenen Methode vorgegangen. Der Kalibrierungsvergleich zwischen gemessenen und berechneten Grundwasserkonzentrationen von Nitrat ist in Abbildung 5-12 enthalten. Die Abbildungen zeigen, dass die Kalibrierung zufrieden stellend gelungen ist.

Die Abbildung 5-13 zeigt die Draufsicht auf die gegenwärtige Konzentrationsverteilung im Thülsfelder Aquifer. Die hellgrauen Flächen sind landwirtschaftlich genutzt und haben höhere CR von ca. 80 mg NO₃/l. Die dunkleren Flächen sind Waldflächen mit 20 mg/l. Es ist gut zu sehen, dass die Waldflächen und die Testfelder von Bauer Högemann durch geringere Konzentrationen gleicher Größenordnung charakterisiert sind.

Der Schnitt A-A' (Schnittführung siehe Abbildung 5-13) einschließlich der Förderbrunnen F13 und die Konzentrationsgleichungen sind in Abbildung 5-14 dargestellt. Die Verteilung der Konzentrationen und die Höhe der Konzentrationen sind typisch für landwirtschaftliche genutzte Gebiete und für Waldflächen. In Abbildung 5-16 sind die niedrigen Nitratkonzentration in der Nähe des Förderbrunnens (unter Wald) und die hohen Konzentrationen unter den landwirtschaftlich genutzten Flächen sichtbar. Die Situation nach einem Simulationslauf über 20 Jahre nach Szenario 1 wird in Abbildung 5-15 gezeigt.

Man kann die Lageänderung der Konzentrationsfront hin zum Förderbrunnen F13 erkennen und damit die Gefahr steigender Nitratkonzentrationen im geförderten Rohwasser. Allerdings ist das Vorankommen der Konzentrationsfront auf die Tiefe über 21 m uGOK begrenzt. Bis zu diesem Zeitpunkt wird Nitrat zu großen Teilen in der darunter liegenden reaktiven Schicht abgebaut. Der Vergleich mit Szenario 2a (Abbildung 5-16) verdeutlicht den Einfluss des ökologischen Landbaus vom Bauer Högemann. Verglichen mit Abbildung 5-15 sind in Abbildung 5-16 weit höhere Konzentrationen in der Umgebung des Brunnens F13 nach 20 Jahren Simulation zu sehen.

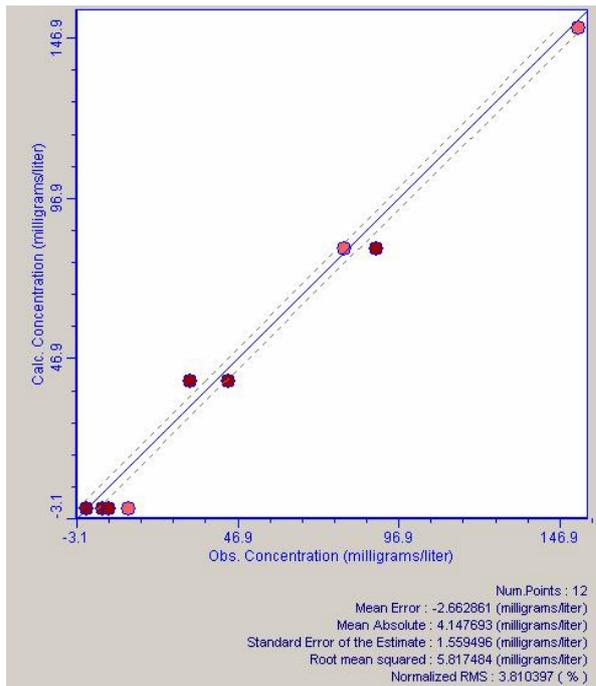


Abbildung 5-12: Kalibrierungsplot für die Nitratkonzentration im Grundwasser (quasi-instationär). Nur die 12 Beobachtungsbrunnen mit Langzeitmessungen sind in den Plot aufgenommen.

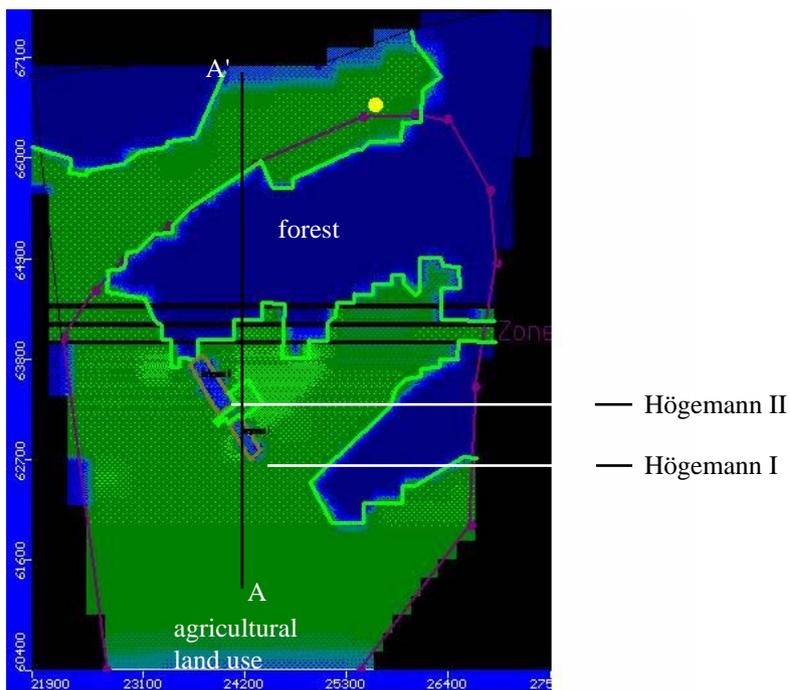


Abbildung 5-13: Draufsicht auf die Nitratkonzentrationsverteilung und Markierung der Schnittlinie A-A'.

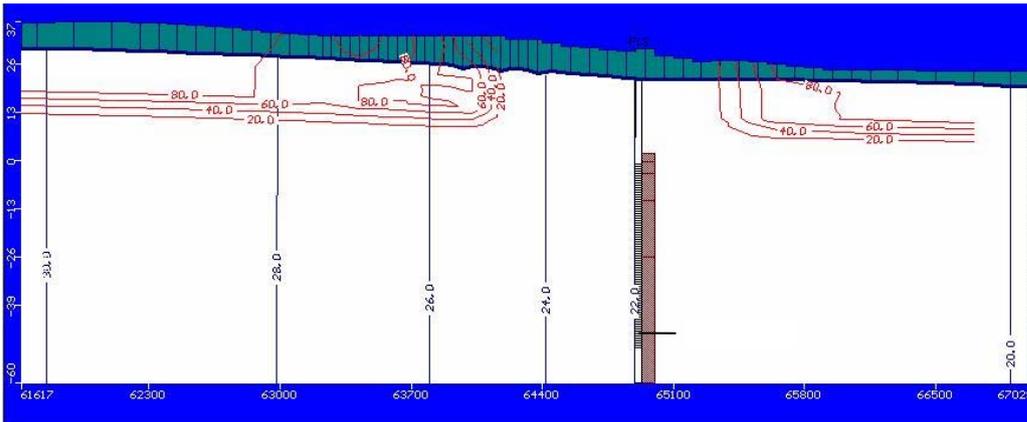


Abbildung 5-14: Anfangszustand für Szenario 1 (Status quo), Jahr 0.

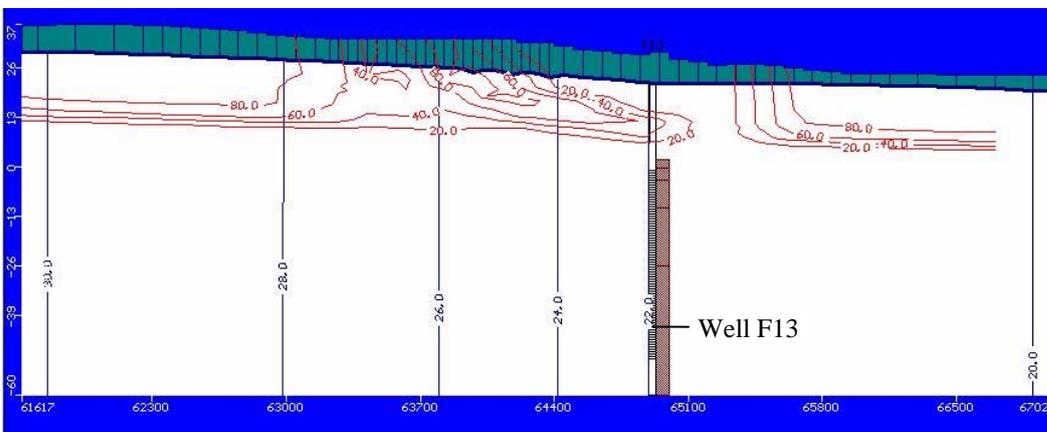


Abbildung 5-15: Ende der Simulation von Szenario 1, Jahr 20.

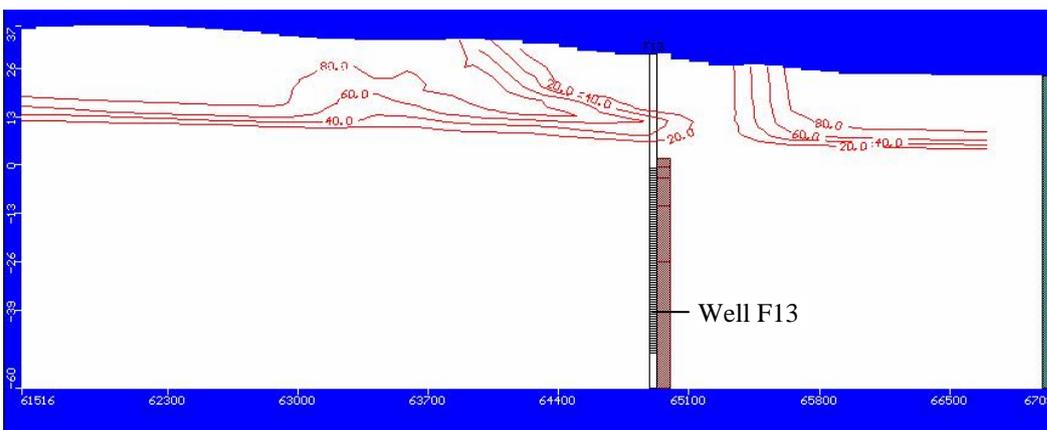


Abbildung 5-16: Ende der Simulation nach Szenario 2a, Jahr 20.

5.4 Inverse Modellierung zur Rekonstruktion des Nitrateintrages

Eine Möglichkeit zur Rekonstruktion von Nitrateinträgen vergangener Jahre besteht in der inversen Modellierung der Nitrattransportes. Dazu wird versucht, ausgehend von den verfügbaren Messdaten der Vergangenheit, den dazu gehörenden Stoffeintrag zu simulieren. Es wird im Folgenden zuerst dargelegt, wie die Modellierung der Einzelpegel erfolgt (Abschnitt

5.4.1). Danach wird die flächenhafte Modellierung erläutert (Abschnitt 5.4.2).

5.4.1 Modellierung von Einzelpegeln

Der Konzentrationsverlauf an einem einzelnen Gütepegel hängt vom Concentration-Recharge (CR) und von den Aquifer-Eigenschaften auf dem Transportpfad ab. Da sich alle Pegel in einem intensiv landwirtschaftlich genutzten Gebiet befinden, erfolgt der Eintrag des Nitrats über das Sickerwasser in das Grundwasser. Die Nitratkonzentration am Beobachtungspunkt wurde in einer Entfernung dx gegen die Strömungsrichtung des Grundwassers gebildet. Zu beachten ist der Abbau auf dem Transportpfad.

In der Abbildung 5-17 soll dieses am Beispiel des Pegels P 369 verdeutlicht werden.

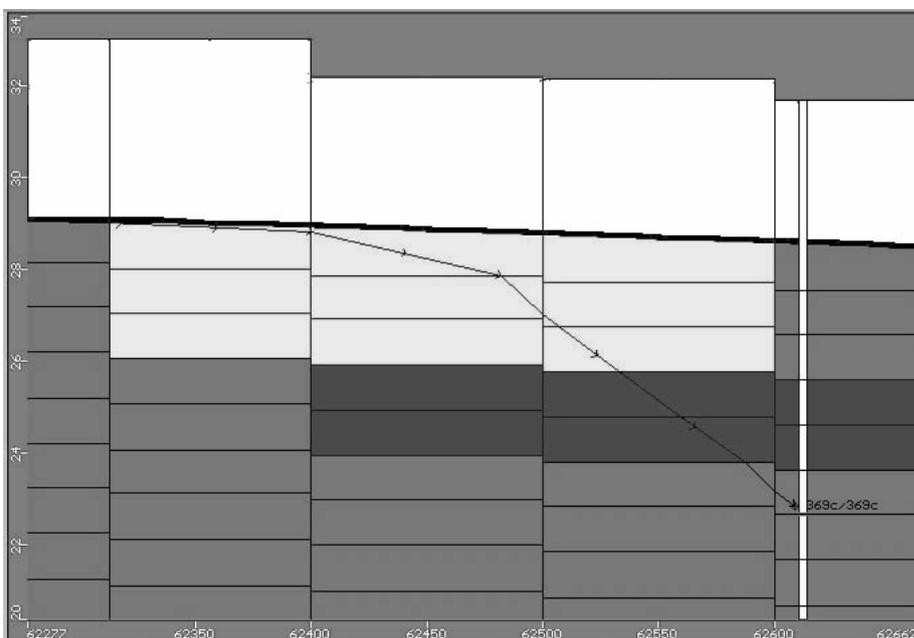


Abbildung 5-17: Pegel P 369 mit Bahnlinie und den verschiedenen Ausgangskonzentrationen der einzelnen Schichten.

Das Grundwasser bewegt sich entlang der eingezeichneten Bahnlinie von der Grundwasseroberfläche bis zum Beobachtungspunkt. Die Strecke beträgt etwa 200 m. Dazu benötigt das Grundwasser ca. 3 Jahre. Es ist zu berücksichtigen, dass sich infolge dispersiver Prozesse die Nitratfront schneller vorwärts bewegt, als durch die mittlere Grundwasserfließgeschwindigkeit zu erwarten wäre.

Soll nun der Konzentrationsverlauf am Pegel P 369 simuliert werden, müssen möglichst genaue Kenntnisse über den Nitratintrag vorliegen. Die Höhe des Nitratintrags ist in erster Linie abhängig von der praktizierten landwirtschaftlichen Bewirtschaftung. Zur Landwirtschaft des gesamten Einzugsgebietes stehen aber nur Durchschnittswerte aus den Berichten der landwirtschaftlichen Zusatzberatung einzelner Jahre zur Verfügung. Über diese Durchschnittswerte kann kein Bezug zu einer bestimmten Fläche hergestellt werden. Außerdem sind die Landwirte lange Zeit nicht verpflichtet gewesen, Angaben über Art und Menge des eingetragenen Düngers zu machen.

Daraus ergibt sich also, dass keine Angaben über die Art der Flächennutzung und die Art und

Menge des verwendeten Düngers für eine bestimmte Fläche zu einem bestimmten Zeitpunkt zur Verfügung stehen. Selbst wenn beides bekannt wäre, würde die Sickerwasserkonzentration unter der entsprechenden Fläche immer noch eine Unbekannte darstellen, da sie von der Menge des ausgewaschenen Düngers aus der Wurzelzone der Pflanzen und einigen anderen Faktoren abhängt.

Mit Hilfe eines inversen Verfahrens kann jedoch das Problem gelöst werden. In diesem Fall bedeutet das, dass man über eine Rückwärtssimulation die notwendige Größe des Nitratreintrags in das Grundwasser bestimmt bei der sich in den entsprechenden Pegeln die gemessene Nitratkonzentration einstellt (z.B. Engelen & Kloosterman, 1996).

Da von den meisten Pegeln die Nitratwerte der letzten 10 Jahre vorliegen, wurde der zu modellierende Zeitraum auf diese 10 Jahre festgelegt. Die Simulationen starten im Jahr 1991 und enden im Jahr 2001. Die Werte des Nitratreintrags ins Grundwasser (Concentration-Recharge, CR) wurden in Jahresmittelwerten der Konzentration c [mg/l] angegeben.

Da das durch den CR zugeführte nitrathaltige Wasser den Beobachtungspiegel zeitlich versetzt erreicht, muss im Modellgebiet entlang der jeweiligen Bahnlinie eine Anfangskonzentration vorgegeben werden. Diese wird aus der aktuellen vertikalen Konzentrationsverteilung abgeleitet und entsprechend der Konzentrationsverlaufes der letzten 10 Jahre am Pegel auf die vorhergehenden Zeitschritte übertragen. Dabei wird vereinfachend angenommen, dass das Konzentrationsprofil am SGM repräsentativ für das Gebiet ist.

Im Beispielfall des Pegels P 369 (Abbildung 5-17) ist dies dargestellt. Die unterschiedlichen Graufärbungen stellen jeweils eine Ausgangskonzentration dar. Wie viele Schichten mit jeweils derselben Ausgangskonzentration belegt werden, hängt von der Länge des Aufenthalts und der sich daraus ergebenden Nitratkonzentration im Beobachtungspiegel ab.

Diese Trial-and-Error-Prozedur wurde für alle Beobachtungspiegel durchgeführt, für die Nitratmesswerte vorlagen.

Die Ergebnisse dieser Modellierung und der entsprechenden Simulation für die einzelnen Pegel sind in Anlage 5-9 aufgeführt. Hier soll beispielhaft nur das Ergebnis des Pegels P 369 dargestellt werden.

Folgende Ausgangskonzentrationen des Nitrats wurden im Modell angesetzt:

Schicht	1 – 3	130 mg/l
Schicht	4 – 5	110 mg/l
Schicht	6 – 13	81 mg/l

Die sich ergebenden Nitratkonzentrationen im Sickerwasser sind in Tabelle 5-13 aufgeführt.

In der Abbildung 5-18 ist der Vergleich der gemessenen Nitratkonzentrationsganglinie und der vom Modell berechneten dargestellt.

Tabelle 5-13: Concentration-Recharge-Werte des Pegels P 369 von 1991 - 2001.

Jahr	91/92	92/93	93/94	94/95	95/96	96/97	97/98	98/99	99/00	00/01
c [mg/l]	140	150	250	400	180	160	140	130	100	100

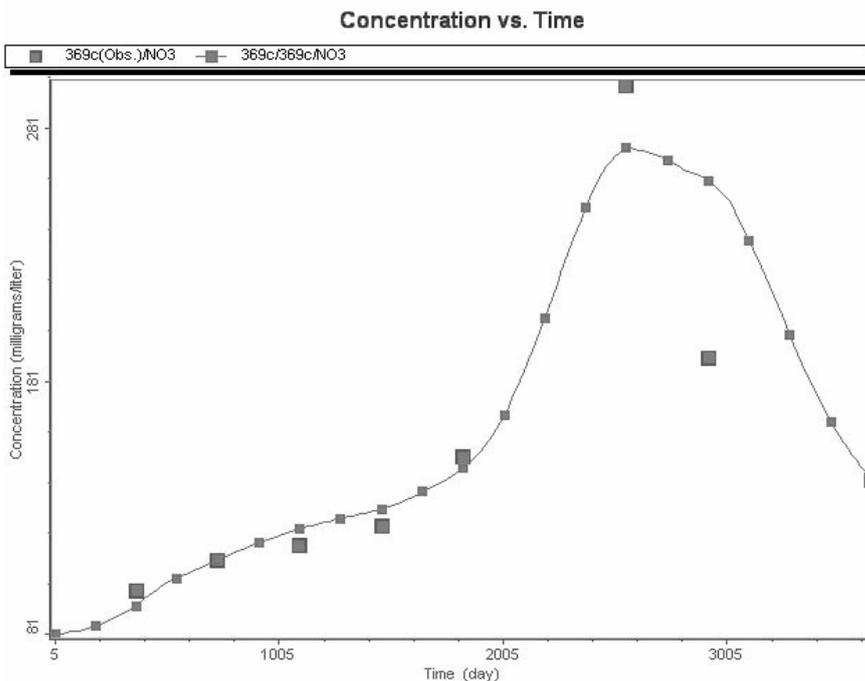


Abbildung 5-18: Ergebnis der Modellierung am Pegel P 369 (Die vom Modell berechneten Werte sind als Linie dargestellt, die gemessenen als große Kästchen.)

Deutlich zu erkennen ist die gute Übereinstimmung der simulierten Nitratkonzentrationsganglinie mit der gemessenen. Wie schon erwähnt, ist eine deckungsgleiche Anpassung des Modells an die gemessenen Nitratkonzentrationen aufgrund der Verwendung von Jahresmitteln nicht zu erreichen.

Ebenso gute Anpassungen konnten für alle anderen Pegel erreicht werden (siehe Anlage 5-9).

5.4.2 Modellierung des flächenhaften Eintrages

Für eine flächenhafte Modellierung des Nitratumsatzes müsste man auf eine große Anzahl von Pegeln im Untersuchungsgebiet zurückgreifen können. Bei geeigneten Abständen zwischen den einzelnen Pegel könnten dann die invers ermittelten Nitrateintragswerte auf die Fläche interpoliert werden. Im vorliegenden Fall stehen aber nur die Daten von 16 Messstellen zur Verfügung. Die meisten dieser 16 Pegel liegen im mittleren und nördlichen Teil des Einzugsgebietes, so dass die Datenlage besonders für den südlichen Teil gering ist. Im Folgenden soll deshalb ein Verfahren für die Abschätzung des flächendeckenden Nitratumsatzes vorgeschlagen werden.

Als erstes muss das Modellgebiet in Wald und landwirtschaftliche Nutzfläche untergliedert werden, da sich diese beiden Flächen hinsichtlich des Nitrateintrags signifikant voneinander unterscheiden. Als nächster Schritt muss die Ackerfläche hinsichtlich ihrer Nutzung und den damit verbundenen wiederum unterschiedlichen Nitrateinträgen unterteilt werden.

In Anlehnung an die in den Berichten der landwirtschaftlichen Zusatzberatung (OOWV, 1999) dargestellten Flächenaufteilungen kann vereinfacht angenommen werden, dass auf der Ackerfläche in allen betrachteten 10 Jahren zu 65 % Getreide und zu 25 % Mais angebaut wurden. Die restlichen 10 % wurden durch Grünland bedeckt. Geht man von einer normalen

Bewirtschaftung dieser drei Flächenanteile aus, so ist unter Mais als Hackfrucht die größte Nitratauswaschung zu erwarten. Am geringsten sind die Nitratfrachten dagegen unter Grünland einzuschätzen. Aufgrund des hohen Viehbestandes im betrachteten Gebiet können unter Grünland aber trotzdem noch Nitratwerte bis zu 100 mg/l im Sickerwasser vorhanden sein, da von einer Düngung dieser Flächen wegen des vorhandenen Gülleüberschusses ausgegangen werden kann.

Unter diesen vereinfachten Annahmen können die drei Anbauarten mit den zu erwartenden Nitratkonzentrationen belegt werden. Zu diesem Zweck wurde für die in Abschnitt 5.4.1 ermittelten Jahreswerte des CR aller flachen Pegel, die in der sauerstoffgesättigten Zone liegen, der Mittelwert bestimmt (Anlage 5-10). Daraus lassen sich dann die für die flächenhafte Modellierung benutzten Jahresmittelwerte der Nitratkonzentrationen im Sickerwasser berechnen (Tabelle 5-14).

Tabelle 5-14: Mittlerer Nitratreintrag in das Grundwasser, berechnet aus den flachen sauerstoffgesättigten Pegeln von 1991 - 2001.

Jahr	91/92	92/93	93/94	94/95	95/96	96/97	97/98	98/99	99/00	00/01
Mittelwert c [mg/l]	114	149	176	214	154	165	170	144	113	93

Unter der Vereinfachung, dass sich der Nitratreintrag unter den drei genannten Anbauflächen nach dem folgenden Muster verhält: $c(\text{Mais}) > c(\text{Getreide}) > c(\text{Grünland})$ wurde der in Tabelle 5-15 dargestellte mittlere Nitratreintrag für Getreide angenommen. Der Nitratreintrag unter Mais wurde dagegen um 40 % erhöht, und der unter Grünland um 40 % verringert, so dass das Mittel aller drei Werte gleich bleibt. Die im Modell angesetzten CR-Werte sind in der folgenden Tabelle 5-15 aufgeführt.

Um die drei verschiedenen Anbauflächen nach ihrem prozentualen Anteil an der Gesamtfläche in das Modell zu integrieren, wurde die Ackerfläche des Modellgebietes in Felder gleicher Größe aufgeteilt. Aufgrund der Kapazitätsgrenzen von MT3D, bezogen auf die Anzahl unterschiedlicher CR-Felder, wurde zur Festlegung der Feldgrößen die mittlere Betriebsgröße der im Einzugsgebiet angesiedelten landwirtschaftlichen Betriebe von 31 ha benutzt. Die Aufteilung der 60 sich daraus ergebenden Felder ist in der Abbildung 5-19 dargestellt.

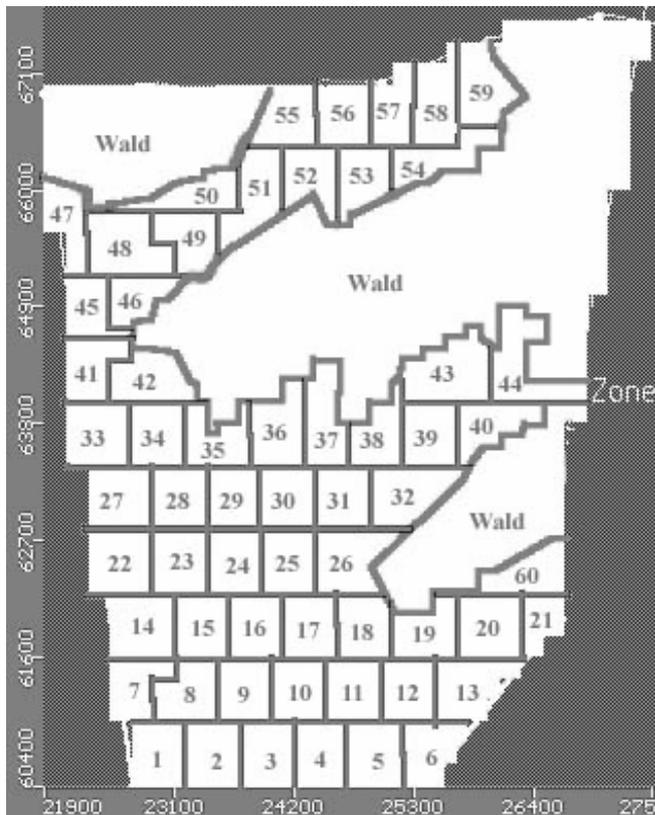
Um den einzelnen Feldern die in Tabelle 5-15 bestimmten CR-Werte zuzuordnen, wurde ein Feldsimulator entwickelt. Dieser ermittelt nach der Eingabe der Felderanzahl und dem prozentualen Anteil von Getreide, Mais und Grünland an der Gesamtfläche eine zufällige Verteilung der drei verschiedenen Ackerfrüchte auf den Feldern (siehe Anlage 5-11).

Führt man diese zufällige Verteilung der Ackerfrüchte für jedes der zu simulierenden 10 Jahre durch, so ergibt sich für jedes Feld eine bestimmte Fruchtfolge. Der jeweiligen Frucht werden dann die CR-Werte zugeordnet, so dass sie für jedes Feld und jedes Jahr vorliegen. Diese Reihen der CR-Werte für die ersten 6 Felder sind der Anlage 5-12 zu entnehmen.

Der Nitratgehalt des Sickerwassers unter den Waldgebieten wurde nach Rohmann & Sontheimer (1985) auf einen mittleren Wert von 15 mg/l gesetzt.

Tabelle 5-15: Concentration-Recharge-Werte in mg/l unter den einzelnen Anbauflächen.

Jahr	Mais	Getreide	Grünland
91/92	160	114	69
92/93	208	149	89
93/94	247	176	106
94/95	300	214	129
95/96	216	154	93
96/97	231	165	99
97/98	238	170	102
98/99	202	144	87
99/00	158	113	68
00/01	130	93	56

**Abbildung 5-19:** Felderaufteilung für den Feldsimulator und Waldgebiete.

Die Ausgangskonzentration des Nitrates im Aquifer wurde nach Informationen aus dem Bericht der landwirtschaftlichen Zusatzberatung OÖV (1999) festgelegt. Danach lag die mittlere Nitratkonzentration unter landwirtschaftlicher Nutzfläche im Jahre 1991 bei 81 mg/l in 5 m uGOK, in 20 m uGOK bei 54 mg/l und unter Wald bei 2 mg/l.

Ausgehend von diesen Werten wurde für die einzelnen Schichten folgende Anfangskonzentration errechnet:

unter Acker

Schicht 1 – 13	81 mg/l
Schicht 14 – 15	54 mg/l
Schicht 16 – 17	35 mg/l

unter Wald

Schicht 1 – 7	2 mg/l
---------------	--------

Schicht 18 10 mg/l

Im nächsten Schritt wurde die Simulation mit dem Transportmodell durchgeführt.

5.4.3 Auswertung

Die Simulation des Nitratumsatzes an den einzelnen Pegeln hat zu den in Tabelle 5-14 aufgeführten mittleren Nitrateinträgen in das Grundwasser geführt. Die Pegel P 483 und P 484 sind in die Berechnung des mittleren Nitrateintrages nicht mit einbezogen worden, da sie im Untersuchungsgebiet eine Sonderstellung einnehmen. Im Einzugsbereich dieser beiden Pegel wird seit 1993 ökologischer Landbau betrieben, wodurch es zu deutlich geringen Nitrateinträgen in das Grundwasser kommt. Diese Art der Grundwasser schonenden Bewirtschaftung hat sich deutlich auf die Nitratgehalte des darunter befindlichen Grundwassers ausgewirkt (Vergleiche Anlage 5-13). Seit 1996 können Nitratkonzentrationen von zirka 20 mg/l im Grundwasser gemessen werden. Am Pegel P 483 lagen die Nitratkonzentration 1999 sogar bei nur 3,8 mg/l. Damit weisen diese beiden Pegel mit Abstand die geringsten Nitratkonzentrationen des Untersuchungsgebietes im Grundwasser auf. Dies zeigt deutlich, welche positiven Auswirkungen auf den Grundwasserleiter durch eine Umstellung der ackerbaulichen Bewirtschaftungsform erreicht werden konnten.

Die in Tabelle 5-14 dargestellten mittleren Nitrateintragswerte in das Grundwasser zeichnen sich durch Konzentrationen aus, wie sie für intensiv genutzte Ackerflächen durchaus typisch sind. An einzelnen Pegeln ergaben sich Spitzenwerte von bis zu 400 mg/l Nitrat im Sickerwasser. Diese ermittelten Nitrateintragswerte können als eine Näherung der tatsächlich im Sickerwasser vorhanden gewesenen Nitratkonzentrationen gesehen werden. Sie spiegeln die Größenordnung der Menge des im Sickerwasser gelösten Nitrats wieder, die nötig war, um Nitratkonzentrationen im Grundwasser von bis zu 300 mg/l zu erhalten.

Deutlich ist auch hier die Umstellung der ackerbaulichen Bewirtschaftung zu erkennen. Bis 1993 stiegen die Nitratkonzentrationen im Sickerwasser an. Ab November 1993 begann dann der OOWV mit der landwirtschaftliche Zusatzberatung der im Einzugsgebiet wirtschaftenden Landwirte. Seit diesem Zeitpunkt sind die mittleren Nitratkonzentrationen im Sickerwasser rückläufig. Sie lagen 1999 bei rund 93 mg/l, was im Vergleich zu den 214 mg/l im Jahre 1993 bemerkenswert ist.

Die Auswirkungen der Umstellung auf eine Grundwasser schonende Landwirtschaft sind im Grundwasser zeitlich versetzt gut zu beobachten gewesen. Dort wurde nach Abbildung 4-9 erst 1996 die maximale Nitratkonzentration im Grundwasser erreicht.

Bei der durchgeführten Simulation konnte das Nitrat bis in eine Tiefe von etwa 20 m uGOK transportiert werden. Nur im Bereich der sauerstofffreien oberen Aquiferschichten wurde das Nitrat schon beim Eintritt in das Grundwasser durch Abbauprozesse beeinflusst. Beim Erreichen der reaktiven Schicht begann der Abbau des Nitrats dann über die gesamte Fläche. Die Ergebnisse der Simulation ergaben jedoch, dass Nitrat im Modell nicht so schnell abgebaut werden konnte, wie es im Untersuchungsgebiet der Fall ist. Das Nitrat konnte im Modell zirka 3 m tiefer in den Aquifer vordringen, bevor es vollständig abgebaut war. Deutlich wird dies zum Beispiel am Pegel P 336 und P 370, deren Messpunkte sich unter der reaktiven Schicht befinden und immer nitratfrei sind. Nach der Simulation konnten in diesen beiden Pegeln noch Nitratgehalte von bis zu 20 mg/l gemessen werden. Der Grund für diese Differenz zwischen den gemessenen und simulierten Werten ergibt sich bei genauerer Betrachtung

der im Modell angesetzten Abbaukonstanten k . Ermittelt wurde diese Abbaukonstante nach dem im Abschnitt 5.3.2.3.2 beschriebenen Verfahren über das Grundwasseralter.

In der folgenden Abbildung 5-20 wird das Grundwasseralter im Modell mit dem durch die FCKW-Datierung ermittelten Grundwasseralter verglichen.

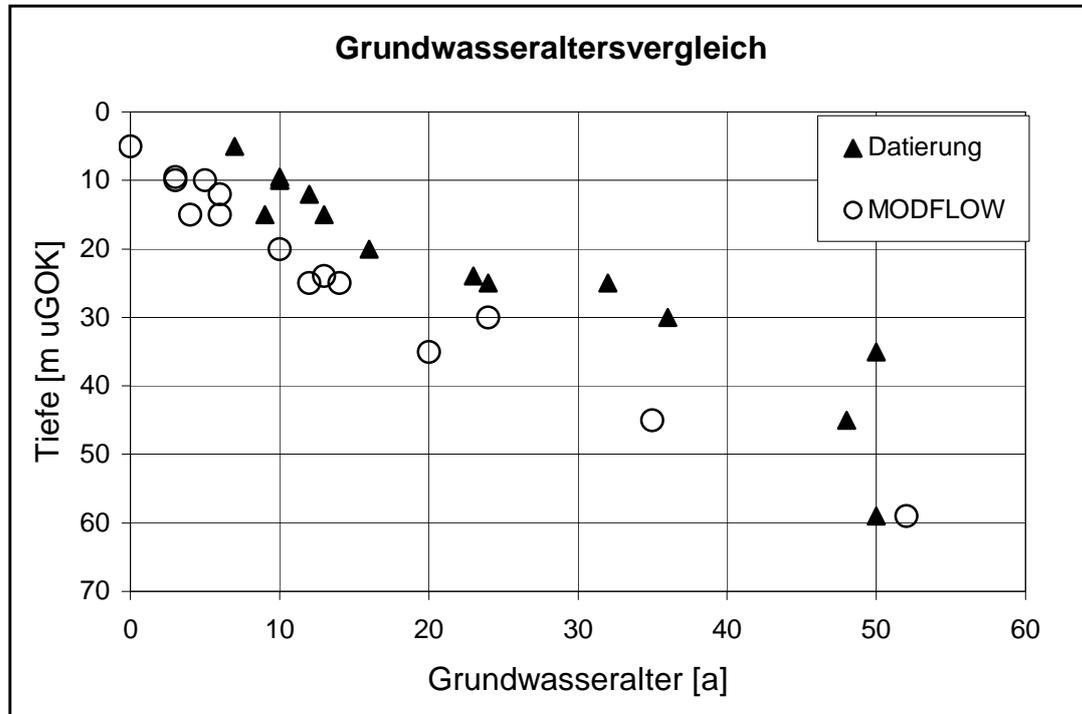


Abbildung 5-20: Vergleich des gemessenen Grundwasseralters (FCKW-Datierung) mit dem simulierten Alter.

Es ist zu erkennen, dass sich die gemessenen und simulierten Grundwasseralter unterscheiden. Das Grundwasseralter im Modell ist bis in eine Tiefe von 20 m im Durchschnitt um 5 Jahre jünger, danach wird die Altersdifferenz noch größer. Im oberen Bereich des Grundwasserleiters ist dies auf das in Anlage 4-3 angesprochene Problem des scheinbar zu alten oberflächennahen Grundwassers zurückzuführen. Weiter unten im Aquifer nimmt der horizontale Anteil der Grundwasserströmung bei den durch die Datierung ermittelten Werten dann stärker zu. Im Modell bleibt der Einfluss der horizontalen Grundwasserströmungskomponente dagegen relativ konstant, was man an dem geradlinigen Verlauf der Grundwasseraltersfunktion erkennen kann. Zu erklären ist dieser Verlauf durch die im Modell verwendeten Durchlässigkeitsbeiwerte. Im Modell wird von einem homogenen Aquifer ausgegangen, dessen k_f -Werte in alle Richtungen den gleichen Betrag aufweisen. In der Realität gibt es aber nur heterogene Aquifere, in denen sich die k_f -Werte in x-, y- und z-Richtung zum Teil erheblich unterscheiden.

Durch diesen Unterschied in der Grundwasseraltersfunktion kommt es im Modell zu Altersunterschieden über die Tiefe. So beträgt die Differenz des Grundwasseralters zwischen SGM 4 und SGM 5 im Modell 4 Jahre, in der Realität beträgt der Unterschied dagegen 8 Jahre (vergleiche Tabelle 5-16).

Dies bedeutet, dass das Grundwasser im Modell eine höhere vertikale Fließgeschwindigkeit aufweist, als es in der Realität der Fall ist. Infolgedessen verkürzt sich die Verweilzeit in der reaktiven Schicht. Da der k -Wert aber nach Gleichung 5.3 direkt von dieser Verweilzeit ab-

hängig ist, entsteht im Modell ein Fehler bezogen auf den Nitratabbau. Ist die Verweilzeit bei gleichem Abbau kleiner, so muss der k-Wert höher sein.

Tabelle 5-16: Vergleich des gemessenen und simulierten Grundwasseralters.

Pegel	Filterunterkante	Grundwasseralter	Grundwasseralter
	[m] uGOK	Messung	MODFLOW
P 335	15	13	4
P 336	25	32	12
P 337	35	50	20
P 389	59	50	52
P 183	45	48	35
P 369	10	10	5
P 370	24	23	13
P 377	12	12	6
P 481	10	10	3
SGM 1	5	7	0
SGM 2	10	10	3
SGM 3	15	9	6
SGM 4	20	16	10
SGM 5	25	24	14
SGM 6	30	36	24

Damit das Nitrat also schon vor Erreichen der Pegel P 336 und P 370 abgebaut ist, muss der k-Wert leicht erhöht werden. Bis auf diesen kleinen Fehler des Nitratabbaus kann der Prozess des Nitratumsatzes durch das Modell jedoch zufrieden stellend wiedergegeben werden.

Das Ergebnis der flächenhaften Nitratumsatzsimulation ist in der folgenden Abbildung 5-21 als Schnitt dargestellt.

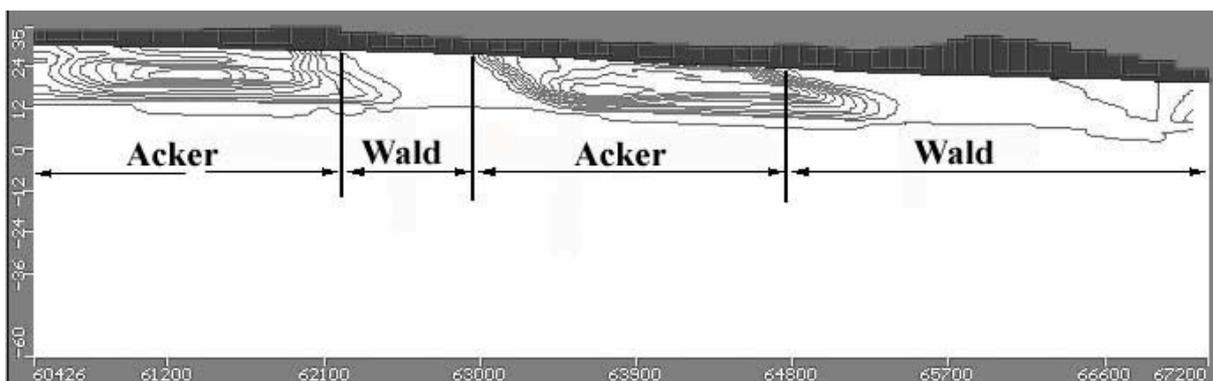


Abbildung 5-21: Ergebnis des vertikalen Nitratkonzentrationsverlaufs der Flächensimulation (Schnitt bei $x = 26000$ m; Süd – Nord).

In Abbildung 5-21 ist die großräumige vertikale Verteilung des Nitrats gut zu erkennen. Es kann sich mit der Grundwasserströmung ungehindert bis zum Erreichen der reaktiven Schicht ausbreiten. Innerhalb dieser Schicht wird dann das gesamte Nitrat abgebaut, so dass das Grundwasser ab einer Tiefe von zirka 12 m ü.NN nitratfrei ist. Sehr gut ist auch die horizontale Verschiebung der Nitratfront unter den Waldgebieten zu erkennen. Dies ist zum einen die Folge des konvektiven Stofftransports in Grundwasserfließrichtung, zum anderen ist die Verschiebung aber auch auf dispersive Prozesse zurückzuführen. In Abbildung 5-22 ist eine Vergrößerung des von nitrathaltigem Wasser unterströmten Waldgebietes dargestellt.

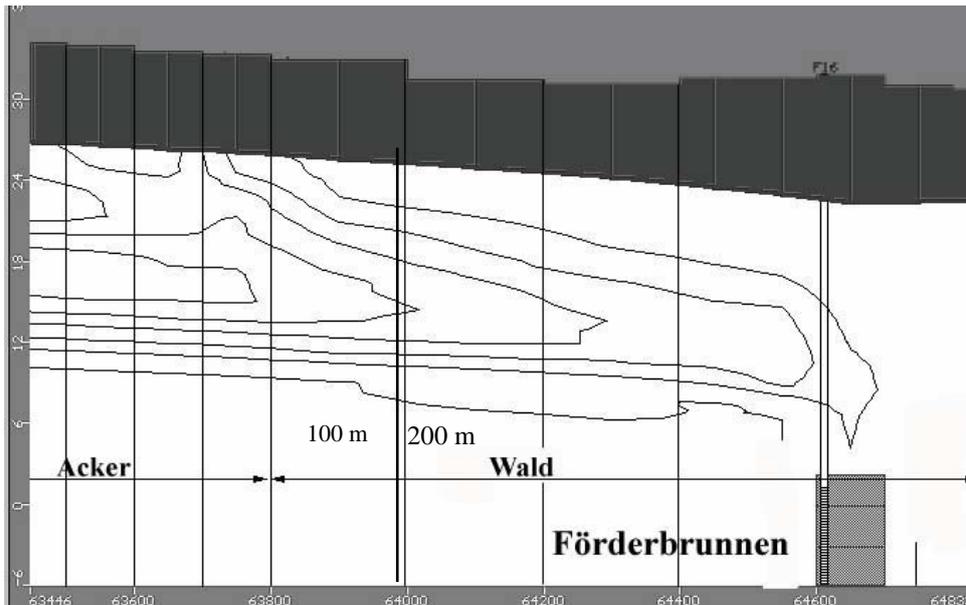


Abbildung 5-22: Nitratdurchbruch in einen Förderbrunnen.

Im Bereich des Waldgebietes beträgt die Gitterweite des Modells 200 m. Da das Modell die Nitratkonzentrationen anhand von benachbarten Zellmittelpunkten berechnet, kann sich die Nitratfront in horizontaler Richtung durch die numerische Dispersion viel schneller ausbreiten, als dies in vertikaler Richtung der Fall ist. Dadurch kommt es im Modell relativ rasch zu einem Nitratdurchbruch in die Förderbrunnen. Vermieden werden kann dieses Problem nur durch eine feinere Diskretisierung des Modellgitters.

Besonders deutlich wirkt sich auch die Feldgröße auf die numerische Dispersion aus. Ändert man die Feldgröße im Modell auf die durchschnittliche originale Feldgröße im Untersuchungsgebiet von 5 ha, so ergibt sich in Bezug auf die Nitratkonzentrationen eine Vergleichmäßigung. Die Felder umfassen dann durch die grobe Diskretisierung in horizontaler Richtung nur noch wenige Gitterzellen, wodurch der Einfluss der numerischen Dispersion verstärkt wird.

5.5 Zusammenfassung

Das Ziel der Kopplung war die integrierte Modellierung der Prozesse der Interaktion zwischen ungesättigter und gesättigter Zone. Dazu wurde das Konzept einer losen Kopplung angewandt. Diese erforderte eine Übertragung der Daten des Bodenmodells in das Grundwassermodell und umgekehrt. Während dieser Operation werden die Output-Daten des Bodenmodells zu Input-Daten des Grundwassermodells transferiert. Dazu kann der Bearbeiter flexibel Austauschzeiträume festlegen, in denen der Datenaustausch zwischen beiden Modellen erfolgt. Neben der integrierten Beschreibung der Austauschprozesse zwischen den Kompartimenten verkürzt dieser Datentransfer die praktisch sonst sehr aufwändige Auswahl der Daten und die Erzeugung von Input-Dateien für das Grundwassermodell. Die Simulationsperiode umfasste die Jahre 1999 und 2000. Der Quelltext des Programms ist in Anlage 5-4 enthalten.

Die landwirtschaftliche Nutzung im Thülsfelder Gebiet wurde durch prozentuale Anteile von angebauten Ackerfrüchten berücksichtigt. Der diesbezüglich vorliegende Datenmangel ist typisch für Modellanwendungen in Deutschland, da aus Datenschutzgründen keine Personenbe-

züge hergestellt werden sollen. Deshalb sind weder spezifische (schlagbezogenen) Daten für eventuelle Fruchtfolgeänderungen erhältlich noch eine Quantifizierung der Düngermengen und der Erntemengen anhand von Messdaten belegt. In der Untersuchung wurde deshalb eine Reihe von Annahmen getroffen, die typisch für die Landnutzung der Region sind. So wurden typische Rotationsszenarien für die Hauptfrüchte erstellt und die Düngermengen und Ernteerträge aus Literaturdaten und verfügbarer Messwerten abgeleitet. Die Variation der Rotations-szenarien wurde mit HERMES durchgeführt. Dabei wurden auch die Sickerwassermengen und die N-Auswaschung berechnet. Die Ergebnisse wurden über das Jahr gemittelt und über die Fläche gewichtet. Damit war es möglich eine Abschätzung der mittleren jährlichen N-Menge in der Grundwasserneubildung zu erhalten.

5.6 Schlussfolgerungen und Ausblick

Im Folgenden sollen die Schwerpunkte dieses Abschnittes hervorgehoben und ein Ausblick gegeben werden.

Ein relativ hoher personeller Aufwand entsteht durch das manuelle Datensammeln und Preprocessing der Daten. Aufgrund der großen Probenahmeintervalle, die in dieser Untersuchung möglich waren, ist eine Messung der Dynamik des Wasser und Nitrattransportes nicht möglich gewesen. Vielmehr wurden Möglichkeiten der Datengenerierung, Regionalisierung und Auswertung aufgezeigt, getestet und angewendet.

Die Menge der verfügbaren landwirtschaftlichen Daten war relativ gering, speziell hinsichtlich der Fruchtartenverteilung, Düngung, Erträge und agrotechnischen Daten. Die Datensituation ist für Deutschland typisch. Die Daten sind generell anonymisiert und nur als mittlere Daten auf der Basis von Gemeindeflächen verfügbar. Düngung und Erträge können im Untersuchungsgebiet nur anhand von Befragungen der Landwirte rekonstruiert werden. Für größere Gebiete ist dies jedoch praktisch nicht möglich. Hier können die erforderlichen Daten nur anhand von Literaturdaten und Berichten der Zusatzberatung oder aus Fernerkundungsdaten abgeleitet werden. Der Weg der Auswertung von verfügbaren Literaturquellen wurde in dieser Arbeit gewählt. Eine Ableitung anhand von Luftbildern ist sicherlich der effizientere Weg, wenn größere Flächen bearbeitet werden sollen.

