



UFZ-Bericht

UFZ-UMWELTFORSCHUNGSZENTRUM LEIPZIG-HALLE GMBH

Nr. 23/2002

Dissertation

**Die Bedeutung der Heterogenität von
Boden, Klima und Landnutzung für die
Regionalisierung von Modellzustands-
größen**

Jens Dreyhaupt

Die Bedeutung der Heterogenität
von Boden, Klima und Landnutzung
für die Regionalisierung
von Modellzustandsgrößen

DISSERTATIONSARBEIT AUS DEM
Lehrstuhl für Bodenkunde und Bodengeographie
Abteilung Bodenphysik
Prof. Dr. B. Huwe
Universität Bayreuth

Archiv

vorgelegt von
JENS DREYHAUPT

Bayreuth, Juni 2002

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Biologie, Chemie und Geowissenschaften der Universität Bayreuth zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Naturwissenschaften genehmigten Dissertation.

Tag der Einreichung: 11. Juni 2002

Tag des wissenschaftlichen Kolloquiums: 03. Dezember 2002

Prüfungsausschuss:

Prof. Dr. B. Huwe

1. Gutachter

Dr. habil. U. Franko

2. Gutachter

Prof. Dr. M. Hauhs

Prof. Dr. R. Herrmann

PD Dr. habil. H. Lange

Vorsitzender

Vorbemerkungen

Diese Arbeit entstand im Rahmen des vom BMBF geförderten Projektes „Gebietswasserhaushalt und Stoffhaushalt in der Lössregion des Elbegebietes als Grundlage für die Durchsetzung einer nachhaltigen Landnutzung“ (FKZ: 0339586).

Die meisten Untersuchungen und Simulationsrechnungen sind am Umweltforschungszentrum Halle, in der Arbeitsgruppe Modellierung und Regionalisierung, durchgeführt worden. Wichtige Daten wurden dazu bereitgestellt:

- von der Arbeitsgruppe von Dr. Kurt-Jürgen Hülsbergen, Institut für Acker- und Pflanzenbau der Landwirtschaftlichen Fakultät der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (landwirtschaftliche Modellbetriebe),
- vom Deutschen Wetterdienst (Wetterdatensätze der Referenzklimastationen).
- von der Arbeitsgruppe Landschaftsökologie der Sektion Angewandte Landschaftsökologie des Umweltforschungszentrums Leipzig (Parameter der Bodenformen),

Die Zusammenarbeit der Arbeitsgruppen hat wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen.

Weiterhin wurden durch das Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH finanzielle Mittel bereitgestellt, welche eine Realisierung der vorliegenden Arbeit in diesem Umfang ermöglichten.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	I
Verzeichnis der Abbildungen im Text	III
Verzeichnis der Abbildungen im Anhang	VI
Verzeichnis der Tabellen im Text	VIII
Verzeichnis der Tabellen im Anhang	XI
Zusammenfassung	XIX
Summary	XXI
Symbolverzeichnis	XXIII
1 Einleitung	1
1.1 Einführung.....	1
1.2 Inhalt, Ziel und Aufbau der Arbeit.....	4
2 Grundlagen	5
2.1 Boden als Komponente von Ökosystemen.....	5
2.2 Behandlung von Heterogenitäten und Variabilitäten in der Modellierung.....	9
2.3 Metamodelle – ein kurzer Abriss	11
2.4 Bodenprozessmodell CANDY-Aufbau und Entwicklungsstand	13
2.5 Beschreibung der inhomogenen Wirklichkeit.....	25
3 Material und Methoden	29
3.1 Behandlung der Texturheterogenität.....	29
3.1.1 Pedotransferfunktionen als Werkzeug zur Modellierung der Texturheterogenität	29
3.1.2 Aufbau und Funktionsweise des Profilgenerators.....	31
3.1.2.1 Erzeugung von Texturpaaren	32
3.1.2.2 Generierung der Modellparameter	34
3.1.3 Validierung des Profilgenerators.....	49
3.2 Entwicklung von Metamodellen für das Bodenprozessmodell CANDY.....	51
3.2.1 Vorbetrachtungen.....	51
3.2.2 Generierung und Simulation der Szenarien	52
3.2.3 Auswertung der Szenarien	56