Das Modell HERMES wurde zum Zweck der Düngungsberatung entwickelt. Der Vorteil dieses Modells ist der relativ geringe Datenbedarf für die Parametrisierung, was durch die Verwendung von Standarddatensätzen erreicht wurde. Die berechneten Ergebnisse von HERMES können als plausibel charakterisiert werden. Die Trends der Stoffauswaschungen werden gut nachvollzogen, obgleich die Absolutwerte teilweise relative große Fehler von bis zu 103 % bei Einzelwerten aufweisen. Bei einer mehrjährigen Mittelung verringern sich diese Ungenauigkeiten deutlich.

Eine ausgesprochen günstige Datenbasis existierte für die Anwendung von MODFLOW zur Strömungsmodellierung im Grundwasser. Hinsichtlich der Modellierung des Nitratabbaus im Grundwasser mit MT3D war dies allerdings nicht der Fall. Die in der Arbeit erhobenen Daten sind ein wichtiges Element für die Verbesserung der Wissensbasis hinsichtlich des Umsatzpotenzials. Jedoch können nicht alle Fragen beantwortet werden. Beispielsweise sollte das Wissen über die Heterogenität des Umsatzpotenzials und die Parametrisierung von Umsatz und Rückhalteprozessen verbessert werden.

Die technische Umsetzung der Modellkopplung von HERMES und MODFLOW/MT3D wur-

de erfolgreich durchgeführt. Die rechentechnische Umsetzung erfolgte als FORTRAN-Programm. Diese Prozedur ist flexibel und macht die Anwendung der gekoppelten Modelle effizienter. Eine integrierte Prozessbeschreibung wurde dadurch möglich. Der nächste Schritt sollte die Kopplung der Prozesse zwischen den Modellen sein. Dazu ist aber eine geschlossene Lösung der Strömung und des Transportes in der ungesättigten und gesättigten Zone notwendig. Das ist mit den vorliegenden Modellen unmöglich, da dies entweder die Verfügbarkeit der Quelltexte der Modelle erfordert oder die Erstellung eines völlig neuen Modells bedeutet, z.B. auf der Basis der Richards-Differenzialgleichung, die sowohl für die gesättigte als auch für die ungesättigte Strömung gültig ist.

In nächsten Kapitel werden nun die Ergebnisse der gekoppelten Modellierung mit sozio-ökonomischen Komponenten zusammengeführt und aufgezeigt, wie eine Kombination dieser unterschiedliche gearteten Kriterien mit Hilfe einer multikriteriellen Entscheidungsprozedur bewertet werden kann.

6 Multikriterielle Entscheidungshilfe

Ein multikriterieller Entscheidungsprozess (englisch: multiple criteria decision aid, MCDA) wurde durchgeführt, um das Konfliktpotenzial zwischen der Landnutzung und den Wasserressourcen zu bewerten. Eine Fokussierung auf die Landnutzung und die Wasserressource allein trägt jedoch der Komplexität des Problems nicht Rechnung. Deshalb soll z.B. auch berücksichtigt werden, dass eine große Bevölkerungsgruppe der Region ihr Einkommen aus der Landwirtschaft erwirtschaftet. Es wird also versucht ökonomische, soziale und auch naturräumliche Werte im Untersuchungsgebiet in die Bewertung einzubeziehen.

Bei der Entscheidungsfindung ist es notwendig, nicht die vorhandenen Konfliktpotenziale in den Vordergrund zu stellen, sondern stattdessen objektive Entscheidungskriterien zu schaffen, anhand derer der Entscheidungsprozess simuliert werden kann. Dazu muss ein Input in das MCDA aus Vorhersagesimulationen und geschätzten Kosten erzeugt werden. Es werden dazu die Ergebnisse aus Kapitel 5 verwendet. Es soll auch möglich sein, unterschiedliche Interessensgruppen (Stakeholder) zu identifizieren und zu berücksichtigen.

Die angewendete MCDA-Methode ist NAIADE (Novel Approach to Imprecise Assessment and Decision Environments). Die Methode wurde vom Joint Research Centre, Institute for Systems, Informatics and Safety (Munda, 1995) entwickelt. Einen Überblick über die NAIADE-Theorie gibt Anlage 7-1 und NAIADE (1996).

Die Struktur des entwickelten Entscheidungshilfesystems entspricht dem in Abbildung 2-10 dargestellten Modell eines GDSS.

6.1 Anwendung auf das Untersuchungsgebiet Thülsfeld

Das Ziel der Anwendung der MCDA-Methode auf Thülsfeld ist die integrierte Analyse der naturwissenschaftlichen Ergebnisse der gekoppelten Modellierung und der Interessenslagen der Stakeholder. Es wird ein Entscheidungsprozess simuliert, der die Gestaltungsmöglichkeiten der landwirtschaftlichen Bodennutzung im Hinblick auf den Schutz der Grundwasserressource aufzeigen soll. Gleichzeitig wird veranschaulicht, welche Arten von Informationen aus dieser Analyse erhalten werden können. Eine genaue Analyse ist jedoch nicht möglich, da dazu eine Teilnahme der Akteure im Entscheidungsprozess notwendig ist. Die Anwendung soll deshalb lediglich dazu, die bisher verfügbare Information zu bewerten. Es ist deshalb weder das Ziel eine behördliche Analyse, d.h. Bewertung der Gesetzeslage, der politischen und administrativen Strukturen zu ersetzen, noch eine Entscheidung hinsichtlich öffentlicher oder wirtschaftlicher Interessen zu treffen. Es soll lediglich das Prinzip der Entscheidungsfindung dargelegt werden.

Die Hauptgründe für Wahl von NAIADE sind, dass die Methode auch Unsicherheiten berücksichtigen und sowohl quantitative als auch qualitative Informationen in die Analyse einbeziehen kann. Jedem Kriterium ist ein Wert für jede Alternative zugeordnet. Der Wertetyp kann entweder eine Zahl sein (scharfe Definition), eine stochastische Funktion (Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion mit entsprechenden Parametern), eine unscharfe Zahl (Mitgliedschaftsfunktion) oder sprachlicher Ausdruck (gut, mittel, schlecht). Unter Verwendung der paarweisen Vergleichstechnik, die auf Vorzugsbeziehungen, d.h. möglichst kleinen Entfernungen zwischen zugeordneten Werten für jedes Kriterium beruht, generiert NAIADA eine Reihenfolge der Alternativen.

NAIADE erzeugt zwei Arten von Informationen die wichtig sind, für den Entscheidungsträger. Das sind zum einen eine multikriterielle Analyse, die das Ranking der verschiedenen Alternativen aufzeigt und zum anderen eine Gleichheitsmatrix, welche die Konflikte zwischen den Interessensgruppen und die möglichen Koalitionen zwischen ihnen darstellt.

In der Anwendung wurden die untersuchten Alternativen zur gegenwärtigen landwirtschaftlichen Bewirtschaftung untersucht und in einem Zusammenhang mit möglichen Konflikten bzgl. der GW-Ressourcen, der natürlichen und sozialen Werte verglichen. Der entwickelte Entscheidungsrahmen basiert auf vorhersagenden Simulationen als Input für das MCDA hinsichtlich der Wasserressourcen. Die verschiedenen Komponenten, die in das MCDA eingehen und die Wechselwirkungen sind in Abbildung 6-1 dargestellt.

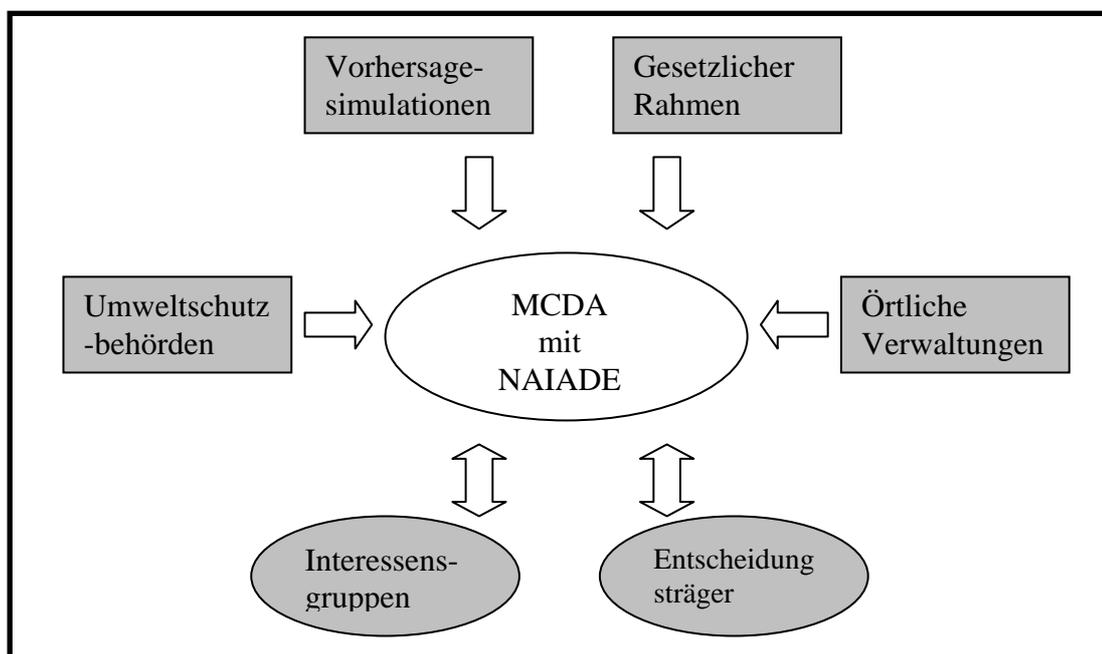


Abbildung 6-1: Nutzung des MCDA NAIADe als Werkzeug im Wassermanagement (Linde, 2000).

6.2 Akteure

Die identifizierten Interessensgruppen und ihre Belange sind in Tabelle 6-1 dargestellt.

Die Teilnahme von Vertretern der Interessensgruppen ist ein wichtiges Instrument zur Versorgung des Entscheidungsträgers mit Alternativen. Dazu müssen im Vorfeld der Untersuchung alle Interessengruppen identifiziert werden und zu einer Teilnahme animiert werden. Zusätzlich müssen die zu beteiligenden Behörden identifiziert werden, da sie einen wichtigen Beitrag zur Umsetzung der Entscheidungen leisten.

6.3 Kriterien

Die Kriterien basieren auf den Belangen der Akteure (Tabelle 6-2). Im realen Prozess resultieren diese aus der Auswertung von Fragebögen und Befragungen der

Schwerpunktgruppen. Dazu ist es nötig, dass alle Akteure für einige Tage zur Diskussion und zum „Brainstorming“ zusammenkommen.

Es ist theoretisch möglich, viele Kriterien für jeden Belang aufzustellen. Um die Übersichtlichkeit zu gewährleisten, sollten jedoch nicht zu viele Kriterien ausgewählt werden. Die Studie ist begrenzt durch die verfügbaren Informationen. Die Kriterien sollten deshalb so gewählt werden, dass die Hauptbelange erfasst werden.

Tabelle 6-1: Identifizierte Interessensgruppen und deren Belange.

Interessensgruppe	Belange
Wasserwerk	Heutige und künftige Wasserversorgung, Wasserressourcen (Qualität, Quantität)
Kommunale Verwaltung	Ökonomische Entwicklung, Kosten, Wasserversorgung, landwirtschaftliche Produktion
Kreisverwaltung	Gesetze, Nachhaltigkeit
Landwirte	Einflüsse auf die künftige Wasserversorgung, Wasserressourcen
Ingenieurbüros	Heutige und künftige Wasserversorgung, Wasserressourcen (Qualität, Quantität)
Landesamt für Ökologie	Wasserressourcen (Qualität, Quantität)
Örtliche Bevölkerung	Ökonomische Entwicklung, Gesundheit, Erholungswert

Die Kriterien im Beispiel sind so gewählt worden, dass die Hauptbelange durch jeweils mindestens ein Kriterium repräsentiert werden. Damit kann die Handhabbarkeit gewährleistet werden und es ist damit auch relativ unwahrscheinlich, dass diese Kriterien überflüssig sind, da sie verschiedener Art sind. Es ist wichtig eine ausgewogene Verteilung der Kriterien für die Hauptbelange zu erhalten (Tabelle 6-2).

Tabelle 6-2: Die Hauptbelange für das Thülsfelder Fallbeispiel.

Hauptbelanggebiet	Hauptbelange
Ökonomie	Landwirtschaftliche Produktion, Wald, Kosten für alternative Wasserversorgung
Natürliche Ressourcen	Wasserressourcen (Quantität, Qualität, Nachhaltigkeit)
Sozial	Gesundheit, Tourismus, Erholungswert, ökonomische Entwicklung
Naturwerte	Habitate für Arten, wertvolle Gebiete (Talsperre, Kulturlandschaft)
Gesetzgebung	Übereinstimmung mit EU-Recht und nationaler Gesetzgebung

Die Kriterien in Tabelle 6-3 für den Einfluss auf die GW-Qualität wurden aus den Simulationen in Kapitel 5 abgeleitet. Alle anderen Kriterien wurden geschätzt.

Tabelle 6-3: Gewählte Kriterien für das Fallbeispiel Thülsfeld mit Hauptbelanggebiet, Zielen, Bewertungskriterien, Größeneinheiten und Definitionen.

Hauptbelanggebiet	Ziel	Bewertungskriterium	Größeneinheit	Definition
Ökonomisch	Minimum	Kosten zur Sicherung der Wasserversorgung (Unschärfes Kriterium)	MEUR	- Kosten für den Neubau von Brunnen (Vertiefung) - Verschneiden von Wasser - Kosten für Landnutzungsänderung im Schutzgebiet
Ökonomisch	Maximum	Landwirtschaftliche Werte (Sprachliches Kriterium)	sprachlich	- Landwirtschaftliche Produktion
Natürliche Ressourcen	Minimierung	Beeinflussung der GW-Qualität (Stochastisches Kriterium)	mg/l	- Durchbruch der Konzentration in einem Brunnen infolge kostenanter Kontamination von 50 mgNitrat/l innerhalb von 25 Jahren
Natürliche Ressourcen	Minimierung	Risiko eines Unfalls	Jahre ⁻¹	- Wahrscheinlichkeit für Unfälle mit gefährlichen Stoffen in der Wasserschutzzone (z.B. Pestizidkontamination des GW)
Naturwerte	Maximum	Natur- und Erholungswert (Sprachliches Kriterium)	sprachlich	- Gebiet mit hohem Natur- und Erholungswert
Sozial	Maximum	Tourismus und Ökonomie (Sprachliches Kriterium)	sprachlich	- Tourismus und ökonomische Entwicklung
Sozial	Maximum	Gesundheit (Sprachliches Kriterium)	sprachlich	- Gesundheit der örtlichen Bevölkerung

6.4 Einflussmatrix

Die Einflussmatrix wird in Abbildung 6-2 gezeigt. Die Werte sollten so ermittelt werden, dass sie das gesamte Wissen über den Einfluss reflektieren. Die Sammlung der Daten für die Kriterien muss sehr systematisch erfolgen, d.h. nicht nur Werte, sondern auch Informationen über ihre Verteilung sollten erhoben werden.

Ein Problem entsteht, wenn beispielsweise nicht bekannt ist, wie die Daten erhoben wurden oder wenn keine statistische Information vorliegt. Dadurch können zusätzlich Inkonsistenzen und Unsicherheiten entstehen. In diesem Beispiel wird deshalb auf Schätzungen zurückgegriffen, die durch vertiefte Studien verbessert werden müssen.

Criteria \ Alternatives	Realfall	Szenario 1	Szenario 2	Szenario 2a	Szenario 3
Ersetzungskosten Wasserversorgung	0	1.2	1.2	1.2	0
Einfluss auf Landwirtschaft	Moderate	Bad	Good	Bad	Bad
Beeinflussung der GW-Qualitaet	Very Good	Very Bad	More or Less Bad	Very Bad	Very Good
Risiko eines Unfalls	approx (1/1000)	approx (1/750)	approx (1/750)	approx (1/750)	approx (1/1000)
Natur- und Erholungswert	Very Good	Bad	Moderate	Bad	Very Good
Tourismus und Ökonomie	Very Good	Very Bad	Moderate	Very Bad	Good
Gesundheit	Good	Bad	More or Less Good	Very Bad	Good

Abbildung 6-2: Die multikriterielle Einflussmatrix für das Ranking der unterschiedlichen Landnutzungsszenarien. Die Tabelle zeigt 7 Kriterien und 5 Alternativen.

6.5 Gleichheitsmatrix

Die Präferenzen der Akteure hinsichtlich der verschiedenen Alternativen werden in Abbildung 6-3 gezeigt. Sprachliche Bewertungen wurden einbezogen, indem die gesamte Skale von „perfekt“ bis „extrem schlecht“ verwendet wurde.

Die Präferenzen werden direkt oder indirekt von den unterschiedlichen Interessensgruppen formuliert. Die Formulierung der Präferenzen muss auf der Sichtweise der Akteure basieren und nicht darauf, wie sie von den geplanten Aktionen betroffen sind.

Groups \ Alternatives	Realfall	Szenario 1	Szenario 2	Szenario 2a	Szenario 3
Wasserwerk	Very Good	Very Bad	Bad	Very Bad	Perfect
Kommunale Verwaltung	Good	Bad	Good	Bad	Moderate
Landwirte	Moderate	Moderate	Very Good	Very Good	Extremely Bad
Ingenieurbüros	Bad	Good	More or Less Good	Very Good	Bad
Landesamt fuer Oekologie	Very Good	Very Bad	Bad	Very Bad	Very Good
oertliche Bevölkerung	Good	More or Less Bad	Moderate	More or Less Bad	Moderate
Kreisverwaltung	Good	Bad	Moderate	Bad	Moderate

Abbildung 6-3: Die Gleichheitsmatrix für die unterschiedliche Bewirtschaftungsvarianten.

6.6 Ranking der Bewirtschaftungsszenarien und Sensitivitätsanalyse

Für ein Ranking der alternativen Bewirtschaftungsszenarien und der aktuellen Bewirtschaftung wurde der Minimumsoperator gewählt. Dabei wird das Ergebnis als Variation der Minimumsbedingung des Glaubwürdigkeitsindex, d.h. des α -Wertes, gezeigt.

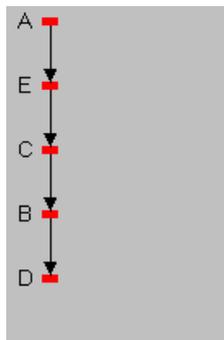
Durch Definition des α -Wertes werden nur die Kriterien, deren Index der Glaubwürdigkeit über der α -Schwelle liegt positiv in der Aggregation für das Ranking der Alternativen

berücksichtigt. Durch Variation des α -Wertes (0,2; 0,4 und 0,6) ist es möglich die Sensitivität des Ranking zu bewerten. Ein niedriger α -Wert erlaubt einen hohen Grad der der Unsicherheit in der Information, die genutzt wird. Ein hoher α -Wert berücksichtigt nur Informationen mit einem hohen Bestätigungsgrad oder hoher Indifferenz. Es ist damit möglich die Robustheit einer Aussage zu bewerten.

Das endgültige Ranking der Alternativen basiert auf 2 separaten Rankings. Beim ersten Ranking basiert die Rankingalternative $\Phi^+(A)$ auf den besser und viel besser Relationen. Die Werte reichen von 0 bis 1 und zeigen, dass (A) „besser“ ist als andere Alternativen. Beim zweiten Ranking basiert die Ranking-Alternative $\Phi^-(A)$ auf der schlecht und noch schlechter Relation, die auch von 0 bis 1 variiert und zeigt, wie schlecht (A) im Vergleich zu mit anderen Alternativen ist.

Durch Vergleich der beiden separaten Rankings werden nicht vergleichbare Alternativen identifiziert. Zwei Alternativen sind nicht vergleichbar, wenn innerhalb eines Rankings eine Alternative besser als eine andere ist, jedoch im zweiten Ranking im Vergleich schlechter bewertet wird. Weiterhin wird, wenn die Differenz $\Phi^+ - \Phi^-$ positiv ist, die „schlecht“ und „noch schlechter“ Relation abgelehnt zugunsten der „besser“ und „noch besser“ Relation.

Die Ergebnisse des Ranking werden in den Abbildung 6-4 bis Abbildung 6-6 gezeigt. In den Abbildungen werden die Bewirtschaftungsalternativen folgendermaßen bezeichnet: A ... Realfall, B ... Szenario 1, C ... Szenario 2, D ... Szenario 2a, E ... Szenario 3.



Hohe Unsicherheit ($\alpha=0,2$)

$$\Phi^+(A)=0,51 \quad \Phi^+(B)=0,08 \quad \Phi^+(C)=0,13 \quad \Phi^+(D)=0,00 \quad \Phi^+(E)=0,48$$

$$\Phi^-(A)=0,00 \quad \Phi^-(B)=0,37 \quad \Phi^-(C)=0,36 \quad \Phi^-(D)=0,46 \quad \Phi^-(E)=0,00$$

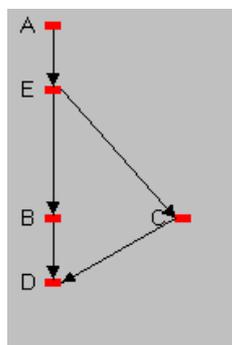
Nach Φ^+ ergibt sich folgendes Ranking:

$$A \rightarrow E \rightarrow C \rightarrow B \rightarrow D$$

Nach Φ^- ergibt sich folgendes Ranking:

$$A = E \rightarrow C \rightarrow B \rightarrow D$$

Abbildung 6-4: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen für hohe Unsicherheit ($\alpha=0,2$). Die Alternativen sind miteinander vergleichbar und ordnen sich daher aufeinander folgend an. Die Alternative A wurde, im Vergleich aller Alternativen, als die beste Alternative identifiziert.



Mittlere Unsicherheit ($\alpha=0,4$)

$$\Phi^+(A)=0,26 \quad \Phi^+(B)=0,01 \quad \Phi^+(C)=0,04 \quad \Phi^+(D)=0,00 \quad \Phi^+(E)=0,23$$

$$\Phi^-(A)=0,00 \quad \Phi^-(B)=0,15 \quad \Phi^-(C)=0,16 \quad \Phi^-(D)=0,21 \quad \Phi^-(E)=0,00$$

Nach Φ^+ ergibt sich folgendes Ranking:

$$A \rightarrow E \rightarrow C \rightarrow B \rightarrow D$$

Nach Φ^- ergibt sich folgendes Ranking:

$$E = A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$$

Abbildung 6-5: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen für mittlere Unsicherheit ($\alpha=0,4$). Alternative B und C sind jetzt miteinander nicht mehr vergleichbar, da die Sicherheit (Zuverlässigkeit) der Aussage gesteigert wurde. Alternative A wurde wiederum als beste Alternative identifiziert.

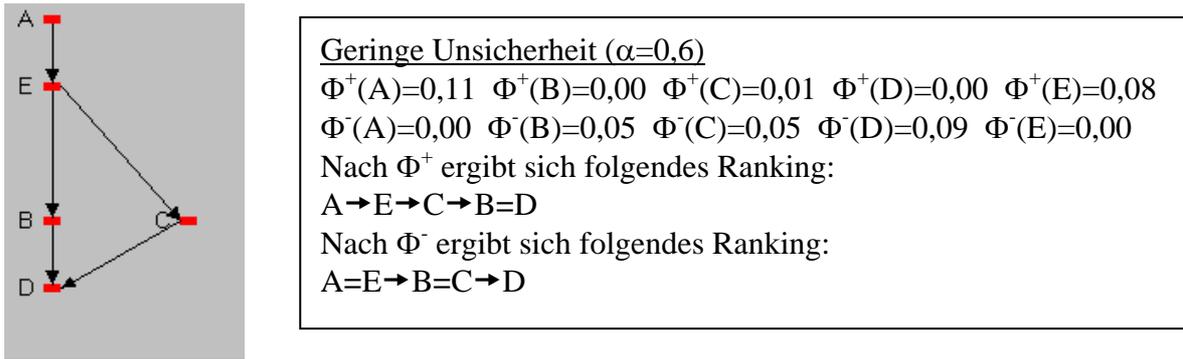


Abbildung 6-6: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen für geringe Unsicherheit ($\alpha=0,6$). Alternative B und C sind auch hier nicht miteinander vergleichbar. Alternative A wurde auch hier wieder als beste Alternative identifiziert.

NAIADE identifiziert die Bewirtschaftungsalternative A als den besten Kompromiss aller Alternativen. Eine Veränderung der Aussage-Unsicherheit durch Variation des α -Wertes zeigt, dass diese Alternative diesbezüglich sehr robust ist.

Ein Vergleich der beiden Rankings Φ^+ - Φ^- zeigt, dass Alternative A positiver ist als die anderen. Die Alternativen B, C und D sind ziemlich schlechte Varianten, da Φ^+ - Φ^- negativ ist.

Es wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt, um den Einfluss der anderen Modellparameter neben dem α -Wert auf das NAIADE-Ranking zu untersuchen. Die Modellparameter, die variiert wurden sind a) der Operator, hier wird anstatt des Minimumsoperators der Zimmermann-Zysno-Operator verwendet und b) die Repräsentativität der Parameterverteilungen, d.h. die Verwendung von Zahlen anstatt von stochastischen Funktionen und unscharfen Mengen. In Abbildung 6-7 und Abbildung 6-8 werden die Resultate gezeigt.

a) Operator

Der Zimmermann-Zysno-Operator ermöglicht, im Vergleich zum Minimums-Operator (keine Kompensation), eine Berücksichtigung unterschiedlicher Grades der Kompensation. Kompensation regelt die Art mit der Unsicherheiten behandelt werden (Anlage 7-1)

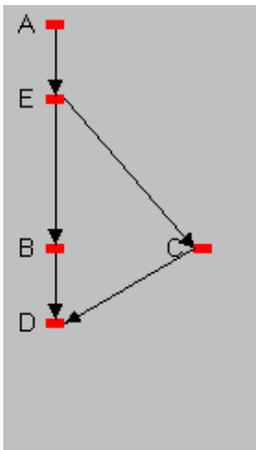


Abbildung 6-7: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen mit dem Zimmermann-Zysno-Operator, mittlere Kompensation ($\gamma=0,6$), mittlere Unsicherheit ($\alpha=0,4$).

Es zeigt sich kein Unterschied im Ranking im Vergleich mit dem Minimums-Operator für mittlere Unsicherheit. Die Reihenfolge der Alternativen ändert sich also nicht und die Entscheidung würde Bestand haben.

b) Repräsentativität der Kriterienverteilung

Für nicht sprachliche Kriterien kann die Verteilung der Vorzugsbeziehungen durch entweder stochastische Funktionen oder unscharfe Mengen berücksichtigt werden. Diese erlauben die Einbeziehung von Unsicherheiten. Durch Änderung der Verteilung zu harten Daten werden keine Unsicherheiten im Ranking berücksichtigt. Im untersuchten Fall wurden die harten Daten für die Ersatzkosten der Wasserversorgung halbiert. Die Kosten, die mit Null angesetzt waren wurden bei Null belassen. Damit kann gezeigt werden, inwieweit sich das Kostenkriterium auf die Alternativen auswirkt.

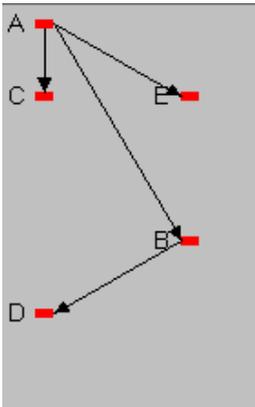


Abbildung 6-8: Das NAIADE-Ranking der Bewirtschaftungsalternativen mit einer Reduktion der Ersetzungskosten (harte Daten) um 50 %.

Die Halbierung der Ersetzungskosten wirkt sich noch nicht auf die gewählte Vorzugsalternative aus. Es zeigt sich jedoch, dass jetzt die Alternative C mit der Alternative E gleichgesetzt ist. Damit gibt es keine eindeutige Rangfolge nach der Vorzugsalternative mehr. Es zeigt sich, dass nach wie vor die Alternative A die beste Lösung ist. Jedoch sind jetzt die Alternativen E und C gleichrangig, so dass das Szenario 2, welches die originale Ackerfrucht mit Winterzwischenfrucht mit verteilten kleinen Düngergaben betrifft, in die Überlegungen einbezogen werden sollte.

6.7 Konfliktanalyse und Koalitionsbildungsprozess

Die Abbildung 6-9 zeigt das Dendrogramm für die Koalitionsbildung. Es ist aus der Gleichheitsmatrix gebildet worden. Für jedes Paar von Interessensgruppen mit ähnlichen Beurteilungen der vorgeschlagenen Alternativen wird für unterschiedliche Niveaus der Koalition ein Ähnlichkeitsindex (links im Bild) berechnet.

Das NAIADE-Dendrogramm des Koalitionsbildungsprozesses zeigt, dass das Wasserwerk und das Landesamt für Ökologie ähnliche Sichtweisen haben (Ähnlichkeitsindex 0,90). Eine etwas geringere Übereinstimmung zeigt sich zwischen der Kommunalen Verwaltung und der örtlichen Bevölkerung (Ähnlichkeitsindex 0,82). Deren wahrscheinlichster Koalitionspartner die Kreisverwaltung wäre (Ähnlichkeitsindex 0,75). Die örtliche Bevölkerung und die Verwaltung auf der einen und Wasserwerk und Landesamt auf der anderen Seite, wären die

nächst-wahrscheinlichen Koalitionspartner (Ähnlichkeitsindex 0,62). Geringfügig wahrscheinlicher ist eine Koalition zwischen Landwirten und Ingenieurbüros (Ähnlichkeitsindex 0,65). Die beiden Koalitionen treffen sich mit einem eher geringen Ähnlichkeitsindex von 0,50. Das zeigt insgesamt ein recht breites Interessensspektrum und recht gegensätzliche Beurteilungen der Alternativen.

Die stärkste Koalition bildet sich offensichtlich zwischen Kommunal- und Kreisverwaltung, örtlicher Bevölkerung, Wasserwerk und dem Landesamt für Ökologie.

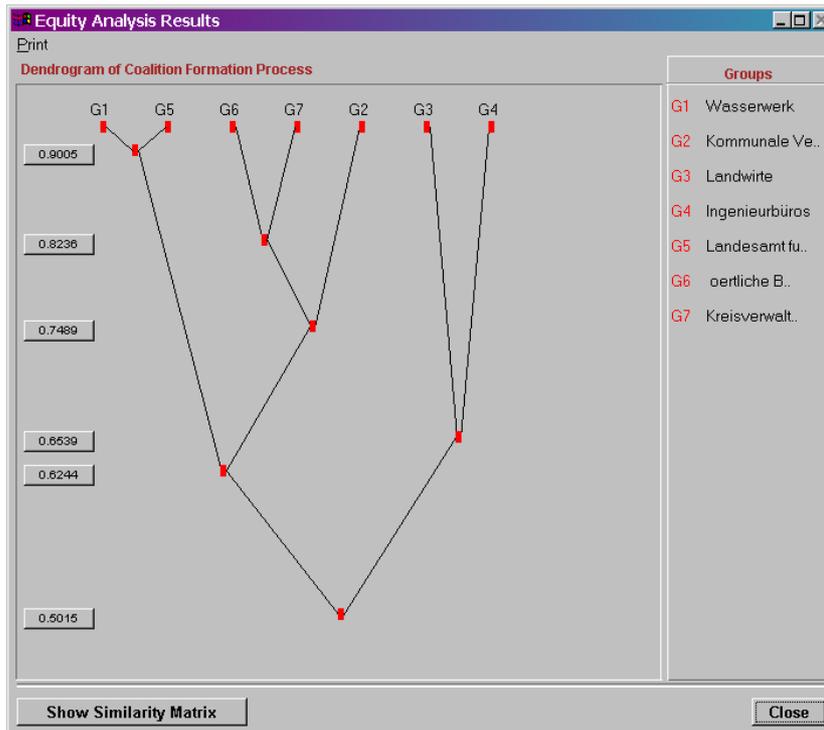


Abbildung 6-9: NAIAD-DE-Dendrogramm der Koalitionsbildung für die Akteursgruppen in Thülsfeld. Die Ähnlichkeiten zwischen den Akteursbeurteilungen hinsichtlich der vorgeschlagenen Alternativen werden in den verschiedenen Stadien der Interaktion durch die Ähnlichkeitsindizes (links in der Abbildung) deutlich.

6.8 Diskussion und Analyse

Das Ergebnis zeigt, dass die beste Kompromisslösung diejenige ist, die auch von der stärksten Koalitionsgruppe: Kommunal- und Kreisverwaltung, örtliche Bevölkerung, Wasserwerk und dem Landesamt für Ökologie vertreten wird. Dies ist die Alternative A, also die gegenwärtig in der Etablierung befindliche Variante mit dem ökologischen Landbau. Theoretisch möglich wäre auch die Alternative E, die die Umwandlung in Grünland befürwortet.

Man sieht jedoch auch, wenn der Kostenfaktor der Wasserversorgung in den Hintergrund tritt, wachsen die Chancen eines Kompromisses für die intensiveren landwirtschaftlichen Bewirtschaftungsvarianten. Dies liegt nahe, da das behandelte Problem im Spannungsfeld zwischen Wasserversorgung und Landwirtschaft liegt, und dann die Seite der Landwirtschaft gestärkt wird. Im Ergebnis kann festgestellt werden, dass bei einer etwa 50 %-igen Verringerung der Kosten der Wasserversorgung eine intensive landwirtschaftliche Alternative

(C) in Frage kommt. Wenn jedoch andererseits die Kosten der Wasserversorgung steigen, sinkt die Wahrscheinlichkeit einer landwirtschaftlich geprägten Alternative.

Es gibt einige Einwände hinsichtlich dieser Analyse, die hier erwähnt werden sollen. Der Haupteinwand ist, dass die Entscheidung bereits getroffen wurde, indem der Wasserversorger auf den im seinem Besitz befindlichen Flächen den ökologischen Landbau fördert. Insofern ist es nun kaum noch möglich eine freie Entscheidung in einer interaktiven Diskussion zwischen den Akteuren und den Entscheidungsträgern zu finden. Es ist auch klar, dass die Analyse auch an einem unübersehbaren Datenmangel leidet.

Es gibt einige Grenzen und Einschränkungen der MCDA-Methoden und damit von NAIADE, die gleichzeitig aber auch als Vorteile gesehen werden können. Die Haupteinschränkung besteht darin, dass eine MCDA-Analyse niemals eine Antwort auf die Frage liefern kann „Welches ist die beste Alternative?“. Sie kann nur ein Verständnis und Vorschläge für Akteure und Entscheidungsträger liefern. Dieser Fakt kann für die Entscheidungsträger ärgerlich sein. Es gibt ein Risiko, dass die Ergebnisse einer MCDA-Analyse als Faktum genutzt werden können, welche sie jedoch nicht sind. Die Tatsache, dass NAIADE keine Wichtung erlaubt, kann eine Einschränkung sein, wenn der Entscheidungsträger, z.B. das ökonomische Kriterium stärker wichten möchte als das kulturelle.

Es gibt weiterhin ein deutliches Risiko, dass der Analyst oder der Entscheidungsträger die Analyse durch die Wahl der Kriterien, der Akteure, der Präferenzen und der Verzugsbeziehungen beeinflusst. Es wäre z.B. möglich, dass die Alternative D als beste Alternative identifiziert wird, wenn mehr Kriterien, die die intensive Landwirtschaft berücksichtigen einbezogen und Kriterien, die die Wasserversorgung und den Ressourcenschutz beinhalten entfernt werden.

Zusammenfassend zeigt die Anwendung der NAIADE-Analyse auf Thülsfeld, dass MCDA effektiv als Werkzeug in einem Entscheidungsprozess einbezogen werden kann. Es können die gegensätzlichen Interessen bewertet und eine Kompromisslösung erreicht werden. Speziell ist dies durch die Möglichkeit der Berücksichtigung verschiedener Typen von Informationen, d.h. harte Daten, sprachliche Ausdrücke, stochastische Verteilungen und unscharfe Mengen gegeben. Das Problem wird strukturiert durch eine multikriterielle Einflussmatrix und die Koalitionen werden über die Gleichheitsmatrix gefunden. Letztere ist eine gute Möglichkeit zur Verbesserung des Verständnisses für die Interessen der anderen teilnehmenden Akteure.

Die Kombination der multikriteriellen Analyse und der Gleichheitsanalyse kann sehr wertvoll sein. In der Gleichheitsanalyse, die hier angewendet wurde konnte gezeigt werden, dass es eine akzeptable Lösung gibt, die den Grundwasserschutz priorisiert und für die gleichzeitig die stärkste Koalitionsgruppe steht.

Am Schluss soll erwähnt werden, dass NAIADE den Vorteil hat unspezifisch zu sein. Es kann damit, z.B. auch in der Kombination mit anderen Modellwerkzeugen, auch für andere Bereiche Anwendung finden.

Im nächsten und letzten Kapitel werden die Schlussfolgerungen für die gesamte Arbeit gezogen und es erfolgt ein Ausblick.

7 Schlussfolgerungen und Ausblick

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war die Untersuchung von Modellen und Methoden zur Entscheidungsfindung in der Grundwasserbewirtschaftung. In der Arbeit wurde dazu ein Entscheidungsrahmen geschaffen, der Erkundungsmethoden, numerische Modelle und gesellschaftswissenschaftliche Aspekte mit einem multikriteriellen Entscheidungshilfswerkzeug verknüpft.

Nach einer Bewertung und Diskussion von Modellen und Methoden in der Grundwasserbewirtschaftung erfolgte eine Anwendung an praktischen Beispielen. Der Entscheidungsrahmen fokussiert dabei auf Nutzungsaktivitäten, die Wirkungen auf die Grundwasserressourcen haben. Die praktische Anwendung erfolgt dazu im Einzugsgebiet des Wasserwerkes Thülsfeld des Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverbandes (Niedersachsen), in dem die Wasserförderung und die landwirtschaftliche Bodennutzung die Hauptnutzungen darstellen. Die landwirtschaftliche Nutzung in der Trinkwasserschutzzone 3 ist bereits Nutzungseinschränkungen z.B. hinsichtlich der Düngermengen und des Einsatzes von Pflanzenschutzmitteln unterworfen. Das Bestreben des Wasserwerksbetreibers besteht darin, die Landwirtschaft zu extensivieren und Flächen mit besonders hohem Gefährdungspotenzial aufzuforsten. Dazu werden schrittweise konventionell bewirtschaftete landwirtschaftliche Flächen vom Wasserversorger aufgekauft und diese entweder wieder an Landwirte verpachtet oder aber aufgeforstet. Die Verpachtung wird unter Nutzungsaufgaben durchgeführt. Dabei wird die ökologische Landwirtschaft favorisiert. Im Zusammenhang mit der forstwirtschaftlichen Nutzung stellt sich vor allem die Frage nach der Strategie der Aufforstung um erhöhten Stoffeinträgen und einer daraus resultierenden Tiefenversauerung des Grundwassers entgegenzuwirken.

Die vorliegende Arbeit identifiziert die Umwelteinflüsse infolge der landwirtschaftlichen Nutzung und der atmosphärischen Stoffeinträge und vergleicht verschiedene Bewirtschaftungsvarianten. Dabei kann gezeigt werden, dass bei einer Extensivierung der Landwirtschaft das Gefährdungspotenzial für das Grundwasser hinsichtlich Kontamination deutlich zurückgeht.

Zur Bewertung der Reaktionsbedingungen und des *Status quo* im Aquifer werden ausgewählte Erkundungs- und Auswertungsmethoden vorgestellt und praktisch angewendet. Dabei wird mit leicht gewinnbaren Informationen, wie z.B. anhand von Wasseranalysen, die Reaktionsbedingungen im Aquifer ermittelt. Außerdem werden Indikatoren verwendet, die das Stattfinden bestimmter Reaktionen anzeigen. Hierzu zählen z.B. das Vorkommen von organischem Kohlenstoff als Elektronendonator und die Interpretation der Nitrat-Sulfat-Hydrogenkarbonat-Diagramme. Auf diese Weise konnte der Untersuchungsaufwand deutlich reduziert und die Effizienz erhöht werden. Weitere Methoden zur Identifizierung hydrogeologischer und hydrochemischer Verhältnisse, z.B. Isotopenmethoden und Chlorid-Sulfat-Diagramme, wurden angewendet und diskutiert.

Die in der Recherche ausgewählten Modelle, die in das Entscheidungshilfesystem implementiert wurden, sind:

- HERMES für die ungesättigte Zone,
- MODFLOW/MT3D für die gesättigte Zone und
- NAIADE für die Szenarienvergleich und die multikriterielle Entscheidungsfindung.

Die Modelle HERMES und MODFLOW/MT3D wurden gekoppelt um eine integrierte Berechnung der Stoffflüsse in der ungesättigten und der gesättigten Zone zu ermöglichen. Die Kopplung wurde als „lose“ Kopplung realisiert, die den Datenfluss zwischen den Modellen realisiert, die Modelle selbst aber nicht verändert.

Im Zusammenhang mit der Modellierung wurden auch Möglichkeiten zur Regionalisierung von Modelleingangsdaten erörtert und angewendet. Dazu wurden geostatistische Methoden verwendet. Des Weiteren wurde mit der Entwicklung des Feldsimulators ein Werkzeug geschaffen, das eine wertvolle Hilfe für Simulationen bei eingeschränkter landwirtschaftlicher Datenbasis sein kann. Da die Fruchtartenverteilung meist unbekannt ist, ermittelt der Feldsimulator auf wahrscheinlichkeitstheoretischer Basis eine Zeitreihe von Fruchtartenverteilungen für das Untersuchungsgebiet. Damit wird die Regionalisierung von Ergebnissen der Stoffausstragsmodellierung der ungesättigten Zone unterstützt. Es wurden auf diese Weise Modellwerkzeuge geschaffen, die in einem Entscheidungsrahmen angewendet werden können. Damit wird eine naturwissenschaftliche Basis für die Entscheidungsfindung bereitgestellt.

Die Ergebnisse der Feldmethoden in Kombination mit Modellrechnungen im Untersuchungsgebiet Thülsfeld zeigen, dass Nitrat gegenwärtig noch von den Förderbrunnen fern gehalten wird. Wesentlichen Anteil hat dabei eine reaktive Schicht im Aquifer, die durch einen hohen Pyritgehalt gekennzeichnet ist. Der bestimmende Prozess ist hier die autotrophe Denitrifikation, die durch Redox-Prozesse im sauerstoffarmen Milieu hervorgerufen wird. Wenn die Denitrifikationskapazität erschöpft ist, wird es zu einem Durchbruch von Nitrat an den Förderbrunnen kommen. Um die Denitrifikationskapazität weitgehend zu erhalten, ist deshalb mittelfristig eine Minimierung der Nitrateinträge durch die Landwirtschaft erforderlich.

In der vorgelegten Arbeit wurde weiterhin gezeigt, dass das multikriterielle Entscheidungshilfswerkzeug NAIAD (Munda, 1995) für die Einbeziehung und Bewertung der Ziele verschiedener Interessensgruppen geeignet ist und für das Erreichen einer Kompromisslösung erfolgreich eingesetzt werden kann. NAIAD liefert eine systematische Anwendung für die Strukturierung von Problemstellungen. Es erlaubt die Verknüpfung und Bewertung von natur- und gesellschaftswissenschaftlichen Kriterien einschließlich von Nutzungsszenarien und gestattet die Identifizierung möglicher Koalitionen von Interessensgruppen. Die getesteten 4 alternativen Bewirtschaftungsszenarien wurden auf diese Weise hinsichtlich ihres Konfliktpotenzials für die Wasserressourcen, die Landwirtschaft, die natürlichen und die landeskulturellen Werte beurteilt.

Für das Untersuchungsgebiet Thülsfeld wurde festgestellt, dass die extensive landwirtschaftliche Bewirtschaftung des Gebietes die optimale Variante ist. Diese wird bereits teilweise im Gebiet praktiziert.

Es gibt einige Fragestellungen, die in dieser Arbeit offen geblieben sind. Diese sollen im folgenden Ausblick, schwerpunktmäßig zusammengefasst werden. Es wurde gezeigt, dass die entwickelten Methoden genutzt werden können, um mittelfristige Beeinflussungen von Grundwasserressourcen, d.h. über einen Zeitraum eines Jahrzehnts, zu identifizieren und hinsichtlich ihrer Wirkungen zu bewerten. Zukünftig wäre zu untersuchen, inwieweit langfristige Beeinflussungen, z.B. über mehrere Jahrzehnte, zuverlässig prognostizierbar sind. Dazu wären längere Beobachtungsreihen notwendig.

Ferner sollte untersucht werden, wo die Grenzen der Werkzeuge hinsichtlich der Anwendungsskala liegen. Bei den Transportmodellen sind die Anwendungen, z.B. hinsichtlich des realisierbaren Parametrisierungsaufwandes und der Relevanz der berücksichtigten Prozesse,

beschränkt. Die Ansätze zur Entscheidungsunterstützung haben hinsichtlich der Skale keine Begrenzung, sofern ein strukturiertes Problem vorliegt. Schwieriger wird es, wenn die Zielstellung nicht eindeutig formuliert werden kann, z.B. bei unterschiedlichen politischen Interessen verschiedener Bundesländer oder Nationen beim Grundwasserschutz. Die Methoden wurden so ausgewählt, dass sie hinsichtlich der Skale möglichst universell einsetzbar sind. Ein Nachweis, bis zu welcher Grenze dies gilt, steht allerdings noch aus.

Ein weiterer interessanter Aspekt, der künftig zu untersuchen wäre, sind Mehrfachnutzungen verschiedener Wasserressourcen, z.B. Grund- und Oberflächenwasser, in einem Untersuchungsgebiet. Dies ist bei einzugsgebietsbezogenen Bewirtschaftungsansätzen der Regelfall. Allerdings kann es dabei dazu kommen, dass eine Zielformulierung nicht mehr eindeutig möglich ist, da das Problem nicht mehr strukturierbar ist. Eine Alternative wären hier Entscheidungsketten, bei denen jeweils kleinere und überschaubare Gebiet bewertet und die Wechselwirkungen mit dem Rändern untersucht werden. Dieser Aspekt gewinnt grundsätzlich bei zunehmender Komplexität an Bedeutung.

Weitere Aspekte für künftige Aufgaben sollten die Untersuchung der Übertragbarkeit der Ansätze auf andere Gebiete sein und ein Test, wie die Akteure in einem Entscheidungsprozess mit dem System, also wie groß die Akzeptanz ist. Die Übertragbarkeit ist für Teile der Methodik, wie z.B. das Bodenmodell und das Grundwassermodell durch vielfältige Anwendungen bereits nachgewiesen. Eine diesbezügliche Untersuchung der integrierten Modelle steht allerdings noch aus. Die Frage der Akzeptanz der Methode ist essentiell für die weitere Verwendung. Ein Praxistest erfordert deshalb eine möglichst breite Basis von Fachleuten aus verschiedenen Disziplinen, die am Test interessiert sind, eine gründliche Vorbereitung aller Akteure sowie eine interessante und überschaubare Zielstellung.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass der in der vorliegenden Arbeit erarbeitete Entscheidungsrahmen einen wesentlichen Beitrag für eine natur- und gesellschaftswissenschaftlich basierte Entscheidungsfindung leisten kann. Dazu wurden Stoffeinträge und Stofftransportbedingungen im Untergrund durch ausgewählte Erkundungsmethoden und gekoppelte numerische Modellierung charakterisiert und die Auswirkungen unter verschiedenen Szenarien prognostiziert. Weiterhin wurden naturwissenschaftliche mit sozio-ökonomischen Kriterien in einer multikriteriellen Entscheidungsumgebung verknüpft und ein möglicher Entscheidungsweg angegeben. Im Ergebnis konnte gezeigt werden, dass auf diese Weise Lösungen für einen nachhaltigen Grundwasserschutz gefunden werden können.