II

3.2.4 Entwicklung der Metamodelle.....	60
3.2.4.1 Herleitung der Regressionsansätze	60
3.2.4.2 Quantifizieren der Wirkung der Texturheterogenität	66
4 Exemplarische Entwicklung von Metamodellen	80
4.1 Datengrundlagen	80
4.1.1 Boden	82
4.1.2 Klima.....	83
4.1.3 Landnutzung	84
4.2 Generierung der Datenbasen, Simulationsauswertung und Quantifizieren der Texturheterogenität.....	85
4.3 Parametrisierung der Metamodelle	87
4.4 Vergleichende Betrachtung der Metamodelle der vier Gebiete.....	94
5 Validierung und Anwendung von Metamodellen	99
5.1 Validierung von Metamodellen am Einzugsgebiet der Parthe	99
5.2 Validierung von Metamodellen am Einzugsgebiet der mittleren Mulde.....	104
5.3 Anwendung von Metamodellen auf Gebiete im Bundesland Sachsen-Anhalt und im Freistaat Sachsen	106
5.3.1 Abschätzung der Stickstoffauswaschung aus Ackerflächen für die aktuelle landwirtschaftliche Betriebsstruktur.....	107
5.3.2 Einhaltung von Höchstwerten der Stickstoffauswaschung	109
6 Schlussbetrachtungen und Ausblick	111
6.1 Zusammenfassende Bewertung der Ergebnisse.....	111
6.2 Ausblick und Forschungsbedarf	115
7 Literaturverzeichnis	116
8 Anhang	128
Glossar	196

Verzeichnis der Abbildungen im Text

	Seite
Abb. 1: Stoffaustausch und Prozesse im System Boden - Pflanze - Atmosphäre (nach DYCK & PESCHKE (1995), verändert)	5
Abb. 2: Schema des landwirtschaftlichen Stickstoffkreislaufs (nach SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1992), verändert)	6
Abb. 3: Erscheinungsformen des Bodenwassers.....	6
Abb. 4: Eingangsdaten und Prozesse des Simulationsmodell CANDY.....	13
Abb. 5: Aufbau des Bodenprofils im Simulationsmodell CANDY	14
Abb. 6: Modularer Aufbau des Simulationssystems CANDY.....	15
Abb. 7: Prozesse für einen Simulationstag des Bodenwassermoduls in CANDY.....	17
Abb. 8: Prozesse für einen Simulationstag des Kohlenstoff-/ Stickstoff-Transformationsmoduls in CANDY	20
Abb. 9: Zusammenhang der einzelnen Fraktionen der organischen Substanz im Simulationsmodell CANDY (in FRANKO et al. (1995a)).....	21
Abb. 10: Beschreibung der Simulationsobjekte von CANDY durch die Klassen <i>Klima</i> , <i>Boden</i> und <i>Landnutzung</i>	24
Abb. 11: Anwendung des Profilgenerators	31
Abb. 12: Stützstellenwahl für Ton und Schluff zur deterministischen Beschreibung der Texturheterogenität eines Horizontes	33
Abb. 13: Algorithmus der Parametergenerierung	34

	Seite
Abb. 14: Teilschritte der Generierung von Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte des Bearbeitungshorizontes	37
Abb. 15: Empirische Verteilung der Stickstoffauswaschung	48
Abb. 16: Versuchsplan zur Erstellung von CANDY-Simulationsobjekten für ein Gebiet	55
Abb. 17: Schema des Auswertungsalgorithmus der Datenbasis für ein Gebiet.....	57
Abb. 18: Arbeitsschritte zur Entwicklung von Metamodellen	60
Abb. 19: Reihenfolge der Untersuchungen der Regressionsansätze	62
Abb. 20: Schrittfolge zum Quantifizieren des Fehlerterms	68
Abb. 21: Reduktion der Elemente in der Profilstichprobe P	71
Abb. 22: Behandlung des i-ten Horizontes	72
Abb. 23: Geografische Lage der behandelten Gebiete	81
Abb. 24: Wirkungsprinzip der Antriebsindikatoren in den vier Gebieten.....	94
Abb. 25: Geografische Lage des Parthegebietes.....	99
Abb. 26: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Nordsächsische Platten- und Hügelland) für Grundwasserneubildung im Parthegebiet.....	101
Abb. 27: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Nordsächsisches Platten- und Hügelland) für Stickstoffauswaschung im Parthegebiet.....	102
Abb. 28: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Nordsächsisches Platten- und Hügelland) für Nitratkonzentration im Parthegebiet	102