8. Literaturverzeichnis

- Aamodt, A., Plaza, E. (1994): Case-Based Reasoning: Foundational Issues, Methodological Variations and System Approaches, *AI Communications*, 7(1), 39-59.
- Abou-Seda, M.N.I., OTTOW, J.C.G. (1995): Effect of increasing oxygen concentration on total denitrification and nitrous oxide release from soil by different bacteria. *Biol. Fert. Soils* 1, 31-38.
- Addiscott, T.M. (1977): A simple computer model for leaching in structured soils. *J. of Soil Sci.*, 28, 554-563.
- Addiscott, T.M., Wagenet, R.J. (1985): Concepts of solute leaching in soils: A review of modelling approaches. *J. of Soil Sci.*, 36, 411-424.
- Addiscott, T.M., Whitmore, (1987): Computer simulation of changes in soil mineral nitrogen and crop nitrogen during autumn, winter and spring. *J. Agric. Sci., Camb.*, 109, 141-157.
- Aerts, J.C.J.H., Kriek, M., Schepel, M. (1999): STREAM (Spatial Tool for River Basins, Environment and Analysis of Management Options): Set up and Requirements. Report Resource Analysis RA-99.
- AG Bodenkunde (1994): Bodenkundliche Kartierungsanleitung. – 4. Edition., 392 S., Hannover.
- Ahmed, S., De Marsily, G. (1987): Comparison of Geostatistical Methods for Estimating Transmissivity Using Data on Transmissivity and Specific Capacity. *Water Resources Research*, 23 (9), 1717-1737.
- Alter, S. (1994): Transforming DSS Jargon into Principles for DSS Success, p. 3-26 in *Decision Support and Executive Information Systems*, edited by Paul Gray.
- Andersen, P.F. (1993): Manual for instructional problems for USGS Modflow model, GeoTrans Inc., Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, US EPA, Ada, Oklahoma, 280p.
- Bach (1994): Die potentielle Nitratbelastung des Sickerwassers durch die Landwirtschaft in der Bundesrepublik Deutschland. *Göttinger Bodenkundliche Berichte* 93, 1-186 p.
- Ball, J.W., Nordstrom, D.K. (1979): WATEQ2 - A computerized chemical model for trace and major element speciation and mineral equilibria of natural waters - S.815-835, in: E.A. Jenne (Hrsg.): *Chemical modeling in aqueous systems - Am. Chem. Soc. Symp. Series*, 93, Washington D.C.
- Ball, J.W., Nordstrom, D.K. (1991): User's manual for WATEQ4F, with revised thermodynamic data base and test cases for calculating speciation of major, trace, and redox elements in natural waters: U.S. Geological Survey Open-File Report 91-183, 189 p. (Revised and reprinted August 1992.)
- Baptist, M.J., Vonk, M. (1999): A Fuzzy Expert System to Assess the Effects of Climate Change on the Ecosystem of the Wadden Sea. Final Report WL | Delft Hydraulics T2056.
- BBodSchG (1998): Gesetz zum Schutz des Bodens vom 17. März 1998. *Bundesgesetzblatt Jahrgang 1998, Teil I, Nr.16, S. 505-510*
- BBodSchV (1999): Bundes - Bodenschutz- und Altlastenverordnung vom 16. Juli 1999. *Bundesgesetzblatt Jahrgang 1999, Teil I Nr.36, S. 1554-1682*
- Becking, J.H. (1981): The family Azotobacteriaceae, 795-817. In: STARR, M. R., STOLP, H., TRÜPER, H. G., BALOWS, A. and SCHLEGEL, H. G. (eds): *The prokaryotes* Springer, Berlin
- Bedient, P.B., Rifai, H.S., Newell, C.J. (1999): *Ground Water Contamination, Transport and Remediation*, Second Edition, Prentice Hall PTR, UK, ISBN 0-13-013840-1.
- Benecke, P., Eberl, C., Marbach, M. (1992): Bestandsbegründung mit Bodenbearbeitung, Kalkung und Hilfspflanzenanbau, *Allg. Forstzeitung* 10 / 1992
- Bergmann, R. (1999): *Developing Industrial Case-Based Reasoning Applications – The INRECA-Methodology*, Springer-Verlag, Germany.
- Beudt, J. (Hrsg.) (1997): *Grundwassermanagement: Schutz – Reinigung – Sanierung*. Springer – Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Barcelona, Budapest, Hongkong, London, Mailand, Paris, Santa Clara, Singapur, Tokio, ISBN 3-540-62404-X.
- Beyer, W. (1964): Zur Bestimmung der Wasserdurchlässigkeit von Kiesen und Sanden aus der Kornverteilungskurve. – *WWT* 14: 165-168, Berlin
- BfG (1997): *Darstellung und Bewertung von mesoskaligen Stickstoffmodellen*, Bundesanstalt für Gewässerkunde, Koblenz - Berlin.
- Binder, M., Reinstorf, F., Walther, W. (2002): "Konzept zur Verbesserung der flächenbezogenen Aussagen aus bestehenden Messnetzen im System Atmosphäre - Boden - Gewässer", LAWA für DK 5.71, twV (DVWK) 4121, Abschlussbericht, Institut für Grundwasserwirtschaft, TU Dresden.

- Blattner, M. (1996): Modelle: EHP, Tagungsunterlagen zur Zwischenpräsentation, BMBF-Verbundprojekt "Prognosemodell für die Gewässerbelastung durch Stofftransport aus kleinen Einzugsgebieten - Weiherbachprojekt-".
- Bleeker, A., Draaijers, G.P.J., Klap, J.M., van Jaarsveld, J.A. (2000): Deposition of acidifying components and base cations in Germany in the period 1987-1995. National Institute of Public Health and Environment Protection (RIVM), Bilthoven, Report no. 722108027.
- BLW (1994): Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft, Internationales Symposium - Grundwasserversauerung durch atmosphärische Deposition Ursachen - Auswirkungen - Sanierungsstrategien: 26.-28. Oktober 1994, Bayreuth, Deutschland. In: Informationsber. des Bayerischen Landesamtes für Wasserwirtschaft Heft 3 (1995), Eigenverlag München, 429 S.
- Böckle, R., Rohmann, U., Sontheimer, H. (1984): Die Bedeutung eines natürlichen Nitratabbaus im Untergrund für die Grundwasserqualität und dessen Nachweis mit Hilfe eines einfachen Verfahrens zur Bestimmung der Stickstoffkonzentration in Grundwässern. *Vom Wasser* 62 (1984), S. 25-37.
- Boening, D. (1990): Verifikation thermodynamischer Gleichgewichtsmodelle anhand von Labor- und Feldversuchen. In: DFG-Kolloquium : Modellierung hydrogeochemischer Reaktions- und Transportprozesse im Grundwasserbereich, Universität Karlsruhe, Institut für Hydromechanik, S.5
- Borchers, U. (1993): Erfassung und Charakterisierung von Substraten in pleistozänen Aquiferen sowie deren Verwertbarkeit für die mikrobielle Nitratreduktion. (Diss.), Cuvillier Verlag, Göttingen, 1993.
- Böttcher, J. (1989): Kinetik und Modellierung gekoppelter Stoffumsetzungen im Grundwasser eines Lockergesteines Aquifers. *Geol. Jahrbuch*, Hannover.
- Böttcher, J., Strebel, O. (1985): Vertikale Stoffkonzentrationsprofile im Grundwasser eines Lockergesteinsaquifers und deren Interpretation (Beispiel Fuhrberger Feld), *Z. dt. geol. Ges.* 136, 543-552, Hannover.
- Brooks, C.H.P. (1997): A Framework for DSS Development - from Decision support and Executive Information Systems, ed. Paul Gray.
- Bulfin, M. (1993): Private Forestry in Ireland: Progress and Problems, aus: *Agriculture: Afforestation of agricultural land*, Proceedings of a workshop held in Brussels (Belgium) on 12 and 13 December 1991, Commission of the European Communities, Report EUR 14804 EN, 1993
- Burns, I.G. (1974): A model for predicting the redistribution of salts applied to fallow soils after excess rainfall or evaporation. *J. of Soil Sci.*, 25, 165-178.
- Burrough, P.A. (1989): Principles of Geographical Information Systems for Land Resources Assessment, Clarendon press, Oxford, 194p.
- Canter, L (1997): Nitrates in Groundwater. Lewis Publishers, Boca Raton, New York, London, Tokyo, 1997.
- CEC (1991): Final report on project: "Nitrate in Soils". CEC EUR 13501, Luxembourg, 544 pp.
- Clayton, A.M.H., Radcliff, N.J. (1997): Sustainability – a system approach, ISBN 1-85383-319-3.
- Com (97) 49: Final-Proposal for Council Directive establishing a framework for Community action in the field of water policy. OJ, No. C 184/97, 20 p.
- Cornforth, I.S. (1999): Selecting indicators for assessing sustainable land management, *Journal of Environmental Management*, 56, 173-179.
- Costanza, R. (1993): Developing ecological research that is relevant for achieving sustainability, *Ecological Applications*, 3, 4, 579-581.
- Costanza, R., Pattern, B.C. (1995): Defining and predicting sustainability, *Ecological Economics* 15, 193-196.
- Costanza, R., Wainger, L., Bockstael, N. (1996): Integrating Spatially Explicit Ecological and Economic Models: Theory and application in the Patuxent River Watershed, Maryland, in getting down to earth, Washington, D.C. Island Press.
- Crowe, A.S., Mutch, J.P. (1994): An expert system approach for assessing the potential for pesticide contamination of ground water, *Ground Water*, 32, 2, 487-498.
- Cypionka, H. (1999): Grundlagen der Mikrobiologie. Springer, Berlin, Heidelberg 1999.
- Dadda, R. (1996): PC Magezine, April 1996/10.
- Davis, B.M., 1987. Uses and abuses of cross-validation in geostatistics. *Math. Geol.*, 17, 563-586.
- De Jong, D.J., 1999. Ecotopes in the Dutch Marine Tidal Waters. A proposal for a classification of ecotopes and a method to map them. RIKZ-Report 99.017 801 ISBN 90-369-3424-9

- De Kok, J. L., Wind, H.G. 1999. Methodology for sustainable Coastal Zone Management in the Tropics, The Integrative Research, Twente University, Dept. of Civ. Eng., Techn. and Env.
- Delwiche, C.C (1956): Denitrification. In: McELROY, W.D. and GLASS, B. (eds.): Symposium on inorganic nitrogen metabolism. The Hopkins Press, Baltimor.
- De Nijs, T.C.M. , de Niet, R., de Hollander, G.E.M. (RIVM), Filius, F., Groen, J. (RPD), 2000. De LeefOmgevingsVerkenner: Kaartbeelden van 2030 RIVM publication 408505044, Bilthoven,
- DHI Water and Environment (2001): MIKE SHE Code Verification and Validation, http://www.dhisoftware.com/mikeshe/Reviews/External_Evaluations/MSHEVerification_Appendix.pdf
- Deutsch, C.V., Journel, A.G., 1998. GSLIB – Geostatistical Software Library and User’s Guide. Second Edition, Oxford University Press.
- Diersch, H.-J. (2004): FEFLOW 5.1 – Users manual, WASY Institute for water resources planning and systems research, Berlin, <http://www.wasy.de/deutsch/produkte/feflow/>
- DIN 18123: Baugrund – Untersuchung von Bodenproben – Bestimmung der Korngrößenverteilung, 11.96
- DIN 38404-5: Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Bestimmung des pH-Wertes, 01.84
- DIN 38406- 5: Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Bestimmung des Ammonium-Stickstoffs, 10.83
- DIN 38406-13 : Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Bestimmung von Kalium mittels Atomabsorptionsspektrometrie (AAS) in der Luft-Acetylen-Flamme, 07.92
- DIN 38406-14: Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Bestimmung von Natrium mittels Atomabsorptionsspektrometrie (AAS) in der Luft-Acetylen-Flammem, 07.92
- DIN 38406-3: Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Bestimmung von Calcium und Magnesium, 09.82
- DIN 38409-7: Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Bestimmung der Säure- und Basekapazität, 05.79
- DIN 38414-2: Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Bestimmung des Wassergehaltes und des Trockenrückstandes bzw. Trockensubstanz, 11.85
- DIN 4220 (1998): Kennzeichnung, Klassifizierung und Ableitung von Bodenkennwerten. Normenausschuss Wasserwesen (NAW) im DIN Deutsches Institut für Normung e.V.
- DIN EN 27888: Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Bestimmung der elektrischen Leitfähigkeit, 11.93
- DIN EN ISO 10304-1: Bestimmung von gelösten Anionen Fluorid, Chlorid, Nitrit, Orthophosphat, Bromid, Nitrat und Sulfat mittels Ionenchromatographie
- DIN ISO 10694: Bodenbeschaffenheit – Bestimmung von organischem Kohlenstoff und Gesamtkohlenstoff nach trockener Verbrennung (Elementaranalyse), 08.96
- Dohrenbusch, A. (1998): Der Beitrag von Erstaufforstungen zum Klima - und Wasserschutz, in: Mitteilungen aus der NNA 3/98
- Domenico, P.A., Robbins, G.A. (1984): A dispersion scale effect in model calibration and field tracer experiments, *Journal of Hydrology* 7, 121-132.
- Domenico, P.A., Schwartz, F.W. (1997): Physical and chemical Hydrogeology, Second Edition, John Wiley & Sons, Inc. ISBN 0-471-59762-7.
- Domenico, P.A., Schwartz, F.W. (1998): Physical and chemical Hydrogeology, Second edition, John Wiley and sons, Inc., ISBN 0-471-59762-7
- Dörhöfer & Josopait (1980): Eine Methode zur flächendifferenzierten Ermittlung der Grundwasserneubildungsrate. - Geologisches Jahrbuch, Reihe C, Heft 27 Hannover
- Draaijers, G.P., van Leeuwen, E.P., de Jong, P.G.H., Erisman, J.W., 1996. Deposition of base-cations in Europe and its role in acid neutralisation and forest nutrition. National Institute of Public Health and Environment Protection (RIVM), Bilthoven, Report no. 722108017.
- Draaijers, G.P., Erisman, J.W., Spranger, T., Vel, E., 1998. Quality and uncertainty aspects of forest deposition estimation using throughfall, stemflow and precipitation measurements. TNO-report TNO-MEP – R 98/093, Apeldoorn, 73pp.

- DVWK (1984): Ermittlung der Stoffdeposition in Waldökosystemen, DVWK Regeln 122/1984, Verlag Paul Parey.
- DVWK (1997): Erfassung der depositionsbedingten Schadstoffbelastung des Sickerwassers aus Waldstandorten - Einfluß auf die Grundwasserbeschaffenheit. DVWK-Merkblätter zur Wasserwirtschaft, Heft 243/1997, Bonn
- Eastman, J.R. (1993): IDRISI 4.1 Update manual: 213 Seiten (- darin: S.61), Worcester.
- Eliasson, A. (1999): The integration of GIS and Hydrological modelling for Groundwater resources management in Sweden, Presentation from the GIS day, Nov. 19th, Joint Research Centre, Ispra, Italy.
- Eliasson, A. (2001): Groundwater Impact Assessment and Protection, Licentiate Thesis, Kings University Stockholm, ISBN 91-7283-050-6.
- Engel, Th. et al. (1993): Simulationsmodelle zur Stickstoffdynamik. - In: Agrarinformatik, Vol. 25, Verlag Eugen Ulmer (Stuttgart)
- Engesgaard, P., Jensen, K.H., Molson, J., Frind, E.O., Olsen, H. (1996): Large-scale dispersion in a sandy aquifer: Simulation of subsurface transport of environmental tritium, *Wat. Res. Res.*, 32 (11), 3253-3266.
- Engel, Th., Klöcking, B., Priesack, E., Schaaf, Th. (1993): Simulationsmodelle zur Stickstoffdynamik. In: *Agrarinformatik*, Bd. 25, Verlag Eugen Ulmer Stuttgart.
- Engelen, G. (2000): The development of the WADBOS DSS. A bridge between knowledge and policy in the Wadden Sea. Techn. Paper prepared for the Min. of Transport, Public Works and Water Management. ESRI (2005): *GIS Worlds*, Author: Ian Masser, ISBN: 1-58948-122-4, 336 pages.
- Engelen, G.B., Kloosterman, F.H. (1996): *Hydrological Systems Analysis – Methods and Applications*, Water Science and Technology Library, Vol. 20, Kluwer Academic Publishers, ISBN 0-7923-3986-X.
- EUWID (2002): EU-Kommission legt Themenpapier zur Grundwasserrichtlinie vor. Dokument Nr.: WA 002 Ausgabe 02 vom 22.01.2002.
- Englund, E., Sparks, A. (1991): *GEO-EAS 1.2.1 – Geostatistical Environmental Assessment Software. User's Guide*, Environmental Monitoring Systems Laboratory Office of Research and Development U.S. Environmental Protection Agency Las Vegas, Nevada 89119.
- Erismann, J.W., Draaijers, G.P.J. (1995): Atmospheric deposition in relation to acidification and eutrophication. *Studies in Environmental Science* 63, Elsevier Science B.V., Amsterdam.
- Faustzahlen für Landwirtschaft und Gartenbau (1993): *Landwirtschaftsverlag Münster-Hiltrup*, 1993.
- Fischer, J. (1991): Gefährdung der Grundwasserqualität durch Säureeintrag in das Grundwasser und Pilot-Maßnahmen zur Sicherung der Trinkwasserversorgung. *DVGW-Schriftenreihe, Wasser Nr. 73* (1991), 91-110
- Franko, U. (1995): Interpretation von Lysimeterexperimenten mit Hilfe des Simulationsmodells Candy, 5. Gumpensteiner Lysimetertagung, Bundesanstalt für Alpenländische Landwirtschaft.
- Franko, U., Oelschlägel, B., Schenk, S. (1995): Simulation of temperature, water- and nitrogen dynamics using the model CANDY. *Ecol. Modell.* 81, 213-222.
- Freeze, R.A., Cherry, J.A. (1979): *Groundwater*, Englewood Cliffs, N.J. Prentice Hall, ISBN 0-1336-531-29.
- Freeze, R.A., James, B., Massmann, J., Sperling, T., Smith, L. (1992): Hydrogeological Decision Analysis: 4. The Concept of Data Worth and its Use in the Development of Site Investigation Strategies, 30 (4), 574-588.
- Frissel, M.J., Van Veen, J.A. (eds.) (1981): *Simulation of nitrogen behaviour of soil-plant systems*. PUDOC, Wageningen, 276 pp.
- Gauger, Th., Köble, R., Smiatek, G. (1997): Kartierung kritischer Belastungskonzentrationen und -raten für empfindliche Ökosysteme in der BRD und anderen ECE-Ländern. Endbericht zum Forschungsvorhaben 106 01 061 Teil 1: Deposition Loads, Institut für Navigation der Universität Stuttgart, im Auftrag des UBA.
- Gauger, Th., Köble, R., Anshelm, F. (2000): Kritische Luftschadstoff-Konzentrationen und Eintragsraten sowie ihre Überschreitung für Wald und Agrarökosysteme sowie naturnahe waldfreie Ökosysteme. Teil 1: Deposition Loads 1987-1989 und 1993-1995, Institut für Navigation der Universität Stuttgart, Endbericht 297 85 079 im Auftrag des UBA.
- Gauger, Th., Anshelm, F., Schuster, H., Erismann, J., Vermeulen, A., Draaijers, G., Bleeker, A., Nagel, H.-D., 2002. Mapping of ecosystem specific long-term trends in deposition loads and concentra-

- tions of air pollutants in Germany and their comparison with Critical loads and Critical Levels. Final report 299 42 210, Institute for Navigation, University Stuttgart.
- Gelhar, L.W., Welty, C. Reehfeldt, K.R. (1992): A critical review of data on field scale dispersion in aquifers, *Water Resources Research* 28 (7), 1955-1974.
- Germon, J.C. (1985): Microbiology of denitrifikation and other processes involving the reduction of oxygenated nitrous compounds. In: H.L. GOLTERMANN (ed.): Denitrifikation in the nitrogen cycle. *Nato Conference Series I* (9), 31-46.
- Glasson, J., Therviel, R., Chadwick, A. (1994): *Introduction to Environmental Impact Assessment, Principles and procedures, processes, practice and prospects*, ed. University Collage Press Ltd., London, UK.
- Groenendijk, P. Kroes, J.G. (1999), *Modeling the nitrogen and phosphorus leaching to groundwater and surface water with ANIMO 3.5*, Wageningen, The Netherlands, SC-DLO Report 144, 138 p.
- Groot, J.J.R., De Willigen, P. (1991): Simulation of nitrogen balance in the soil and a winter wheat crop. *Fert. Res.* 27, 261-272.
- Guiguer, N., J. Molson, T. Franz and E. Frind, 1993, FLOTRANS, User guide version 2.1: Two-dimensional steady-state flownet and advective-dispersive contaminant transport model, *Waterloo Hydrogeologic Software*, Canada, 79p.
- Gupta, S., Woodside, G., Raykham, N., Connolly, J. (1996): GIS in Groundwater Hydrology, in *Geographical Information system in Hydrology*, eds. Singh, V.P. and Fiorentino, M., *Water Science and Technology Library*, Kluwer Academic Publishers, 303-321.
- Haan, C.T., Storm, D.E. (1996): Non-point Source Pollution Modelling (with GIS), in *Geographical Information System in Hydrology*, ed. Singh, V.P. and Fiorentino, M., *Water Science and Technology Library*, Kluwer Academic Publishers, 323-337.
- Haberlandt, U., Kite, G.W., 1998. Estimation of daily space-time precipitation series for macro scale hydrological modelling, *Hydrolog. Process.* 12, 1419-1432.
- Hahn, B., Kofalk, S., Maas, A. (2005): *Elbe-DSS – Ein Pilot DSS für das Flusseinzugsgebiet der Elbe. – Benutzeranleitung*. Research Institut for Knowledge Systems bv, Maastricht, The Netherlands.
- Hansen, H.C.B., Brogaard, O.K., Sörensen, J. (1994): Evaluation of the free energy of formation of Fe(II)-Fe(III)hydroxide-sulphate (green rust) and its reduction of nitrite. *Geochim. Cosmochim. Acta* 58(12): 2599-2608.
- Harbaugh, A.W., Banta, E.R., Hill, M.C., and McDonald, M.G. (2000): MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey modular groundwater model -- User guide to modularization concepts and the Ground-Water Flow Process: U.S. Geological Survey Open-File Report 00-92, 121 p.
- Harbaugh, A.W., McDonald, M.D. (1996): User's documents for MODFLOW-96: An update to the U.S. Geological Survey modular finite-difference groundwater flow model, U.S. Geological Survey Open File Report 96-485, 220p.
- Harms, E. (1987): *Hydrogeologische und ökologische Beweissicherung im Einzugsgebiet des Wasserwerkes Thülsfelde, Landkreis Cloppenburg und Kartierung im südlichen Teil der TK 25 Markhausen (Nr. 3013). – Dipl.arb., Inst. Für Geologie und Paläontologie der TU Braunschweig.*
- Hashimoto, T., Stedinger, J.R., Loucks, D.P. (1982): Reliability, resiliency, and vulnerability criteria for water resources system performance evaluation, *Water Resources Research* 18 (1), 14-20.
- Hazen, A. (1892): Some physical properties of sands and gravels with special references to their use in filtration. – 24th annual report state board of health Massachusetts: 541-556, Boston, Mass.
- Härdle, W., Simar, L., 2003. *Applied Multivariate Statistical Analysis*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, ISBN 3-540-03079-4.
- Hollerung, R. (1990): Grenzen und Probleme der Anwendung von thermodynamischen Gleichgewichtsmodellen bei der Modellierung hydrochemischer Reaktionen in Grundwassersystemen. In: DFG-Kolloquium: Modellierung hydrogeochemischer Reaktions- und Transportprozesse im Grundwasserbereich, Universität Karlsruhe, Institut für Hydromechanik, S.6-9
- Holzbecher, E. (1996): *Modellierung dynamischer Prozesse in der Hydrologie*, Springer-Verlag, 1996.
- Högemann, M. (1994): *Möglichkeiten der wirtschaftlichen Landnutzung in einem ausgewählten Wassereinzugsgebiet Südoldenburgs unter Berücksichtigung der nachhaltigen Grundwasserschonung.* - Unpublished Diploma Thesis, University of Kassel, Faculty for Agroecconomy
- Huber, G.P. (1994): Group Decision Support Systems as Aid in the Use of Structured Group Management Techniques, p. 211-225 in *Decision Support and Executive Information Systems*, ed. Paul Gray.

- Hudson, G., Wackernagel, H., 1994. Mapping temperature using kriging with external drift: theory and an example from Scotland. *International Journal of Climatology*, 14, 77-91.
- Huwe, B., Van Der Ploeg, R. (1989): Modelle zur Simulation des Stickstoffhaushaltes von Standorten mit unterschiedlicher landwirtschaftlicher Nutzung. Eigenverlag des Institutes für Wasserbau der Universität Stuttgart, Heft 69, 213 pp.
- Huwe, B. (1992): Deterministische und stochastische Ansätze zur Modellierung des Stickstoffhaushaltes landwirtschaftlich genutzter Flächen auf unterschiedlichen Skalenniveau, Institut für Wasserbau, Stuttgart, Mitteilungen, 77, 385 p.
- IIASA (1997): DESERT – Decision support system for evaluating river basin strategies, Manual.
- INCO (2002): Final Report: “Development of tools needed for an impact analysis for groundwater quality due to changing of agricultural soil use” from the 4th Framework Programme INCO-COPERNICUS of the European Union (1.01.1999-31.12.2001), Contract number: IC 15-CT98-0131.
- Industry Canada (1997): Measuring sustainable development: Review of current practice, ISBN 0-662-63202-8.
- Isaaks, E. H., Srivastava, R.M., 1989. An Introduction to Applied Geostatistics. Oxford University Press.
- Jamieson, D.G., Fedra, K. (1996a) : The ‘WaterWare’ decision-support system for river-basin planning, 1. Conceptional design, *J. of Hydrology*, 177, 3-4, 163-176.
- Jamieson, D.G., Fedra, K. (1996b) : The ‘WaterWare’ decision-support system for river basin planning, 3, Example applications, *Journal of Hydrology*, 177, 3-4, 199-212.
- Jansen, R., Rietwald, P. (1990): Multicriteria Analysis and Geographical Information Systems: An Application to agricultural land use in the Netherlands, in *Geographical Information Systems for Urban and Regional Planning*, eds. Scholten, H.J. and Stillwell, J.C.H., Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 129-139.
- Jansen, R. (1992): Multiobjective Decision Support for Environmental Management, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 232p.
- Jarke, M., Jelassi, M.T. (1994): View Intergation in Negotiation Support Systems, p. 279-289 in *Decision Support and Executive Information Systems*, ed. Paul Gray.
- Jasmund, K., Lagaly, G. (1993): *Tonminerale und Tone*, Steinkopff Verlag, Darmstadt, 1993.
- Johnston, R.H. (1986): Factors Affecting Groundwater Quality, Water Supply Paper 2325, US Geological Survey, Virginia, National Water Summary 1986, Hydrological Events and Groundwater Quality, 71-86.
- Josopait, V. (1990): Hydrogeologisches Gutachten zur Bemessung und Gliederung eines Wasserschutzgebietes für die Wassergewinnungsanlagen des Wasserschutzgebietes Thülsfelde. Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung Hannover, 1990.
- Jury, W.A., Gruber, J. (1989): A stochastic analysis of the influence of soil and climatic variability on the estimate of pesticide and groundwater pollution potential. *Water Res. Res.*, 25, 2465-2474.
- Kersebaum, K.C. (1995): Application of a simple management model to simulate water and nitrogen dynamics, *Ecological Modeling*, 81: pp. 145–156.
- Kersebaum, K. C. (1997): Szenarienberechnung zur Reduktion der Nitratbelastung im Trinkwasser-Einzugesgebiet Scheeßel Niedersächsisches Landesamt für Ökologie.
- Kersebaum, K.C., Beblík, A.J. (2001): Performance of a nitrogen dynamics model applied to evaluate agricultural management practices. In: Shaffer, M.J., L. Ma, S. Hansen (Eds.): *Modeling carbon and nitrogen dynamics for soil management*. Lewis Publishers Press, Boca Raton, FL, USA, 549 - 569.
- Kersebaum, K.C., Richter, J. (1991): Modeling nitrogen dynamics in a plant-soil system with a simple model for advisory purposes. *Fert. Res.* 27, 273-281.
- Ketelsen, H., Widmoser, P. (2000): Trend und Verteilungsmuster der Nitratbelastung im Grundwasser des westlichen Geestkerns auf der Insel Föhr. In: *Zeitschrift Hydrologie und Wasserwirtschaft*, Vol. 44/2, S. 75-87, 2000.
- Kinzelbach, W. (1987): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. - Oldenburg Verlag GmbH, München 1987, pp. 161ff
- Kjeldsen, T.R., Rosbjerg, D. (2001): A framework for assessing of the sustainability of a water resources system. In: Schumann, A., (Ed.) *Regional Management of Water Resources (Proceedings*

- of a symposium held during the Sixth IAHS Scientific assembly at Maastricht, The Netherlands, July 2001), Vol. IAHS Publication No. 268, pp. 107-113
- Knuth, O., Wolke, R. (1998): An explicit-implicit numerical approach for atmospheric chemistry-transport-modelling. *Atmospheric Environment* 32, 1785-1797.
- Klemme, J.-H. (1981): Neuere Erkenntnisse über die Nitratreduktion. *Forum Mikrobiol.* 4, 330-337
- Knowles, R. (1982): Denitrification. *Microbiol. Rev.* 46, 43-70.
- Koch, C. B., Hansen, H. C. (1997): Reduction of Nitrate to Ammonium by Sulphate Green Rust. In: *Advances in GeoEcology* 30, S. 373-393, Cantena Verlag Reichskirchen, 1997
- Kolditz, O., Kaiser, R., Habbar, A., Kohlmeier, M., de Jonge, J., Beinhorn, M., Xie, M., Kalbacher, T., Ungruh, G., Bauer, S., Wang, W., McDermott, Ch., Chen, C., Beyer, C., Gronewold, J., Kemmler, D. (2003): *RockFlow Manual, RFD Input Description Version 3.9 First Draft, ROCKFLOW – Preprint, Tübingen/Hannover.*
- Korn, R. (1995): Grundwassergütebericht für das Wassergewinnungsgebiet Thülsfelde (OOWV). Report ordered by OOWV, Brake.
- Köble, R., Smiatek, G., Gauger, Th. (1997): Kartierung kritischer Belastungskonzentrationen und –raten für empfindliche Ökosysteme in der BRD und anderen ECE-Ländern. Endbericht zum Forschungsvorhaben 106 01 061 Teil 2: Critical Levels, Institut für Navigation der Universität Stuttgart (1997), im Auftrag des UBA.
- Kölle, W. (1991): Nitratabbauvermögen des Aquifers – Wasserwerk Thülsfelde des Oldenburgisch Ostfriesischen Wasserverbandes. Stellungnahme des Instituts für Wasserforschung Hannover an den OOWV und das Niedersächsische Landesamt für Wasser und Abfall.
- Kölle, W. (1996): Konzept zur Bewertung des Stickstoffumsatzes im Grundwasser. In: *Grundwasserschutz, Konzepte* 96, Heft 1 (Grundwasser-Kolloquium 14./15.2.96), S 267-293. IGW TU Dresden, 1996.
- KOM (2003): Entwurf für einen Vorschlag für eine Richtlinie des Europäischen Parlaments und des Rates zum Schutz des Grundwassers vor Verschmutzung (Tochterraichtlinie), Kommission der Europäischen Gemeinschaften, Brüssel.
- Klein, M. (1999): Erweiterung des Versickerungsmodells PELMO zur Berechnung des schnellen Stofftransports („preferential flow“). - Jahresbericht 1999, Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie, Schmallenberg
- Krieter, M. (1991): Wasserkreislauf und Saure Niederschläge, *Geographische Rundschau*, 6/1991
- Kroes, J.G. and J. Roelsma, 1998, ANIMO 3.5: User's guide for the ANIMO version 3.5 nutrient leaching model, Wageningen, The Netherlands, SC-DLO, Technical Document 46, 98 p.
- Kubiniok, J., Müller, A. (1993): Bodenentwicklung und Nährstoffhaushalt unterschiedlich alter Ackeraufforstungen, *Allg. Forstzeitung* 5 / 1993
- Kubiniok, J., Müller, A. (1994): Pedologische Auswirkungen von Ackeraufforstungen auf Sandböden - Eine Untersuchung an Böden aus dem östlichen Saarland, *Forst und Holz* 1994, S. 6 - 9
- Kukuric, N., Hall, M.J. (1998): The electronic encapsulation for groundwater quality management, *Water Resources Management*, 12, 1, 51-79
- Landesvermessung und Geobasisinformation Niedersachsen (Ed., 1997): Topografische Karte 1:25.000, Blatt 3013 Markhausen.
- Landesvermessung und Geobasisinformation Niedersachsen (Ed., 1997): Topografische Karte 1:25.000, Blatt 3113 Molbergen: 8th edition
- Landwirtschaftskammer Weser-Ems & Landwirtschaftsamt Cloppenburg (1998): Landwirtschaftliche Zusatzberatung im Interesse des Gewässerschutzes. Sachbericht 1998. Wasservorranggebiet Thülsfeld. – 43 S., Report contracted by OOWV
- Landwirtschaftskammer Weser-Ems & Landwirtschaftsamt Cloppenburg (1999): Landwirtschaftliche Zusatzberatung im Interesse des Gewässerschutzes. Sachbericht 1999. Wasservorranggebiet Thülsfeld. – 43 S., Report contracted by OOWV
- LAWA (1998): Atmosphärische Deposition: Richtlinie für Beobachtung und Auswertung der Niederschlagsbeschaffenheit 1998, Empfehlungen Wasserhaushalt und Gewässerschutz, Länderarbeitsgemeinschaft Wasser.
- Lee, S.S., In, H.P. (2005): Simulating groundwater transport process using a vertical heterogeneity model: A case study, *SYSTEMS MODELING AND SIMULATION: THEORY AND APPLICATIONS LECTURE NOTES IN COMPUTER SCIENCE* 3398: 536-544.

- Lee, J., Casey, F.X.M. (2005): Development and evaluation of a simplified mechanistic-stochastic method for field-scale solute transport prediction, *SOIL SCIENCE* 170 (4): 225-234 APR 2005
- Leeks, G.J.L., Jarvie, H.P. (1998): Introduction to Land-Ocean Interaction Study (LOIS): Rationale and International Context, *The Science of the Total Environment*, 210-211, 1-6, 5-20.
- Lehmann, W. (1995): Anwendung geostatistischer Verfahren auf die Bodenfeuchte in ländlichen Einzugsgebieten. IHW Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft Universität Karlsruhe Heft 52.
- Lensing, H. J., Vogt, M., Herrling, B. (1994): Modelling of biologically mediated redox-processes in the subsurface. *Journal of Hydrology* 159, pp 125- 143
- LfU (1991): Materialien zur Altlastenbearbeitung. Bd. 7, Handbuch Mikrobiologische Bodenreinigung. Landesanstalt für Umweltschutz Baden – Württemberg.
- Linde, N. (2000): Multi-Criteria Decision Aid as a tool in Water Management – Nybroasen case study, thesis project, Uppsala University.
- Lindström, R., Scharp, C. (1995): Approaches to groundwater vulnerability assessment – A state of the art report. TRITA-AMI REPORT 3015, Div. of Land and Water Resources at the Royal Institut of Technology, Stockholm, Sweden, ISSN 1400-1306.
- Linkersdörfer, S., Benecke, P. (1987): Auswirkungen von sauren Depositionen auf die Grundwasserqualität in bewaldeten Gebieten: eine Literaturstudie, (Materialien Umweltbundesamt, 87/4) - Berlin: Erich Schmidt, 1987
- Lockett, A.G., Ahmad, R., Turner, C. (1994): Managing System Change Requests in the Development of a Large and Complex DSS, from Decision Support and Executive Information Systems, ed. Paul Gray.
- Loucks, D.P. (1997): Quantifying trend in system sustainability, *Hydrological Science Journal* 42 (4), 513-530.
- Loucks, P.D., Costa, J.R. (1991): Decision Support Systems, Water Resources Planning, Springer-Verlag, 574p.
- Loucks, P.D., Gladwell, J.S. (1999): Sustainability Criteria for Water Resource Systems, International Hydrology Series, UNESCO
- LUA Brandenburg (1998): Luftqualität in Brandenburg 1997, Landesumweltamt Brandenburg, Potsdam.
- Malinowsky, P., Ottow, J.C.G. (1985): Ökologische Bedingungen der Denitrifikation von Pilzen. *Landwirtsch. Forsch.* 38, 30-34.
- LWF (1998): Bayerische Landesanstalt für Wald und Forstwirtschaft, <http://www.lwf.uni-muenchen.de/veroef/veroef98/wze98/kap4.htm>.
- Magette, W.L. (1989): Managing Ground Water quality in Relation to Agricultural Activities, *Water Resources Bulletin*, 25, 599-606.
- Maier, H.R., Lence, B.J., Tolson, B.A., Foschi, R.O. (2001): First-order reliability method for estimation reliability, vulnerability and resilience, *Water Resources Research* 37 (3), 779-790.
- Malessa, V., Schall, P., Richter, A. (1997): Prognoseverfahren zur regionalen und quantitativen Ableitung von Gewässerversauerung auf mittlerer und kleiner Maßstabsebene. Projektbericht an die Deutsche Bundesstiftung Umwelt Osnabrück (Text- und Kartenband). Niedersächsisches Landesamt f. Bodenforschung Archiv-Nr. 115959.
- Massmann, J., Freeze, R.A., Smith, L., Sperling, T., James, B. (1991): Hydrogeological Decision Analysis: 2. Applications to Ground-Water Contamination, *Ground Water*, 29 (4), 536-548.
- Matheron, G. (1971): The Theory of Regionalized Variables and its Applications. *Les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique*, Fasc.5.
- McClean, Watson, Wadsworth, Blaiklock, O'Callaghan (1995): Land Use Planning: A Decision Support System, *J. Environmental Planning and Management*, 38, 1, 77-92.
- McDonald, M., Harbaugh, A. (1988): Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey, Chapter A1: A modular Three-dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model. - Book 6 : Modeling Techniques
- McDonald, M.D., Harbaugh, A.W. (1988): A modular three-dimensional finite-difference flow model, *Techniques for Water Resources Investigations of U.S. Geological Survey*, Book 6, 586p.
- McMahon, T.A. (1993): Hydrologic design for water use, In: Maidment, D.R. (Ed.) *Handbook of Hydrology*. McGraw-Hill, New York (Chapter 27).
- Mengel, K. (1984): Ernährung und Stoffwechsel der Pflanze, VEB Gustav Fischer Verlag, 1984

- Meiwes, K.J., Merino, A., Fortmann, G. (1994): Untersuchung der Versauerung in Bohrprofilen von Meßstellen des Grundwassergütemeßnetzes (GÜN) des Landes Niedersachsen. - Berichte des Forschungszentrums Waldökosysteme/Waldsterben, Reihe B, 34(1994): 86 S.
- Mioduszewski, W., Fic, M., Slesicka, A., Zdanowicz, A., Walther, W., Paetsch, M., Reinstorf, F., Weller, D., Diankov, S., Velovski, G., Radoslavov, S., Marinov, W., Nicheva, O., Querner, E.P., Roelsma, J. (2005): Development of tools needed for an impact analysis for groundwater quality due to changing of agricultural soil use, Lidi Razowska-Jaworek & Andrzej Saduski (eds), IAHS-Books, A.A. Balkema Publishers, 295 pp, ISBN 90 5809 664
- Misra, C., Nielson, D. R., Biggar, J. W. (1974): Nitrogen transformations in soil during teaching. Soil Sci. Soc. Amer. Proc. 38.
- Miralles-Wilhelm, F., Gelhar, L.W. (1996): Stochastic analysis of transport and decay of a solute in heterogeneous aquifers, Wat. Res. Res., 32 (12), 3451-3459.
- Moy, W.S., Cohon, J.L., ReVelle, C.S. (1986): A programming model for analysis of the reliability, resilience and vulnerability of a water supply reservoir, water Resources Research 22 (4), 489-498.
- Munda, G. (1995): Multi-Criteria Evaluation in a fuzzy environment, Theory and Application in Ecological Economics, Physica-Verlag, Heidelberg, Germany.
- Nachtnebel, H.P., Fürst, J., Holzmann, H. (1993): Application of geographical information systems to support groundwater modelling, in Application of Geographical Information Systems in Hydrology and Water Management, eds. Kovar, K. and Nachtnebel, H.P., IAHS Publication No 211, 13-23.
- NAIADE (1996): Users manual, European Commission, Joint Research Centre, TP 650, 210 20, Ispra, Italy.
- Neteler, M. (2000): Das GRASS-Handbuch. Ein problemorientierter Leitfaden. 3.Aufl., Hannover.
- Byars, B., M. Neteler, S. Clamons, S. Cherry (1998): GRASS 4.2 Fact Sheet. Baylor University, Waco, Texas.
- Neteler, M., Mitasova, H. (2002): Open Source GIS: A GRASS GIS Approach. ISBN: 1-4020-7088-8, Kluwer Academic Publishers, Boston, Dordrecht, 460 pages
- Neteler, M., Mitasova, H. (2003): Open Source GIS: A GRASS GIS Approach. ISBN: 1-4020-8064-6, Kluwer Academic Publishers, Boston, Dordrecht, 420 pages
- Newell, C.J., Haasbeck, J.F., Bedient, P.B. (1990): OASIS: A Graphical Decision Support System for Groundwater Contamination Modelling, Groundwater 8 (2), 224-234.
- Nießner, R., Zajic, A., Schäfer, O., Kühnhardt, M. (1994): Einfluß der Wechselwirkung organischer Luftschadstoffe (PAHs, PCBs) in atmosphärischen Aerosol und Niederschlag auf die Qualität oberflächennaher Grundwässer. - Abschlußbericht, Lehrstuhl für Hydrogeologie, Hydrogeochemie und Umweltanalytik, Technische Universität München, (Bayerisches Klimaforschungsprogramm), 73 S.
- Nitzsche, O. (1997): TReAC-Modell zur Beschreibung des reaktiven Stofftransportes im Grundwasser. 105 Seiten, Wissenschaftliche Mitteilungen des Institutes für Geologie des Institutes für Geologie der TU Bergakademie Freiberg.
- NLfB (1976): Gutachterlicher Bericht über die hydrogeologischen Gegebenheiten im Bereich des Wasserwerkes Thülsfelde des OOWV. – Report VI-4057/76, unveröffentlicht.
- NLfB (1981): Bodenkundliche Untersuchungen zur Beweissicherung für das Wasserwerk Thülsfelde/Cloppenburg. – Report 2265/80, unveröffentlicht.
- NLfB (1982): Stellungnahme zur Grundwasserabsenkung im Bereich des Wasserwerkes Thülsfelde. unveröffentlicht.
- NLfB (1990): Hydrogeologisches Gutachten zur Bemessung und Gliederung eines Wasserschutzgebietes für die Wassergewinnungsanlage des Wasserwerkes Thülsfelde (OOWV). unveröffentlicht.
- NLÖ - Niedersächsisches Landesamt für Ökologie (1993): Nitrat im Grundwasser, Fallbeispiele.
- Newell, C.J., Haasbeck, J.F., Bedient, P.B. (1990): OASIS: Graphical Decision Support System for Groundwater Contaminant Modelling, Ground Water, 28 (2), 224-234.
- Nukuric, N., Hall, N.J. (1998): The Electronic Encapsulation of Knowledge for Groundwater Quality Management, Water Resources Management, 12, 51-79.
- Obermann, P. (1981): Hydrochemisch/hydrmechanische Untersuchungen zum Stoffgehalt von Grundwasser unter dem Einfluss landwirtschaftlicher Nutzung. Lehrstuhl Geologie-Geotechnik der Ruhr-Universität Bochum, 1981.

- O'Callaghan, J.O. (1995): NELUP – An Introduction, *J. Environmental Planning and Management*, 38, 1, 5-20.
- O'Callaghan, J.O. (1996): *Land use – the Interaction of Economics, Ecology and Hydrology*, Chapman and Hall, London, 197p.
- Oldenburgische-Ostfriesischer Wasserverband (OOWV) (1981): *Flurabstandskarte – Wassereinzugsgebiet Thülsfelde*. – Brake.
- Olsthoorn, T.N. (1999): A comparative review of analytic and finite difference models used at the Amsterdam Water Supply. – *Journal of Hydrology*, 226 (3-4): 139-143.
- OMKAS, 2000. *Air Hygienic Situation and Forest Condition in the Black Triangle*. Proceedings of the Final Project Meeting, Saxon State Authority for Environment and Geology.
- OOWV (1998) Oldenburgisch-Ostfriesischer Wasserverband, Landwirtschaftskammer Weser-Ems, Landwirtschaftsamt Cloppenburg: *Landwirtschaftliche Zusatzberatung im Sinne des Gewässerschutzes*. Sachbericht 1998, Wasservorranggebiete Thülsfelde
- OOWV (1999) Oldenburgisch-Ostfriesischer Wasserverband, Landwirtschaftskammer Weser-Ems, Landwirtschaftsamt Cloppenburg: *Landwirtschaftliche Zusatzberatung im Sinne des Gewässerschutzes*. Sachbericht 1999, Wasservorranggebiete Thülsfelde.
- Oster, H. (2001): *Spurenstoffuntersuchungen an Messstellen bei Thülsfeld*. – 23.1.2001. Bericht im Auftrag des OOWV (Wachenheim, Bornheim).
- Otter-Nacke, S., Kuhlmann, J. (1991): A comparison of the performance of N simulation models in the prediction of Nmin on farmers fields in the spring. *Fert. Res.* 27, 341-347.
- Ottley, C., Davison, W., Edmunds, W. (1997): Chemical catalysis of nitrate reduction by iron (II). In: *Geochemica et Cosmochimica Acta*, Vol 61 (9), S. 189-1828, 1997.
- Ottow, J.C.G. (1969): Mechanism of iron reduction by nitrate reductase inducible aerobic microorganisms. *Naturwissen.* 56, 371.
- Painter, H. A. (1970): A review of literature on inorganic nitrogen metabolism in microorganism. *Water Res.* 4, 6, 393-450.
- Parkhurst, D.L., Appelo, C.A.J. (1999): *USER'S GUIDE TO PHREEQC (VERSION 2)*, Water-Resources Investigations Report 99-4259, Denver Colorado. http://www.geo.tu-freiberg.de/hydro/vorl_portal/englisch_courses/reactive_transport/manual.pdf.
- Parkhurst, D.L., Thorstensen, D.C., Plumer, L.N., (1980): Phreeqc - a computer program for geochemical calculations. - U.S. Geological Survey, Water Resources Investigation 80 (96)
- Pastrovich et al. (1979): In Domenico & Schwartz, (1998).
- Pätsch, M., Weller, D., Walther (2001a): *Untersuchungsprogramm zur Ermittlung des vertikal differenzierten Stickstoffumsatzes in der gesättigten Zone und der Lebensdauer der Nitratelimination*. Report of IGW, TU Dresden, April 2001.
- Pätsch, M., Weller, D., Walther, W., Reinstorf, F., Harms, E. (2001b): *Heterogeneity of nitrogen removal processes in pleistocene aquifers, northern low plain of Germany*. Groundwater Quality 2001, Third International Conference on Groundwater Quality, University of Sheffield, UK. 18-21 June 2001.
- Peters, E., van Lanen, H.A.J., Torfs, P.J.J.F., Bier, G. (2005): Drought in groundwater-drought distribution and performance indicators, *Journal of Hydrology* 306 (2005), 302-317.
- Postma, D. (1990): Kinetics of nitrate reduction by detrital Fe(II)-silicates. In: *Geochemica et Cosmochimica Acta*, Vol. 54, S. 903-908, 1990.
- Rajaram, H., Gelhar, L.W. (1995): Plume-scale dependent dispersion in aquifers with a wide range of scales of heterogeneity, *Water Resources Research*, 31 (10), 2469-2482.
- RAMCO Rapid Assessment Module for Coastal Zones [diskettes] : version 2.0 / National Institute for Coastal and Marine Management (RIKZ) , Coastal Zone Management Centre (CZM), 1998. - 2 diskettes (3.5inch.) Demo version.
- Rajaram, H., Gelhar, L.W. (1995): Plume-scale dependent dispersion in aquifers with a wide range of scales of heterogeneity, *Wat. Res. Res.*, 31 (10), 2469-2482.
- Rao, P.S.C., Jessup, R.E., Hornsby, A.G. (1982): Simulation of Nitrogen in Agroecosystems: Criteria for Model Selection and Use. *Plant and Soil* 67, 35-43.
- Rats-Richtlinie für die Qualität von Wasser für die menschliche Ernährung (98/83/EC vom 3. November 1998) (Trinkwasserrichtlinie).