Seite

Abb. 29: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Mittelsächsisches Lösshügelland) für Grundwasserneubildung im Parthegebiet.....	103
Abb. 30: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Mittelsächsisches Lösshügelland) für Stickstoffauswaschung im Parthegebiet	103
Abb. 31: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Mittelsächsisches Lösshügelland) für Nitratkonzentration im Parthegebiet.....	104
Abb. 32: Vergleich der Grundwasserneubildungsraten: Referenzszenarien der Metamodelle für Grundwasserneubildung (GWB0) und der mit ABIMO ermittelten Zahlen (GWB_NR)	105
Abb. 33: Vergleich der Stickstoffausträge: Referenzszenarien der Metamodelle für Stickstoffauswaschung (N_AUS0) und umgerechnete Stickstofffrachten (N_AUS_NR)	106
Abb. 34: Jährliche Stickstoffauswaschung in den zur Lössregion gehörenden Gemeinden Sachsens und Sachsen-Anhalts	108
Abb. 35: Maximal tolerierbare Stickstoffsalden zur Begrenzung der jährlichen Stickstoffauswaschung auf höchstens 23 kg pro Hektar landwirtschaftlicher Nutzfläche	110

Verzeichnis der Abbildungen im Anhang

	Seite
Abb. A 8.1: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes)	168
Abb. A 8.2: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes)	168
Abb. A 8.3: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Nitratkonzentration des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes).....	168
Abb. A 8.4: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung des Mittelsächsischen Lösshügellandes).....	175
Abb. A 8.5: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Mittelsächsischen Lösshügellandes)	176
Abb. A 8.6: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Nitratkonzentration des Mittelsächsischen Lösshügellandes)	176
Abb. A 8.7: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung des Mulde-Lösshügellandes)	183
Abb. A 8.8: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Mulde-Lösshügellandes).....	184
Abb. A 8.9: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Nitratkonzentration des Mulde-Lösshügellandes)	184
Abb. A 8.10: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes)	191

Seite

Abb. A 8.11: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes).....	192
Abb. A 8.12: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Nitratkonzentration des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes).....	192
Abb. A 8.13: Zusammenhang von Stickstoffauswaschung und Stickstoffsaldo bei den CANDY-Prozesssimulationen des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes.....	193
Abb. A 8.14: Zusammenhang von Stickstoffauswaschung und Stickstoffsaldo bei den CANDY-Prozesssimulationen des Mittelsächsischen Lösshügellandes.....	193
Abb. A 8.15: Zusammenhang von Stickstoffauswaschung und Stickstoffsaldo bei den CANDY-Prozesssimulationen des Mulde-Lösshügellandes.....	194
Abb. A 8.16: Zusammenhang von Stickstoffauswaschung und Stickstoffsaldo bei den CANDY-Prozesssimulationen des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes.....	194

Verzeichnis der Tabellen im Text

	Seite
Tab. 1: Räumliche Skalen zur Modellierung des Wasser- und Stoff- transports (in Anlehnung an DYCK & PESCHKE (1995)).....	2
Tab. 2: Einteilung der Körnungsklassen in Kornfraktionen und Unterklassen nach DIN 4220	8
Tab. 3: Modelltypen und Merkmale nach BOSSEL (1994).....	9
Tab. 4: Beispiele der Beschreibung komplexer Vorgänge mit vereinfachten Modellen	11
Tab. 5: Beispiele für Anwendungen von Regressionsverfahren.....	12
Tab. 6: Maßnahmen und Attribute der Managementverarbeitung beim Simulationsmodell CANDY	16
Tab. 7: Beispiele für mögliche Ausprägungen von Bodenformen im Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebiet	26
Tab. 8: Untersuchungsergebnisse der Feinbodentextur des mitteldeutschen Löss-Schwarzerde-Standortes Bad Lauchstädt	27
Tab. 9: Untersuchungsergebnisse der Feinbodentextur der beiden Flächen S1 und S2 eines norddeutschen Parabraunerde- Braunerde-Standortes.....	27
Tab. 10: Ergebnisse einer Sensitivitätsanalyse: Variationen des CANDY-Parameters Feldkapazität der Horizonte Ap (FKAP1), Bv (FKAP2) und Sw (FKAP3)	28
Tab. 11: Bodenphysikalische Parameter der CANDY-Datenbank für die drei Horizonte Ap, Bt und Cc der Bodenform Lehm-Parabraunerde.....	32

Seite

Tab. 12:	Mittelwerte und Variationsbreiten von Ton- und Schluffgehalt sowie Texturgitter zur deterministischen Beschreibung der Texturheterogenität für das Beispiel der Lehm-Parabraunerde	33
Tab. 13:	Berechnung der CANDY-Modellparameter Feldkapazität (FKAP) und Permanentwelkepunkt (PWP) mit den Formeln (3.20) – (3.22) nach LIEBEROTH (1982)	47
Tab. 14:	Berechnung der CANDY-Modellparameter Feldkapazität (FKAP) und Permanentwelkepunkt (PWP) mit Formel (3.23) nach RAWLS & BRAKENSIEK (1985).....	47
Tab. 15:	Berechnung der CANDY-Modellparameter Feldkapazität (FKAP) und Permanentwelkepunkt (PWP) mit Formel (3.24) nach VERECKEN et al. (1989)	47
Tab. 16:	Datensätze zur Validierung des Profilgenerators: Charakteristika der Standorte und Datenquellen.....	49
Tab. 17:	Minimum, Maximum und Mittelwert der CANDY-Parameter in der generierten Profilstichprobe für Lehm-Parabraunerde	70
Tab. 18:	Größe der behandelten Gebiete.....	81
Tab. 19:	Repräsentative Bodenprofile der behandelten Gebiete.....	82
Tab. 20:	Repräsentative Klimastationen und Eigenschaften der Klimaelemente der Referenzwetterabläufe	83
Tab. 21:	Anzahl der Fruchtfolgen und Modellbetriebe in den Gebieten	84
Tab. 22:	Kennwerte der Szenarien mit ‚mittleren Eigenschaften‘	85
Tab. 23:	Bedingungen, unter denen der Profilgenerator in den vier Gebieten angewendet wurde	86
Tab. 24:	Zusammenfassung der Werte für ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K}	87

	Seite
Tab. 25: Kennwerte der Referenzszenarien für Grundwasserneubildung	89
Tab. 26: Kennwerte der Referenzszenarien für Stickstoffauswaschung	89
Tab. 27: Kennwerte der Referenzszenarien für Nitratkonzentration	89
Tab. 28: Zusammenfassung der Regressionskoeffizienten der Meta- modelle für Grundwasserneubildung der vier Gebiete	90
Tab. 29: Zusammenfassung der Regressionskoeffizienten der Metamodelle für Stickstoffauswaschung der vier Gebiete	90
Tab. 30: Zusammenfassung der Regressionskoeffizienten der Metamodelle für Nitratkonzentration der vier Gebiete.....	90
Tab. 31: Bestimmtheitsmaße (B_{GWB} , B_{N_AUS} und B_{NO3_K}) sowie empirische Reststreuungen (s^2_{GWB} , $s^2_{N_AUS}$ und $s^2_{NO3_K}$) der Regressionsfunktionen.....	91
Tab. 32: mittlere absolute Residuen der Regressionsfunktionen für Grundwasserneubildung (GWB), Stickstoffauswaschung (N_AUS) und Nitratkonzentration (NO3_K) der vier Gebiete.....	91
Tab. 33: Anwendungsbereiche der Metamodelle für Grundwasserneubildung	93
Tab. 34: Anwendungsbereiche der Metamodelle für Stickstoffauswaschung.....	93
Tab. 35: Anwendungsbereiche der Metamodelle für Nitratkonzentration	93
Tab. 36: Relative Fehleranteile der einzelnen Komponenten des Metamodells für Grundwasserneubildung.....	97
Tab. 37: Relative Fehleranteile der einzelnen Komponenten des Metamodells für Stickstoffauswaschung.....	97
Tab. 38: Relative Fehleranteile der einzelnen Komponenten des Metamodells für Nitratkonzentration	98