- Regionalverband Neckar-Alb (1998): „Der Wald auf dem Vormarsch ? Grundlagen zur Beurteilung von Aufforstungsmaßnahmen im Zuge der Extensivierung landwirtschaftlicher Nutzflächen in der Region Neckar-Alb“, 1998.
- Rehfuss, K. E. (1990): Waldböden: Entwicklung, Eigenschaften und Nutzung, Pareys Studentexte 29, 1990.
- Ress, R. M., Ribbens, J.C.H. (1995): Relationship between afforestation, water chemistry and fish stocks in an upland catchment in south west Scotland, Acid Rain '95.
- Rheinheimer, G. (1988): Stickstoffkreislauf im Wasser, Oldenburg Verlag GmbH, München, 1988.
- Reefsgaard, J.C., Abbott, M.B. (1996): Distributed Hydrological Modelling, C. Kluwer Academic Publisher, Netherlands, p. 321, ISBN 0-7923-4042-6.
- Reinstorf, F. (1995): Der Einfluss atmosphärischer Stoffeinträge, insbesondere von Stickstoff, auf die Abflussbeschaffenheit bewaldeter Flächen, dargestellt am Beispiel eines Wassereinzugsgebietes im mittleren Erzgebirge. Dissertation, Technische Universität Dresden, Fakultät Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften.
- Reinstorf, F., Binder, M., Schirmer, M., Grimm-Strele, J., Walther, W. (2005): Comparative assessment of regionalisation methods of monitored atmospheric deposition loads, Atmospheric Environment, Vol 39/20 pp 3661-3674.
- Reinstorf, F., Heblack, K., Pätsch, M., Walther, W. (2002): Stoffauswaschung unter aufgeforsteten Flächen und Untersuchungen zum Zustand der Versauerung in der Tiefe im Wasserschutzgebiet Thülsfeld, Abschlussbericht zum Untersuchungsauftrag des Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverbandes (OOWV).
- Reinstorf, F., Susset, B., Marre, D., Grathwohl, P., Walther, W. (2001): Modelle zur Sickerwasserprognose, Bodenschutz 1/01, ISSN 1432-170x.
- Reinstorf, F., Walther, W., Heblack, K., Cramer, T. (2001): Tools for prognosis of the acidification of aquifers in sedimentary rocks, 6th Scientific Assembly of the IAHS, In: “Impact of Human Activity on Groundwater Dynamics”, IAHS-Publication (Red Book) no. 269, ISSN 0144-7815, Maastricht 18-27th July 2001.
- Rhind, D.W. (1990): Global Database and GIS in the Association for Geographical Information Yearbook 1989, eds. Foster, M.J. and Shand, P.J., Taylor and Francis and Miles Arnold, London, 85-91.
- Richtlinie über Schutz des Grundwassers gegen Verschmutzungen durch bestimmte gefährliche Stoffe (80/68/EWG vom 17. Dezember 1979) (Grundwasserrichtlinie).
- Richtlinie zum Schutz der Gewässer vor Verunreinigungen durch Nitrat aus landwirtschaftlichen Quellen (91/676/EWG vom 12. Dezember 1991) (Nitratrictlinie).
- Richtlinie über das Inverkehrbringen von PSM (91/414/EWG vom 15. Juli 1991) (Pflanzenschutzmittel).
- Richtlinie zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik (2000/60/EG vom 23. Oktober 2000) (Wasserrahmenrichtlinie).
- Riesbeck, C.K., Schank, R.C. (1989): Inside Case – Based Reasoning, Lawrence Erlbaum Associates, Publishers, New Jersey.
- Rijtema, P.E., P. Groenendijk and J.G. Kroes, 1999, Environmental impact of land use in rural regions, London, Imperial College Press, 321p.
- Rijtema, P.E., Roest, C.W.J., Kroes, J.G. (1990): Formulation of the nitrogen and phosphate behaviour in agricultural soils, the ANIMO-model. Report 30, Winand Staring centre, Wageningen, Netherlands.
- Rodda, H.J.E., Demuth, S., Shankar, U. (1999): The application of a GIS-decision support system to predict nitrate leaching to groundwater in southern Germany, J. of Hydrological Sciences, (44)2, 221-236.
- Rohmann, U., Sontheimer, H. (1985): Nitrat im Grundwasser. Engler-Bunte Institut der Universität Karlsruhe, Eigenverlag, 1985.
- Roth, K. (1989): Stofftransport im wasserungesättigten Untergrund natürlicher, heterogener Böden unter Feldbedingungen, Diss., Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, ETH - Nr.8907.
- Schäfer, W.: Modellierung des Stofftransports im Grundwasser, Vorlesungsskript der Universität Heidelberg.
- Schäfer, W. (1992): Numerische Modellierung mikrobiell beeinflusster Stofftransportvorgänge im Grundwasser, Schriftenreihe gwf Wasser Abwasser, Band 23.

- Schäfer, D., Schäfer, W., Kinzelbach, W. (1998): Simulation of reactive processes related to biodegradation in aquifers, 1. Structure of the three - dimensional reactive transport model. *Journal of Contaminant Hydrology*, 31, pp167-186.
- Scheffer, B. (1996)- Extensivierung und Flächenumwidmung zur Grundwasserentlastung, Veröffentlichungen der Nds. Akademie der Geowissenschaften, Hannover 11, 85 – 89.
- Scheffer, F., Schachtschabel, P. (1998): Lehrbuch der Bodenkunde. Enke Verlag Stuttgart, 1998.
- Scheidegger, A. M., Sparks D.L. (1996): A critical assessment of sorption-desorption mechanisms at the soil mineral/water interface. In: *Soil Science*, Vol. 161, No. 12, S. 813-831, 1996.
- Schenk, D., Kaupé, M. (1998): Grundwassererfassungssysteme in Deutschland, Materialien zur Umweltforschung, Hrsg.: Rat von Sachverständigen für Umweltfragen, Metzler-Poeschel Stuttgart.
- Schlegel, H.G. (1992): Allgemeine Mikrobiologie. 7. Überarbeitete Auflage, Georg Thime Verlag Stuttgart, 1992.
- Schleyer, R., Kerndorff, H. (1992): Die Grundwasserqualität westdeutscher Trinkwasserressourcen. VCH.
- Schlichting, E., Blume, H.-P., Stahr, K. (1995): Bodenkundliches Praktikum, 2., neubearbeitete Auflage, Blackwell Wissenschafts-Verlag Berlin, Wien.
- Schloe, K. (1996): Investigations of Starter Cultures for the Heterotrophic Denitrifikation of Drinking Water. Ulrich E. Grauer Verlag, Stuttgart.
- Schlünzen, K.H., Bigalke, K., Lenz, C.-J., Lüpkes, C., Niemeyer, U., von Salzen, K., 1996. Concept and Realization of the Mesoscale Transport and Fluid Model METRAS. METRAS, Technical Report 5, Meteorological Institute of the University Hamburg.
- Schmidt, A.L. (1998): Role Play on River and Floodplain Management – Final Report Phase 1, IHE Delft.
- Schoen, R., Wright, R., Krieter, M. (1984): Gewässerversauerung in der Bundesrepublik Deutschland - erster regionaler Überblick. *Naturwissenschaften* 71, S. 95-97.
- Schretzenmayr, G., Röder, R. (1987): Auswirkung der sauren Niederschläge auf die Gewässer unter besonderer Berücksichtigung der Trinkwasserversorgung. Vortrag Seminar Wassergütwirtschaft, TU München Nov. 1987.
- Schulz, K. (1996): Das N-Gebietsmodell Dynamit. In: Tagungsunterlagen der Zwischenpräsentation am 10. Dezember 1996 in Karlsruhe. Weiherbachprojekt.
- Schultz-Wildelau, Walther, W., Hölscher, J. (1986): Belastung von Wasser und Boden durch Schadstoffe in Luft und Niederschlägen, Bestandsaufnahme und Konzept für ein Untersuchungs- und Forschungsprogramm. Texte Nieders. Landesamt f. Wasserwirt, Hildesheim 1986, 99 Seiten.
- Sigg, L., Stumm, W. (1994): Aquatische Chemie - Eine Einführung in die Chemie wässriger Lösungen und natürlicher Gewässer. 3. Aufl., ISBN 3-7281-1931-8 vdf-Verlag 1994.
- Simonovic, S.P. (1996b): Decision Support Systems for Sustainable Management of Water Resources: 2. Case Studies, 21, 233-244.
- Simunek, J., K. Huang, M. Th. van Genuchten, 1995, SWMS_3D code for simulating water flow and solute transport in three-dimensional variably-saturated media, USSL, Riverside, California, USA, 155p.
- Sinowski, W. (1995): Die dreidimensionale Variabilität von Bodeneigenschaften – Ausmaß, Ursache und Interpolation. Dissertation an der TU München.
- Sperling, T., Freeze, R.A., Massmann, J., Smith, L., James, B. (1992): Hydrological decision analysis: 3. Application to Design of a Ground-Water Control System at an Open Pit Mine, *Ground Water*, 30 (3), 376-388.
- Sposito, G. (1989): Bodenchemie. Übers. Von A. Eifert, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart, 1998. (Originalausgabe: „The Chemistry of Soils“, Oxford University Press, 1989.).
- Stabell, C.B. (1994): Towards a Theory of Decision Support, from Decision Support and Executive Information Systems, ed. Paul Gray.
- Steinberg, C., Arzet, K. (1984): Versauerung in ausgewählten stehenden Gewässern. In UBA, Gewässerversauerung in der Bundesrepublik Deutschland. Materialien 1/84 (1984), Erich Schmidt Verlag Berlin
- Stockwell, W.R., Kley, D. (1994): The Euro-RADM mechanism: A gas-phase chemical mechanism for European air quality studies. *Berichte des Forschungszentrums Jülich*, 2868.

- Stuart, N., Stocks, C. (1993): Hydrological Modeling within GIS: an integrated approach, in Application of Geographical Information systems in Hydrology and Water resource Management, eds. Kovar, K. und Nachtnebel, H.P., IAHS Publication No 211, 319-332.
- Stumm, W. & J.J. Morgan (1996): Aquatic Chemistry. 3. Aufl., Willey & Sons, Inc.
- Sverdrup, H., Warfvinge, P., Blake, L., Goulding, K. (1995): Modelling recent and historic soil data from the Rothamsted Experimental Station, UK using SAFE. Agriculture, Ecosystems and Environment 53 (1995), 161-177
- Torbjarnson, K.W., Mackay, D.M. (1994): A forced gradient experiment on solute transport in the Borden aquifer, 2, Transport and dispersion of the conservative tracer, Wat. Res. Res., 30 (2).
- Trudel, M., Gillham, R., Cherry, J. (1986): An in-situ study of the occurrence and rate of denitrification in a shallow unconfined sandy aquifer. In: Journal of Hydrology, Vol. 83, S. 251-268, 1986.
- Turban, E.R., Aronson, J.E. (1998): Decision Support Systems and Intelligent Systems, 5th ed., Prentice Hall, New Jersey.
- UBA (1995): Monitoring der Schwermetallbelastung in der Bundesrepublik Deutschland mit Hilfe von Moosanalysen. Texte 31/95 UBA.
- Uhlmann, W. (1990): Die Wirkungen saurer atmosphärischer Depositionen auf Boden und Grundwasser - Eine Abschätzung auf der Basis hydrogeo-chemischer Modelle . TU Dresden, Fakultät für Bau-, Wasser- und Forstwesen, Diss. A, 1990
- Ulrich, B. (1981a): Ökologische Gruppierung von Böden nach ihrem chemischen Bodenzustand. Z. Pflanzenernaehr. Bodenk. 144 (1981a), 289-305
- Ulrich, B. (1981b): Theoretische Betrachtung des Ionenkreislaufs in Waldökosystemen. Z. Pflanzenernaehr. Bodenk. 144 (1981b), 647-659
- Ulrich, B., Malessa, V. (1989): Tiefengradienten der Bodenversauerung. Z. Pflanzenernaehr. Bodenk., 152 (1989), S. 81-84
- Ulrich, B., Mayer, R., Khanna, P.K. (1979): Deposition von Luftverunreinigungen und ihre Auswirkungen in Waldökosystemen im Solling. Schriften aus der Forstlichen Fakultät der Universität Göttingen und der Niedersächsischen Forstlichen Versuchsanstalt, D.J. Seuerländers Verlag, Frankfurt/Main, 1. Auflage.
- Umweltverträglichkeitsprüfung bei bestimmten öffentlichen und privaten Projekten (85/337/EWG vom 27. Juni 1985) (Umweltverträglichkeitsprüfung)
- UN ECE (1996): Manual on methodologies for Mapping Critical Loads/Levels and geographical areas where they are exceeded. Umweltbundesamt Texte 71/96. Berlin.
- United Nations (1993): United Nations Development Commission: Agenda 21: Action Plan for the next Century, UNDC, New York.
- UVM (1997): Ministerium für Umwelt und Verkehr Baden-Württemberg, <http://www.uvm.baden-wuerttemberg.de/bofaweb/berichte/tbb03b/tbb03b05.htm>
- Van Breemen, N., Driscoll, C. T., Mulder, J. (1984): Acidic deposition and internal proton sources in acidification of soils and waters. Nature 307(1984), 599-604
- Van Breemen, N., Mulder, J., Driscoll, C. T. (1983): Acidification and alkalization of soils. Plant and Soil 75 (1983), 283-308
- Van Dam, J.C., J. Huygen, J.G. Wesseling, R.A. Feddes, P. Kabat, P.E.V. van Walsum, P. Groenendijk, P., and C.A. van Diepen, 1997, Theory of SWAP version 2.0: Simulation of water flow, solute transport and plant growth in the Soil-Water-Atmosphere-Plant environment, Wageningen, The Netherlands, SC-DLO en WAU Report 71, 167p.
- Van Genuchten, M.Th. (1985): Convective-dispersive transport of solutes involved in sequential first-order decay reactions. Computers and Geosciences. 11(2): 129-147.
- Vanclooster, M. (1995): Nitrogen transport in soils: Theoretical, experimental and numerical analysis. Doctoraatsproefschrift Nr. 278, Katholieke Universiteit Leuven.
- Van Jaarsveld, J.A. (1995): Modelling of the long-term atmospheric behaviour of pollutants on various spatial scales. National Institute of Public Health and Environment Protection (RIVM), Bilthoven, Report no. 722501005.
- Van Leeuwen, E.P., Draaijers, G.P.J., Erisman J.W. (1996): Mapping wet deposition of acidifying components and base cations over Europe using measurements. Atmospheric Environment, 30 (14), 2495-2511.

- Van Veen, J.A. (1993): Modelle zum Stickstoff im Boden: Betrachtungen zum Stand der Forschung. In: Berichte über Landwirtschaft, Verlag Paul Parey, Hamburg und Berlin, 207. Sonderheft, 158-169.
- VASTRA (1988): VASTRA – Swedish Water Management Research Program, Towards catchment-based strategies for sustainable resources use 1998-2000.
- Vaz, A.C. (1986): Reliability in water resources planning. In: Valadares Tavares, L., Evaristo Da Silva, J. (Eds.) Systems analysis applied to water and related land resources, Proceedings of the IFAC Conference, Lisbon, Portugal, 2-4, October 1985, Pergamon Press, Tarrytown, NY.
- Verbeek, M., Wind, H.G. (2000): The development of Decision Support Systems for interactive planning in ICZM. Techn. Paper prepared for the Min. of Transport, Public Works and Water Management.
- Verberne, E.J.L. (1991): Nitrogen turnover in the soil-crop system. Modeling of biological transformations, transport of nitrogen and nitrogen use efficiency. Proc. Workshop, 5-6 June 1990, Haren Kluwer Acad. Publ. Dordrecht, 250 pp.
- Verlagsunion Agrar (1993): Faustzahlen für Landwirtschaft und Gartenbau. – 12th edition, 618 p., Münster
- Vogt, M., Herrling, B. (1990): Ein vektorisiertes Multikomponenten Transport-Reaktionsmodell: Theorie und Anwendung auf Naturdaten einer Uferfiltrationspassage. In: DFG-Kolloquium: Modellierung hydrogeochemischer Reaktions- und Transportprozesse im Grundwasserbereich, Universität Karlsruhe, Institut für Hydromechanik, S.19 - 21
- Volpato, M.C. (1994): "Decision conferencing": An Organizational Teamworking Tool, p. 267-278 in Decision Support and Executive Information Systems, ed. Paul Gray.
- Wagenet, R.J., Hutson, J.L. (1989): LEACHM, a process based model of water and solute movement, transformation, plant uptake and chemical reactions. Centre for environmental research, Cornell University, Ithaca, NY, U.S.A., 147 pp.
- Walther, J. (1989): Naturwissenschaftliche Grundlagen, Entwicklungsstand und Anwendungsmöglichkeiten eines rechnergestützten Ansatzes zur Planung und Kontrolle der landwirtschaftlichen Flächennutzung in Trinkwasserschutzgebieten, Diss. A, TU Dresden, Fakultät Bau-, Wasser und Forstwesen.
- Walther, W. et al. (1985): Ergebnisse langjähriger Lysimeter-, Drän- und Saugkerzenversuche bei landbaulich genutzten Böden und Bedeutung für die Belastung des Grundwassers. - Institut für Stadtbauwesen, TU Braunschweig.
- Walther, W. (1999): Diffuser Stoffeintrag in Böden und Gewässer, B. G. Teubner Stuttgart, Leipzig, 1999.
- Walther, W., Cramer, T., Heblack, K., Reinstorf, F. (2000): Säureinträge und Einträge von Stickstoff über den Luftpfad und deren Auswirkungen auf Boden und Grundwasser im Bereich der Wingst/Niedersachsen, Abschlussbericht an das Niedersächsische Landesamt für Ökologie.
- Walther, W., Pätsch, M., Reinstorf, F., Weller, D., Harms, E., Kersebaum, C. (2001): Input of nutrients to groundwater, processes of metabolism and tools for the management of soil utilisation demonstrated at a groundwater protection zone of a waterworks in Northern Germany. – XXXI. IAH Congress. New approaches to characterizing Groundwater Flow, 10th – 14th September 2001, Munich.
- Warfvinge, P., Falkengren-Grerup, U., Sverdrup, H. (1993): Modeling long-term base cation supply to acidified forest stands. Environ. Poll. 80 (1993), 209-220.
- Waterloo Hydrologic Inc. (2000): Visual MODFLOW, Users Manual 27/09/00
- Watson, I. (1997): Applying Case-Based Reasoning, Morgan Kaufmann Publishers, Inc. – San Francisco, California.
- Weller, D., Pätsch, M., Reinstorf, F., Heblack, K., Walther, W. (2002): "Development of tools needed for an impact analysis for groundwater quality due to changing of agricultural soil use", Inco - Copernicus – Project, IC15-CT98-0131
- Wiggering, H., Rennings, K. (1997): Sustainability indicators: geology meets economy, Environmental Geology 32, 1.
- Wiedemeier, T.H., Rifai, H.S., Newell, C.J.J., Wilson, T.J. (1999): Natural Attenuation of Fuel Hydrocarbons and Chlorinated Solvents, New York, John Wiley and Sons.
- Williams, J.R., Renard, K.G., Dyke, P.T. (1983): A new method for assessing the effect of soil erosion on productivity, the EPIC model. J. Soil Water Cons., 38, 381-383.

- Wocköck, M. (1991): Abschlussbericht zum Projekt Nitrat im Grundwasser Raum Cloppenburg/Thülsfeld – Bestandsaufnahme. – Niedersächsisches Landesamtes für Wasser und Abfall.
- Zheng, Ch. (1990): A Modular three-dimensional transport model for simulation advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater system, Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory, US EPA, Ada, Oklahoma
- Zheng, Ch. (2005): MT3DMS v5 Supplemental User's Guide, Technical Report to the U.S. Army Engineer Research and Development Center, Department of Geological Sciences, University of Alabama, 24 p.
- Zheng, Ch., Wang, P. (1999): MT3DMS, A modular three-dimensional multi-species transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems, documentation and user's guide, U.S. Army Engineer Research and Development Center Contract Report SERDP-99-1, Vicksburg, MS, 202 p.

Anlage 2-1: Modelle zur Sickerwasserprognose - Zusammenstellung der Informationen der Internet-Recherche.

Modellinformationen		Transport				Rückhalt / Abbau				Bemerkungen / Besonderheiten
Modell-Name	Autoren (Institution) / Ausgabedatum Internet-Quelle	Modell (Ansatz Strömungsgleichung)	gesättigte / unges. Zone i: instat. Fluß	bevorzugte Fließpfade Diff./Disp.	Transportphasen: Wasser / Gas / NAPL	Sorption	Sorptionskinetik	Biodegradation (Abbau) ggf. Schadstoffproduktion	andere Reaktionen (abiotisch, Fällung, Komplexe, etc.)	
3D-FATMIC	Yeh, Cheng (Pennsylvania State Univ.) & Short (US-EPA) / 1997 (1), 2)	3D-FEM (Richardsgl.)	+ / + i	? + / +	+ / - / -	linear	-	1. Ordnung Monodkinetik; Produktion 0. Ordnung	Transport von aeroben Elektronenakzeptoren und anaeroben Elektronendonatoren	-Dichteströmung -Spezialisierung auf Bioreaktionen -heterogenes anisotropes Medium
3D-FEMFAT	? (Scientific Software Group) 1)	3D-FEM (Richardsgl.)	+ / + i	? + / +	+ / - / -	linear / Freundlich, Langmuir	-	-	-	-vor allem für großskalige Probleme -Dichteströmung, Salzintrusionen -heterogenes, anisotropes Medium
BIOF&T 3D	Katyal (Draper Aden, Environ. Modeling Inc.) / 1995 (1), 2), 7)	3D (2D)-FEM (modifizierte Richardsgl.)	+ / + i	? + / +	+ / - / +	+	-	1. Ordnung, Monodkinetik, sequenzieller Abbau	radioaktiver Zerfall	-Unterscheidung aerobe/anaerobe Degradation -Bildung und Abbau von Bioabbau-Nebenprodukten -auch für Kluffgestein, duales Porositätsmodell -heterogenes, anisotropes Medium
CHEM-FLOW	Nofziger et al. (Oklahoma State Univ., für US-EPA) / 1989 (1), 2), 3)	1D-FDM (Richardsgl.)	- / +	- + / +	+ / - / -	linear	-	1. Ordnung; Produktion 0. Ordnung	-	-homogenes Bodenprofil
CTRAN/W	? (Geo-Slope International) / 1992 (1), 2), 11)	2D-FEM (Darcy)	+ / + i	- + / +	+ / - / -	linear	-	-	radioaktiver Zerfall	-enthält SEEP/W für Wasserströmung -dichteabhängiger Fluss -Partikel-Tracking-Funktion -Stofftransportgleichung: Freeze & Cherry, 1979
DESI	K. Finsterwalder (Finsterwalder Umwelttechnik, GmbH&Co. KG), Version 2000 Informationen direkt bei der Firma 9)	1 D-FDM (Darcy)	+ / +	- + / +	+ / - / -	Langmuir	-	(1.Ordnung)	-	-Modellierung von Deponiekörpern + Abdichtungen -exp. Ermittlung der Sorptions- und Stoffparameter in Permeameter od. Batchversuch oder Auswahl der Eingabeparameter aus Datenbanken mit definierten Böden (Sorptionskapazitäten, Bodeneigenschaften) -Schichtenmodell
FEFLOW	Diersch (WASY) Durbin & Bond (USGS) / 1997 (1), 2)	3D-FEM (?)	+ / + i	- + / +	+ / - / -	linear / nichtlinear	1. Ordnung	-	radioaktiver Zerfall	-dichteabhängiger, Massen- und Wärme-Transport, Salzintrusionen, Partikel-Tracking-Funktion -für heterogene, anisotrope Substrate/Böden -Einbeziehung schwebender Grundwasserleiter
HYD1D	Vogel et al. (?) 3)	1D-lineare. FEM (Richardsgl.)	+ / + i	- + / +	+ / - / -	linear / nichtlinear	-	1.Ordnung; Produktion 0. Ordnung	-	-Wärmetransport -Wasseraufnahme durch Wurzeln

Modellinformationen		Transport				Rückhalt / Abbau				Bemerkungen / Besonderheiten
Modell-Name	Autoren (Institution) / Ausgabedatum Internet-Quelle	Modell (Ansatz Strömungs-gleichung)	gesättigte / unges. Zone i: instat. Fluß	bevorzugte Fließ-pfade Diff./Disp.	Transport-phasen: Wasser / Gas / NAPL	Sorption	Sorp-tions-kinetik	Biodegradati-on (Abbau) ggf. Schad-stoff-produktion	andere Reaktionen (abiotisch, Fällung, Komplexe, etc.)	
HYDRO-BIOGEO-CHEM 123D	(Oak Ridge National Laboratory) / 1999 (Weiterentwicklung von HBGC: G.-T. Yeh et al., Pennsylvania State Univ. 1999) 4)	3D-FEM (modifizierte Richardsgl.)	+ / + i	? + / +	+ / - / -	linear	1. Ordnung	Monodkinetik	Komplexbildung, Redox- + pH-Abhängigkeiten; Ionenaustauscher; Lösung/Fällung; advektiv/disp. Kolloidtransport; Gleich-/Nichtgleichgewichts-sorption an Kolloiden	-Spezialisierung auf anorganische Reaktionen und Bioreaktionen -heterogenes anisotropes Medium -Partikel- und Kolloidtransport (stabile Kolloide) -Reaktionen gasförmiger Stoffe unter Bildung gelöster Stoffe
HYDRUS-2D Vers. 2.0	J. Simunek et al. (U.S. Salinity Laboratory, USDA/ARS) / 1999 (2), 3), 5)	2D FEM (Richardsgl.)	+ / + i	? + / +	+ / +(Diffusion) / +	linear / nichtlinear	1. Ordnung	1. Ordnung; Produktion 0. Ordnung; sequenzieller Abbau; Kopplung gelöster Stoffe	-	-Datenbank mit Parametern für 12 Bodentypen, numerische Parameteridentifikation mit statistischer Auswertung -Subregionen mit lokaler Anisotropie auch 3 D radialsymmetrisch um Vertikalachse -Wasseraufnahme durch Wurzeln -lin. Gleichgewichtsreakt. Gas- und Flüssigphase
KYSPILL 2.0	(Scientific Software Group) / 1998 (1)	3D-semianalyt. Modell (stoch. Ansatz)	+ / + i	? + / +	+ / - / +	linear	1. Ordnung	1. Ordnung	radioaktiver Zerfall und abiotischer Abbau 1. Ordnung	-statist. Beschreibung der Heterogenitäten
LEACHM-Gruppe	L. Hutson, R.J. Wagenet (Dept. of Soil, Crop and Athm. Sciences, Cornell Univ., New York) / 1992 (2), 7)	1D-analytisch-lineares FDM (Richardsgl.)	- / + i	- + / +	+ / - / -	linear	1. Ordnung	Monodkinetik	Lösung/Fällung Stoffumsatz durch Pflanzen	-spezialisiert auf Nitratreintrag und Stoffaufnahme durch Pflanzen (Landwirtschaft) -neues Modell LEACHA ersetzt die Richardsgl. für Wasserfluss und die Konv.-Disp.-Gleichung für Stofftransport durch ein mobil-immobil Kapazitätsmodell; v.a. für regionale Skala
MARS 3-D	? Scientific Software Group) 1)	3D-FEM (Darcy)	+ / + i	? + / +	+ / - / +	linear	1. Ordnung	1. Ordnung Monodkinetik sequenz. Abbau, Abbau-Produkte	radioaktiver Zerfall	-beinhaltet BIOF&T 3D mit allen Funktionen -heterogenes, anisotropes Medium, auch Klufftgestein (Datenbank mit Bodentypen) -Multiphasenfluß
MODFLOW SURFACT 2000	? (Scientific Software Group, Verbesserung von Modflow, USGS) 1), 2), 3), [6]	3D-FDM (Richardsgl.)	+ / + i	? + / +	+ / +(Diffusion) / +	linear / Freundlich	-	1. Ordnung	radioaktiver Zerfall	-Modflow ist Grundbestandteil des umfassenderen Groundwater Modeling Systems (GMS) -auch für Klufftgestein -umfangreiche Berechnung des Wasserhaushalts -Dichtefluss, Dynamik der Mikrobiologie -Abh. der Dichte von Zusammensetz. der Phasen
MOFAT	Katyak et al (ES&T, EPA) / 1991 (1), 2)	2D-FEM (modifizierte Richardsgl.)	+ / + i	- + / +	+ / +(Diffusion) / +	linear / ?	1. Ordnung	1. Ordnung	-	-bis zu 5 reaktive Chemikalien -bis zu 10 verschiedene Materialeigenschaften
MT3D	Zheng (SS Papadopoulos & Assoc., USGS) / 1992 (1), 2), 3)	3D-Modell (abhängig vom Wasserfluss-Modul, s. Bem.)	abhängig vom Wasserfluss-Modul (vgl. Bemerkungen) + / +		+ / - / -	linear / nichtlinear	1. Ordnung	1. Ordnung Monod-Typ	abiotischer Abbau und Reaktionen	-Zusatzmodul zu blockzentrierten FEM für Wasserfluss (z.B. Modflow) -auch für heterogenes anisotropes Medium

Modellinformationen		Transport				Rückhalt / Abbau				Bemerkungen / Besonderheiten
Modell-Name	Autoren (Institution) / Ausgabedatum Internet-Quelle	Modell (Ansatz Strömungs-gleichung)	gesättigte / unges. Zone i: instat. Fluß	bevorzugte Fließ-pfade Diff./Disp.	Transport-phasen: Wasser / Gas / NAPL	Sorption	Sorp-tions-kinetik	Biodegradati-on (Abbau) ggf. Schad-stoff-produktion	andere Reaktionen (abiotisch, Fällung, Komplexe, etc.)	
PELMO	M. Klein (Frauenhofer-Inst. für Umweltchemie und Ökotoxikologie) / 1991 (basiert auf PRZM 7.)	1D-FDM bzw. FEM (Richardsgl.)	- / + (i)	(z.Zt. in Arbeit) + / +	+ / +(Ausgasung) / -	linear / Freundlich	-	Pestizid-Abbau 1. Ordnung	Abschätzung von Bodentemperaturen	-Spezialisierung auf Versickerung von Pestiziden, Abschätzung von Bodentemp., ETP nach Haude -einfaches Kaskadenmodell (horizontale Schichten) -neue Version in Arbeit; mit Makroporenfluss, in dem Stoffe keinen Sorptionsprozessen unterliegen (KLEIN 1999)
PESTAN	V. Ravi & J.A. Johnson (Dynamac Corporation & USEPA) / 1992 (1), 2), 3)	1D-Modell (analytische Lösung)	- / +	- + / +	+ / - / -	linear	-	1. Ordnung	-	-Annahme: homogener Untergrund, stationärer Fluss -geschlossene analytische Lösung nach Bear
POLLUTE	Rowe & Booker (Univ. of W. Ontario) / 1983 (1), 2)	1 1/2D-Modell (analytisch)	+ / + i?	? ? / +	+ / +(Diffusion) / -	linear / Langmuir, Freundlich	-	1. Ordnung	radioaktiver Zerfall	-heterogenes Medium, auch für Kluffgestein
PRZM2 (PRZM und VADOFT)	Carsel et al. (US-EPA, ERL) / 1994 (1), 2), 3)	1D-FDM bzw. FEM (Richardsgl.)	- / + i	- + / +	+ / +(Diffusion) / -	linear	-	1. Ordnung	Wasser-/Stoff-Aufnahme durch Pflanzen	-Pestizid-Programm, bis zu 3 Chemikalien -umfangreiche Berechnung des Wasserhaushalts -Wärmefluß
ROCK-FLOW	? (Universität Hannover) 1997 (10, inkl. Handbuch)	3D-FEM (Darcy-Forchheimer Gleichung)	- / + i	(+) + / +	+ / +(Diffusion) / -	linear/ Freundlich Langmuir	Intraparti-kel-diffusion (nach Miller & Rabideau)	1. Ordnung	Redox-Reaktionen, Fällung/Lösung, Säure-/Basenreaktionen Radioaktiver Zerfall	-Unterscheidung: poröses, geklüftetes, geklüftet-poröses Medium; -Wärmetransport, Salzverlagerung -Multiphasenfluss nicht-mischbarer Flüssigkeiten
RITZ	Nofziger et al. (US-EPA) / 1988 (1), 2), 3)	analyt. Modell (uniformer Wasserfluss)	- / +	- + (Gas) / -	+ / +(Diffusion) / +	linear	-	1. Ordnung	abiotischer Abbau	-Annahmen: NAPL-Phase ist immobil, 2-Schicht-Modell
RT3D	? (Scientific Software Group) / 1997 (1), 3)	3D-Modell (abhängig vom Wasserfluss-Modul, s. Bem.)	abhängig vom Wasserfluss-Modul (vgl. Bemerkungen) + / +		+ / - / -	linear/nicht-linear	1. Ordnung	1. Ordnung	vom Benutzer definierbare chemische Reaktionen	-Zusatzmodul zu blockzentrierten FEM für Wasserfluss (z.B. Modflow) -unterscheidet aeroben und anaeroben Abbau -simuliert Natural Attenuation und aktive Sanierung
SESOIL	Bonazountas & Wagner (A. Little, Oak Ridge Nat. Lab.) / 1995 (1), 2), 3)	1D-hybrid-analyt-numer. FDM (?)	- / + i	- + / +	+ / +(Diffusion) / +	Freundlich	-	1. Ordnung	abiotischer Abbau, Hydrolyse, Komplexie-rung, Ionenaustausch	-umfangreiche Datenbanken (chemisch; für USA: Klima, Böden) -umfangreichere Berechnung des Wasserhaushalts -Langzeit-Simulationen; maximal 4 Schichten

Modellinformationen		Transport				Rückhalt / Abbau				Bemerkungen / Besonderheiten
Modell-Name	Autoren (Institution) / Ausgabedatum Internet-Quelle	Modell (Ansatz Strömungsgleichung)	gesättigte / unges. Zone i: instat. Fluß	bevorzugte Fließpfade Diff./Disp.	Transportphasen: Wasser / Gas / NAPL	Sorption	Sorption-kinetik	Biodegradation (Abbau) ggf. Schadstoffproduktion	andere Reaktionen (abiotisch, Fällung, Komplexe, etc.)	
SISIM	(Konzept: Arge Fresenius – focon; Umsetz.: CHEMLOG GbR/focon GmbH; Auftrag: UBA) 1999 8)	1D-FDM (über mittlere vertikale Sicker-geschwindigkeiten)	- / +	- + / +	+ / - / -	linear	-	1. Ordnung	-	-Auswahlliste Bodentypen mit definierten Parametern -Schichtmodell: Bodenprofil in horiz. Schichten (gleiche Aufenthaltsdauer des Sickerwassers in jeder Schicht); Ermittlung der Sickerwasserkonzentration aus dem Schadstoffgesamtgehalt der jeweiligen Schicht (Gleichgewichtsbedingungen)
STANMOD 2.0	Simunek et al. (U.S. Salinity Laboratory, USDA/ARS, Riverside, California) / 1997 5)	1D-Modell (analytische Lösungen)	+ / +	- + / +	+ / - / -	linear	1. Ordnung	1. Ordnung; Produktion 0.Ordnung	-	-analytische Codes für vereinfachte 1-D Probleme -N3DADE: 2-3 D Nichtgleichgewichts-Stofftransport bei stationärem Fluss; Retardation; Abbau
SUMATRA	van Genuchten (Princeton Univ.) / 1986 2), 3)	1D-Hermitian FEM (?)	- / + i ?	- ? / ?	+ / - / -	linear	-	0./1. Ordnung	?	-Annahme: einfacher, horizontaler Schichtenbau -Batch-Modus
SUMMERS	van der Heijde (US EPA, ERL) / 1993 2), 3)	numerisch (uniformer Wasserfluss?)	+ / +	- ? / -	+ / - / -	linear	-	-	-	
SUTRA	Voss (USGS) / 1997 1), 2), 3), 6)	2D-Hybrid FDM-FEM (Richardsgl.)	+ / + i	- + / +	+ / - / -	Linear/ Freundlich, Langmuir	-	0./1. Ordnung	abiotischer Abbau	-erfordert ein gut definiertes System -Dichtefluss -Wärmetransport
SWIM v2	? (?) / 1992 1), 2)	1D-Modell (Richardsgl.)	+ / + i	+ - / +	+ / - / -	Freundlich	-	-	-	-einfacher horizontaler Schichtenaufbau -umfangreicher Berechnung des Wasserhaushalts, Evapotranspiration, Bodenversalzung -bypass flow, schneller Transport
TARGET (mehrere Module)	Sharma et al. (Dames & Moore) / 1995 2), 3)	2D-FDM (?)	+ / + i	- + / +	+ / - / -	linear	-	1. Ordnung	-	-Abhängigkeit des Fließverhaltens von Dichte und Viskosität
UTCHEM Vers. 6.1	G.A. Pope et al., (Center for Petroleum and Geosystems Engineering, Univers. of Texas) / 1999 2)	3D-FDM (?)	+ / + i	- + / +	+ / - / +	linear (Organika) Langmuir (Surfactants und Polymere)	-	1.Ordnung, Monodkinetik, Bioabbau mit Nebenprodukten; Kometabolismus; Biomassenwachstum	Kationenaustausch; Multiphasenfluss; Lösung organ. Mischphasen; Löslichkeiten abhängig von Salinität, Mizellen, Kosolventen	-Spezialisierung auf 3 D- Multikomponenten-/ Multiphasenfluss und Biodegradation von NAPL -Kapillardruck, relative Permeabilitäten beim Phasenfluss
VAM 3D	3D-Vers.: Huyakorn (Hydro-Geologic Inc.) / 1988 1), 2)	3D-numer. FEM (?)	+ / + i	? + / +	+ / - / -	linear Freundlich	-	1. Ordnung Kette von Abbauprodukten	radioaktiver Zerfall	-heterogenes, anisotropes Medium -umfangreiche Berechnung des Wasserhaushaltes, Evapotranspiration

Modellinformationen		Transport				Rückhalt / Abbau				Bemerkungen / Besonderheiten
Modell-Name	Autoren (Institution) / Ausgabedatum Internet-Quelle	Modell (Ansatz Strömungsgleichung)	gesättigte / unges. Zone i: instat. Fluß	bevorzugte Fließpfade Diff./Disp.	Transportphasen: Wasser / Gas / NAPL	Sorption	Sorptionskinetik	Biodegradation (Abbau) ggf. Schadstoffproduktion	andere Reaktionen (abiotisch, Fällung, Komplexe, etc.)	
VLEACH 2.2 a	V.Ravi & J.A Johnson (Dynamac Corp. & US-EPA) / 1997 (1), 2), 3)	1D-numer. FDM (uniformer Wasserfluss)	+ / +	- +/-	+ / +(Diffusion) / -	linear	-	-	-	-1 D-Modell (Gleichgewichtsannahmen, Henry-konstante, K_{oc} etc.) -vertikalen homogene Polygone, lateral unterschiedlich
VS2DT	Healy (USGS) / 1996 (1), 2), 3), 6)	2D-numer. FDM (Richardsgl.)	+ / + i	? + / +	+ / - / -	Freundlich Langmuir	-	1.Ordnung	Ionenaustausch, chemische Reaktionen, radioaktiver Zerfall	-nicht-linearer Speicher- und Leitfähigkeits-Term -neue Version VS2DI (2000) enthält auch Wärmetransport (Internet-Quelle 6)

Zeichenerklärung:

- + wird von dem Programm berücksichtigt
- wird von dem Programm nicht berücksichtigt
- ? keine (ausreichenden) Informationen erhältlich

Internet-Quellen: (teilweise müssen bei der Namensuche die Versionen weggelassen werden, z.B. FATMIC statt 3D-FATMIC)

- 1) <http://www.scisoftware.com/html/products.html>
- 2) <http://www.epa.gov/ada/csmos/omid.html>, bzw. <http://www.epa.gov/ahaazvuc/csmos/models.html>
- 3) <http://talus.Mines.EDU/research/igwmc/software/>
- 4) <http://hbgc.esd.ornl.gov>
- 5) <http://www.ussl.ars.usda.gov/Models/models.htm> - Homepage for the United States Salinity Laboratory Riverside California
- 6) http://water.usgs.gov/software/alphabetical_list.html
- 7) <http://dino.wiz.uni-kassel.de/ecobas.html> - www-Server for Ecological Modelling a joint service with ISEM Europe at the University of Kassel
- 8) http://www.umweltdaten.de/altlast/web1/deutsch/3_0.htm
- 9) <http://www.fitec.com> - Finsterwalder Umwelttechnik, Hittenkirchen
- 10) <http://www.hydromech.uni-hannover.de>
- 11) <http://home.geo-slope.com/webhelp/ctr/>

Anlage 2-2: Übersicht und Bewertungsmatrix für recherchierte Entscheidungshilfesysteme.