Verzeichnis der Tabellen im Anhang

	Seite
Tab. A 8.1: Bodenphysikalische Eigenschaften der Löss-Schwarzerde am Standort Bad Lauchstädt.....	135
Tab. A 8.2: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Bad Lauchstädt. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.....	135
Tab. A 8.3: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Bad Lauchstädt.....	136
Tab. A 8.4: Bodenphysikalische Eigenschaften des Bodentyps erodierte Braunerde am Standort Brandis	136
Tab. A 8.5: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Bodentyp erodierte Braunerde des Standortes Brandis. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.....	137
Tab. A 8.6: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Bodentyp erodierte Braunerde des Standortes Brandis.....	137
Tab. A 8.7: Bodenphysikalische Eigenschaften des Bodentyps Braunerde-Pseudogley am Standort Brandis	137
Tab. A 8.8: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Bodentyp Braunerde-Pseudogley des Standortes Brandis. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.....	138
Tab. A 8.9: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Bodentyp Braunerde-Pseudogley des Standortes Brandis.....	138
Tab. A 8.10: Bodenphysikalische Eigenschaften der Schwarzerde aus Löss über Lehm am Standort Magdeburg	139

	Seite
Tab. A 8.11: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Magdeburg. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.....	139
Tab. A 8.12: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf Schwarzerde aus Löss über Lehm des Standortes Magdeburg	140
Tab. A 8.13: Bodenphysikalische Eigenschaften der Sand-Rosterde am Standort Noitzsch	140
Tab. A 8.14: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Noitzsch. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.....	141
Tab. A 8.15: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf Sand-Rosterde des Standortes Noitzsch.....	141
Tab. A 8.16: Bodenphysikalische Eigenschaften der Tieflehm-Fahlerde am Standort Thyrow	142
Tab. A 8.17: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Thyrow. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA	142
Tab. A 8.18: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf Tieflehm-Fahlerde des Standortes Thyrow	143
Tab. A 8.19: Bodenphysikalische Eigenschaften der Auenlehm-(Norm-) Vega am Standort Torgau	144
Tab. A 8.20: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Torgau. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA	144
Tab. A 8.21: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf Auenlehm-(Norm-) Vega des Standortes Torgau	144

Seite

Tab. A 8.22:	Relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten des Feinanteilgehaltes (Spalte ‚FAT‘) für die Horizonte der getesteten Bodenformen.....	145
Tab. A 8.23:	Relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Trockenrohddichte (Spalte ‚TRD‘) und Trockensubstanzdichte (Spalte ‚TSD‘) bei Anwendung verschiedener Verfahren zur Bestimmung des Anteils vom inerten Kohlenstoff (Spalte ‚Meth. CINERT‘).....	146
Tab. A 8.24:	Relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Trockenrohddichte (Spalte ‚TRD‘) und Trockensubstanzdichte (Spalte ‚TSD‘) für die tieferen Horizonte der getesteten Bodenformen	147
Tab. A 8.25:	Bearbeitungshorizont: relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Feldkapazität (Spalte ‚FKAP‘) und Permanentwelkepunkt (Spalte ‚PWP‘) bei Anwendung verschiedener Verfahren zur Bestimmung des Anteils vom inerten Kohlenstoff.....	148
Tab. A 8.26:	Zweiter Horizont: relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Feldkapazität (Spalte ‚FKAP‘) und Permanentwelkepunkt (Spalte ‚PWP‘), bei Anwendung verschiedener Verfahren zur Bestimmung des Anteils vom inerten Kohlenstoff (Spalte ‚Meth. CINERT‘).....	149
Tab. A 8.27:	Tiefere Horizonte: relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Feldkapazität (Spalte ‚FKAP‘) und Permanentwelkepunkt (Spalte ‚PWP‘)	150
Tab. A 8.28:	Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Sand-Braunerde bei Simulation der Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung.....	152

	Seite
Tab. A 8.29: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Löss-Schwarzerde bei Simulation der Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung.....	153
Tab. A 8.30: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Staugley-Parabraunerde aus Sandlöss bei Simulation der Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung	153
Tab. A 8.31: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Parabraunerde-Haftnässestaugley aus Decklöss bei Simulation der Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung	154
Tab. A 8.32: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Sand-Braunerde bei Simulation der Fruchtfolge des ökologischen Landbaus	154
Tab. A 8.33: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Löss-Schwarzerde bei Simulation der Fruchtfolge des ökologischen Landbaus	155
Tab. A 8.34: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Staugley- Parabraunerde aus Sandlöss bei Simulation der Fruchtfolge des ökologischen Landbaus.....	155
Tab. A 8.35: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Parabraunerde-Haftnässestaugley aus Decklöss bei Simulation der Fruchtfolge des ökologischen Landbaus.....	156
Tab. A 8.36: Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes.....	157
Tab. A 8.37: Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile des Mittelsächsischen Lösshügellandes.....	158
Tab. A 8.38: Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile des Mulde-Lösshügellandes	158
Tab. A 8.39: Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes	159

Seite

Tab. A 8.40:	Erstellung der Datenbasis des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes: Faktorstufenkombinationen (FSK) von Standort- und Klimaheterogenität	161
Tab. A 8.41:	Nordsächsisches Platten- und Hügelland: statistische Kennzahlen der Modellgrößen	161
Tab. A 8.42:	Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland. Schritte 1 und 2 zur Prüfung der Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität.....	162
Tab. A 8.43:	Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland. Schritt 3: Test der wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung	163
Tab. A 8.44:	Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland. Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung.....	164
Tab. A 8.45:	Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland. Schritt 4: Test von Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung	164
Tab. A 8.46:	Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland. Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration.....	165
Tab. A 8.47:	Erstellung der Datenbasis des Mittelsächsischen Lösshügellandes: Faktorstufenkombinationen (FSK) von Standort- und Klimaheterogenität	169
Tab. A 8.48:	Mittelsächsisches Lösshügelland: statistische Kennzahlen der Modellgrößen	169

	Seite
Tab. A 8.49: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland. Schritte 1 und 2 zur Prüfung der Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	170
Tab. A 8.50: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland. Schritt 3: Test der wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung	171
Tab. A 8.51: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland. Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung	171
Tab. A 8.52: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland. Schritt 4: Test von Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung	172
Tab. A 8.53: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland. Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration	173
Tab. A 8.54: Erstellung der Datenbasis des Mulde-Lösshügellandes: Faktorstufenkombinationen (FSK) von Standort- und Klimaheterogenität	177
Tab. A 8.55: Mulde-Lösshügelland: statistische Kennzahlen der Modellgrößen	177
Tab. A 8.56: Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland. Schritte 1 und 2 zur Prüfung der Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	178
Tab. A 8.57: Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland. Schritt 3: Test der wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung	179

Seite

Tab. A 8.58:	Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland. Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung	180
Tab. A 8.59:	Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland. Schritt 4: Test von Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung	180
Tab. A 8.60:	Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland. Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoff- saldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration	181
Tab. A 8.61:	Erstellung der Datenbasis des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes: Faktorstufenkombinationen (FSK) von Standort- und Klimaheterogenität	185
Tab. A 8.62:	Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet: statistische Kennzahlen der Modellgrößen	185
Tab. A 8.63:	Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet. Schritte 1 und 2 zur Prüfung der Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	186
Tab. A 8.64:	Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet. Schritt 3: Test der wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung	186
Tab. A 8.65:	Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet. Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung	187
Tab. A 8.66:	Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet. Schritt 4: Test von Kohlenstoff- reproduktionsrate (CREP) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung	188