DSS Name	Entwickelt von:	Typ der Entscheidung, die unterstützt wird:	Art des DSS:	Entscheidungstheorie / Ziel-funktionen:	Nutzbar für einzugsgebiets-basiertes nach-haltiges Mana-gement diffuser Belastung?	Plattform	Bemerkungen	Literatur / Referenzen
-	Potsdamer Institut für Klimafolgenforschung	Modellierung des Risikos für Nitratkontamination des Grundwassers	ES, das mit dynamischen Modellen gekoppelt ist	Regelbasiertes ES / keine Ziel-funktionen	Ja. Stimmt gut mit Fragestellungen in Thülsfeld überein	Workstation, PC NEXPERT OBJECT Software für das ES	Sehr geringe Entscheidungsunterstützung. Schwerpunkt auf Modellintegration gelegt	Leimbach, 1994
AERIS	-	Clean-up Kriterium für Böden von Industriestandorten	ES	-	Nein	-	-	Crowe, 1994
ALEXIS	-	Sanierung und Beobachtung von kontaminierten Standorten	ES	-	Nein	-	-	Chowdhury & Canter, 1997-98
AQUATOOL	Universidad Politecnica de Valencia, Spain	Allgemeine Planung von Wasserflüssen	DSS	Simulation, Risikoanalyse und Optimierung von Szenarien	Ja, berücksichtigt Komplexität. Nein, Wasserqualität und Verschmutzung wird nicht berücksichtigt	Windows mit FORTRAN C++, Visual Basic	Verwendet von verschiedenen Flussgebietsämtern in Spanien	Andreu et al., 1996
Aquifer Klassifizierungssystem	Rice University, Houston, USA	Auswahl geeigneter hydrologischer Einstellungen für die GW-Modellierung	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997-98; Newell et al., 1990
AQUISYS	-	Klassifizierung von Aquiferen	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury &

		hinsichtlich der Verwundbarkeit bzgl. Kontamination						Canter, 1997-98
ARIANE	Hydro-Quebec	Wasserkraftgewinnung	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
CAD HE	-	Kanal Hydraulik, Modelle und Auswahl von Variablen	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
CEEPES	-	Politikanalyse für landwirtschaftliche Praktiken und Umweltpolitiken	DSS	-	Nein, das Projektergebnis ist, dass Politiken besser definiert und fokussiert werden müssen.	-	-	Brady, 1999
Computer unterstützte Daten (Computer aided data)	-	Bewertet analytische Daten aus Labors	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997-98
CORA	-	Abschätzung der Kosten von Sanierungsmaßnahmen	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997-98
CPSS	Department of Civil Engineering, Univ. of Manitoba, Canada	Wasserressourcenplanung (Menge)	DSS oder GDSS	Planung durch Zusammenarbeit. Teilweise regelbasiert.	Nein, Verschmutzung und Wasserbeschaffenheit werden nicht berücksichtigt.	-	Interessante DSS-Struktur.	Simonovic, 1996a & b; Simonovic & Bender, 1996
Defence Priority Model; DPM)	-	Risikobewertung für Lagerstätten für gefährliche Abfälle. Risiko-Ranking für GW-Kontamination	ES	-	N/A	-	-	Crowe, 1994; Chowdhury & Canter, 1997-98
DEMOTOX	-	Potential für Kontamination durch organische Chemikalien. Transportmodelle	ES	-	N/A	-	Regelbasiert.	Crowe, 1994; Kukuric & Hall, 1998; Chowdhury &

								Canter, 1997-98
DESERT	IISAS	Wasserbeschaffensmanagement. Kalibrierung und Simulation von Flussnetzen. Bestimmung von optimalen Standorten für Abwasserreinigungsanlagen	DSS	-	N/A – sehr dünne und unstrukturierte Dokumentation.	PC Windows.	Schwierig zu nutzen, da das Entwicklungsteam sich aufgelöst hat. Dokumentation ist dünn.	IIASA (1998); DESERT FAQ aus dem Internet; die Software
DMWW	-	Planung kommunaler Brunnen zur Wasserförderung	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
HGDB	-	Eingabenvorbereitung für GW-Modellierung und Charakterisierung des Gebietes	Datenbasis	-	N/A	PC	-	Newell et al., 1990; Kukuric & Hall, 1998
DSS für die Bewertung von Pump- und Behandlungsalternativen	-	GW-Fluss und Chemikalien-transport Modelle	Datenbasis	-	N/A	-	-	Kukuric & Hall, 1998
DSS für Hochwasser-Management	-	HW-Management-Alternativen	DSS/ES	GIS basierte Entscheidungen	Szenariobewertung	NEXPERT, OBJECT, GRASS GIS, ORACLE	Es wird berichtet, dass die Datenmenge sehr groß ist, was die Anwendung auf große Gebiete schwierig macht	Simonovic, 1996 a & b
DSS MINE	-	Regionale Nutzung von Wasserressourcen in der Umgebung von Bergwerken	ES	-	-	-	-	Crowe, 1994
ECOFUZZ	Delft Hydraulics, Niederlande	Einfluss von Klimaänderungen auf das Ökosystem des Wattenmeeres	ES	-	Nein	-	-	Baptist & Vonk, 1999.
ECECMOD	Verschiedene Gruppen in Norwegen	Analyse der Auswirkungen von verschiedenen politischen und ökonomischen Bedingungen auf den Nährstoffverlust in	DSS	Politiksimulation	Nein. Das Entwicklungsteam schlussfolgerte, das sie auf der	-	Paket von 6 verschiedenen Modellen für die Stickstoffauswaschung	Brady, 1999

		EG's			Systemebene starten müssen.			
Elbe-DSS	Research Institut for Knowledge Systems (RIKS, Niederlan- de), Bun- desanstalt für Gewäs- serkunde (BfG), Deutsch- land	Auswirkungen von Maßnahmen auf Gewässergüte, Gewässerzu- stand, Ökologie, Hydrologie, Hydraulik, Schifffahrt und Hochwasserschutz im Elbe-EG	DSS	Keine ob- jektive Funktion, Modellie- rung und Simulation als Ent- schei- dungshilfe	Ja, aber nur für Oberflächenge- wässer	PC Win- dows	Es handelt sich um ein Pilot-DSS; Anwendung auf gesamtes EG steht noch aus	Hahn et al., 2005; http://elise.bafg.de/servlet/is/3283/
ESES-GW, Umweltbeprobungs- Expertensystem - Grund- wasser	-	Wahl der Methode für die Be- probung, Probenbehandlung, QA/QC und Dokumentation für die Kontaminationskontrolle von Altlasten	ES aufge- baut auf Regeln	Entschei- dungen werden anhand von Ketten logischer Entschei- dungen, die auf Regeln basieren getroffen	Nein, Schwer- punkt ist auf nicht-diffuse Verschmutzungen gerichtet	PC- DOS/MS- DOS text- basiert	Schwerpunkt auf Do- kumentation des Ent- scheidungsprozesses	Cameron et al., 1991
ESSEM	-	Prototyp für die Empfehlung von Messmethoden in Kanälen	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
EXPAR	-	Hilft Nutzer Fluss- und Trans- portparameter zu schätzen für die GW-Modellierung	ES	-	N/A	-	-	Chowhury & Canter, 1997 - 98
Expert - RO- KEY	-	GW-Schadstoffmodellierung, Schätzung des unterirdischen Transportes von Schadstoff und	ES	Regelba- sierte Emp- fehlungen	N/A	FORT- RAN, text- basiert	Schießt das EXPAR Wissen ein, welches auch Komponente des	Crowe, 1994; Chowdhury & Canter, 1997 -

		Parameterschätzung					OASIS Systems ist	98; Kukuric & Hall, 1998
EXPRES – Expertensystem für Pestizideinsatz, Bewertung und Simulationen	National Water Research Institute of Canada, Centre for Inland Waters	Modellierung und Risikoabschätzung bzgl. Pestizidauswaschung in das GW	DSS mit einem ES-Teil, der zur Auswaschungsmodellierung verwendet wird	Keine objektive Funktion, Modellierung und Simulation als Entscheidungshilfe	Die Struktur könnte nutzbar sein, aber das Thema passt nicht	DOS, Grafisches Interface	Scheint sehr klar strukturiert und nutzbar zu sein. Artikel für Lehrzwecke und zur Information.	Crowe & Mutch, 1994; Crowe, 1994; Chodhury & Canter, 1997 – 98; Kukuric & Hall, 1998
EXSRM	-	Parameterschätzung für ein Schneeschmelz-Abfluss-Modell	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
FIESTA	-	Berechnet hydraulische Leitfähigkeit aus wenigen Felddaten	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 - 98
FLEX	-	Auswahl künstlicher Profile von Deponien	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 - 98
Flood Advisor	-	Durchflussschätzung bei Hochwässern	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
Geophysics Expert System	-	Auswahl von Monitoringtechniken für Altlastenstandorte	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 - 98
GEOTOX	-	Bewertung von Mülldeponien	ES	Regelbasiertes Ranking	N/A	-	-	Crowe, 1994; Chowdhury & Canter, 1997 – 98; Kukuric & Hall, 1998

GWMS unter Verwendung von GIS und Multikriterien	School of Civil Engineering, Asian Institute of Technology, Thailand	Gestaltung von Netzwerken aus Brunnen für die Beobachtung von Cl, FE, TOH, NO ₃ und SO ₄	Eher eine Methode als ein DSS	Multikriterielle Entscheidungen; verschiedenen Alternativen werden gewichtet und ausgewählt mit einer Methode, die „Promethee-Methode“ genannt wird	Multikriterielle Methoden könnten interessant sein	ARC-INFO	Nutzt die DRASTIC Methode für die GW-Verletzbarkeitsabschätzung	Dutta et al., 1998
GWW	UNESCO	System für die Sicherung, Bearbeitung und Präsentation von Hydrogeologischen Daten	DATA-BASE	-	N/A	-	-	Kukuric & Hall, 1998
HABIMAP	National Institute for Coastal and Marine Management (RIKZ).	Definition von Ökotypen und Habitaten in marinen Tidegewässern	DSS	-	-	ARC-INFO	-	De Jong, D.J., 1999.
HASP	-	Vorbereitung von Sanierungs- und Sicherungsplanungen für Altlastenstandorte	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
HAWAMAX	-	Risikoverminderung von Altlastenstandorten	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
Hazardous	-	Beobachtung und Reglementie-	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury &

wate Generator's system		rung von Altlasten						Canter, 1997 – 98
HAZWASTE	-	Hilft bei der Regulierung der Erzeugung neuer Gefahrenstoffe	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
HERBASYS	-	Erzeugt eine Relativschätzung des Risikos für eine Herbizidkontamination des GW	ES	-	N/A	-	Simuliert nicht die Auswaschung durch die ungesättigte Zone	Crowe, 1994
HYDRLAB	-	Hilft bei der Felddateninterpretation zur Anlage von Brunnen mit hoher Leistung	ES	-	N/A	-	-	Crowe, 1994
INCA	University of Reading, UK	Einzugsgebietsbasierte Simulation und Berechnung von Stickstoffauswaschung in das Wasser	DSS	Modelle können eine Hilfe sein bei Entscheidungen	Ja, kann verschiedene Szenarien simulieren; „Semidistributed“ Berechnung von Wasserflüssen	PC-DOS	2D und 3D Profile von Nitrat, Ammonium und Wasserflüssen für ein Einzugsgebiet und bis zu 30 Sub-Einzugsgebiete	INCA, 1997; Whitehead et al., 1998 a, b. Software
IRAS	Civil and Environmental Engineering at Cornell University	Simuliert zeitlich und räumliche Wasserflüsse and Wasserbeschaffenheit (Konzentration), Energie etc.	DSS	Modelle können eine Hilfe für Entscheidungen sein	Verschiedene Szenarien können simuliert werden	PC-Windows	IRAS ist gerade in der Entwicklung innerhalb eines Forschungsprojektes, in dem Ökonomie, Umwelt und Ökologie verknüpft werden. Das Ziel ist ein DSS für das Wassereinzugsgebietsmanagement und Wirkungskontrolle	Loucks & Gladwell, 1999; Loucks, 1999; Bain & Loucks, 1999
JOE	-	Hydroelektrik	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
KBSWM	-	System für die Kalibrierung eines Hochwassermodells	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
KGM	TNO, Netherlands	Programm-Code und Parameterauswahl für die Grundwassermodellierung	ED	Regelbasierte Anleitung	N/A	PC-Windows	Nutzerfreundliches Interface. Empfohlen für das Training der Auto-	Kukuric & Hall, 1998 Saaltink &

							ren	Carrera, 1992
LABSYS	-	-	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
LANDIS	-	-	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
LOIS	Verschiedene Universitäten in England	Simulation des Flusses und der Transformation von Material aus und in Flüssen in Richtung Küste	DSS	N/A	N/A	PC	6 Jahres Projekt mit 360 Wissenschaftlern von 27 Universitäten. Die Überblicks-CD funktioniert ziemlich schlecht	Leeks 6 Jarvie, 1998 CD-LOIS Overview LOIS-newsletters LOIS-präsentation
LOV / EE	National Institute of Public Health and the Environment (RIVM), Niederlande	Ein räumliches dynamisches Modell für soziale, ökonomische und ökologische Aktivitäten	DSS	-	-	ARC-INFO	-	de Nijs, T.C.M., de Niet, R., de Hollander, G.E.M. (RIVM), Filius, F., Groen, J. (RPD), 2000
MARS	IGWMC	Modellcodeauswahl für die Grundwassermodellierung	Datenbasis	Regeln für die Auswahl	N/A	-	-	Kukuric & Hall, 1998
MEPAS	-	Ranking der Auswirkungen chemischer und radioaktiver Abfälle auf einer Deponie	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
MHOES	-	Hydroelektrik	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
Micro-RAISON	-	Schnelle Diagnose hygienischer Verunreinigungen von Brunnen	ES	-	N/A	-	-	Crowe, 1994
MODELEX-	-	Modellcodeauswahl für die	Daten-	Regeln für	N/A	-	-	Kukuric &

PERT		Grundwassermodellierung	basis	die Auswahl				Hall, 1998
MODSS (Multi-Objective DSS)	Agricultural Research Service in Arizona, USA	Vorhersage von Auswirkungen alternativer Managementsysteme auf Oberflächenwasser- und Grundwasserqualität, sowie auch Ökonomie	DSS für Multi-kriterienanalyse und integrierte Modelle	Multikriterielle Wichtung	?	-	Eher schwache Erklärung des Systems	Yakowitz et al., 1993
NAIADE	Joint Research Centre, Ispra	Universell	DSS	multikriterielles Verfahren	Ja	Windows-PC	mäßige Dokumentation	NAIADE, 1996; Munda, 1995
NELUP	NERC-ESRC, UK	Verschiedene Landnutzungsplanungsentscheidungen	DSS mit integrierten Modellen	Keine Entscheidungstheorie	Ja	UNIX, nicht übertragbar	-	Moxey & White, 1998 Lunn et al., 1996 O'Callaghan, 1995 McClellan, 1995
OASIS	Rice University, Houston, TEXAS	Grundwasserkontaminationsmodellierung	DSS	Keine Entscheidungstheorie	Behandelt Probleme der Grundwassermodellierung als unstrukturiertes Probleme, welche für die Nachhaltigkeit notwendig sind	PC grafisches Interface, Objektorientierter Hypertext	Eines der allerersten DSS für Grundwasserthematiken. Ziemlich futuristisch für damalige Verhältnisse, heute sind die meisten Komponenten Standard	Crowe, 1994 Kukuric & Hall, 1998 Newell et al., 1990
Patuxent Wa-	Institute for	Integrierte Simulation und Mo-	DSS	Keine Ent-	Integration von	STELLA	-	Costanza et al.,

tershed Model	Ecological Economics, University of Maryland	dellierung von Ökologie und Ökonomie		scheidungs- theorie, eher ein Modell	Ökologie und Ökonomie in Zeit und Raum	Software SME-räumliche Modellumgebung		1996
QUAL2E ADVISOR	-	Auswahl von Parametern für das QUAL2E Wasserbeschaffenheitsmodell	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
Neubewertung von Managementstrategien für einen Mehrzweckspeicher	-	Speichermanagement, Optimierung der Wassernutzung. Ökonomie, Umwelt- und physikalische Erfordernisse sind integriert	DSS	Optimierung über eine Zielfunktion die minimiert wird.	Integration von Ökonomie, Ökologie und Physik	-	Arbeit gut, aber es fehlt ein Nutzerfreundliches Interface	Simonovic, 1996 a & b
RAMCO	Research Institute for Knowledge Systems (RIKS),	Ökologische, ökonomische und soziale Prozesse in Küstenzonen	DSS	-	-	-	-	Kok, J. L. de, and Wind, H.G. 1999.; Ramco, 1998.
REGIS	TNO Institute, Netherlands	Präsentation und Speicherung von geohydrologischen Daten	Datenbasis / Informationssystem	-	N/A	-	-	Kukuric & Hall, 1998
REZES	-	Speicheranalyse. Formuliert mathematischen ausdrücke anhand von pseudo-englischen Begriffen	ES	-	N/A	Interaktiv menügesteuert	Scheint sich von anderen ES zu unterscheiden. Simonovic arbeitete in diesem Projekt.	Bakonyi, 1993
Risk Assessment System	-	Risikobewertung für Industriestandorte	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 - 98
Risk Assistant	-	Assistiert bei der Risikobewertung von Gefahrstoffdeponien	ES	-	N/A	-	-	Crowe, 1994 Chowdhury &

		für die menschliche Gesundheit						Canter, 1997 - 98
RPI Risk Assessment	-	Ranking von Gefahrenstoffdeponien	ES	-	N/A	-	-	Crowe, 1994 Chowdhury & Canter, 1997 - 98
SCEES	-	Kosten- und Zeitplanung für die Sanierung Abfalldeponien	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 - 98
SDDSS	University of Manitoba for Environment Canada. Hydrometrisches Programm	Management des Durchflusses und Wasserspiegelhöhen. Nutzung von Wasser Energiegewinnung, Wasserversorgung und Bewässerung	DSS mit integriertem Modell	Prognose und Simulation von Szenarien	Szenarien können getestet werden	UNIX unter Verwendung von NEXPERT OBJECT, ORACLE DATENBASIS und FORTRAN	-	DeGagne et al., 1996 Simonovic, 1996 a & b
SEPIC	-	Jauchegruben in Texas. Erlaubnis für den Betrieb von privaten Abwasserbeseitigungssystemen	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993 Chowdhury & Canter, 1997 - 98 Crowe, 1994
SFM	-	Auswahlmethoden für die Flussmessung basierend auf ISO Empfehlungen	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
SID (WMS)	-	Dürremanagementplanung	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
SISES	-	Standortwahl. Arbeitet als Reduktionsmethode für alternative Standorte	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
Smart Method Index	-	Auswahl von laboranalytischen Methoden für Abfalldeponie-	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 -

		probleme						98
Smart Reg	-	Assistiert die Einschätzung von Untergrundspeichertanks	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 - 98
STEEL-GDSS	Universität Darmstadt, Ingenieurhydrologie und Wassermanagement	Hochwassermanagemententscheidungen	GDSS	Gruppeninformationen für gemeinsam genutzte Entscheidungen	Berücksichtigt die Komplexität der Interdisziplinarität und vielen Interessensgruppen.	Internetbasiert	Von Beginn an für die Ausbildung geplant. Modular aufgebaut, nutzt ein Modellierungssystem für die Bewertung von Alternativen	Ostrowski, 1997
Storm	Department of Environmental Science and Water Resources Management at IHE Delft, Netherlands	Management von Überflutungsflächen	GDSS	Gruppeninformationssystem für gemeinsam genutzte Entscheidungen	Berücksichtigt die Komplexität der Interdisziplinarität und vielen Interessensgruppen.	PC Windows, für Netzwerkbetrieb	In Entwicklung . Neue Version im September 1999 geplant	Schmidt, 1998 (Software)
STREAM	National Institute for Coastal and Marine Management (RIKZ).	Flussgebietsmanagementsystem	DSS	-	-	WindowsPC, ARC-INFO	-	Aerts, J.C.J.H., Kriek, m., and Schepel, M., Schepel, 1999
TCM-Manager	Martens and Associates Pty Ltd, Australia	Bewertet die Effekte von Feuchtgebieten in der Landschaft. Berechnet Stickstoff und Phosphorauswaschung	DSS	Szenariosimulation	Scheint eher eine ad hoc Lösung zu sein	PC Windows	Leicht zu verstehendes Interface. Schlechte Dokumentation. Berechnet EG-Fläche aus topografischen Daten	Software Martens & DiBiase, 1996
TECHSCRN	-	Bewertung von technischen und	ES	-	N/A	-	-	Crowe, 1994

		ökonomischen Möglichkeiten des Einschließens oder Beseitigens von Kontaminanten von Gefahrstoffdeponien.						Chowdhury & Canter, 1997 – 98
Toxic Waste Advisor	-	Auswahl der Sanierungstechnologie für die Säuberung von Boden und Grundwasser, die mit Lösungsmitteln oder Kohlenwasserstoffen kontaminiert sind	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
TSAR	-	Auswahl der Sanierungstechnologie während Sanierungsuntersuchungen	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
TSDSYS	-	Identifiziert Anlagen für die Behandlung oder Beseitigung von Abfällen aus Gefahrstoffdeponien	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
UTliner	-	Beurteilung von Tondichtungen für Deponien	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
WADBOS	National Institute for Coastal and Marine Management (RIKZ), Niederlande	Modellierung ökologischer und sozioökonomischer Funktionen des Meeres und der Küsten	DSS	-	-	-	-	Engelen, G., 2000. ; Verbeek, M., and Wind, H.G., 2000.
WA/WPM	-	Planung von Maßnahmen für aufgegebene Gefahrstoffdeponien	ES	-	N/A	-	-	Crowe, 1994 Chowdhury & Canter, 1997 – 98
WASES	-	Identifikation von Schadstoffquellen Trinkwasserschutzge-	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 –

		bieten						98
WATERS- HEDSS	-	Integriertes Management	DSS	-	N/A	-	Artikel verfügbar	Ostrowski, 1997
WaterWare	University of Newcas- tle upon Tyne; De- partment of Civil En- gieneering and Envi- ronmental Software and Ser- vices Aus- tria	Wasserressourcenbewertung, Speicherstandortauswahl, De- kontamination von Grundwas- ser, nachhaltige Bewässerung	DSS mit ES	Simulatio- nen durch Modelle. ES für Empfeh- lungen	Sehr ähnlich wie VASTRA	UNIX, Fortran C++	Eine Schlussfolgerung ist, dass der Nutzer für diesen Systemtyp be- nutzt wird. Das ist wich- tiger als ein DSS zu bekommen mit der ge- samten breite von The- men	Jamieson & Fedra, 1996 a Fedra & Ja- mieson, 1996 Jamieson & Fedra, 1996 b
WATQUAS	-	Heraussuchen von Daten aus historischen Wasserbeschaffen- heitsdaten	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
Wellhead Mo- delling User Interface	-	Begrenzung von Brunnenein- zugsgebieten	GIS	-	N/A	-	-	Kukuric & Hall, 1998
XSAL	-	Sanierung von AbfalldPONen	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
XUMA	-	Sanierungsalternativen für kon- tamierte Standorte	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98
YHYSIZE	-	Optimale Gestaltung von Was- serkraftgewinnungsstandorten	ES	-	N/A	-	-	Bakonyi, 1993
INHEC-1	-	Hilft dem nutzer die Parameter für das HEC-1 Grundwasser- modell zu wählen	ES	-	N/A	-	-	Chowdhury & Canter, 1997 – 98

- = Information fehlt; N/A = aus vorliegenden Unterlagen und Informationen nicht entnehmbar

Anlage 4-1: Ausgewählte Grundwasserbeschaffenheitsdaten des Thülsfelder Aquifers**Pegel-Daten**

Pegel	Datum	SO4 [mg/l]	NO3 [mg/l]	O2 [mg/l]	Cl [mg/l]
248	12.05.89	40	80	7.8	23
	04.07.90	40	83.1	7.4	20
	29.11.90	40	80.5	8.5	22
	08.04.91	40	79.8	7.3	61
	14.05.92	40	81.3	8.8	1
	05.05.93	40	93.3	8.1	21
	19.05.94	40	88.8	4.8	21.7
	18.04.96	36.8	68.4	7.5	13.1
	09.04.97	31.2	75.9	7.9	13
	10.03.99	31.3	99.15	6.8	23.3
	09.05.00	33.1	88.75	6.2	20.95
335	05.05.89	45	153	6	32
	03.07.90	62	134.9	4.9	23
	28.11.90	71	126.2	4.5	25
	04.04.91	64	126.7	4.4	21
	09.06.92	63.4	135.9	5.7	30.7
	12.05.93	41	111.6	4.6	28
	20.05.94	40	108.4	3.2	30.3
	03.07.96	45.8	173.9	2.4	28.2
	23.06.97	34.5	286	7.6	32.4
	18.08.99	42.1	231	3.5	29.45
	20.07.00	37.85	210.5	4.2	28
336	05.05.89	52	1	0.1	32
	03.07.90	66	1	0	31
	28.11.90	66	0.1	0	31
	04.04.91	40	0.1	0.1	27
	09.06.92	63.6	1	0	27.8
	12.05.93	40	1	0.2	27
	20.05.94	56	1	0	27.4
	03.07.96	89.9	1	0.1	43.3
	23.06.97	84.5	1	0.2	46.97
	18.08.99	98.6	1	0.1	45.55
	20.07.00	113	1	0.1	42
337	05.05.89	40	1	0.1	39
	03.07.90	40	1	0	39
	28.11.90	40	0.1	0	35
	04.04.91	40	0.1	0	36
	09.06.92	40	1	0	42
	12.05.93	40	1	0.1	37
	20.05.94	41	1	0	35.3
	03.07.96	44.4	1	0.1	33.8
	23.06.97	42.5	1	0.1	38.5
	18.08.99	56.85	1	0.1	35.1
20.07.00	53.4	1	0.2	34.89	

Pegel	Datum	SO4 [mg/l]	NO3 [mg/l]	O2 [mg/l]	Cl [mg/l]
369	02.08.90	70	98.2	9.4	19
	30.11.90	67	98.4	9.1	16
	08.04.91	40	110.1	9.2	15
	11.06.92	60.3	116.1	10.8	16.4
	11.05.93	40	124.1	10.6	14
	03.06.94	40	150.6	9.6	14.5
	18.04.96	35.5	298	8.2	39.5
	01.04.97	43.8	190.7	8.2	24.5
	02.03.99	30.8	142	9.1	24.5
	370	01.08.90	106	1	0
29.11.90		113	0.1	0	32
05.04.91		120	0.1	0.1	30
13.05.92		124.4	0.1	0	25
15.04.93		109	1	0	25.5
06.10.93		116	1	0.2	22
02.02.94		97	1	0	21.1
28.02.94		108	1	0	20
11.04.94		104	1	0	18
03.05.94		100	1	0.1	18
06.06.94		104	1	0	18
16.08.94		104	1	0	19
05.09.94		103	1	0.2	18
10.10.94		102	1	0	18
03.11.94		103	1	0	18
05.12.94		105	1	0	18
05.01.95		101	1	0.1	19
02.02.95		105	1	0.2	18
02.03.95		102	1	0.1	18.1
06.04.95		103	1	0	18
03.07.95		107	1	0.1	17.6
07.08.95		111	1	0.1	18.1
05.10.95		109	1	0.1	17.8
07.11.95		108	1	0.1	17.6
12.12.95		109	1	0.1	17.8
09.01.96		109	1	0.1	17.4
26.02.96		106	1	0.1	18
25.03.96		108	1	0.1	17.3
23.04.97	114	1	0.1	17.1	
05.08.97	116	1	0.1	17.5	
24.02.98	120	1	0.1	17.8	
13.05.98	116	1	0.1	18.3	
17.08.98	115	1	0.1	21.7	
17.11.98	122.2	1	0.1	22.8	
23.02.99	119.5	1	0.1	25.9	
17.05.99	121.6	1	0.1	25.9	

Pegel	Datum	SO4 [mg/l]	NO3 [mg/l]	O2 [mg/l]	Cl [mg/l]	
371	01.08.90	89	89.6	9.6	22	
	29.11.90	83	112.3	9.2	23	
	13.05.92	68.3	140	11.8	24	
	30.04.93	59	158.1	11.4	22.8	
	06.10.93	59.2	106	11.5	23	
	02.02.94	58	142	8.2	23.9	
	28.02.94	56	146	8	22	
	11.04.94	53	139	9	22	
	03.05.94	48	146	10.4	20	
	06.06.94	51	151	10	19	
	16.08.94	51	146	10.1	21	
	05.09.94	52	151	9.9	21	
	10.10.94	51	159	9	21	
	03.11.94	54	151	9	21	
	05.12.94	52	146	8.9	23	
	05.01.95	51.6	136	9.7	22	
	02.02.95	51.1	141	9.7	21	
	06.04.95	50.9	138	8	20.3	
	05.05.95	49.7	142	9.7	19.7	
	31.05.95	51.7	140	9.9	20.9	
	03.07.95	51.4	138	10	20.8	
	07.08.95	52.4	150	9.6	21.6	
	05.10.95	53	137	9.6	21.2	
	07.11.95	52.8	131	9.6	23.7	
	12.12.95	52.6	130	9.7	20.3	
	09.01.96	52.4	129	9.9	21.5	
	26.02.96	49.6	130	10.4	20.2	
	25.03.96	52.1	131	9.7	21	
	29.01.97	55.3	133	8.4	20.3	
	23.04.97	54.9	134	9.6	22.4	
	05.08.97	55.5	129	9.6	24.8	
	377	01.08.90	111	44.4	0.4	42
		29.11.90	103	52.6	0.4	46
05.04.91		98	61.3	0.5	44	
13.05.92		106.5	72.9	0.5	44.3	
26.04.93		105	84.5	0.6	43	
02.06.94		40	69.3	0.4	46.1	
29.04.96		90.8	90.2	0.6	44.3	
09.04.97		93	77.4	0.7	48.99	
378	01.08.90	84	109.3	6.8	25	
	04.12.90	76	207.1	7.1	19	
	04.04.91	81	194.4	8.6	21	
	10.06.92	40	157.5	8.8	21.7	
	29.04.93	80	179.5	9.2	17	
	07.06.94	60	190.3	10.1	16.3	
	18.04.96	48	245	8.7	15.8	
	08.04.97	52.2	250	8	16.2	
	09.03.99	50.7	223	7.8	16.2	
	389	08.05.91	40	0.1	0.2	30
09.06.92		40	1	0	31	
12.05.93		40	1	0.1	29	
20.05.94		40	1	0	31.5	
18.04.96		20.9	1	0.1	32.5	
08.04.97		17.6	1	0.1	29.7	
09.03.99		13.35	1	0.1	29.2	
05.05.00		12.55	1	0.1	28.1	

Pegel	Datum	SO4 [mg/l]	NO3 [mg/l]	O2 [mg/l]	Cl [mg/l]
481	06.10.93	76.3	111.6	5.6	48.4
	03.01.94	70	213	5.1	47
	03.01.94	70	211	5.4	47
	02.02.94	68	213	5.3	52
	11.04.94	70	214	6.1	38
	03.05.94	61	210	7.7	37
	06.06.94	65	204	7.4	38
	16.08.94	63	208	6.9	37
	05.09.94	62	214	6.7	38
	10.10.94	65	238	6.1	39
	03.11.94	67	225	6.3	38
	05.12.94	68	222	6.2	39
	05.01.95	63.7	211	6.8	39
	02.02.95	67.8	208	7	38.2
	02.03.95	74.1	196	6.2	38.5
	06.04.95	73.3	196	6.5	36.3
	05.05.95	73.5	192	8	39
	31.05.95	71.4	182	8.1	37.7
	03.07.95	68.5	176	8.2	39.9
	07.08.95	75.3	200	7.7	41.9
	05.10.95	93.7	139	7.5	45.3
	07.11.95	77	190	7.3	56.1
	12.12.95	79	193	7.3	42.2
	09.01.96	77	192.2	7.2	37.9
	26.02.96	77.5	194	7.8	37.7
	25.03.96	76.1	199	7.2	35.9
	29.01.97	64.2	223	6.7	36
	23.04.97	67.7	195	6.7	38.1
	05.08.97	67.9	175	6.6	36.4
	24.02.98	71.9	169	7.8	35.5
	13.05.98	71.8	165	6.9	34.05
	17.08.98	70.8	156	7.1	34.9
	17.11.98	70.8	119	5.8	35.2
	23.02.99	81.25	124.5	7.4	33
482	06.10.93	85.4	151.8	11.5	25.6
	03.01.94	67	53	9.5	12
	02.02.94	53	15	9.3	10
	28.02.94	57	17	8.8	10
	11.04.94	44	10	10.4	10
	03.05.94	47	7.6	11.9	10
	06.06.94	48	8.1	11.6	10
	16.08.94	61	15	11.4	3.8
	05.09.94	64	26	11.2	5
	10.10.94	64	42	10.3	6
	03.11.94	68	53	10.2	9.7
	05.12.94	65	49	9.6	10
	05.01.95	52.5	33.1	11.1	9.5
	02.02.95	43.6	8.6	11.4	6.2
	02.03.95	34.8	4.4	9.7	4.6
	06.04.95	36.5	8	9.7	4.9
	05.05.95	37	13.2	11.4	5.1
	31.05.95	39.9	13.5	11.6	6.2
	03.07.95	43.8	26.1	11.6	6.1
	07.08.95	49.5	56.8	11.4	8.6
	05.10.95	58.1	80.7	11.5	11.8
	07.11.95	57.5	94.1	10.9	17.4
	12.12.95	56.5	110	11	18.5
	09.01.96	55.7	120	11.1	18.1
	26.02.96	40.1	49.5	12.4	19.4
	25.03.96	42.8	44.7	12	9.82
	23.04.97	53.3	143	8.7	9.32
	05.08.97	58.4	135	7.8	28
	04.02.99	52.7	122	6.7	22.04

Pegel	Datum	SO4 [mg/l]	NO3 [mg/l]	O2 [mg/l]	Cl [mg/l]
	09.01.96	55.7	120	11.1	18.1
	26.02.96	40.1	49.5	12.4	19.4
	25.03.96	42.8	44.7	12	9.82
	23.04.97	53.3	143	8.7	9.32
	05.08.97	58.4	135	7.8	28
	24.02.98	62.7	122	8.7	32.04
	13.05.98	57.7	139	9.2	25.8
	17.08.98	54.7	126	9.2	24.5
	17.11.98	34.8	40.8	8.3	22.4
	23.02.99	31.3	52.6	8.6	9.54
	17.05.99	33.35	45.55	9.4	9.5
483	06.10.93	66.2	49.2	0.3	24.3
	03.01.94	64	46	0.1	24
	02.02.94	62	47	0.2	24
	28.02.94	67	45	0	22
	11.04.94	60	44	0	21
	03.05.94	59	45	0.1	22
	06.06.94	60	46	0.2	21
	16.08.94	61	40	0.1	22
	05.09.94	60	38	0.2	22
	10.10.94	61	38	0.1	22
	03.11.94	63	38	0.1	22
	05.12.94	60	38	0.1	23
	05.01.95	60.8	37	0.1	22
	02.02.95	60.9	38.4	0.2	22.3
	02.03.95	59.3	39	0.1	23.3
	06.04.95	59.7	40.4	0.1	21.8
	05.05.95	60.6	39.4	0.1	21.4
	07.08.95	63.8	40.5	0.2	22.8
	05.10.95	61.8	37.7	0.2	23.9
	07.11.95	62.6	38.1	0.1	24.5
	12.12.95	63.6	38.6	0.1	25.2
	09.01.96	64.9	36.1	0.1	25.1
	26.02.96	65.8	35.1	0.2	25.9
	25.03.96	65.6	33.9	0.1	24.6
	23.04.97	67.4	34.9	0.1	24.5
	05.08.97	69.3	28.7	0.1	24.3
	24.02.98	77.9	20.8	0.2	23.7
	13.05.98	79.5	17.2	0.1	20.5
	17.08.98	48.95	15.8	0.1	20.6
	17.11.98	78.7	16.3	0.1	22.57
	23.02.99	81.75	8.4	0.2	16
	17.05.99	88.65	3.8	0.2	15
484	06.10.93	79.5	124.8	1.2	16.6
	03.01.94	67	112	0.1	18
	02.02.94	64	109	0.1	19
	28.02.94	64	106	0	21
	11.04.94	60	98	0	19
	03.05.94	57	93	0.1	21
	06.06.94	61	96	0	20
	16.08.94	60	87	0.2	20
	05.09.94	62	83	0.2	19
	10.10.94	62	83	0.1	20
	03.11.94	61	77	0.1	19
	05.12.94	65	76	0.1	18
	05.01.95	58.1	64.2	0.3	19
	02.02.95	60.2	62.4	0.2	19.4

Pegel	Datum	SO4 [mg/l]	NO3 [mg/l]	O2 [mg/l]	Cl [mg/l]
	02.03.95	60.7	58.4	0.3	21.1
	06.04.95	61.6	55.1	0.4	23.2
	05.05.95	63.2	51.9	0.4	20.2
	31.05.95	65.5	50.5	9.2	19.3
	03.07.95	65.2	46.9	0.3	18.8
	07.08.95	69.5	46.5	0.3	17.9
	05.10.95	67.1	37.9	0.3	18.3
	07.11.95	67.5	36.9	0.3	16.2
	12.12.95	67.6	34.8	0.3	15.8
	09.01.96	66.7	32.41	0.4	13.9
	26.02.96	66.4	30.2	0.6	13.5
	25.03.96	65.7	28.2	0.5	12.5
	29.01.97	58.7	19.8	0.4	12.8
	23.04.97	56.6	17.9	0.2	10.5
	05.08.97	53.9	18.1	0.2	10.3
	24.02.98	51.4	19.4	0.2	9.31
	13.05.98	49.5	20.8	0.1	8.26
	17.08.98	88.7	22	0.1	8.5
	17.11.98	48.9	23	0.1	7.51
	23.02.99	42.95	26.8	0.2	7.74
183	12.05.89	53	13	6	31
	04.07.90	40	8.8	4.7	34
	29.11.90	40	10.3	4.6	37
	08.04.91	40	10.6	4.8	38
	14.05.92	43.3	15	6.9	65.3
	05.05.93	40	21.7	6.8	38
	18.05.94	40	16.3	3.8	44.3
	18.04.96	6.02	20.9	4.3	48.7
	09.04.97	4.99	18.4	4	47.3
	10.03.99	6.28	13.75	4.2	49
	05.05.00	6.93	15.15	3.7	45.3

SGM-Daten

Sulfat [mg/l]

Tiefe	5.6	10.6	15.6	20.6	25.6	30.6	35.6
12.08.99	32.6	50.8	60.3	30.6	51.4	26.6	16
09.09.99	41.9	49.0	68.6	28.7	36	26.5	15.8
18.04.00	30.3	65.6	50.7	37.5	57.9	19.7	
30.05.00	28.8	68.7	51.6	47.1	87.8	31.6	11.5
09.08.00	28	71.5	51.8	65.4	80.2	35.1	
17.10.00	29.5	76.8	58.7	69.1	76.6	33.4	13.5
05.12.00	27.9	77.5	55.3	61.7	75.7	37.0	17.4
05.02.01	27.3	74.3	46.0	55.9	71.7	24.3	23.2
28.03.01	26.7	78.6	46.3	53.9	74.3	25.9	21.0
20.05.01	27.58	82.38	48.43	60.09	81.9	27.98	19.91

Nitrat [mg/l]

Tiefe	5.6	10.6	15.6	20.6	25.6	30.6	35.6
12.08.99	49.9	129.7	117.6	92.4	17.1	0.1	0.1
09.09.99	43.8	131.0	118.0	71.9	22.0	0.0	0.0
18.04.00	32.1	73.4	115.4	129.9	20.1	0.0	0
30.05.00	38.6	65.8	123.0	139.5	8.1	0.0	0.0
09.08.00	35.1	55.0	131.6	146.2	9.7	0.0	
17.10.00	29.2	47.2	133.7	144.5	10.8	0.0	0.0
05.12.00	29.3	44.0	140.4	143.8	11.9	0.0	0.0
05.02.01	24.1	35.1	139.5	134.3	17.1	0.0	0.0
28.03.01	23.0	32.6	142.8	132.2	14.1	0.0	0.0
20.05.01	21.8	29.6	150.3	138.0	13.9	0.2	0.2

Sauerstoff [mg/l]

Tiefe	5.6	10.6	15.6	20.6	25.6	30.6	35.6
12.08.99	5,25	7,85	4,04	0,96	0,97	1,24	1,74
09.09.99	1,05	4,7	3,16	1,1	0,84	0,85	1,12
18.04.00	7,48	7,91	4,08	1,09	0,94	0,6	
30.05.00	7.8	8.5	7.6	2.92	0.54	0.52	0.61
09.08.00							
17.10.00	5.5	8.16	5.09	3.98	0.04	2.36	0
05.12.00	9.17	10.8	9.36	4.83	0.8	5.25	7.45
05.02.01	8.0	10.1	8.85	4.69	0.18	0.59	2.3
28.03.01	6.7	10.3	9.2	5.1	0.2	0.2	
20.05.01	7.57	9	8.17	4.2	0.14	0.18	3.14

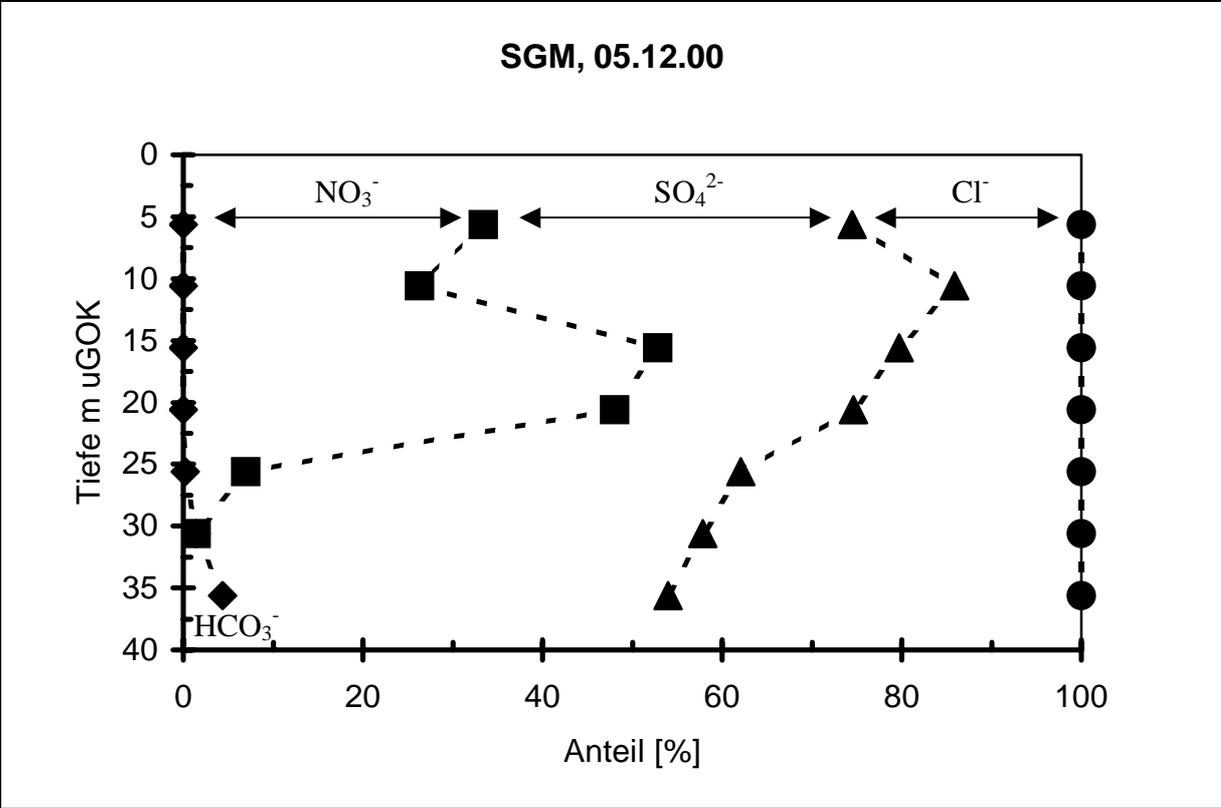
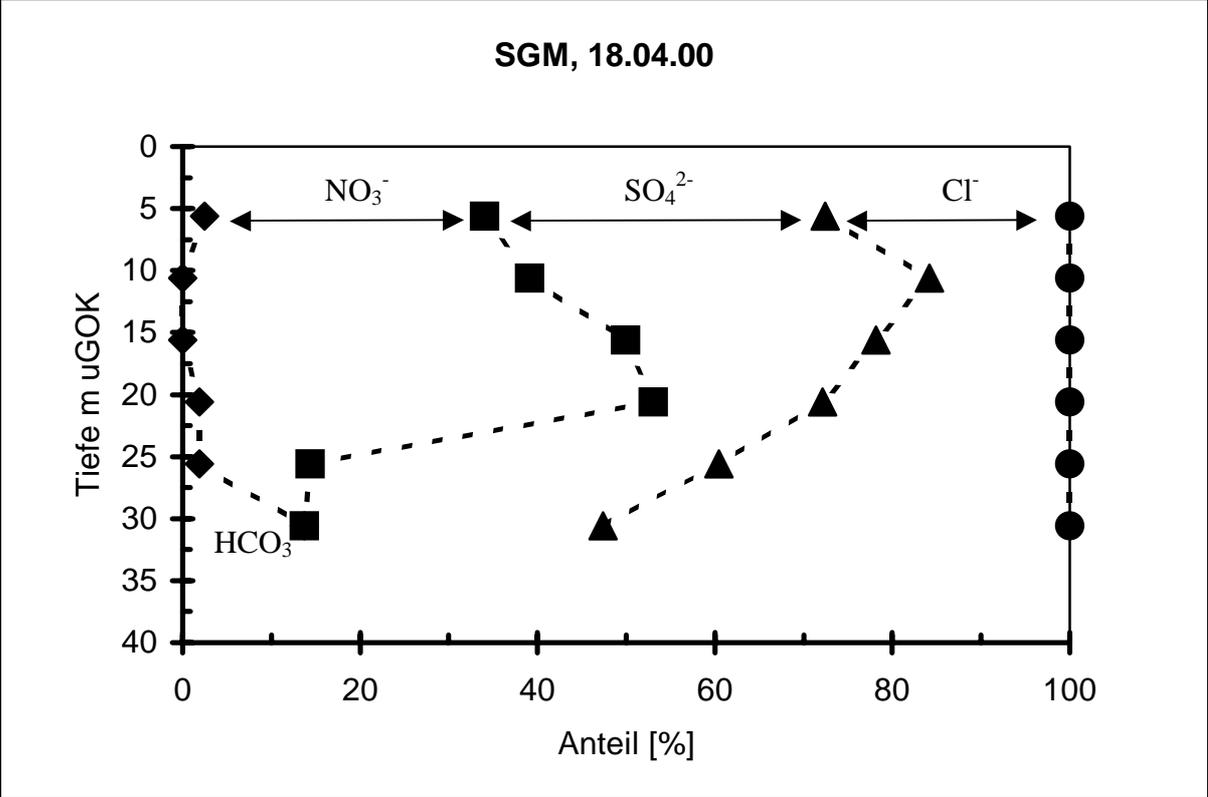
Hydrogencarbonat [mg/l]

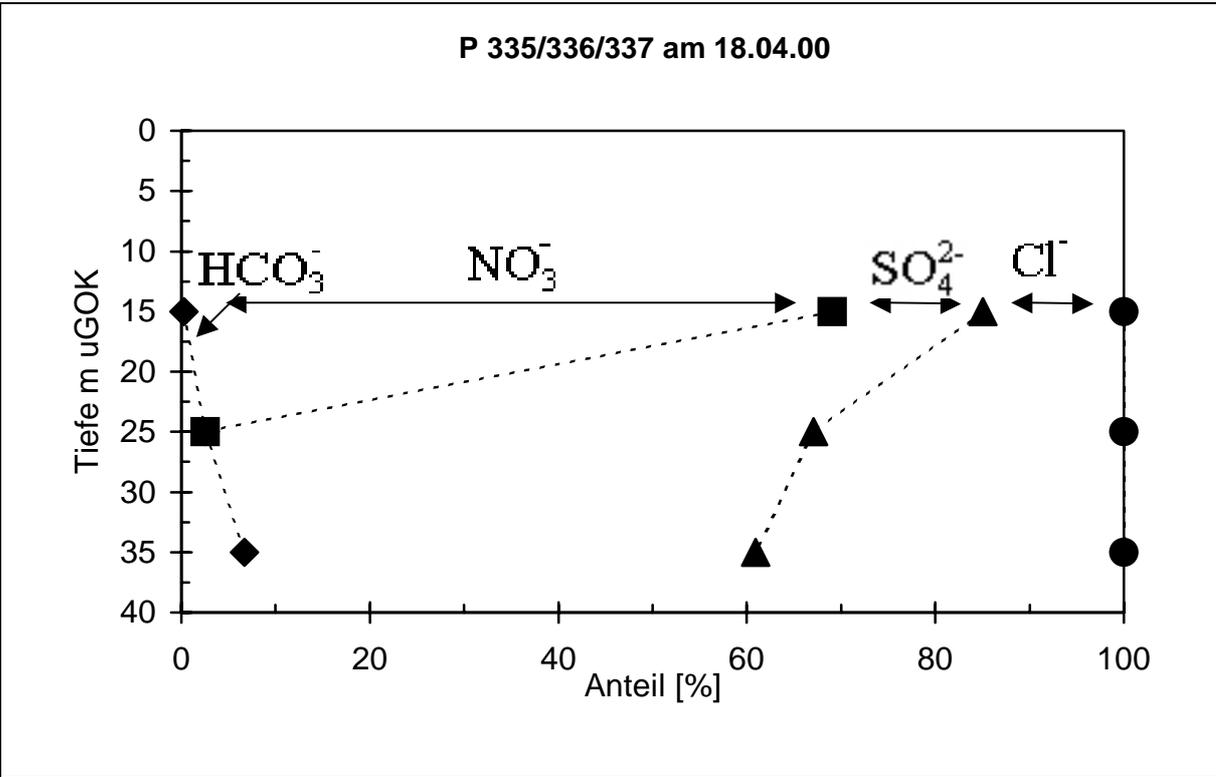
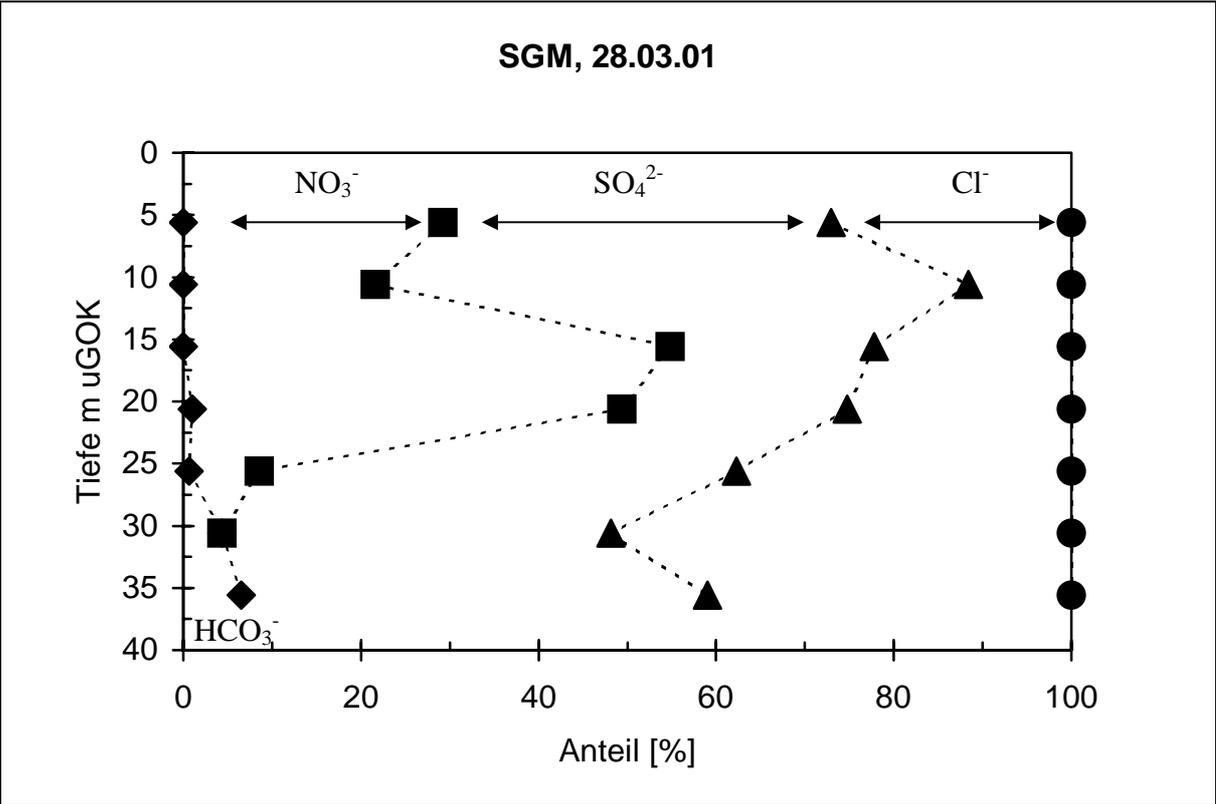
Tiefe	5.6	10.6	15.6	20.6	25.6	30.6	35.6
12.08.99	7.93	0.0	3.05	12.2	12.2	12.2	14.64
09.09.99							
18.04.00	2.4	0.0	0.0	4.8	3.1	10.3	10.3
30.05.00	0.6	0.0	0.0	1.7	1.0	7.9	18.4
09.08.00	0.0	0.0	0.0	1.2	1.2	2.3	
17.10.00	0.6	0.0	0.0	1.2	0.6	3.4	5.4
05.12.00	0.0	0.0	0.0	0.0	0.4	1.2	2.0
05.02.01	0	0.0	0.0	1.22	0.37	2.07	4.76
28.03.01	0.0	0.0	0.0	2.7	1.1	3.3	3.3
20.05.01	3.3	0.0	0.0	3.3	2.4	2.9	4.5

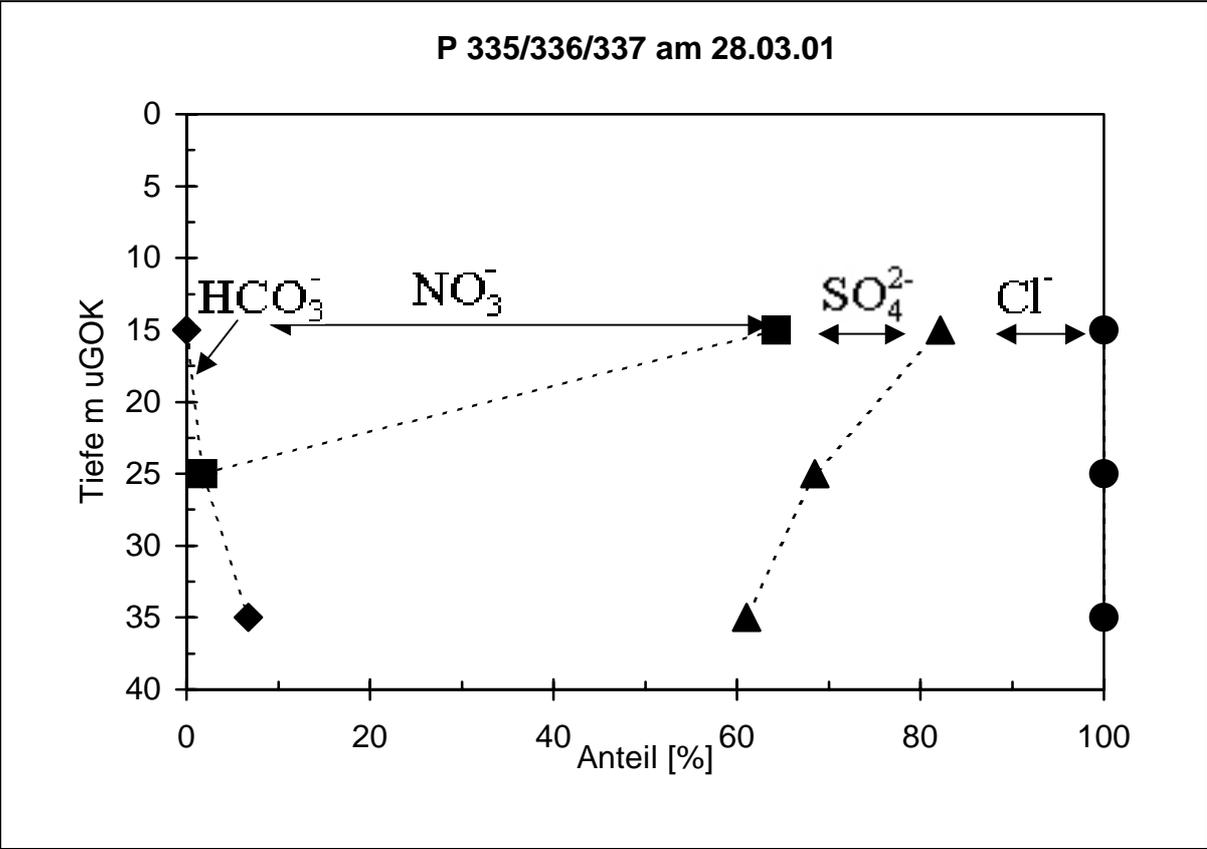
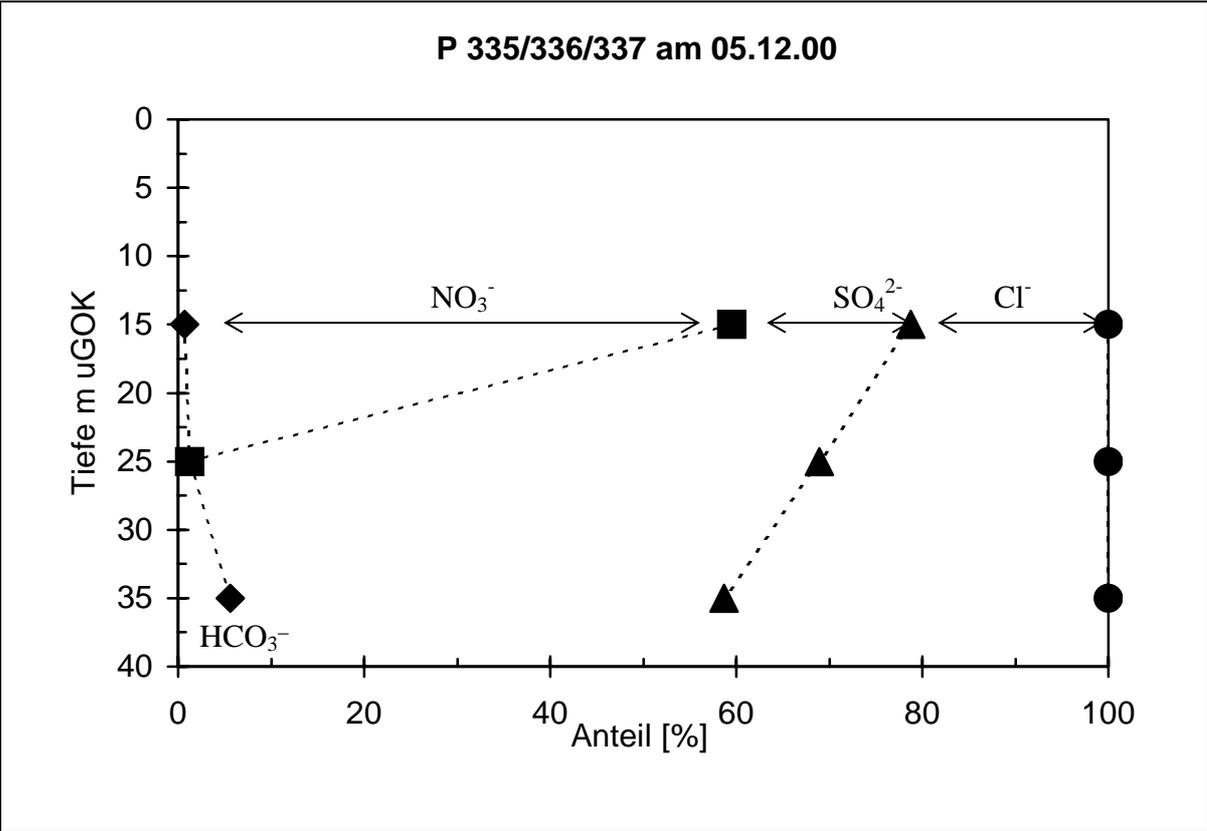
Chlorid [mg/l]

Tiefe	5.6	10.6	15.6	20.6	25.6	30.6	35.6
12.08.99	15.7	17.1	32.3	45.0	39.7	23.5	17.9
09.09.99	15.7	18.2	32.6	41.8	34.9	24.1	16.4
18.04.00	16.01	16.9	28.9	40.6	36.5	22.8	
30.05.00	14.1	15.7	30.2	43.0	37.3	19.9	14.7
09.08.00	14.5	13.5	31.8	42	37.5	18	
17.10.00	15.0	11.1	27.9	40.2	35.8	18.1	12.5
05.12.00	12.8	13.5	30.7	43.5	38.5	20.4	11.9
05.02.01	11.8	10.0	32.4	44.7	37.8	22.4	13.2
28.03.01	12.2	10.0	33.0	39.5	38.5	22.6	12.1
20.05.01	13.45	8.93	34.13	43.18	44.02	20.68	14.07

Anlage 4-2: Äquivalentkonzentrationsanteile der Anionen zur Bewertung der Denitrifikation.







Anlage 4-3: Anwendung von Isotopenmethoden im Untersuchungsgebiet Thülsfeld.**1 Methodik**

Unter dem "Alter" eines Grundwassers wird die Zeitdauer verstanden, die seit dem Eintritt des Wassers in die gesättigte Zone verstrichen ist. Das Grundwasseralter lässt sich über die Konzentration von Spurenstoffen im Grundwasser ermitteln, man spricht von einer sogenannten Tracermethode.

Junge Grundwässer, bis zu einem Alter von 25 - 50 Jahren, lassen sich mit Hilfe von Fluorchlorkohlenwasserstoffen (FCKWs), Schwefelhexafluorid (SF_6), Krypton (^{85}Kr), Tritium (^3H) oder mit dem Verhältnis von Tritium zu dreiwertigem Helium (^3He) datieren. Der Vorteil der Treibhausgase (FCKWs, SF_6) ist die relativ einfache Bestimmung der Konzentrationen in den Grundwasserproben (gaschromatographisch mit Hilfe eines Elektroneneinfangdetektors).

Im Vergleich zu den Isotopenmessungen (^{85}Kr , ^3H) stellt die Messung der gelösten Treibhausgase eine preiswerte Alternative dar.

Die industrielle Produktion der FCKWs als Treibgas, Kühl- und Lösungsmittel begann in den 30er Jahren. Da FCKWs nicht auf natürliche Weise entstehen, kam es zu einem globalen zeitlichen Anstieg der FCKW-Konzentration in der Atmosphäre. Vor allem die Konzentration der FCKW-Spezies F11 und F12 mit einer Lebensdauer von 50 – 100 Jahren steigt seit den 50er Jahren monoton an (Abbildung 1). Die Produktion von SF_6 und F113 begann dagegen erst 20 – 30 Jahre später. Der Anstieg der SF_6 -Konzentration in der Atmosphäre begann Mitte der 70er Jahre und der Anstieg der F113-Konzentration Anfang der 80er Jahre.

Durch eine genaue Dokumentation des Eintrags der FCKWs beziehungsweise des SF_6 in die Atmosphäre kann eine Datierung relativ gut durchgeführt werden, da die vier Spurenstoffe als ideale konservative Tracer für aerobe Systeme angesehen werden können und sie sich sehr gut in Wasser lösen (Oster, 2001). Die Grundwasseraltersbestimmung beruht auf der Tatsache, dass das Sickerwasser auf dem Weg durch die ungesättigte Zone aufgrund von Gasaustausch mit der aktuell in der Atmosphäre herrschenden FCKW- und SF_6 -Konzentration beladen wird. Unter der Annahme vollständiger Gleichgewichtseinstellung mit der Bodenluft an der Grundwasseroberfläche lässt sich der Entstehungszeitraum des derart markierten Grundwassers bestimmen, da es nach dem Eintritt in die gesättigte Bodenzone von weiterem Gasaustausch isoliert ist. Zu jeder Konzentration $c(t)$ in der Atmosphäre stellt sich also eine entsprechende Konzentration im Grundwasser ein. Relativ junges Grundwasser enthält demnach eine höhere Konzentration an FCKW/ SF_6 als älteres Grundwasser, da die atmosphärische Konzentration zum Zeitpunkt der Entstehung höher war.

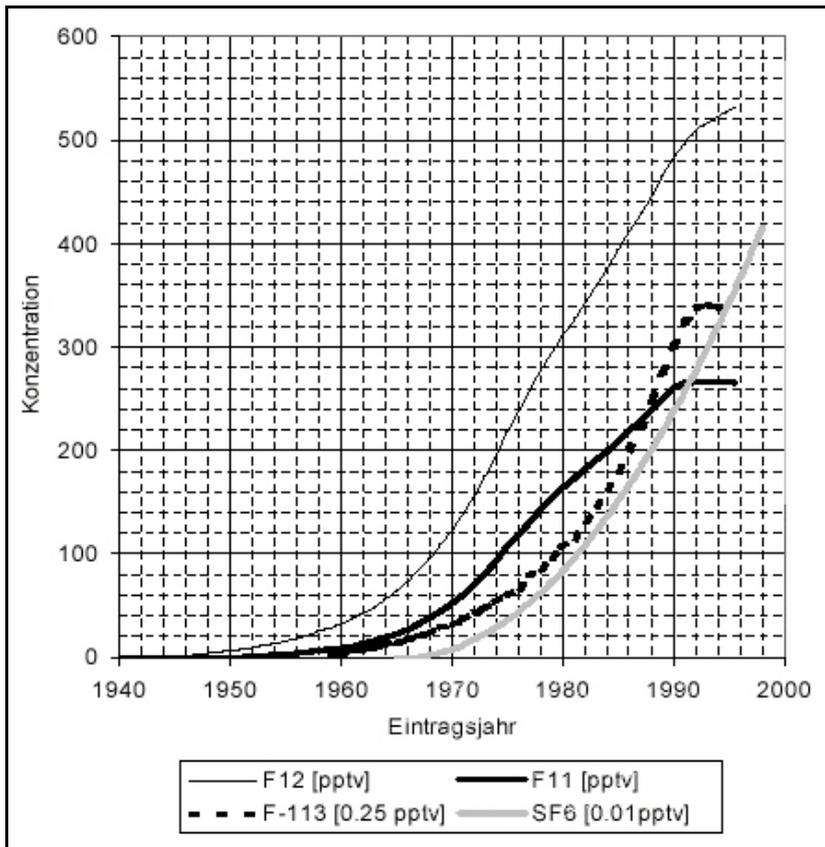


Abbildung 1: Reinluftkonzentrationen der vier Tracer F11, F12, F113 und SF₆. 1 pptv ist definiert zu 10⁻¹² NISpurenstoff/NILuft mit NI = Liter bei Normalbedingungen. Die Konzentrationen von F-113 beziehungsweise SF₆ sind aus Gründen der Übersichtlichkeit in vier- beziehungsweise hundertfacher Überhöhung dargestellt.

2 Randbedingungen

Folgende Prozesse beziehungsweise Einflüsse können sich negativ auf eine Grundwasserdatierung mit FCKW auswirken:

- Instabilität unter anoxischen Bedingungen ⇒ mikrobieller Abbau möglich
- Adsorption an Tonminerale
- lokale Verunreinigungen des Bodens, des Grundwassers, der Umgebungsluft (in industrieller Umgebung)
- Fehler bei Probenahme (Adsorption an Kunststoff, Gummi)
- Temperaturabhängigkeit des Lösungsprozesses ⇒ eine Temperaturerhöhung führt zu einer Verfälschung hin zu höheren Altern

Um den Fehler durch diese Negativeinflüsse so gering wie möglich zu halten, sollten immer mehrere Tracer gleichzeitig untersucht werden. Da sie zum Teil sehr unterschiedlich auf äußere Einflüsse reagieren, können Fehler erkannt und korrigiert werden. Unter anaeroben Bedingungen wird F11 zum Beispiel zehnmal schneller mikrobiologisch abgebaut als das stabilere F12. Ein stattgefundenen Abbauprozess kann durch den Quotienten F11/F12, der seit 1975 konstant bei 2:1 liegt, angezeigt werden.

Eine weitere Randbedingung ist das maximale Alter, das sich mit dem jeweiligen Tracer ermitteln lässt. So kann man mit den FCKWs F11 und F12 Grundwässer bis zu einem Alter von 50 Jahren, mit SF₆ dagegen nur Grundwässer bis zu einem Alter von 26 Jahren datieren. Besonders zu beachten ist dabei, dass sich der Fehler an der Nachweisgrenze extrem erhöht.

3 Ergebnisse

Eine Interpretation der FCKW- und SF₆-Daten kann unter Zuhilfenahme des Piston-Flow-Modells durchgeführt werden [OSTER, 2001]. Als Ergebnis erhält man dann das Grundwasseralter, welches für die einzelnen Brunnen in Tabelle 1 aufgeführt ist.

Die Modellvorstellung von Piston-Flow geht von einem homogenen Modellkörper als idealem Aquifer aus. Ein Konzentrationsimpuls, der zum Zeitpunkt t_0 in den Modellkörper eintritt, bewegt sich wie ein Pfropfen nur in Folge der Konvektion durch denselben und verlässt ihn zum Zeitpunkt t_1 in gleicher Form. Jegliche Art von Dispersion, Diffusion oder Vermischung wird ausgeschlossen. Weiterhin ist die Fließgeschwindigkeit zu allen Zeiten und an jedem Ort gleich. Die sich aus der Zeitdifferenz Δt ergebende Aufenthaltszeit des Pfropfens entspricht dann dem Modellalter.

Tabelle 1: Berechnete Grundwasseralter der einzelnen Messstellen (OSTER, 2001).

Brunnen Nr.	Filterunterkante [m uGOK]	verwendete Tracer	Grundwasseralter [a]	1 σ – Abweichung [a]
P 335	15	F11, F12, F113 / SF ₆	13	± 2
P 336	25	F12 / SF ₆	32	± 7
P 337	35	F11, F12, F113 / SF ₆	50 / 21	-
P 389	59	F11, F12, F113 / SF ₆	50 / 26	-
P 183	45	F11, F12 / SF ₆	48 / 19	-
P 369	10	F12 / SF ₆	10	± 2
P 370	24	F12 / SF ₆	23	± 2
P 377	12	F11, F12, F113 / SF ₆	12	± 1
P 481	10	F11, F12, F113 / SF ₆	10	± 2
SGM 1	5	F11, F12, F113 / SF ₆	7	± 2
SGM 2	10	F11, F12, F113 / SF ₆	10	± 3
SGM 3	15	F11, F12, F113 / SF ₆	9	-
SGM 4	20	F11, F12, F113 / SF ₆	16	± 3
SGM 5	25	F11, F12, F113 / SF ₆	24	± 4
SGM 6	30	F11, F12, F113 / SF ₆	36	± 4
SGM 7	35	F11, F12, F113 / SF ₆	-	-

Die angegebene 1 σ – Abweichung beschreibt die Abweichung der mittleren Verweilzeit der verschiedenen Spezies.

4 Interpretation der Ergebnisse

Die Übertragung der Piston-Flow Modellvorstellung auf den untersuchten Aquifer war möglich, da man in Bezug auf den Aufbau und damit auch auf die Durchlässigkeit von einem homogenen sandigen Aquifer sprechen kann. Die Eintrags- und Transportbedingungen können im gesamten landwirtschaftlich genutzten Gebiet als gleich angesehen werden.

Diskussion der Ergebnisse aus dem Bericht von Oster (2001):

- An einigen Messstellen (P 336, P 369, P 370) ist im Vergleich zum F12-Gehalt ein zu geringer F11-Gehalt gemessen worden. Aufgrund des anoxischen Milieus kann dieser Befund mit einem natürlichen F11-Abbau im Aquifer erklärt werden. Darüber hinaus bedeutet diese Indikation mit Hilfe von F11, dass im Aquifer vermutlich ein geochemisches Milieu existiert, das möglicherweise einen natürlichen Abbau von Nitrat ermöglicht.
- Die FCKW – Gehalte zeigen insbesondere in der Tiefe von 15 m uGOK der SGM – Messstelle eine Auffälligkeit. Hier deutet sich eine anthropogene Beeinflussung des Grundwassers an.
- An einigen Messstellen liegt eine Doppeldeutigkeit vor (.../...) (siehe Tabelle 1 in der Spalte des Grundwasseralters). Die FCKW – Modellalter sind hier deutlich höher als die SF_6 – Alter. Dies kann an einem FCKW Abbau liegen oder die gemessenen SF_6 Gehalte sind zu groß. Möglicherweise sind die Ursachen in anthropogenen oder geogenen Quellen zu suchen.

In Abbildung 2 ist das berechnete Grundwasseralter gegen die Tiefe aufgetragen. Des Weiteren sind für alle Messstellen die 1σ – Abweichung mit dargestellt.

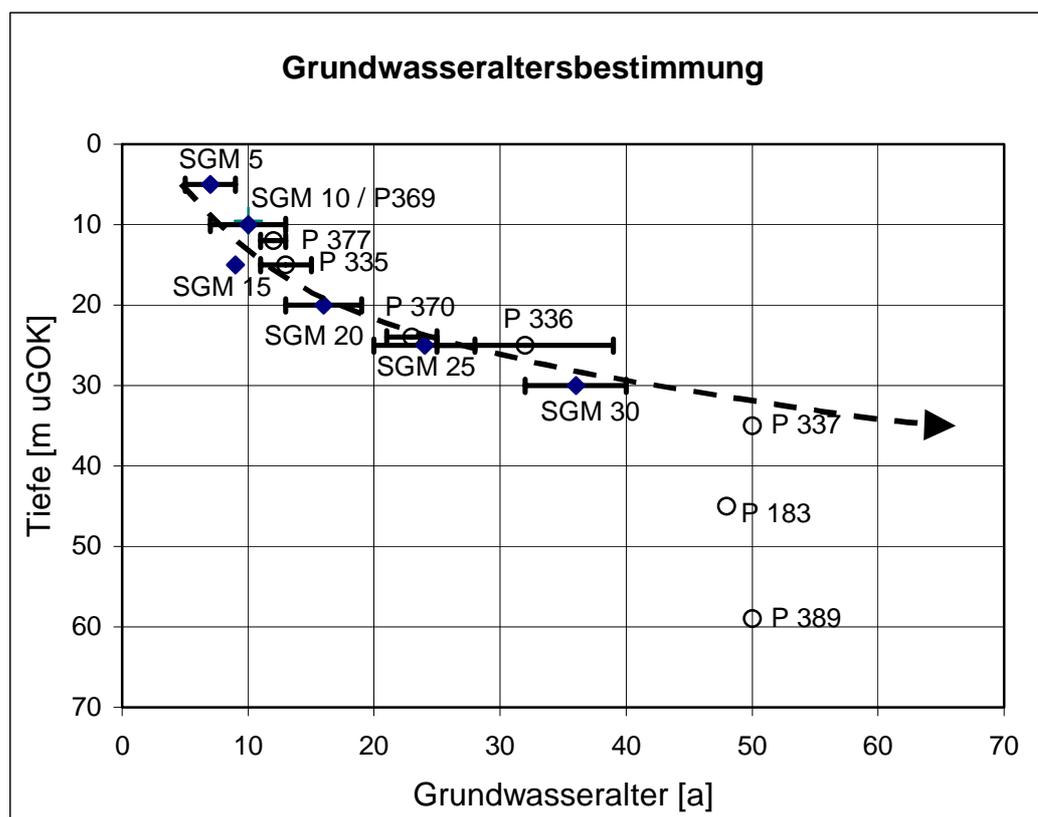


Abbildung 2: Tiefenabhängige Grundwasseraltersverteilung.

Der Verlauf der Altersfunktion in den ersten 30 – 35 m des Aquifers kann auf den ersten Blick als ideal angesehen werden.

Für die drei tiefsten Messstellen (P 337, P 183, P389) bleibt das Grundwasseralter dann jedoch konstant bei zirka 50 Jahren. Betrachtet man aber den Tiefenunterschied der Pegel 337 und 389 von fast 25 m so scheint ein gleiches Grundwasseralter nicht mehr realistisch.

Auffällig ist auch, dass die Doppeldeutigkeiten zwischen den FCKW - und SF₆ – Messungen nur an diesen drei Messstellen auftreten.

Für dieses Phänomen gibt es eine einfache Erklärung. Mit einem berechneten Alter von 50 / 21 Jahre am Pegel 337 und 50 / 26 Jahren am Pegel 389 ist die Datierungsgrenze des Grundwassers sowohl für FCKW als auch für SF₆ erreicht. Da man mit Hilfe des SF₆ Grundwasser nur bis zu einem Alter von 26 Jahren (mündliche Mitteilung von Dr. Oster, 2001) bestimmen kann, die FCKWs aber ein Mindestalter von 50 Jahren wiedergeben, kann beziehungsweise muss man das SF₆ in diesen Fällen außer Acht lassen. Wie in Abschnitt 2 beschrieben, nehmen die Fehler an der Nachweisgrenze extrem zu. Schon kleinste Konzentrationsunterschiede der Tracer führen zu einem beträchtlichen Altersunterschied. Auch das durch die FCKWs ermittelte Alter am Pegel 389 muss angezweifelt werden, da in dieser Tiefe mit einem viel höheren Grundwasseralter zu rechnen ist. Vorstellbar wäre zum Beispiel eine Verunreinigung der Probe bei der Probenahme, da schon kleinste Konzentrationen ausreichen würden, um die hier vorliegenden Grundwasseralter zu erhalten. Für eine solche Verunreinigung spricht, dass in 30 – 50 Jahre altem Grundwasser die SF₆ – Konzentration gleich null sein muss, in unserem Fall aber trotzdem geringe Spuren vorhanden sind.

Der Pegel 183 sollte mit einem berechneten Grundwasseralter von 48 / 19 Jahren auf seine Funktionstüchtigkeit als Grundwassermessstelle überprüft werden. Die im Abschnitt 4.2.2 vermuteten Kurzschlussströmungen, die auf ein Versagen der Dichtungsringe hinweisen, bestätigen sich auch hier. Trotzdem er 10 m tiefer als Pegel 337 liegt wird hier ein scheinbar jüngerer Grundwasser gemessen. Da jegliche Art von störenden undurchlässigen Schichten fehlt, kann eine erhöhte Tracerkonzentration nur auf eine Kurzschlussströmung zurückgeführt werden.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass ein Grundwasseralter von 50 Jahren am Pegel 337 sehr wahrscheinlich ist. Dagegen ist das Alter der tiefer liegenden Pegel 183 und 389 durch die aufgeführten Gründe als entsprechend höher einzuschätzen.

Ein weiteres Problem ergibt sich aus den oberen drei Messpunkten des SGM. In 5 m Tiefe ergibt sich ein berechnetes Grundwasseralter von 7 Jahren, in 10 m Tiefe von 10 Jahren und in 15 m Tiefe von nur 9 Jahren. Eine solche Schichtung könnte aber nur auftreten, wenn infolge undurchlässiger Schichten altes von jungem Grundwasser unterströmt wird. Solche Störschichten können im Aquifer jedoch nicht nachgewiesen werden.

Betrachtet man die SGM–Messpunkte genauer aus einer anderen Perspektive, so fällt auf, dass die Punkte ab einer Tiefe von 15 m sehr schön auf einer Kurve liegen. Nur die ersten beiden Messpunkte weichen davon ab, sie liefern ein zu altes Grundwasser. Nach der Theorie der Grundwasserdatierung beginnt an der Grundwasseroberfläche das Grundwasseralter bei 0 Jahren, da das Wasser erst mit dem Eintritt in die gesättigte Zone von weiterem Gasaustausch isoliert wird (mündliche Mitteilung von Dr. Oster, 2001). Da sich der Messpunkt SGM 5 direkt an der Grundwasseroberfläche befindet müsste das dortige Grundwasser also gerade erst entstanden sein. Die durch die FCKWs ermittelten 7 Jahre sind demnach viel zu alt. Selbst wenn man von der Geländeoberkante ausgeht, braucht das Sickerwasser durch die ungesättigte Schicht bei einer Sickergeschwindigkeit von zirka 1,7 m/a höchstens 3 Jahre bis an die Grundwasseroberfläche. Auch dies steht mit den ermittelten 7 Jahren nicht im Verhältnis.

Ein Wert für das Grundwasseralter von 0 Jahren in einer Tiefe von 5 m unter Geländeoberkante würde genau auf der oben genannten Kurve durch die unteren 4 Messpunkte der SGM – Messstelle liegen. Allein aus Plausibilitätsgründen müsste dieser Punkt (5 m uGOK und 0 Jahre) auch dort liegen.

Weiterhin fällt beim Betrachten der einzelnen Messpunkte der Grundwasseraltersfunktion auf, dass sämtliche SGM–Messpunkte ein mehr oder weniger jüngeres Wasser als die restlichen Messstellen ergeben. Dies könnte damit zusammenhängen, dass die SGM – Messstelle erst rund ein Jahr vor dieser Probenahme fertig gestellt worden ist. Da bei der Installation dieser Messstelle eine Spülbohrung niedergebracht wurde, könnte das umliegende Bodenmaterial mit FCKW-haltigem Wasser verunreinigt worden sein.

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, dass es zu einer Verschiebung hin zu älteren Grundwässern bei den anderen Pegeln durch den durchschnittlich 2 m langen Filterbereich kommt. Die hohen Tracerkonzentrationen des jüngeren Grundwassers werden demnach mit älterem Grundwasser und einer entsprechend niedrigeren Tracerkonzentration vermischt, es kommt zu einer Verdünnung und damit auch zu einem scheinbar älteren Grundwasser.

Abschließend kann man sagen, dass die erhaltene Grundwasseraltersfunktion als eine erste Näherung ein doch recht ordentliches Ergebnis liefert.

Um aber die noch offenen Fragen zu klären wäre eine weitergehende Untersuchung des Aquifers mit Isotopenmethoden (zum Beispiel über Krypton oder Tritium) zu empfehlen.

Anlage 5-1: Kurzbeschreibungen der für die Kopplung ausgewählten Modelle für die ungesättigte und die gesättigte Zone.

1 Modelle für die ungesättigte Zone

1.1 SWAP

Das Modell wurde von Alterra und der Landwirtschaftlichen Universität Wageningen in den Niederlanden entwickelt. Die Autoren sind J.C. van Dam, J. Huygen, J.G. Wesseling, R.A. Feddes, P. Kabat, P.E.V. van Walsum, P. Groenendijk und C.A. van Diepen. Mehr Information ist in van Dam et al. (1997) und Rijtema et al. (1999) enthalten.

SWAP simuliert den Transport von Wasser, Lösungen und Wärme im variabel gesättigten Oberboden. Das Modell hat eine integrierte Modellierung des Boden-Atmosphäre-Pflanze-Systems zum Ziel. Die Transportprozesse in Feldmaßstab während der gesamten Wachstumsperiode werden berücksichtigt. Die obere Systemgrenze bildet die Bodenoberfläche mit oder ohne Vegetation. Die laterale Grenze simuliert die Interaktion mit dem Oberflächenwasser. Die untere Grenze befindet sich in der ungesättigten Zone oder im oberen Teil der gesättigten Zone und beschreibt die Wechselwirkung mit dem regionalen Grundwasser.

SWAP verwendet die Richardsgleichung und ermöglicht die Nutzung von Daten von bodenhydraulischen Funktionen. Die Richardsgleichung wird unter Verwendung eines impliziten finiten Differenzschemas gelöst. Die bodenhydraulischen Funktionen werden durch die analytischen Lösungen von van Genuchten oder durch Tabellenwerte beschrieben. Die Hysterese bei der Auf- und Absättigung des Bodens kann berücksichtigt werden. Die Wurzelwasseraufnahme wird für verschiedene Tiefen mit Hilfe der potentiellen Transpiration, der Wurzeldichte und möglichen Reduktionen infolge trockenen, feuchten oder salinen Bedingungen beschrieben. Die obere Randbedingung schließt die Oberflächenabflussberechnung ein und erlaubt alternierende Bedingungen von oberflächennahem Grundwasser und Überstau. Am unteren Rand des Profils kann spezifiziert werden: Bodenwasserfluss, Druckhöhe, Fluss als Funktion des Grundwasserstandes, freie Entwässerung oder Lysimeter.

SWAP simuliert die Transportprozesse mit Konvektion, Diffusion und Dispersion, nichtlinearer Sorption, Abbau 1.Ordnung und Wurzelaufnahme. Die Simulation des Abbaus erfolgt in Abhängigkeit von der Temperatur

SWAP wurde entwickelt zur Simulation im Feldmaßstab. Die Bodenheterogenität wird berücksichtigt. Die räumliche Variabilität der hydraulischen Bodenfunktion wird mit Hilfe eines Skalierungskonzeptes beschrieben. SWAP nutzt eine 2-Schritt-Berechnung der täglichen Evapotranspiration. Der erste Schritt ist die Berechnung einer potentiellen Transpirationsrate nach Penman-Monteith unter Verwendung täglicher Werte der Lufttemperatur, Solarstrahlung, Windgeschwindigkeit und Luftfeuchtigkeit und unter Verwendung der Minima des Pflanzenwiderstandes. Im zweiten Schritt wird die aktuelle Evapotranspirationsrate berücksichtigt unter Verwendung einer Wurzelwasseraufnahmereduktion durch Wasser- und/oder Salzstress und der Reduktion infolge maximal möglicher Bodenevapotranspiration. SWAP beinhaltet drei Pflanzenwachstumsroutinen: detaillierte Modelle für landwirtschaftliche Basispflanzen, ein

detailliertes Modell für das Graswachstum und einfache Modelle für landwirtschaftliche Basispflanzen.

In SWAP wird Bewässerung als auch Entwässerung als Festwert oder mit Hilfe einer Zeitfunktion berücksichtigt.

Für regionale Teilgebiete kann die Interaktion zwischen Bodenwasser, Pflanzenwachstum und Oberflächenwasser simuliert werden. Eine Interaktion mit Oberflächenwasser kann durch fünf unterschiedliche Entwässerungstypen beschrieben werden.

1.2 ANIMO

ANIMO ist eine Software, die von Alterra, Wageningen (Niederlande) entwickelt wurde. Autoren: P. Groenendijk und J.G. Kroes. Mehr Informationen sind in Groenendijk & Kroes, 1999; Kroes & Roelsma, 1998; Rijtema et al., 1999 enthalten.

ANIMO hat die Quantifizierung der Beziehungen zwischen Düngungsniveau, Bodenmanagement und Nährstoffauswaschung zum Ziel. Es berücksichtigt einen breiten Bereich von Bodentypen und unterschiedlichen hydrologischen Bedingungen. Der Input für ANIMO, die täglichen Wasser und Wärmeflüsse müssen mit anderen Modellen, wie SWAP, berechnet werden. ANIMO kann als funktionelles Modell bezeichnet werden, das vereinfachte Prozessbeschreibungen des organischen Stoffkreislaufes enthält. Damit spielt es eine wichtige Rolle bei der Quantifizierung der Langzeiteffekte von Landnutzung und Düngungsstrategien.

Das Modell berücksichtigt:

- die Zugabe von organischer Substanz und Nährstoffen durch Düngung, Wurzelreste und Ernteverluste und deren Umverteilung durch Ackerbearbeitung
- den Auf- und Abbau von organischer Substanz im Verhältnis zur Qualität und Zusammensetzung von verschiedenen organischen Materialien
- die Pflanzenaufnahme von Stickstoff und Phosphor im Verhältnis zum Nährstoffstatus von Ackerfrüchten und Grasland
- die Produktion von Trockensubstanz von Grasland, simuliert durch ein dynamisches Submodell
- die Sorption von Ammonium und nichtlineare zeitabhängige Sorption von Phosphaten durch die feste Bodenphase
- die Nitrifikation und Denitrifikation als eine Funktion des Sauerstoffbedarfs von Umsatzprozessen und den diffusiven Eigenschaften des Bodens.
- die Verflüchtigung von Ammonium und atmosphärische Nachlieferung durch trockene und nasse Deposition
- den Einfluss von Umweltfaktoren (pH, Temperatur, Belüftung und Trockenheitsverhältnisse) auf die Umsatzzraten
- die Auswaschung von verschiedenen Stickstoff- und Phosphorspezies: Ammonium, Nitrat, gelöster organischer Stickstoff, Phosphat und gelöster organischer Phosphor

Das Modell generiert Materialbilanzen wie auch Zeitreihen von allen relevanten Statusvariablen für eine nutzerdefinierte Anzahl von Bodenschichten über ein nutzerdefiniertes Zeitintervall.

1.3 WAVE

Das Modell wurde entwickelt vom Institut für Land- und Wassermanagement der katholischen Universität in Leuven (Belgien). Autoren: M. Vanclooster, P. Viaene, J. Diels und K. Christiaens. Weiter Informationen sind in Vanclooster et al. (1994) enthalten.

WAVE ist ein deterministisches mathematisches Modell, das die Bewegung von Wasser und den Transport von Agrochemikalien im Boden-Pflanze-Kontinuum beschreibt.

Das Modell wurde entwickelt für:

- die Abschätzung der Stickstoffauswaschung (Bewegung von Nitrat aus der Wurzelzone und der Dränzone und die nachfolgende Kontamination des unterliegenden Aquifers)
- die Vorhersage von kurz und langfristigen Effekten von Landnutzung auf die Qualität von Böden und Aquiferen
- das Prozessverständnis zum Transport und Umsetzungen von Lösungen und deren Migration durch den Boden
- die Verbesserung von Managementmaßnahmen

Die Modellierung der Lösungstransportes erfolgt durch die Lösung der Richardsgleichung für den Wassertransport in der ungesättigten Zone und der Konvektions-Dispersionsgleichung für den chemischen Transport und den Wärmetransport. Der Effekt der Hysterese kann berücksichtigt werden. Zusätzlich kann der Umsatz des Stickstoffs durch Simulation von Stickstoffspezies simuliert werden. WAVE ist eine offene modulare Software zur der Module hinzugefügt werden können oder existierende Module ersetzt werden können.

In dem Stickstoffmodul und beim Lösungstransport sind folgende Prozesse berücksichtigt: Mineralisation, Immobilisierung, Nitrifikation, Verflüchtigung. Das Modell ermöglicht die Simulation von Transport von Ammonium-Ionen für den Fall von Böden mit hohem Sandanteil und niedrigem organischem Gehalt)

1.4 HERMES

Das Modell wurde vom ZALF Muencheberg e.V., Institut für Landschaftsmodellierung, Muencheberg, Deutschland. Autoren: K.C. Kersebaum und J. Richter. Eine detaillierte Beschreibung ist in Kersebaum (1995) enthalten.

HERMES beschreibt Wasserbilanz und Flüsse, Nettomineralisation, Nitrattransport, Pflanzenwachstum und N-Aufnahme durch die Pflanzen. Es ist entwickelt worden zur Modellierung der ungesättigten Zone bis 2 m Tiefe. Anhand vorhersagender Simulationen der Stickstoffnachlieferung der Bodens und des Pflanzenbedarfes kann eine Düngungsberatung erstellt werden.

Ein Kapazitätsmodell wird für die Simulation der Wasserbilanz und der Flüsse verwendet. Seine Parameter können bestimmt werden anhand der Bodentextur und des Humusgehaltes. Die potenzielle Evapotranspiration wird berechnet nach dem Ansatz von Haude unter Verwendung monatlicher Faktoren der Pflanzenentwicklung. Die potentielle Evapotranspiration wird reduziert zur realen Evapotranspiration in Abhängigkeit von der

Bodenfeuchte. Der Nitrattransport im Boden wird mit der Konvektions-Dispersionsgleichung beschrieben.

Für die Mineralisation der organischen Substanz werden zwei Pools angenommen, die mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten mineralisiert werden. Dafür werden Gleichungen 1. Ordnung verwendet. Die Abhängigkeit der Mineralisationskoeffizienten von der Temperatur wird mit zwei Arrhenius-Funktionen beschrieben. Der Einfluss der Bodenfeuchte wird durch einen Reduktionsfaktor berücksichtigt. Die Denitrifikation wird als Michaelis-Menten-Kinetik simuliert in Abhängigkeit vom Nitratgehalt im Boden, dem wassergefüllten Porenraum und der Temperatur.

Das Pflanzenwachstumsmodell berechnet die tägliche Entwicklung der Trockensubstanz anhand der Solarstrahlung und der Temperatur. Ein Wasser- bzw. Nitratmangel reduziert das Pflanzenwachstum mit Hilfe von Stressfunktionen. Die Wasseraufnahme durch die Pflanzen erfolgt proportional mit dem Wurzelwachstum und der Wasserverfügbarkeit im Boden. Die Stickstoffaufnahme wird mit einer vereinfachten Konvektions-Dispersionsgleichung simuliert.

Der Output ist die Rest-Nitratkonzentration, die Sickerwassermenge und die Nitratauswaschung bis in 2 m Tiefe.

1.5 SWMS-3D

Das Modell wurde entwickelt vom U.S. Salinity Laboratory, Agricultural Research Service, U.S. Department of Agriculture, Riverside, California, USA. Autoren: J. Simunek, K. Huang und M. Th. van Genuchten. Mehr Informationen sind in Simunek et al. (1995) enthalten.

Das Modell ist dreidimensional und hat die Analyse des Wasser- und Salzregimes unter der Bodenoberfläche zum Ziel, sowohl in der ungesättigten Zone als auch in der gesättigten. Es wird die Richardsgleichung numerisch gelöst für den ungesättigten und gesättigten Wasserfluss und die Konvektions-Dispersionsgleichung für den Lösungstransport.

Das Modell basiert auf Bilanzgleichungen für die Änderungen der quantitativen Charakteristik von Wasser und Salz in bestimmten Zeitintervallen.

Das Modell enthält einen Senkenterm, um die Pflanzenwasseraufnahme zu quantifizieren. Es können unterschiedliche Randbedingungen, wie Wasserstand, Durchfluss, hydraulischer Gradient und freie Entwässerung simuliert werden.

Die Massentransfergleichung schließt lineare Adsorption, Produktion 0. Ordnung und Abbau 1. Ordnung ein. Dies wird genutzt und den Austausch von Salzkonzentration zwischen der flüssigen und festen Phase zu beschreiben. Randbedingungen 1. und 3. Art können für den Lösungstransport vorgesehen werden. Der Lösungsaustausch durch das Wurzelsystem wird ebenfalls berücksichtigt.

Die numerische Lösung der Differenzialgleichungen erfolgt auf der Basis der Methode der finiten Elemente.

2 Modelle für die gesättigte Zone

2.1 MODFLOW

Das Modell wurde entwickelt durch den United States Geological Survey, USA. Autoren: M.G. McDonald, A.W. Harbaugh. Mehr Informationen sind in McDonald & Harbaugh (1988); Anderson (1993); Harbaugh & McDonald (1996) enthalten.

MODFLOW ist ein 3D-finite-Differenzen-Modell. Das Modell ermöglicht stationäre als auch instationäre Analysen bei den üblichen Randbedingungen 1., 2. und 3. Art.

In MODFLOW können die Aquiferschichten gespannte, ungespannte und gemischte Druckverhältnissen aufweisen. Der Grundwasserfluss wird simuliert unter Verwendung einer blockzentrierten finite Differenzen Anwendung. Die finite Differenzen Gleichung wird u.a. mit Hilfe einer streng impliziten Prozedur gelöst. MODFLOW enthält auch ein „Particle Tracking“- und ein „Zone Budget“ Modul.

Das Modul MODPATH wurde entwickelt zur Simulation von 3D-Particle-Tracking für stationäre Flussbedingungen und kann verwendet werden zur Berechnung von 3D-Path-Lines und für die Positionen der Partikel zu einem bestimmten Zeitpunkt.

Das „Zone Budget“ Modul berechnet die Wasserbilanz unter Verwendung von Ergebnissen der stationären und instationären Simulationen.

MODFLOW besteht aus einer Reihe von Teilmodellen, den so genannten "packages". Jedes package führt eine spezifische Aufgabe durch. Einige der packages werden stets für eine Simulation benötigt und einige sind optional, z.B.:

- Basic Package (BAS1)

Das Basis-Package wird immer benötigt. Der Input in das Basis-Package beinhaltet die Gitterdimensionierung, die Berechnungszeitschritte und ein Feld mit der Bezeichnung der Packages, die genutzt werden sollen.

- River Package (RIV1)

Das „River Package“ wird verwendet, um die Randbedingung eines Flusses zu simulieren.

- Well Package (WEL1)

Das „Well Package“ wird verwendet, um die Randbedingungen eines Brunnen zu simulieren.

- u.a.

2.2 MT3D

Das Modell wurde entwickelt von S. S. Papadopoulos & Associates Inc. Autor: Chunmiao Zheng. Mehr Informationen sind in Zheng (1990) enthalten.

MT3D (Modular Transport in 3 Dimensions) ist ein Transportmodell. Das Modell hat eine modulare Struktur und ermöglicht eine voneinander unabhängige Simulation von Konvektion, Dispersion, Quellen/Senken und chemischen Reaktionen (lineare gleichgewichtskontrollierte oder nichtlineare Sorption und Zerfall 1.Ordnung oder Bioabbau). Es ist entwickelt für die Kopplung mit einem blockzentrierten finiten Differenzen-Strömungsmodell, wie MODFLOW, und basiert auf der Annahme, dass Änderungen des Konzentrationsfeldes das Strömungsfeld nicht beeinflussen. MT3D übernimmt die Druckhöhen und die verschiedenen

Strömungs- und Quellen/Senken-Terme des Strömungsmodells und die spezifischen Randbedingungen (Brunnen, Dränagen, Flüsse, Grundwasserneubildung und Evapotranspiration).

2.3 FLOTRANS

Das Modell wurde von Waterloo Hydrogeologic Software, Waterloo Centre for Groundwater Research, Canada entwickelt. Autoren: N. Guiguer, J. Molson, Th. Franz und E. Frind. Mehr Information ist in Guiguer et al. (1993) enthalten.

FLOTRANS simuliert den 2D-konvektiv-dispersiven Transport in porösen Medien. Das Modell kann Heterogenitäten und Anisotropie berücksichtigen genauso wie variable Randbedingungen und Quellen. Der Schadstoff kann linear retardiert oder nach 1.Ordnung abgebaut werden.

FLOTRANS löst das Strömungsproblem dual durch Formulieren der Strömungsgleichung bezüglich des hydraulischen Potentials und der Stromfunktion. Das Ergebnis ist eine sehr genaue Widerspiegelung des Grundwasserströmungssystems. Neben einer einzigartigen visuellen Darstellung des Strömungsfeldes gestattet die Stromfunktion eine generell genauere Berechnung der Strömungsgeschwindigkeiten als bei Verwendung des hydraulischen Potentials. Die duale Formulierung ist jedoch gebunden an gesättigte stationäre hydrogeologische Systeme.

FLOTRANS geht von einem Kontaminanten in gelöster Phase aus, welcher bei Aquifertemperatur verdünnt wird. Wenn das Modell 2D vertikal eben angewendet wird, wird der transversale horizontale Fluss vernachlässigt, ebenso wie Konzentrationsgradienten. Für die 2D horizontal ebene Anwendung wird eine einheitliche Aquifermächtigkeit angenommen und Neubildung, vertikaler Fluss und Konzentrationsgradienten vernachlässigt. Die Transportrandbedingungen können 1., 2., und 3. Art sein.

Anlage 5-2: Modellvergleich der für die Kopplung ausgewählten Modelle.

Für einen leichteren generellen Vergleich und einen Überblick über die Möglichkeiten der Modelle wurde eine Vergleichsmatrix entwickelt. In der Matrix findet der Nutzer die Schwerpunkte: allgemeine Informationen, Wassertransport, Lösungstransport, Wärmetransport und organischen C und N-Kreislauf. Acht unterschiedliche Modelle wurden verglichen. Eine Kurzbeschreibung der Modelle ist in Anlage 5-1 enthalten. Der Vergleich dient der Bewertung der Eignung der Modelle für die Simulation des Stickstofftransportprozesses zwischen der ungesättigten und gesättigten Zone. Außerdem sollen die Möglichkeiten der Kopplung der Modelle mit dem Ziel einer integrierten Beschreibung der untersuchten Prozesse identifiziert werden. Die Ergebnisse des Modellvergleiches werden im Folgenden beschrieben. Ein Vergleich der numerischen Ergebnisse wird in diesem Zusammenhang nicht durchgeführt.

1. Generelle Schlussfolgerung aus dem Modellvergleich

Die Bewertung der untersuchten Modelle führt zu folgenden Schlussfolgerungen:

- keines der Modelle liefert eine komplette Beschreibung des Wasser- und Nährstofftransportes für die ungesättigte und die gesättigte Zone auf regionaler Skala
 - die Modelle beschreiben den Wasserfluss und Stickstoffumsatz in der ungesättigten oder in der gesättigten Zone mit unterschiedlichen Detaillierungsgraden
 - keines der ungesättigten Modelle beschreibt Schneeakkumulation oder -schmelze
 - das SWMS-3D-Modell berücksichtigt den Stickstoffkreislauf in der ungesättigten/gesättigten Zone nicht direkt (aus diesem Grund wird das Modell auch nicht weiter für die Anwendung berücksichtigt)
 - das HERMES-Modell beruht auf vereinfachten Ansätzen und ist auf die Bodenzone bis 2 m Tiefe begrenzt, es ist jedoch einfach in der Anwendung und erfordert relativ wenig Aufwand hinsichtlich der Input-Daten-Bereitstellung
 - die Kombination des SWAP- und ANIMO-Modells und auch WAVE liefert die besten Möglichkeiten zur Simulation des Wassertransportes und der Nährstoffumsätze in der ungesättigten und der gesättigten Zone auf lokalem Maßstab, jedoch benötigen sie eine große Menge an detaillierten Input-Informationen
 - es gibt kein spezielles Modell zur Simulation des Stickstoffmetabolismus in regionalen Grundwassersystemen, jedoch erlauben die Transportgleichungen die Berücksichtigung der Effekte von Produktion 0. Ordnung und Abbau 1. Ordnung. Damit sind die Möglichkeiten einer Kopplung des Lösungstransportes mit sequentiellen Reaktionen gegeben.
 - das FLOTRANS-Modell benötigt keine detaillierte Input-Information, ist jedoch auf 2D-Anwendungen begrenzt
 - die Kombination von MODFLOW und MT3D liefert die besten Möglichkeiten für die Modellierung des Wasserflusses und der Nährstoffumsätze in der gesättigten Zone auf regionaler Skala
-

- die Modelle geben die Möglichkeiten für die Kopplung der Prozesse, die separat für die ungesättigte und die gesättigte Zone simuliert wurden, unter Verwendung der Standard-Input- und -Output-Dateien und -Parameter, eine so genannte „lose Kopplung“.

2. Modellvergleichsmatrix

	Modellname:	SWAP	ANIMO	WAVE	HERMES	SWMS	MOD FLOW	MT3D	FLO TRANS
1. Allgemeine Information									
1.1 Modelltyp									
Empirisch		-	-	-	-	-	-	-	-
Analytisch		-	-	-	-	-	-	-	-
Deterministisch		X	X	X	X	X	X	X	X
Stochastisch		-	-	-	-	-	-	-	-
1.2 räumliche Dimensionen									
1-D		X	X	X	X	-	-	-	-
2-D		-	-	-	-	-	-	-	X
3-D		-	-	-	-	X	X	X	-
1.3 Zeitabhängigkeit									
Stationär		-	-	-	-	-	X	X	X
Instationär		X	X	X	X	X	X	X	-
1.4 Typ und Skale der Anwendung									
Ungesättigt (Vertikal)		-	-	-	X	-	-	-	-
Ungesättigt/gesättigt (Lokal)		X	X	X	-	X	-	-	-
gesättigt (Regional)		-	-	-	-	-	X	X	X
1.5 Numerische Methode									
Finite Differenzen		X	X	X	X	-	X	X	-
Finite Elemente		-	-	-	-	X	-	-	X
1.6 Herstellerregion									
aus der EU		X	X	X	X	-	-	-	-
aus der USA		-	-	-	-	X	X	X	X
2. Wassertransport									
2.1 Grundlegende Gleichungen									
Richards		X	-	X	-	X	-	-	-
Darcy		-	-	-	-	-	X	-	X
Kapazitätsansatz		-	-	-	X	-	-	-	-
Hydrologie aus anderen Modellen		-	X	-	-	-	-	X	-
2.2 Medium-Eigenchaften									
Saugsp.-Wassergeh.-Funktion		X	-	X	-	X	-	-	-
Wassergehalt		X	-	X	-	X	-	-	-

	Modellname:	SWAP	ANIMO	WAVE	HERMES	SWMS	MOD FLOW	MT3D	FLO TRANS
	Ungesättigte Leitfähigkeit	X	-	X	-	X	-	-	-
	Gesättigte Leitfähigkeit	X	-	-	-	X	X	-	X
	Speicherung	-	-	-	-	-	X	-	-
	Hysterese	X	-	X	-	-	-	-	-
	Heterogenität und Anisotropie	X	-	X	-	X	X	-	X
	2.3 Wurzelwasseraufnahme								
	Empirisch	-	-	-	X	-	-	-	-
	Feddes-Gleichung	X	-	X	-	X	-	-	-
	2.4 Evapotranspiration								
	Empirisch	-	-	X	X	-	X	-	-
	Penman-Monteith-Gleichung	X	-	X	-	-	-	-	-
	2.5 Pflanzenwachstum								
	Einfaches Modell	X	X	X	X	-	-	-	-
	Detailliertes Modell	X	-	X	-	-	-	-	-
	2.6 Kumul. Fluss durch unteren Rand	X	-	X	X	X	-	-	-
	2.7 Präferentieller Fluss	X	-	-	-	-	-	-	-
	2.8 Randbedingungen								
	Oberer Rand								
	Niedersch. od. GW-Neubildung	X	-	X	X	X	X	-	X
	Aufstau	X	-	X	-	X	-	-	-
	Oberflächenabfluss	X	-	-	-	X	-	-	-
	Unterer Rand								
	Grundwasserstand	X	-	X	X	X	-	-	-
	Druckhöhe	X	-	X	-	X	-	-	-
	Fluss durch unteren Rand	X	-	X	-	X	-	-	-
	Freie Entwässerung	X	-	X	-	X	-	-	-
	Interne Ränder								
	Brunnen	-	-	-	-	X	X	-	-
	Fluss	-	-	-	-	X	X	-	-
	„General head“	-	-	-	-	X	X	-	-
	Entwässerung	-	-	-	-	X	X	-	-
	Wand	-	-	-	-	-	X	-	-
	Laterale Ränder								
	„Constant head“	-	-	-	-	X	X	-	X

	Modellname:	SWAP	ANIMO	WAVE	HERMES	SWMS	MOD FLOW	MT3D	FLO TRANS
	“General head”	-	-	-	-	X	X	-	-
	Wand	-	-	-	-	X	X	-	-
	Fluss	X	-	-	-	X	X	-	X
	Drän	X	-	-	-	X	X	-	X
3. Lösungstransport									
	3.1 Berücksichtigte Prozesse								
	Konvektion	X	X	X	-	X	-	X	X
	Diffusion	X	X	X	-	X	-	X	X
	Dispersion	X	X	X	X	X	-	X	X
	Adsorption								
	Linear	-	X	X	-	X	-	X	X
	Nicht-linear								
	Freundlich	X	-	-	-	-	-	X	-
	Langmuir	-	-	-	-	-	-	X	-
	Abbau	X	X	X	X	X	-	X	X
	Wurzelaufnahme	X	X	X	X	-	-	-	-
	Quellen/Senken	X	X	X	X	X	-	X	-
	3.2 Randbedingungen								
	obere	X	X	X	X	X	-	X	X
	untere	X	X	X	-	-	-	X	X
	Lateraler Fluss	X	X	-	-	-	-	X	X
4. Wärmetransport									
	4.1 Art der Lösung								
	Analytisch	X	-	-	-	-	-	-	-
	Numerisch	X	-	X	-	-	-	-	-
	4.2 Randbedingungen								
	obere	X	-	X	-	-	-	-	-
	untere	X	-	X	-	-	-	-	-
5. Organischer C- u. N-Kreislauf									
	5.1 Organischer C								
	Zugabe zu Boden								
	Frische organische Substanz	-	X	X	X	-	-	-	-
	Gelöste organische Substanz	-	X	X	X	-	-	-	-

	Modellname:	SWAP	ANIMO	WAVE	HERMES	SWMS	MOD FLOW	MT3D	FLO TRANS
	Wurzelrückstände	-	x	x	x	-	-	-	-
	Transformationen								
	Abbau/Zersetzung	-	x	x	x	-	-	-	-
	Produkt. v. Humus/Biomasse	-	x	x	-	-	-	-	-
	Transport und Auswaschung	-	x	x	x	-	-	-	-
	Lateraler Transport	-	x	x	-	-	-	-	-
	5.2 N-Kreislauf								
	Zugabe zu Boden								
	Frische organische Substanz	-	x	x	x	-	-	-	-
	Gelöste organische Substanz	-	x	x	x	-	-	-	-
	Mineralischer Dünger	-	x	x	x	-	-	-	-
	Berücksichtigte N-Substanzen								
	Gelöster organischer Stickstoff	-	x	x	x	-	-	-	-
	Ammonium	-	x	x	-	-	-	-	-
	Nitrat	-	x	x	x	-	-	-	-
	Transformationen								
	Adsorption	-	x	x	x	-	-	-	-
	Mineralisation	-	x	x	x	-	-	-	-
	Immobilisierung	-	x	x	x	-	-	-	-
	Nitrifikation	-	x	x	x	-	-	-	-
	Denitrifikation	-	x	x	x	-	-	-	-
	Pflanzenaufnahme	-	x	x	x	-	-	-	-
	Volatilisierung	-	x	x	x	-	-	-	-
	Transport	-	x	x	x	-	-	-	-
	Auswaschung	-	x	x	x	-	-	-	-
	5.3 Art der Lösung								
	Analytisch	-	-	-	x	-	-	-	-
	Numerisch	-	x	x	-	-	-	-	-

Bemerkung: Jedes Modell wird mit den Symbolen "x" für "Ja" und "-" für "Nein" in der Matrix bewertet.

Anlage 5-3: Anleitung für die Anwendung der Software für die Datentransformation.

Der Nutzer findet im Folgenden eine Anleitung für die Berechnung mit den gekoppelten Modellen. Es wird empfohlen vor dem Start der Simulationen die Schritte der Regionalisierungsprozedur anwenden, um zu sichern, dass eine optimale Anzahl von LSMs verwendet wird und um die Länge der Austauschperioden festzulegen. Danach können die LSMs für die gesamte interessierende Zeitperiode angewendet werden. Damit erhält der Nutzer alle benötigten Output-Files der LSMs, welche dann zu Input-Files des RGWM transformiert werden.

Wenn gekoppelte Modelle auf dem Feldmaßstab bis zu 15-20 ha angewendet werden, reichen in der Regel ein oder zwei LSM zur Berechnung der Grundwasserneubildung (GWN) und der Nitratauswaschung aus. Bei größeren ländlichen Gebieten oder kleinen Gewässereinzugsgebieten (10 km² und mehr) muss eine Regionalisierung der benötigten Information durchgeführt werden. Dabei muss auf unvollständige oder fehlende Information für bestimmte Größen, wie Düngermenge pro Flächeneinheit, Fruchtfolgeschema, angebaute Ackerfrucht etc. Rücksicht genommen werden.

Eine praktikable Lösung besteht darin, bei Vorliegen der Gesamtverteilung der vorhandenen Ackerfrüchte innerhalb einer Region, z.B. 40 % Mais, 30 % Weizen, 20 % Gras und 10 % restlich Flächen eine Zufallsverteilung der Ackerfrüchte in einer Region zu erzeugen, die jährlich variabel ist. Bei Vorliegen der Zufallsverteilung der Ackerfrüchte kann die Grundwasserneubildung und die Nitratauswaschung anhand von verfügbaren Messungen oder über LSM-Berechnungen ermittelt werden. Dazu können mittlere Werte der Bodenparameter, der Düngung etc. verwendet werden. In diesem Stadium wurde ein Programm entwickelt, das die Zufallsverteilung der Ackerfrüchte für 60 Felder über eine 10 jährige Periode ermöglicht. Auch das Transformationsprogramm zur Erzeugung der Input-Dateien für MODFLOW und MT3D wurde entwickelt. Das Programm arbeitet mit einer festen Anzahl von Feldern, da der FORTRAN-Compiler Restriktionen hinsichtlich der Erzeugung einer großen Anzahl von Output-Dateinamen während der Programmausführung unterliegt. Der Quelltext ist verfügbar und die Nutzer können leicht Veränderungen in dem Programm vornehmen, um z.B. eine andere Feldanzahl oder einen anderen Zeitraum zu berücksichtigen. Ein Beispiel der Programmausführung ist im Folgenden ersichtlich.

1. Kopplung von HERMES mit MODFLOW/MT3D

Die Information für die täglich GWN und die Nitratkonzentration aus dem HERMES-Modell wird in einer Datei zusammen mit der Information über Datum, Wassergehalt, N-Umwandlung etc. gespeichert. Dies ist eine der Basis-Output-Dateien, die die Erweiterung .ERG haben. In dieser Datei ist jedoch das Datum nicht im gewöhnlichen ASCII-Format geschrieben. Aus diesem Grund muss der Nutzer ein EXCEL MACRO ausführen, das speziell für diesen Fall geschrieben wurde und eine vollständig lesbare TXT Datei erzeugt. Dieses EXCEL MACRO befindet sich ausgedruckt am Ende dieses Anhangs. Danach wird die Prozedur für die Transformation von HERMES Output-Daten mit einem von zwei speziellen FORTRAN-Programmen weitergeführt, das die bereits erzeugte TXT Datei liest. Jedes der beiden Programme erzeugt zwei Input-Dateien für MODFLOW und MT3D, welche Tagesdaten für die GWN und die Nitrat-Sickerwasserkonzentration enthalten bzw. die Mittelwerte dieser Parameter. Das erste Programm gibt die Mittelwerte für den gewählten Austauschzeitraum (Teil des gesamten Zeitintervalls der Berechnung) und das zweite errechnet die Mittelwerte für eine feste Reihe von mehreren aufeinander folgenden Tagen. Das Programm kann HERMES Output-Daten in bis zu 5 Jahre lange Berechnungsintervalle transformieren. Der Quelltext ist in Anlage 5-5 enthalten.

2. Anleitung für die Anwendung des Programms für Mittelwerte einer gewählten Austauschperiode

Der Nutzer muss folgende Anleitung berücksichtigen:

- Eingabe des Namens der HERMES-Output-Datei, die transformiert werden soll (xxxxxxxx.txt)
- Eingabe des Namens der MODFLOW-Input-Datei, die die Daten für die GWN enthält [m/day] (max xxxxxxxx.txt)
- Eingabe des Namens der MT3D-Input-Datei, die die Tagesdaten für die Nitratkonzentrationen enthält [mg/l] (max xxxxxxxx.txt)
- Eingabe des Namens der Datei, die Mittelwerte der GWN [m/day] und der Nitratkonzentration enthält [mg/l] (max xxxxxxxx.txt)
- Eingabe der Gesamtanzahl der Tage in der HERMES-Berechnung (max. 5 Jahre = 1827 Tage)
- Eingabe des Start- und Endtages der gewählten Zeitreihe (1-1827 days)

Ein Beispiel für die Programmanwendung und die ermittelten Ergebnisse für die gemittelten Werte ist im Folgenden ersichtlich:

START DAY [dd/mm/yy]	1.000000	3.000000	99.000000
END DAY [dd/mm/yy]	30.000000	3.000000	1.000000
NUMBER OF DAYS	761		
AVERAGE WATER RECHARGE [m/day]	3.758213E-04		
AVERAGE NITRATE RECHARGE [mg/l] CONCENTRATION	5.593956		

3. Anleitung für die Anwendung des Programms für die Mittelwerte einer festen Zeitreihe von Tagen

Der Nutzer muss folgende Anleitung beachten:

- Eingabe des Namens der HERMES-Output-Datei, die transformiert werden soll (xxxxxxxx.txt)
- Eingabe des Namens der MODFLOW-Input-Datei, die die Daten für die GWN enthält [m/day] (max xxxxxxxx.txt)
- Eingabe des Namens der MT3D-Input-Datei, die die Tagesdaten für die Nitratkonzentrationen enthält [mg/l] (max xxxxxxxx.txt)
- Eingabe des Namens der Datei, die Mittelwerte der GWN [m/day] und der Nitratkonzentration enthält [mg/l] (max xxxxxxxx.txt)
- Eingabe der Gesamtanzahl der Tage in der HERMES Berechnung (max. 5 Jahre = 1827 Tage)
- Eingabe des Start- und Endtages der gewählten Zeitreihe (1-1827 days)
- Eingabe der Zeitreihe in Tagen für die Ermittlung der Mittelwerte für die GWN [m/day] und die Nitratkonzentration [mg/l]

Ein Beispiel der Programmanwendung und die ermittelten Ergebnisse für die mittlere GWN ist im Folgenden ersichtlich:

Start day	End day	Water Recharge [mm/d]
0	90	.0000
90	180	.0000
180	270	.0000
270	360	.0008
360	450	.0016
450	540	.0000
540	630	.0000
630	720	.0000
720	761	.0008

Ein Beispiel für die Programmanwendung und die ermittelten Ergebnisse der mittleren Nitratkonzentration ist im Folgenden ersichtlich:

Start day	End day	Nitrate Concentration [mg/l]
0	90	.17
90	180	.00
180	270	.00
270	360	2.94
360	450	11.38
450	540	10.00
540	630	10.00
630	720	9.00
720	761	3.81

Anlage 5-4: Quelltext des Transformationsprogramms für die Kopplung von HERMES und MODFLOW/MT3D.

Kopplung HERMES – MODFLOW und MT3D: Das Programm erzeugt Mittelwerte einer gewählten Zeitperiode

```

c *****
c The program transforms output files of HERMES model
c to input files for Visual Modflow and MT3D models
c
c Maximum possible time period 366 days
c
c Version 1.0 (07/08/2001)
c *****
c
c dimension dy(1830),dm(1830),dd(1830)
c character*14 fnin,fn3
c dimension flnit(1830),flin(1830),flcr(1830)
c dimension temp(17)
c
c write(*,*) ('*****
1 ')
c write(*,*) ('** **
1 ')
c write(*,*) ('** The program transforms output of HERMES model **
1 ')
c write(*,*) ('** **
1 ')
c write(*,*) ('** to input data of Visual MODFLOW and MT3D models **
1 ')
c write(*,*) ('** **
1 ')
c write(*,*) ('*****
1 ')
c write(*,*)
c
c write(*,*) (' ALERT: Original HERMES output files are not readable
1 by the program')
c write(*,*) (' For solving this problem, please, see the Applicatio
1 n Guidelines')
c write(*,*)
c write(*,*) (' ALERT: When enter input file names, please, use apos
1 trophes')
c write(*,*)
c write(*,*) (' Please, enter name of HERMES output file to be trans
1 formed (xxxxxxx.txt)')
c read(*,*) fnin
c
c write(*,*)
c write(*,*) (' Please, enter name of file will contain average data
1 water recharge [m/day] and nitrate recharge concentrations [mg
2 /l] (max xxxxxxx.txt)')
c read(*,*) fn3
c
c write(*,*)
c write(*,*) (' Please, enter total number of days in HERMES calcula
1 tions')
c write(*,*) (' (max. 5 years = 1827 days)')
c write(*,*)
c read(*,*) ndur
c write(*,*)
c write(*,*) (' Please, enter start and end days of chosen time peri
1 od (1-1827)')
c write(*,*)
c read(*,*) ns,ne
c write(*,*)
c
c open(12,file=fnin,form='formatted')
c
c do 11 i=1,ndur
c read(12,*) (temp(ii),ii=1,17)
c dd(i)=temp(1)
c dm(i)=temp(2)

```

```

dy(i)=temp(3)
flnit(i)=temp(12)
flin(i)=temp(13)
flcr(i)=temp(15)
11 continue
c
open(16,file=fn3,form='formatted')
nd=ne-ns+1

write(16,*)(' START DAY [yy/mm/dd] ')
write(16,13) dd(ns),dm(ns),dy(ns)
write(16,*)
write(16,*)(' END DAY [yy/mm/dd] ')
write(16,13) dd(ne),dm(ne),dy(ne)
write(16,*)
write(16,*)(' NUMBER OF DAYS'),nd
write(16,*)
13 format(20x,3f7.0)
c
tflux=flin(ne)-flin(ns)
tflux=tflux-(flcr(ne)-flcr(ns))
avrfl=0.001*tflux/nd
if(tflux.le.0.) goto 115
avrnc=flnit(ne)-flnit(ns)
avrnc=443.*avrnc/tflux
goto 116
115 avrnc=0.
116 continue
write(16,*)(' AVERAGE WATER RECHARGE [m/day]'),avrfl
write(16,*)
write(16,*)(' AVERAGE NITRATE RECHARGE [mg/l]'),avrnc
write(16,*)('
CONCENTRATION ')
write(16,*)

c
write(*,*) (' Output files are ready')
write(*,*)

c
stop
end

```

Kopplung HERMES – MODFLOW und MT3D: Das Programm erzeugt Mittelwerte einer festen Anzahl von Tagen

```

c
c *****
c The program transforms output files of HERMES model
c to input files for Visual Modflow and MT3D models
c
c Maximum possible time period 366 days
c
c
c *****
c
c dimension dy(1830),dm(1830),dd(1830)
c character*14 fnin,fn3,fn4
c dimension flnit(1830),flin(1830),flcr(1830)
c dimension temp(17)
c
c write(*,*) (' *****
1 ')
c write(*,*) ('** **
1 ')
c write(*,*) ('** The program transforms output of HERMES model **
1 ')
c write(*,*) ('** **
1 ')
c write(*,*) ('** to input data of Visual MODFLOW and MT3D models **
1 ')
c write(*,*) ('** **
1 ')
c write(*,*) (' *****
1 ')
c write(*,*)
c
c write(*,*) (' ALERT: Original HERMES output files are not readable
1 by the program')

```

```
write(*,*) (' For solving this problem, please, see the Applicatio
ln Guidelines')
write(*,*)
write(*,*) (' ALERT: When enter input file names, please, use apos
ltrophes')
write(*,*)
write(*,*) (' Please, enter name of HERMES output file to be trans
lformed (xxxxxxx.txt)')
read(*,*) fnin
write(*,*)
c
write(*,*) (' Please, enter name of MODFLOW input file containing
laverage data for')
write(*,*) (' water recharge [m/day] (max xxxxxxxx.txt)')
read(*,*) fn3
write(*,*)
write(*,*) (' Please, enter name of MT3D input file containing ave
lrange data for')
write(*,*) (' nitrate recharge concentrations [mg/l] (max xxxxxxxx
l.txt)')
read(*,*) fn4
write(*,*)
c
write(*,*) (' Please, enter total number of days in HERMES calcula
ltions')
write(*,*) (' (max. 5 years = 1827 days)')
write(*,*)
read(*,*) ndur
write(*,*)
write(*,*) (' Please, enter time period in days for finding averag
le values for')
write(*,*) (' water recharge [m/day] and nitrate recharge concentr
lations [mg/l]')
write(*,*)
read(*,*) np
c
open(12,file=fnin,form='formatted')
c
do 11 i=1,ndur
read(12,*) (temp(ii),ii=1,17)
dd(i)=temp(1)
dm(i)=temp(2)
dy(i)=temp(3)
flnit(i)=temp(12)
flin(i)=temp(13)
flcr(i)=temp(15)
11 continue
c
open(16,file=fn3,form='formatted')
open(17,file=fn4,form='formatted')
c
do 22 i=1,ndur,np
icon=i+np-1
idif=ndur-icon
if(idif.lt.np) icon=ndur
if(idif.lt.np) np=np+idif
tflux=flin(icon)-flin(i)
tflux=tflux-(flcr(icon)-flcr(i))
avrwf=0.001*tflux/np
if(tflux.le.0.) goto 115
avrnc=flnit(icon)-flnit(i)
avrnc=443.*avrnc/tflux
goto 116
115 avrnc=0.
116 ii=i-1
write(16,222) ii,icon,avrwf
write(17,333) ii,icon,avrnc
if(icon.eq.ndur) goto 25
22 continue
222 format(2i6,f10.4)
333 format(2i6,f8.2)
c
25 write(*,*)
write(*,*) (' Output files are ready')
write(*,*)
c
stop
end
```

Anlage 5-5: Stabilitätskriterien und Lösungsverfahren für die Transportgleichung in MODFLOW/MT3D.

Da die Lösung der Differentialgleichung des Transports eine Anfangs- und Randwertaufgabe darstellt, muss sie numerisch gelöst werden.

Zur numerischen Lösung der Transportgleichung sind in MT3D die Methode der Finiten Differenzen und das Charakteristiken-Verfahren implementiert.

Da die Methode der Finiten-Differenzen auch für die Charakteristiken-Verfahren relevant ist, soll diese als erste erläutert werden [nach SCHÄFER]. Danach folgt die Erläuterung der anderen Lösungsverfahren.

1 Finite-Differenzenverfahren

Das Finite-Differenzenverfahren zählt aufgrund seines ortsfesten Gitters zu den EULER-Verfahren. Es wird in jedem Berechnungsknoten eine Massenbilanz über die Änderung des advektiven und dispersiven Flusses, sowie die Massenänderung durch externe Quellen ohne Wasserzugabe aufgestellt.

In MT3D werden zwei verschiedene Methoden unterschieden. Bei der sogenannten Upstream-Methode wird die Konzentration der gegen die Strömungsrichtung vorangegangenen Gitterzellen zur Berechnung der neuen Konzentration verwendet. Dagegen verwendet die Central-Methode einen arithmetischen Mittelwert der Konzentrationen der zwei betreffenden Zellmittelpunkte.

Um den Stofftransport zu simulieren, müssen verschiedene numerische Stabilitätskriterien eingehalten werden.

Das **Courantkriterium** sagt aus, dass der von einem Teilchen in dem Zeitintervall Δt zurückgelegte Weg Δx nicht größer sein darf, als die kleinste Zellweite des Modells. Andernfalls wird die Lösung instabil, es entstehen also unphysikalische Konzentrationen.

$$\frac{u\Delta t}{\Delta x} = Co \leq 1 \quad (\text{Gl.1})$$

Dass ein Konzentrationsgradient durch den dispersiven Transport allein nicht umgekehrt werden darf, besagt das **NEUMANN-Kriterium**.

$$\frac{D}{\Delta x^2} \Delta t = \frac{\Delta c_t}{2\Delta c_x} \leq \frac{1}{2} \quad (\text{Gl.2})$$

Das **Brunnenkriterium** besagt, dass pro Zeitschritt nicht mehr Masse aus einer Zelle entnommen werden darf, als bereits vorhanden ist. In Brunnenzellen wird die Courantzahl dadurch auf ein Sechstel gesenkt.

$$\frac{u\Delta t}{\Delta x} = Co \leq \frac{1}{6} \quad (\text{Gl.3})$$

Ein weiteres Kriterium ist die räumliche und zeitliche Diskretisierung des Modellnetzes. Durch scharfe Konzentrationsfronten kann es zu einer **numerischen Dispersion** kommen. Dieses Phänomen entsteht dadurch, dass durch das Finite-Differenzenverfahren die Konzentrationen nur für die Gitterpunkte berechnet werden. Erreicht eine Konzentrationsfront

nach dem Zeitschritt Δt eine Position zwischen zwei Gitterpunkten, so wird die Konzentration auf die gesamte gerade erreichte Zelle verteilt. Dadurch kommt es zu einer künstlichen Aufweitung der Konzentrationsfront. Dieser Effekt kann durch eine feine räumliche und zeitliche Diskretisierung minimiert werden. Wichtig für die Diskretisierung ist die Gitter-PECLET-Zahl.

$$Pe_x = \frac{u_x \Delta x}{D_{xx}}, Pe_y = \frac{u_y \Delta y}{D_{yy}}, Pe_z = \frac{u_z \Delta z}{D_{zz}} \quad (\text{Gl.4})$$

Die Gitter-PECLET-Zahl sollte beim Finite-Differenzenverfahren immer kleiner als zwei sein.

Eine weitere Möglichkeit zur Verringerung der numerischen Dispersion stellt die Wahl des zentralen Differenzschemas dar. Der Nachteil des zentralen Differenzschemas ist aber, dass eine numerische Oszillation (Über- und Unterschwingung) auftreten kann.

Sowohl die numerische Dispersion als auch die numerische Oszillation sind die Folgen von Gitterverfahren.

Die genannten Stabilitätskriterien werden automatisch von MT3D berücksichtigt, können aber auch durch den Nutzer vorgegeben werden.

2 TVD (Total Variation Diminishing)

Das TVD Verfahren basiert auf einem Finite-Differenzenverfahren höherer (dritter) Ordnung und gehört damit auch zu den EULER-Verfahren. Da zur Berechnung der Transportgleichung Polynome 3. Grades verwendet werden, ergibt sich ein sehr großer Rechenaufwand. Um die Konzentration an einem Knoten zu berechnen, werden die Konzentrationen von drei weiteren Knoten benötigt.

Die Lösung der Transportgleichung mit dem TVD Verfahren ist auf jeden Fall genauer, als bei der Verwendung der einfachen Finite-Differenzenverfahren. Dafür muss aber eine erheblich längere Rechenzeit in Kauf genommen werden. Die numerische Dispersion wird auf ein Minimum gesenkt, kann aber trotzdem nicht völlig eliminiert werden.

3 MOC (Charakteristiken Verfahren)

Das MOC Verfahren löst die beiden Komponenten der Transportgleichung mit zwei unterschiedlichen Verfahren. Der advective Transport wird durch ein Bahnlinienverfahren (particle tracking nach LAGRANGE) berechnet, der dispersive Transport und die Reaktionen durch das Finite-Differenzenverfahren (Gitter-Verfahren nach EULER). Die beiden Prozesse werden dabei entkoppelt und nacheinander berechnet.

Um den advektiven Transport zu berechnen, werden fiktive Partikel, meist mehrere pro Gitterzelle, auf dem Modellgebiet verteilt. Die Partikel erhalten die Ausgangskonzentration, die ihrer Startgitterzelle zugewiesen wurde. Danach werden die Partikel entlang der Bahnlinien des Strömungsfeldes bewegt (forward tracking). Am Ende dieses Schrittes wird über ein einfaches arithmetisches Mittel der Partikelkonzentrationen die neue Konzentration der einzelnen Gitterzellen bestimmt. Auf dieser Basis werden nun der dispersive Transport und die Reaktionen mit dem Differenzenverfahren berechnet. Bevor dann der nächste advective Transportschritt berechnet werden kann, müssen die neuen Partikelkonzentrationen noch aktualisiert werden.

Durch einen dynamischen Partikelansatz können Gebieten mit hohen

Konzentrationsunterschieden mehr Partikel zugewiesen werden, als in weniger interessanten Teilen des Modellgebietes, bezogen auf die Konzentrationen. Somit erhält man eine viel genauere Berechnung.

Der große Vorteil ist, dass dieses MOC Verfahren selbst für große Péclet-Zahlen frei von numerischer Dispersion ist, da die Konzentrationen an die Partikel und nicht an das Gitter gebunden sind.

Der größte Nachteil besteht darin, dass das MOC Verfahren infolge des Wechsels der Verfahren zur Lösung der Transportgleichung nicht massenerhaltend ist. Besonders stark macht sich der Fehler in der Massenbilanz bemerkbar, wenn nichtlineare Reaktionen berücksichtigt werden sollen. Außerdem entsteht durch die große Partikelanzahl ein enormer Rechenaufwand.

4 MMOC (modifiziertes Charakteristiken Verfahren)

In diesem Verfahren wird lediglich ein einziges fiktives Partikel auf die Knoten der Gitterzellen des Strömungsmodells gesetzt. Nun wird für jeden Zeitschritt berechnet, wo das Partikel hätte starten müssen, um den jeweiligen Knoten zu erreichen (backward tracking). Die Konzentration dieses Startpunktes zum vorangegangenen Zeitschritt wird dann als neue Konzentration am jeweiligen Knoten am Ende des advektiven Transports angesetzt. Liegt dieser Startpunkt nicht auf einem Knoten, so wird die Konzentration über die Nachbarknoten interpoliert.

Die Berechnung der Dispersion und Reaktion erfolgt wie beim MOC Verfahren.

Der Vorteil von diesem Verfahren liegt durch die geringere Zahl an Partikeln in einer kürzeren Rechenzeit. Dafür kommt es aber hier infolge der Interpolation zu numerischer Dispersion.

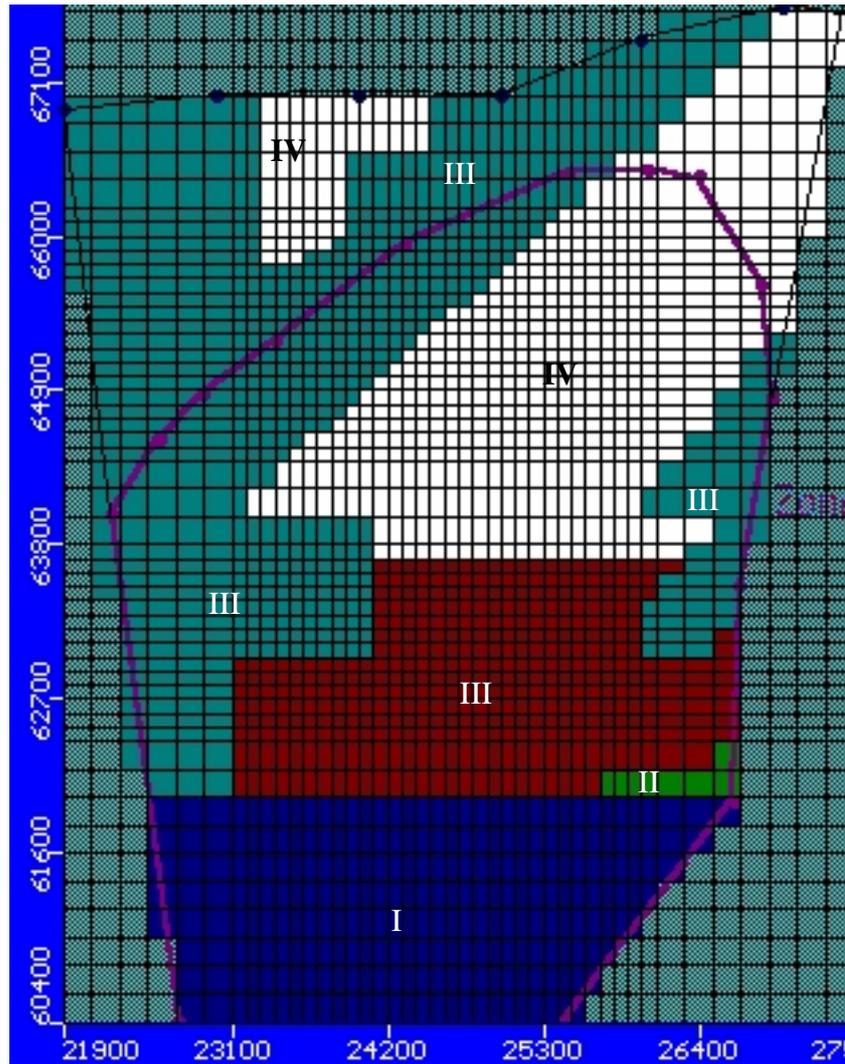
5 HMOC (kombiniertes Charakteristiken Verfahren)

In diesem Verfahren werden die Vorteile des MOC und des MMOC verbunden. In Bereichen mit großen Konzentrationsgradienten wird das MOC Verfahren eingesetzt, während in Bereichen mit kleinen Konzentrationsgradienten das MMOC Verfahren Verwendung findet.

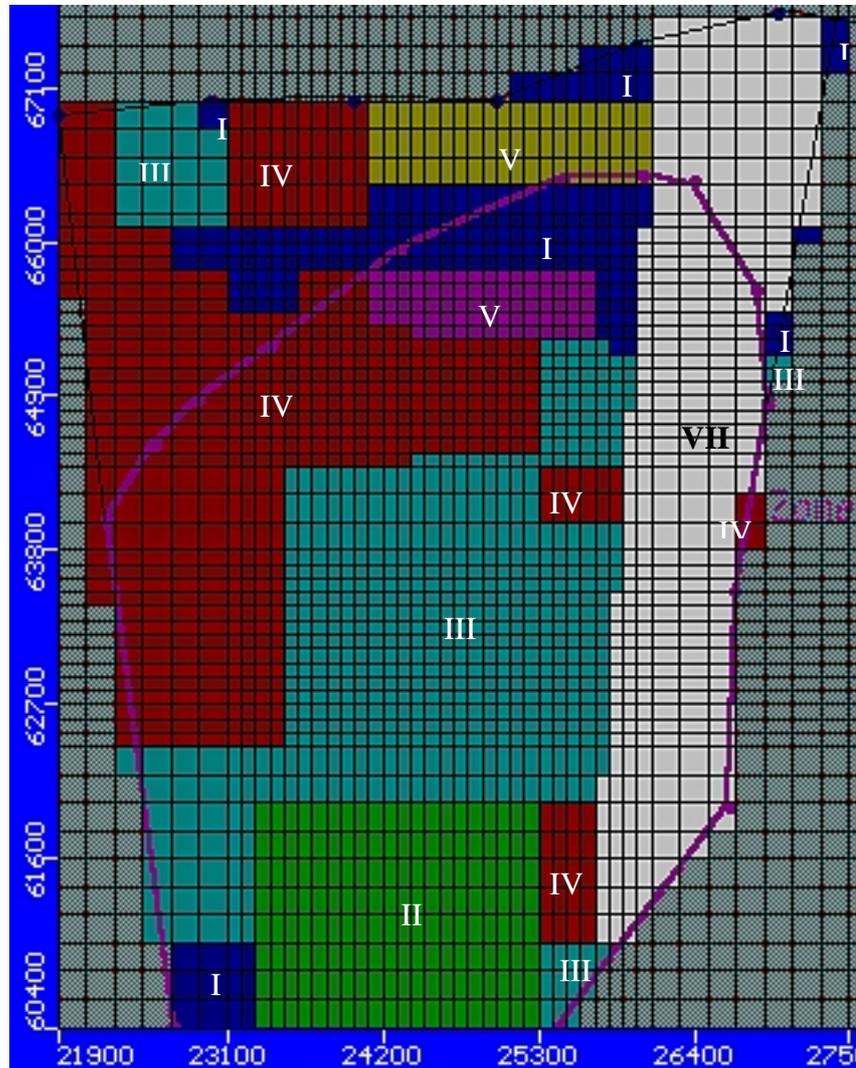
Bei begrenztem Rechenaufwand ist also eine sehr genaue Berechnung möglich.

Anlage 5-6: Zonierung der Grundwasserneubildung und der hydraulischen Leitfähigkeiten.

Recharge (Grundwasserneubildung)



Recharge [mm/a]			
I	275	II	375
IV	225	III	325

Verteilung des Durchlässigkeitsbeiwerts k_f 

kf [m/s]					
I	0.00014	II	0.00036	III	0.00019
IV	0.00016	V	0.00023	VI	9.3E-5
VII	0.0002				

Anlage 5-7: Piezometerdaten der Pegel im Modellgebiet.

Name	x-Werte	y-Werte	Beobachtungstiefe [mNN]
101H	23440	66790	-15.4
102H	23570	64330	-8.1
103H	24850	64940	-8.6
110	24180	65400	3.9
161	22820	66220	-34.0
183	24760	62260	-7.9
184	23450	60400	-5.4
248	23500	61650	25.4
250	24190	66160	17.5
335	23760	63911	18.9
34a	24880	66190	17.9
366	22678	65095	16.8
367	22408	64455	8.3
369	22539	62612	22.7
370	24027	63080	12.5
371	24774	63223	22.9
372	26040	63584	11.2
379	23098	64574	19.8
389	23768	63916	-25.6
481	24183	62561	28.1
482	23880	63024	24.4
483	24128	62898	24.5

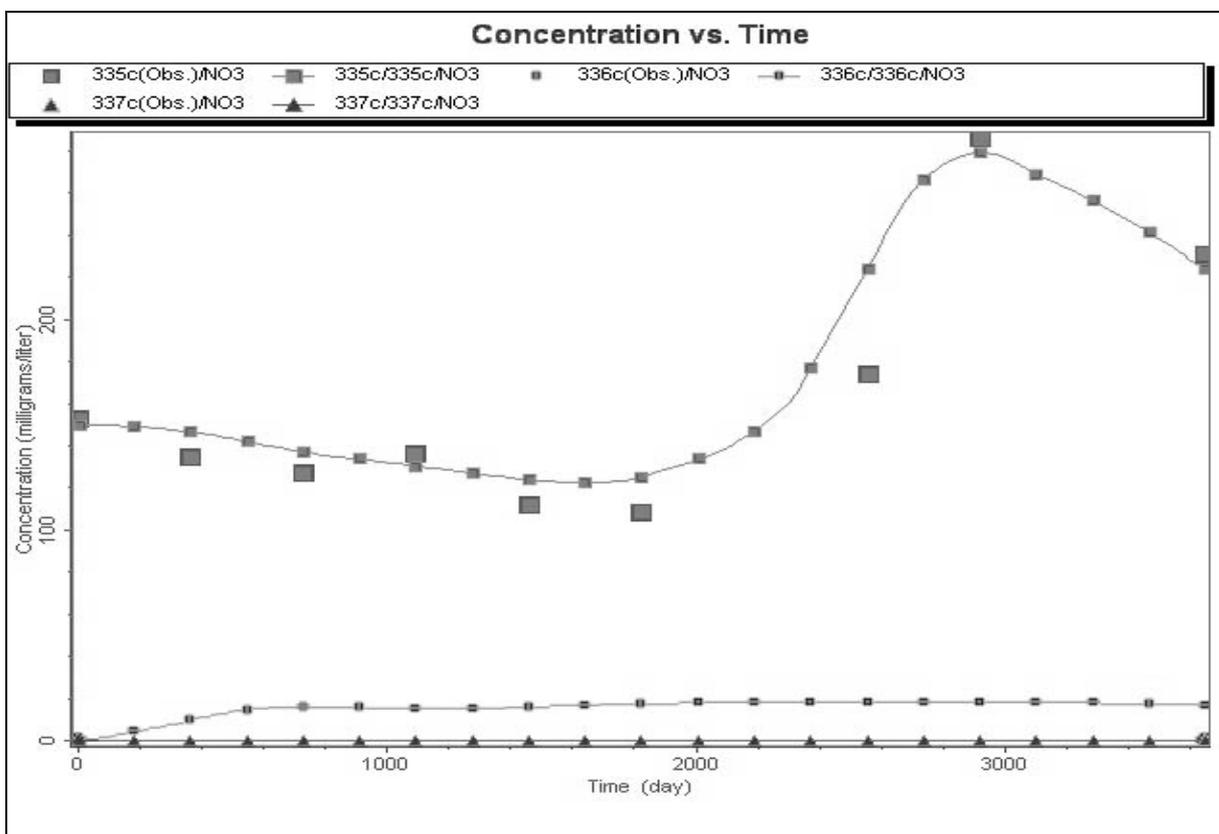
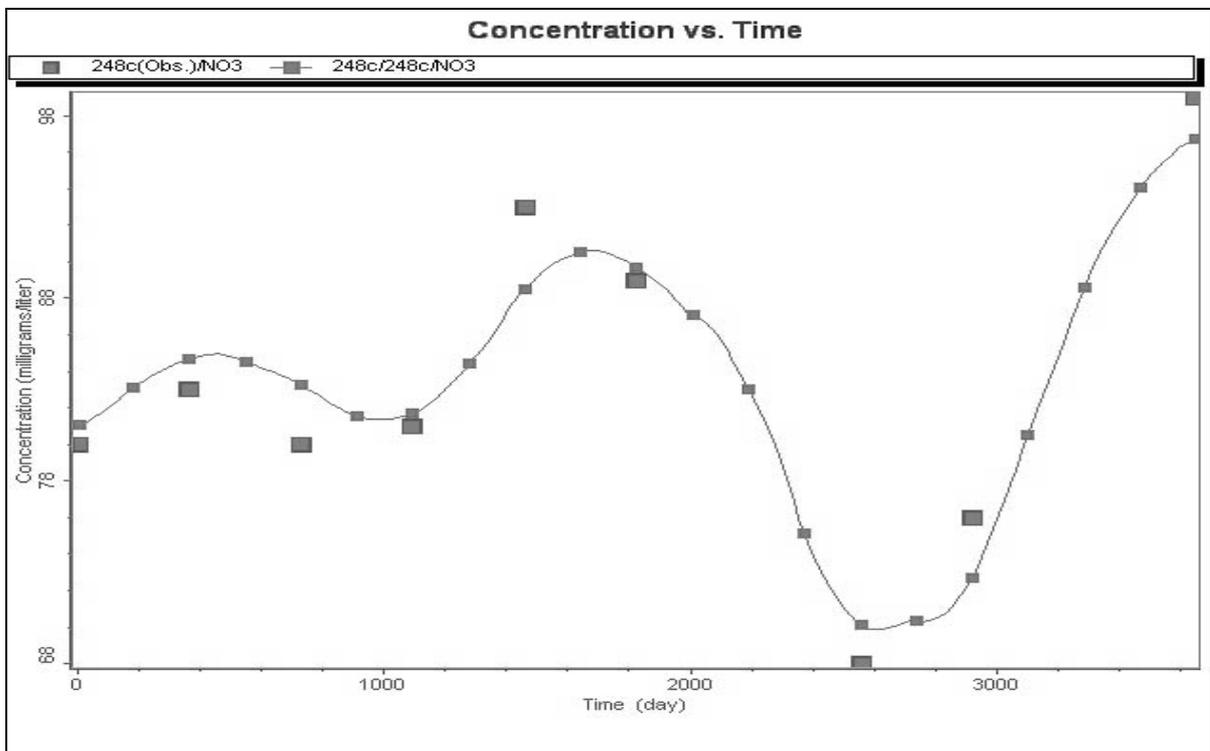
Anlage 5-8: Daten der Konzentrationsbeobachtungspegel.

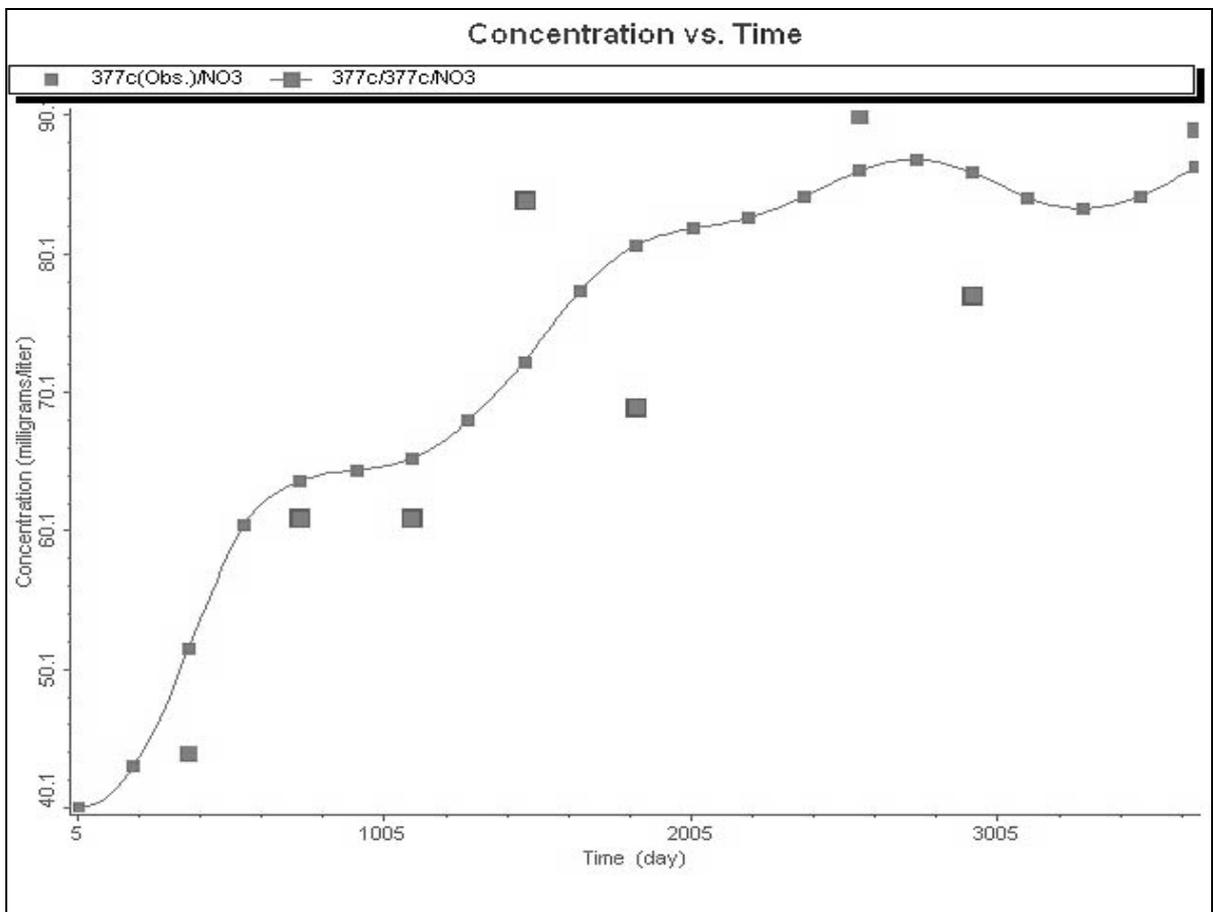
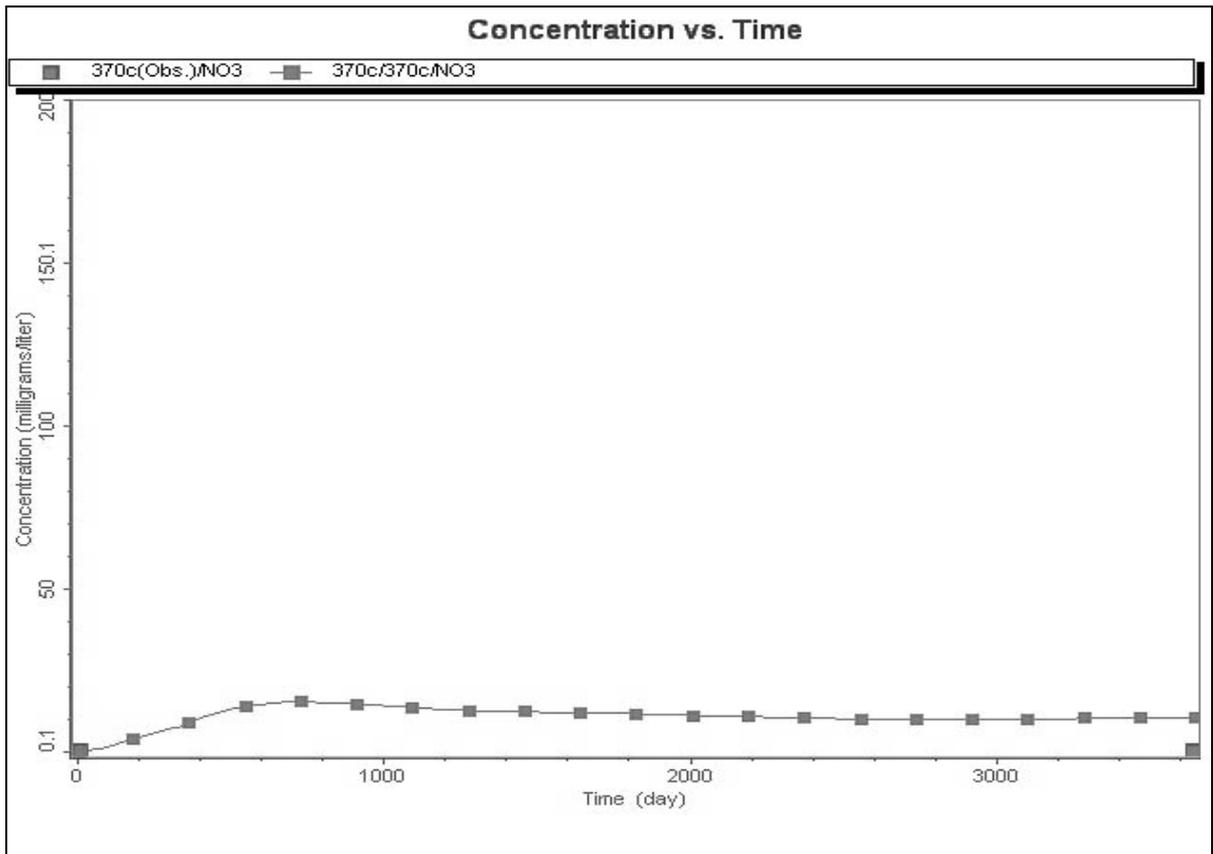
Name	Bezeichnung	x-Werte	y-Werte	Probennahmetiefe [mNN]
132c	132c	23680	62840	26.7
138c	138c	26400	65300	18.6
140c	140c	26280	65900	13.1
147c	147c	25740	64730	16.0
148c	148c	24870	64020	17.6
152c	152c	23500	65150	16.0
156c	156c	24070	64180	18.0
157c	157c	23320	63910	17.4
158c	158c	23140	64570	16.8
183c	183c	24760	62260	-7.9
248c	248c	23500	61650	25.4
335c	335c	23720	63920	18.8
336c	336c	23710	63910	8.6
337c	337c	23700	63900	-1.2
369c	369c	22539	62612	22.7
370c	370c	24022	63077	10.3
371c	371c	24774	63219	22.9
377c	377c	24873	64030	20.9
378c	378c	23267	63905	19.8
389c	389c	23768	63916	-25.2
481c	481c	24183	62561	26.0
482c	482c	23880	63024	25.0
483c	483c	24128	62898	24.5
484c	484c	24200	63080	23.8
SGMc	SGM1c	24435	62875	28.2
SGMc	SGM2c	24435	62875	24.5
SGMc	SGM3c	24435	62875	19.6
SGMc	SGM4c	24435	62875	14.7
SGMc	SGM5c	24435	62875	9.5
SGMc	SGM6c	24435	62875	4.5
SGMc	SGM7c	24435	62875	-0.5

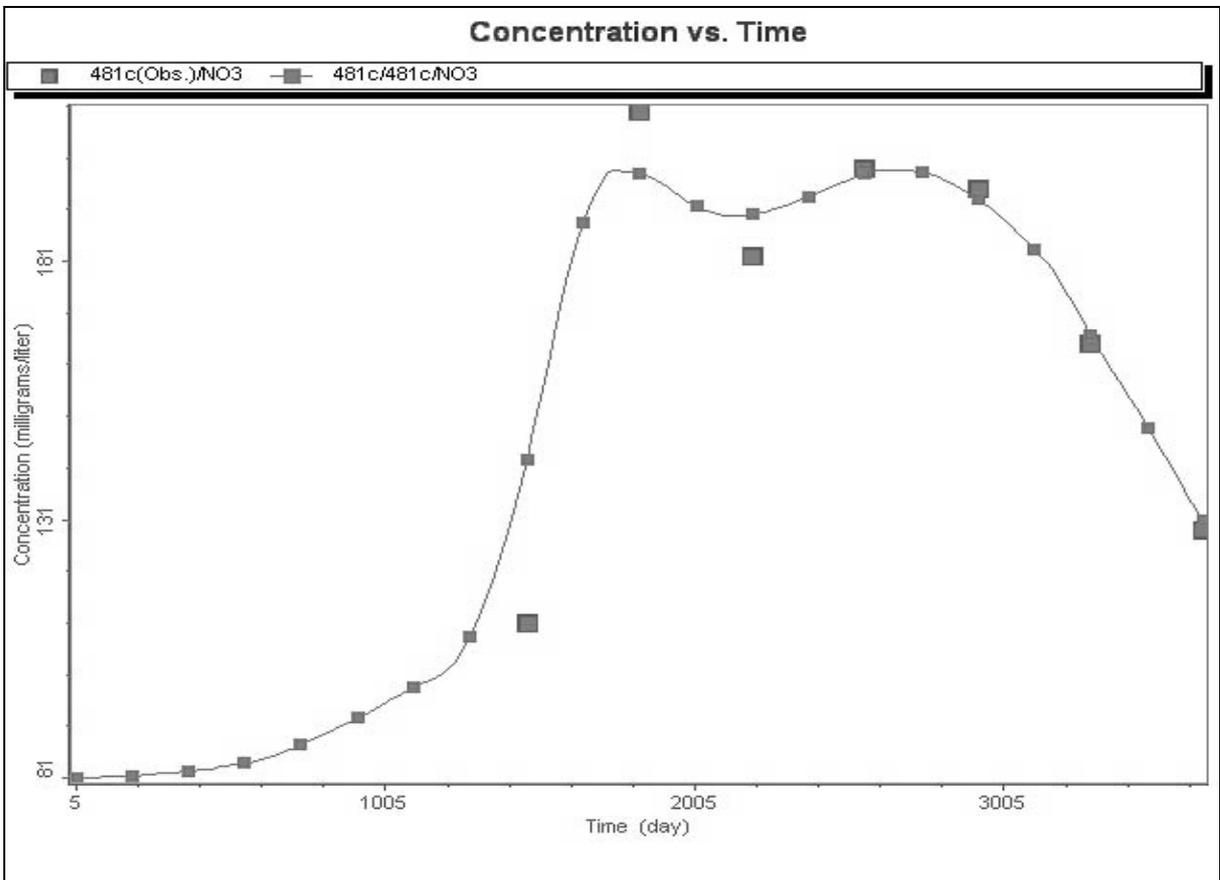
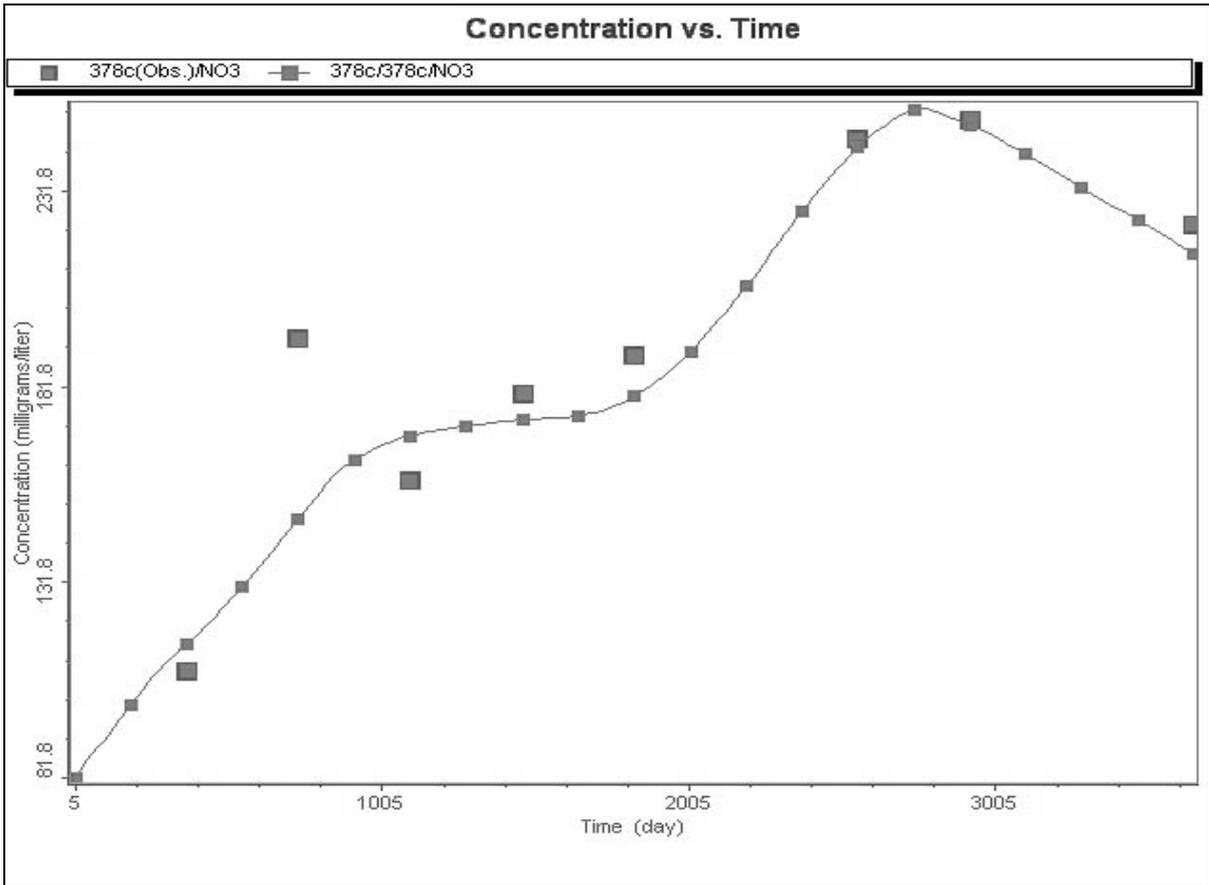
Anlage 5-9: Vergleich der gemessenen und simulierten Konzentrationsverläufe der Einzelpegel im Modellgebiet.

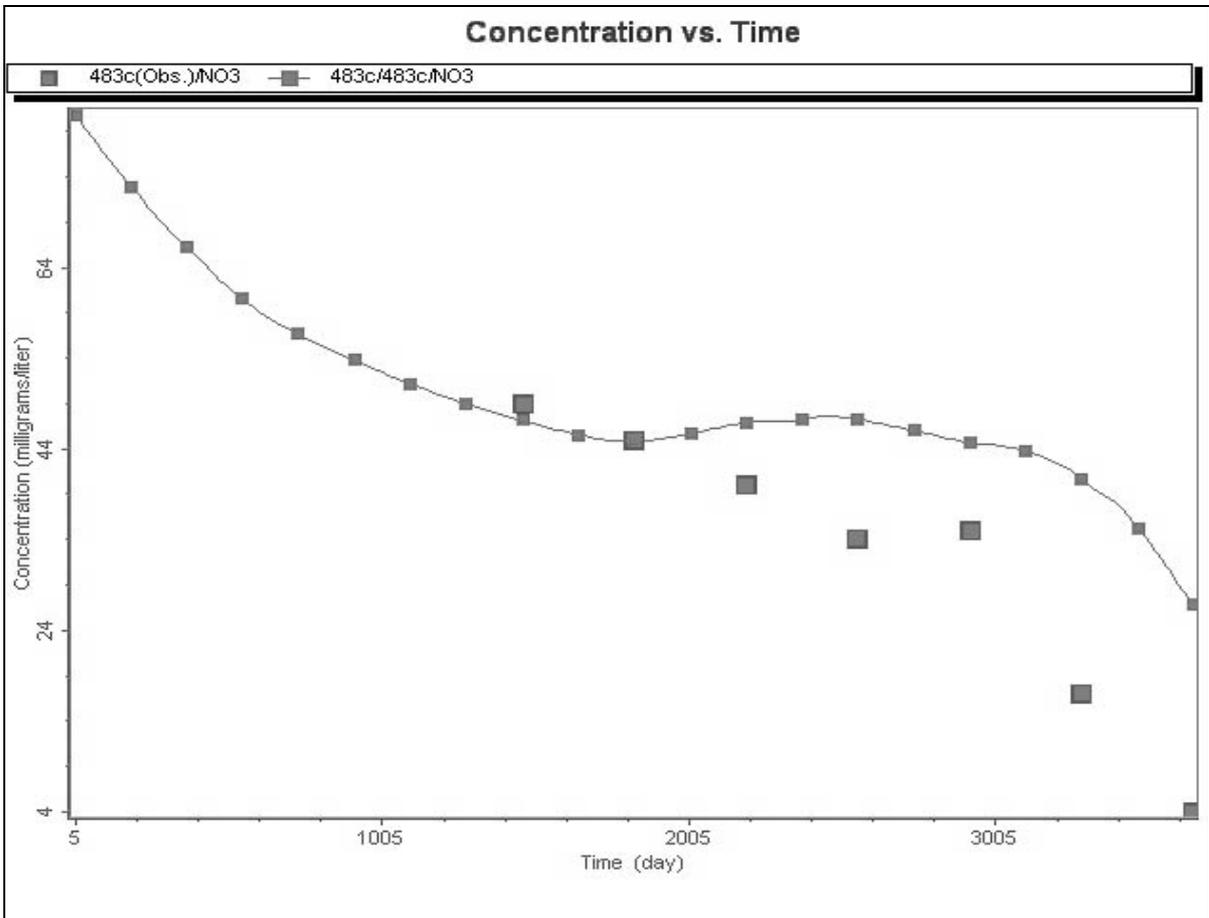
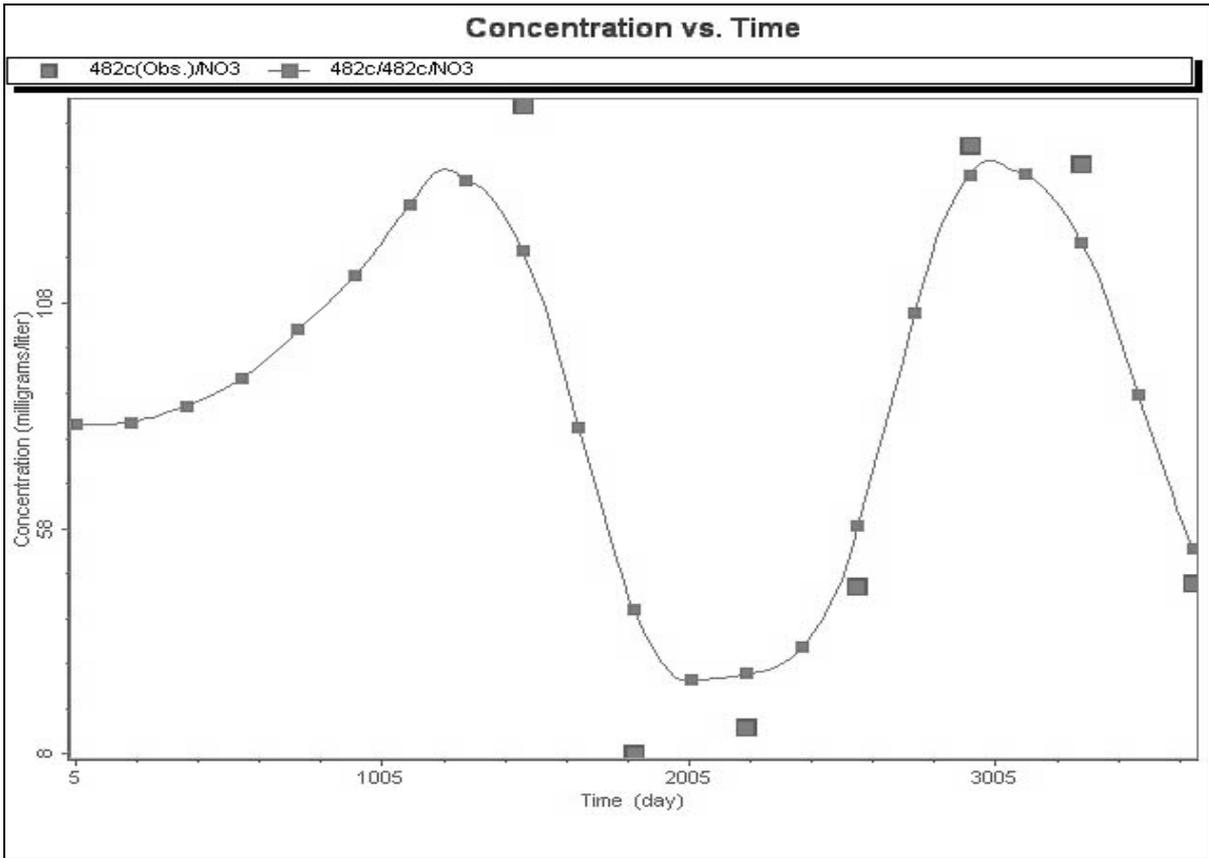
(Obs) und einfaches Kästchen = real gemessene Konzentrationen

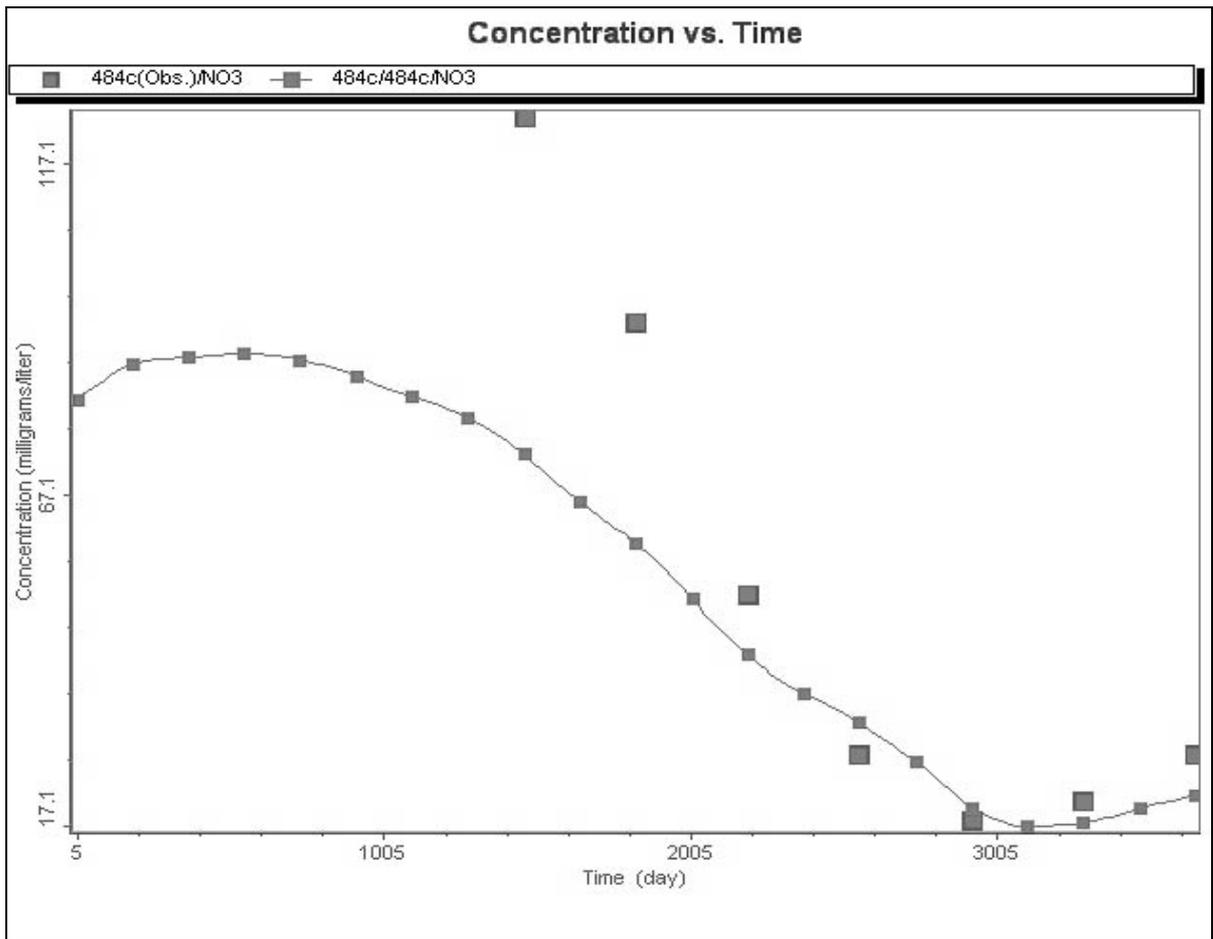
kleines Kästchen mit Linie = modellierte Konzentration











Anlage 5-10: Concentration-Recharge-Werte der flachen Pegel im Modellgebiet [mg/l].

Jahr	P 248	P 335	P 369	P 371	P 378	P 481	P 482	Mittelwert
89/90	55	120	140	130	170	85	100	114
90/91	120	170	150	170	200	100	130	149
91/92	80	240	250	145	250	110	160	176
92/93	60	370	400	130	280	260	0	214
93/94	40	280	180	110	290	160	20	154
94/95	100	250	160	145	250	210	40	165
95/96	100	200	140	140	240	200	170	170
96/97	90	150	130	120	220	160	140	144
97/98	100	120	100	110	200	130	30	113
98/99	80	100	100	100	150	100	20	93

Anlage 5-11: Eingabemaske des Feldsimulators.

FeldSimulator (von Lars Roith)

Datei

Flächenverteilung

Weizen (in Prozent)

Mais (in Prozent)

Grünfläche (in Prozent)

Feldgröße

Sektoren in X-Richtung

Sektoren in Y-Richtung

Achtung: Die optimale Feldgröße beträgt 181 x 181! Die maximal Anzahl an Einzelfeldern beträgt 32761! Für größere Felder ist eine Re-Implementierung erforderlich!

1; 2; 4; 5; 7; 8; 13; 14; 16; 18; 19; 21; 23; 24; 25; 26; 27; 28; 30; 31; 33; 36; 37; 38; 39; 40; 41; 43; 44; 45; 46; 47; 48; 51; 52; 55; 57; 59; 60;

Zeichnen

Löschen

Ergebnis speichern

Mais

Weizen

Grünfläche

Neu

Stop

Landschaft

Karte löschen!

Anlage 5-12: Concentration-Recharge-Werte der ersten 6 Felder im Feldsimulator.

[mg/l]

Jahr	Feld 1	Feld 2	Feld 3	Feld 4	Feld 5	Feld 6
89/90	69	114	114	69	114	114
90/91	89	149	149	149	89	149
91/92	176	90	176	247	176	176
92/93	129	214	214	300	129	214
93/94	93	93	154	216	154	154
94/95	99	165	165	165	99	165
95/96	102	170	170	102	170	170
96/97	202	144	144	144	144	202
97/98	68	158	68	113	68	158
98/99	93	93	56	130	130	93

Anlage 5-13: Concentration-Recharge-Werte bezogen auf die Pegel im Modellgebiet.

[mg/l]

Jahr	P 248	P 335	P 369	P 371	P 377	P 378	P 481	P 482	P 483	P 484
89/90	55	120	140	130	130	170	85	100	80	180
90/91	120	170	150	170	200	200	100	130	70	200
91/92	80	240	250	145	150	250	110	160	65	140
92/93	60	370	400	130	170	280	260	0	60	105
93/94	40	280	180	110	200	290	160	20	55	40
94/95	100	250	160	145	150	250	210	40	50	20
95/96	100	200	140	140	170	240	200	170	45	10
96/97	90	150	130	120	200	220	160	140	45	35
97/98	100	120	100	110	170	200	130	30	15	55
98/99	80	100	100	100	150	150	100	20	15	60

Anlage 5-14: Wahl des Lösungsverfahrens und Diskretisierung des Berechnungsnetzes für das Modellgebiet.

Eine ausführliche Beschreibung der in MT3D verfügbaren Lösungsverfahren der Transportgleichung ist in Anlage 5-5 enthalten. In Tabelle 1 sind die Vor- und Nachteile der einzelnen Lösungsverfahren zusammengefasst.

Tabelle 1: Gegenüberstellung der Lösungsverfahren [Beyer, 2001].

	FD explizit	FD implizit	TVD	MOC	MMOC	HMOC
Rechenaufwand	klein	klein	groß	groß	klein	klein
Numerische Dispersion bzw. Oszillation	groß	groß	klein	nicht vorhanden	groß	klein
Massenbilanz	exakt	exakt	exakt	nicht exakt	nicht exakt	nicht exakt
Zulässige Zeitschrittweite	klein	groß	klein	groß	groß	groß

Da es sich im Fall des Aquifers Thülsfeld um eine Stofftransportmodellierung mit sehr scharfen Konzentrationsfronten handelt, müssen numerische Dispersion und Oszillation möglichst ganz vermieden werden, weil es sonst zu einer künstlichen Aufweitung der Konzentrationspeaks käme. Diese Aufweitung würde sich negativ auf die Güte des Simulationsergebnisses auswirken. Aus diesem Grund müssen die einfachen Finite-Differenzen-Verfahren (FD) ausgeschlossen werden.

Um die numerische Dispersion und Oszillation ganz zu vermeiden, müsste das MOC-Verfahren verwendet werden. Da es aber bei nichtlinearen Abbaureaktionen, z.B. bei einer Reaktion 1. Ordnung, zu besonders starken Fehlern in der Massenbilanz der Charakteristiken-Verfahren kommt, muss das MOC- sowie das MMOC- und das HMOC-Verfahren im Falle Thülsfeld ebenfalls ausgeschlossen werden.

Somit muss die Wahl des Lösungsverfahrens auf das TVD-Verfahren fallen. Die geringe numerische Dispersion muss im Modell berücksichtigt werden.

Hinsichtlich der Diskretisierung des Berechnungsnetzes entsprechend den Ansprüchen der Transportmodellierung stellt sich die Frage nach der notwendigen Schrittweite. Insbesondere betrifft dies die horizontale Rastergröße von den Feldern des Bauern Högemann bis hin zu den Förderbrunnen.

Das Modellgebiet ist mit einer Fläche von zirka 5600 m mal 7200 m und einer vertikalen Ausdehnung von zirka 100 m relativ groß. Von einer pauschal verfeinerten Diskretisierung muss abgesehen werden, da durch jede weitere Schicht, Zeile oder Spalte die Anzahl der Zellen des Gitternetzes erhöht wird. Das TVD-Verfahren, welches angewendet werden muss, ist ein Finite-Differenzen-Verfahren höherer Ordnung, bei dem zur Berechnung einer Konzentration an einem beliebigen Knoten die Konzentrationen an drei weiteren Knoten benötigt werden. Dadurch ist der Rechenaufwand schon für relativ kleine Modelle hoch.

Durch die in Kapitel 4 getroffenen Vereinfachungen wurde der Nitratsatz bisher immer als ein tiefendifferenzierter Prozess behandelt, der sich bis in eine Tiefe von zirka 25 m uGOK verfolgen lässt. Es wurde festgestellt, dass sich Nitratfronten mit einem großen vertikalen Konzentrationsgradienten im Aquifer nach unten bewegen. Um die Dynamik dieser Konzentrationsfronten zu simulieren, bedarf es einer feinen vertikalen Diskretisierung. Da sich der Nitratreduktionsprozess auf die oberen 25 m des Aquifers beschränkt, müssen nur diese einer feineren Diskretisierung unterzogen werden. Eine zusätzliche Verfeinerung der Fläche ist nicht sinnvoll, da die jetzigen kleinsten Zellen eine Seitenlänge von 100 m mal 100 m besitzen. Um eine sinnvolle Simulation über die Fläche zu erreichen, müssten die Zellen um ein Vielfaches kleiner werden. Das ergäbe eine nicht zu verarbeitende Zellenzahl. Für flächige Betrachtungen sollten kleine Gebiete ausgewählt werden, die von besonderem Interesse sind, und in einem separaten Modell simuliert werden.

Um den Einfluss der Schichtmächtigkeit auf das Ergebnis der Simulation zu beurteilen, wurde eine Testsimulation an der SGM-Messstelle über einen Zeitraum von 10 Jahren durchgeführt. Die Oberfläche des Modells wurde im ersten Jahr durch die Grundwasserneubildung mit einer Nitratkonzentration von 300 mg/l belegt, in den folgenden 9 Jahren mit einer Konzentration von 100 mg/l. Das Grundwasser hatte eine Ausgangskonzentration von 100 mg/l Nitrat. Da die vertikalen Abstände der Messpunkte an der SGM-Messstelle 5 m betragen, müsste der Peak um die Zeit Δt versetzt und durch die Dispersion um die Konzentration Δc gedämpft durch die einzelnen Messpunkte wandern. Die hydrodynamische Dispersion im Modell wurde auf 0 m gesetzt. Somit ist die zu beobachtende Dämpfung einzig und allein auf die numerische Dispersion zurückzuführen.

Für die Testsimulation wurde der obere Teil des Modellgebietes jeweils durch 0,5 m, 1,0 m und 2,0 m mächtige Schichten diskretisiert. Das Ergebnis der Simulation mit einer Mächtigkeit von 1,0 m ist in Abbildung 1 dargestellt.

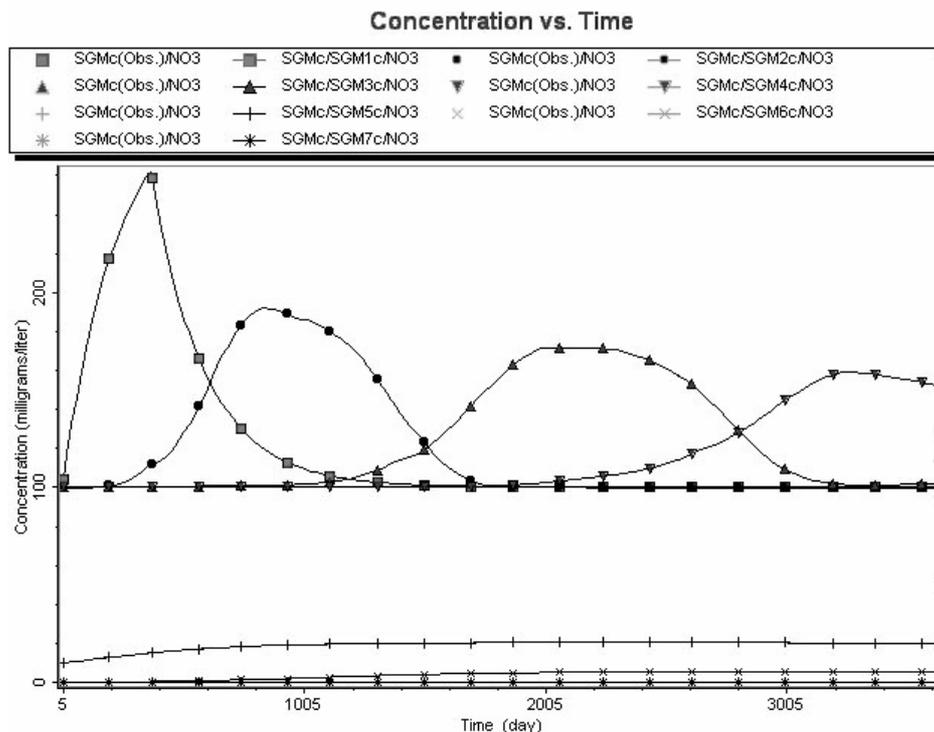


Abbildung 1: Vertikale Bewegung des Konzentrationspeaks am SGM.

Deutlich ist zu erkennen, wie der Konzentrationspeak in Abhängigkeit von der Zeit die Messpunkte 1 - 4 der SGM-Messstelle erreicht. Das Sickerwasser mit der Nitratkonzentration von 300 mg/l erreicht den Grundwasserspiegel und wird dort mit dem Grundwasser vermischt. Es stellt sich eine Mischungskonzentration ein. Am Messpunkt SGM 1 ist der Konzentrationspeak deutlich höher als bei den anderen Messpunkten, da er direkt an der Grundwasseroberfläche in der Vermischungszone liegt. Die Differenz der anderen Messpunkte aufgrund der numerischen Dispersion ist dagegen gleichmäßig. Nachdem der Peak in den Messpunkten erreicht wurde, geht die Konzentration wieder auf die Ausgangskonzentration zurück.

Zum Vergleich der drei durchgeführten Simulationen sind die Konzentrationsmaxima und die zeitliche Differenz zwischen den Konzentrationspeaks in Tabelle 2 dargestellt.

Tabelle 2: Änderung des Konzentrationspeaks in Abhängigkeit der Schichtdicke am SGM.

Schichtmächtigkeit [m]	SGM 1		SGM 2		SGM 3		SGM 4	
	Konzen- - tration [mg/l]	dt [a]	Konzen- tration [mg/l]	dt [a]	Konzen- tration [mg/l]	dt [a]	Konzen- tration [mg/l]	dt [a]
0,5	257	-	212	1,7	183	3,3	175	3,3
1,0	259	-	192	1,4	171	3,4	159	3,2
2,0	210	-	152	1,6	142	2,5	133	2,2

Zwischen den Simulationen der 0,5 m und 1,0 m mächtigen Schichten gibt es keine großen Unterschiede. Die Konzentrationen unterscheiden sich um ca. 15 mg/l aufgrund der etwas stärkeren numerischen Dispersion bei den 1,0 m mächtigen Schichten. Deutlich stärker sind dagegen die Konzentrationsunterschiede zu den 2,0 m mächtigen Schichten. Hier hat die numerische Dispersion einen deutlich höheren Einfluss.

Aufgrund dieser Sensitivitätsanalyse wurde die vertikale Diskretisierung des Modells auf 1,0 m mächtige Schichten festgelegt. Der deutlich höhere Rechenaufwand bei einer Mächtigkeit der Schichten von 0,5 m mit einem nicht wesentlich besseren Ergebnis wäre nicht gerechtfertigt.

Anlage 6-1: Die multikriterielle Entscheidungsmethode NAIADE - Beschreibung und Theorie.

NAIADE (Novel Approach to Imprecise Assessment and Decision Environments) ist eine multikriterielle Entscheidungshilfemethode, die auf „outranking“ basiert. Die Methode wurde vom Joint Research Centre, Institute for Systems, Informatics and Safety entwickelt. Anleitung und Beschreibung ist in (NAIADE, 1996) enthalten.

NAIADE kann zwei Arten von Informationen, die für den Entscheidungsträger wichtig sind, liefern. Die erste ist eine multikriterielle Analyse, die ein Ranking verschiedener Alternativen ergibt. Die zweite ist eine „equity analysis“, die Konflikte zwischen Interessensgruppen analysiert und mögliche Koalitionen zwischen ihnen aufzeigt (also die Suche nach dem kleinsten gemeinsamen Nenner).

1. Einflussmatrix

Für die entwickelten Kriterien und Alternativen muss der Nutzer einen Wert definieren, der das Kriterium mit der Alternative verbindet. Dieser Kriterienwert kann entweder eine Zahl sein, eine stochastische Funktion (Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion mit entsprechenden Parametern), unscharfe Anzahl („Fuzzy number“) (membership function) oder ein verbaler Ausdruck (gut, moderat (mittelmäßig), sehr schlecht). Die verbalen Ausdrücke werden wie unscharfe Mengen behandelt.

2. Semantische Distanzen

Die definierten Kriterienwerte für die unterschiedlichen Alternativen werden verglichen durch die numerische Berechnung der Distanzen. Diese Distanz kann als Differenz zwischen zwei Zahlen gesehen werden. In Fall einer stochastischen oder unscharfen Bewertung, wird der Ausdruck semantische Distanz benutzt. Die semantische Distanz misst die Distanz zwischen zwei Funktionen indem die Position und die Form der Funktionen berücksichtigt wird. Die Definition der Distanz ist:

Bei zwei gegebenen unscharfen Mengen $\mu_A(x)$ und $\mu_B(y)$ können zwei Funktionen definiert werden:

$$f(x)=k_1\mu_A(x) \text{ und } g(y)=k_2\mu_B(y)$$

wobei $f(x)$ und $g(y)$ zwei Funktionen sind die durch die Skalierung der Ordinaten von $\mu_A(x)$ und $\mu_B(y)$ durch k_1 und k_2 als:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} g(y)dy = 1$$

Die semantische Distanz $S_d(f(x), g(y))$ zwischen den zwei unscharfen Mengen wird folgendermaßen definiert:

$$\text{Wenn } f(x):X=[x_L, x_U] \text{ und } g(y):Y=[x_L', x_U']$$

(wobei die Mengen X und Y „non-bounded“ sein können), dann

$$S_d(f(x),g(y)) = \int_x \int_y \text{abs}(x - y) f(x) g(y) dx dy$$

3. Bevorzugte Beziehungen und Paarweiser Vergleich der Alternativen

Um die definierten Kriterienwerte für die unterschiedlichen Alternativen zu vergleichen erfolgt eine numerische Bewertung, die auf der semantischen Distanz beruht. Dieser Vergleich basiert auf bevorzugten Beziehungen, die durch den Nutzer für jedes Einzelkriterium formuliert werden.

Diese bevorzugten Beziehungen werden durch sechs Funktionen (viel besser, besser, ungefähr gleich, gleich, schlecht und viel schlechter) definiert, anhand derer ein Paarweiser Vergleich durchgeführt wird. Daraus wird ein Index der Glaubwürdigkeit/Zuverlässigkeit berechnet, der von 0 (nicht zuverlässig) bis 1 (definitiv zuverlässig) geht.

Um den Index der Zuverlässigkeit zu berechnen (er wird benötigt um das Ranking der Alternativen durchzuführen), muss der Nutzer einen numerischen Wert für die Distanz definieren, bei dem der Zuverlässigkeitsindex gleich 0,5 (Übergangspunkt) ist. Basierend auf einer der sechs bevorzugten Beziehungen, die für das jeweilige Kriterium definiert sind, berechnet NAIADE-Zuverlässigkeitsindizes für jedes Alternativenpaar und für jedes Kriterium.

4. Kriterienagggregation (Verdichtung)

Durch einen Verdichtungsalgorithmus der Zuverlässigkeitsindizes ($\mu(a,b)$) wird ein „bevorzugter Intensitätsindex“ berechnet. Dieser Index wird mit Hilfe des Parameters α , welcher die minimalen Anforderungen an die Größe des Zuverlässigkeitswertes ausdrückt, erzeugt. Nur die Kriterien, deren Indizes über der α -Schwelle liegen, werden bei der Verdichtung positiv gezählt.

$$\mu^*(a,b) = \frac{\sum_{m=1}^M \max(\mu(a,b)_m - \alpha, 0)}{\sum_{m=1}^M \text{abs}(\mu(a,b)_m - \alpha)}$$

Der Intensitätsindex $\mu^*(a,b)$ ist wie folgt charakterisiert:

$$0 \leq \mu^*(a,b) \leq 1$$

$$\mu^*(a,b) = 0 \text{ wenn kein } \mu^\theta(a,b) \text{ größer als } \alpha$$

$$\mu^*(a,b) = 1 \text{ wenn } \mu^\theta(a,b) \leq \alpha \forall_m \text{ und } \mu^\theta(a,b)_m > \alpha \text{ für mindestens ein Kriterium.}$$

Die Entropie wird eingeführt als Index zwischen 0 und 1. Sie gibt einen Anhaltspunkt über die Varianz des Zuverlässigkeitsindizes, der über der Schwelle α und etwa bei dem Übergangspunkt 0,5 (maximale Unsicherheit) liegt. Eine Entropie von 0 heißt, dass alle Kriterien ein exaktes Ergebnis liefern, während ein Wert von 1 einen systematischen Fehler infolge maximaler Unsicherheit bedeutet. Der bevorzugte Intensitätsindex $\mu^*(a,b)$ und die korrespondierende Entropie $H^*(a,b)$ wird verwendet um den Wahrheitsgrad (τ) folgender Behauptungen zu bewerten:

„Anhand der meisten Kriterien“ ist:

a besser als *b* ($\omega_{\text{besser}}(a,b)$)

a und *b* sind indifferent ($\omega_{\text{indifferent}}(a,b)$)

a ist schlechter als *b* ($\omega_{\text{schlechter}}(a,b)$)

Diese Behauptungen werden wie folgt berechnet:

$$\omega_{\text{besser}}(a,b) = \frac{\mu_{>>}(a,b) \wedge C_{>>}(a,b) + \mu_{>}(a,b) \wedge C_{>}(a,b)}{C_{>>}(a,b) + C_{>}(a,b)}$$

$$\omega_{\text{indifferent}}(a,b) = \frac{\mu_{=}(a,b) \wedge C_{=}(a,b) + \mu_{\equiv}(a,b) \wedge C_{\equiv}(a,b)}{C_{=}(a,b) + C_{\equiv}(a,b)}$$

$$\omega_{\text{schlechter}}(a,b) = \frac{\mu_{<<}(a,b) \wedge C_{<<}(a,b) + \mu_{<}(a,b) \wedge C_{<}(a,b)}{C_{<<}(a,b) + C_{<}(a,b)}$$

Der Operator (\wedge) ist ein mathematischer Ausdruck für den meist das Minimum verwendet wird. Der Minimums-Operator erzeugt keine Kompensation. Ein anderer Operator ist der Zimmermann-Zysno-Operator der verschiedene Grade der Kompensation γ (von 0...Minimalkompensation bis 1...Maximalkompensation) erlaubt, um eine Homogenisierung zwischen den Kriterien in der Aggregationsphase zu erzeugen. Es wird eine „Minimalkompensation“ vorgeschlagen, solange es um die Beziehungen zwischen den verschiedenen Kriterien-Familien (Umwelt, soziales, Ökonomie u.s.w.) geht. Bei Beziehungen zwischen den Kriterien aus nur einer Familie, z.B. ökonomische Kriterien, sollte ein höherer Grad der Kompensation genutzt werden.

5. Ranking der Alternativen

NAIADE ermöglicht ein Ranking der Alternativen basierend auf den so genannten bevorzugten Intensitätsindizes („preference intensity indexes“) und den dazugehörigen Entropien, in ähnlicher Weise wie mit dem Grad der Wahrheit. Das endgültige Ranking erfolgt durch zusammenführen von zwei separaten Rankings. Das eine basiert dabei auf den „besser und viel besser Beziehungen“ und das andere auf den „schlechter und viel schlechter Beziehungen“:

$$\Phi^+(a) = \frac{\sum_{n=1}^{N-1} (\mu_{>>}(a,n) \wedge C_{>>}(a,n) + \mu_{>}(a,n) \wedge C_{>}(a,n))}{\sum_{n=1}^{N-1} C_{>>}(a,n) + \sum_{n=1}^{N-1} C_{>}(a,n)}$$

$$\Phi^-(a) = \frac{\sum_{n=1}^{N-1} (\mu_{<<}(a,n) \wedge C_{<<}(a,n) + \mu_{<}(a,n) \wedge C_{<}(a,n))}{\sum_{n=1}^{N-1} C_{<<}(a,n) + \sum_{n=1}^{N-1} C_{<}(a,n)}$$

Zwei Alternativen sind nicht vergleichbar, wenn eine Aktion besser als eine andere Aktion im gleichen Ranking aber schlechter im anderen Ranking ist.

6. Gleichheitsanalyse

Die Gleichheitsanalyse basiert auf der Gleichheitsmatrix, die eine sprachliche Indikation der Beurteilung der verschiedenen Interessensgruppen hinsichtlich jeder alternative gibt. Die Gleichheitsmatrix wird außerdem verwendet, um die Ähnlichkeitsmatrix zwischen den verschiedenen Interessensgruppen zu berechnen. Die Ähnlichkeitsmatrix ermittelt einen Index $s_{i,j}$ für jedes Paar der Interessensgruppen i, j zur Ähnlichkeit der Beurteilung der vorgeschlagenen Alternativen. Der Index $s_{i,j}$ wird berechnet als $s_{i,j} = 1/(1+d_{i,j})$, wobei $d_{i,j}$ die Minowski-Distanz zwischen den Gruppen i und j ist. Diese wird wie folgt berechnet:

$$d_{i,j} = p \sqrt[p]{\sum_{k=1}^N (S_k(i,j))^p}$$

wobei $S_k(i,j)$ die semantische Distanz zwischen den Gruppen i und j in der Beurteilung der Alternative k ist. N ist die Anzahl der Alternativen und $p > 0$ ist der Parameter der Minowski-Distanz. Der Parameter für die Minowski-Distanz hat den Standardwert = 2.

Ein Dendrogramm der Koalitionsbildung wird durch eine Reihe mathematischer Reduktionen gebildet. Das Dendrogramm zeigt die mögliche Koalitionsbildung für sinkende Werte der Ähnlichkeit und dem Grad des Konflikts zwischen den Interessensgruppen. Es ist damit möglich zu sehen, welche der Alternativen leicht zu implementieren sind und welche nicht.

Lebenslauf

FRIDO REINSTORF

Persönliche Daten:

Geboren	01.06.1963
Staatsangehörigkeit	deutsch
Familienstand	verheiratet, zwei Kinder

Wissenschaftlicher Werdegang:

Sept. 1984 – Aug. 1989	HYDROLOGIESTUDIUM am Fachbereich Hydrologie und Meteorologie der Technischen Universität Dresden, Gesamtprädikat "gut"
Jul. 1989	DIPLOM IN HYDROLOGIE, Diplomnote „sehr gut“
Sep. 1989 – Aug. 1997	WISSENSCHAFTLICHER MITARBEITER am Institut für Hydrologie und Meteorologie der Technischen Universität Dresden
Aug. 1992 – Jun. 1994	EUROPÄISCHES INTEGRATIONSSTUDIUM UMWELTWISSENSCHAFTEN am Europäischen Institut für postgraduale Bildung in Dresden, Gesamtprädikat „gut“
Jun. 1994	EUROPÄISCHES DIPLOM IN UMWELTWISSENSCHAFTEN, Gesamtnote „gut“
Jul. 1995	PROMOTION zum Dr. rer. nat. an der Technischen Universität Dresden, Gesamturteil „sehr gut (magna cum laude)“
Mai 1997 – Dez. 2002	OBERASSISTENT am Institut für Grundwasserwirtschaft der Technischen Universität Dresden
Febr. 2003 –	WISSENSCHAFTLICHER MITARBEITER am Department Hydrogeologie des Helmholtz-Zentrums für Umweltforschung - UFZ Leipzig – Halle