	Seite
Tab. A 8.67: Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet. Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration	189
Tab. A 8.68: Variationsbreiten und Mittelwerte der Jahresniederschläge (NIED) der Landkreise des Parthegebietes (Westsachsen).....	195
Tab. A 8.69: Minimum (Min.), Maximum (Max.) und Mittelwerte (MW) der Profilsommen der nutzbaren Feldkapazität (NFK) und wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) der Landkreise des Parthegebietes (Westsachsen)	195
Tab. A 8.70: Minimum (Min.), Maximum (Max.) und Mittelwerte (MW) von Kenngrößen der Landnutzung für die Landkreise des Parthegebietes (Westsachsen).....	195

Zusammenfassung

Zur Untersuchung agrarisch genutzter Ökosysteme werden für kleine Gebiete oft Prozessmodelle verwendet. Sie bilden Details des realen Systemverhaltens ab, benötigen aber spezifische Eingabeparameter. Ihre Anwendung in größeren Arealen bereitet daher oft Probleme. Einerseits sind die Eingabeparameter meist nicht verfügbar und müssen dann abgeleitet werden, was Unsicherheiten hervorruft. Andererseits besitzen physikalisch begründete Parameter in der Realität Spannweiten – sowohl räumlich (Heterogenität) als auch zeitlich (Variabilität). Eine Prozesssimulation mit solchen Eingangsdaten erzeugt Fehler in der Ausgabe des Modells. Für größere Gebiete ist es daher sinnvoll, anstelle der Prozesssimulation Metamodelle (vereinfachte Verfahren, effektive Modelle) zu verwenden, die das System ähnlich gut beschreiben wie das Prozessmodell. Mit solchen Verfahren können Zustandsgrößen von Prozessmodellen (Zustandsindikatoren) aus sensitiven, ‚einfach verfügbaren‘ Eingabegrößen (Antriebsindikatoren) bestimmt werden, wobei eine Berücksichtigung ihrer Unsicherheit auf einfache Art möglich ist.

In der vorliegenden Arbeit wurden Metamodelle für das Bodenprozessmodell CANDY entwickelt. Dieses beschreibt Transport- und Umsatzprozesse sowie Bodentemperatur- und Bodenwasserdynamik für ein Bodenprofil der ungesättigten Zone landwirtschaftlich genutzter Böden. Modelleingangsdaten sind Parameter zu Boden, Klima und Landnutzung, die in verschiedenen Datenbanken enthalten sind. Drei wichtige Zustandsgrößen sind Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration im Sickerwasser. Für diese wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit Metamodelle entwickelt.

Zu Beginn werden Methoden für die Behandlung von Unsicherheiten in der Modellierung dargestellt. Weiterhin erfolgt eine Beschreibung des aktuellen Entwicklungsstandes von CANDY, einschließlich einer Analyse der Unsicherheit seiner Eingangsdaten. Eine besondere Rolle spielt dabei die Texturheterogenität. Zu deren Behandlung wurde für das Bodenprozessmodell ein Simulationswerkzeug entwickelt, der Profilgenerator, welcher in einem ausführlichen Abschnitt beschrieben wird. Der Profilgenerator kann auf jedes homogene Profil der CANDY-Datenbank angewendet werden, Ergebnis ist eine Menge unabhängiger Bodensäulen. Jede von diesen repräsentiert das homogene Profil, unterscheidet sich von diesem jedoch geringfügig in den bodenphysikalischen Parametern. Eine wichtige Komponente des Profilgenerators sind Pedotransferfunktionen, die den Zusammenhang verschiedener Bodengrößen beschreiben. Durch Anwendung des Profilgenerators können für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration Fehlerterme ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} bestimmt werden. Diese beschreiben die Wirkung der Texturheterogenität auf die Zustandsindikatoren in Form einer maximalen relativen Änderung.

Anschließend wird die Entwicklung der Metamodelle für ein spezielles Gebiet ausführlich behandelt. Grundlage ist eine Datenbasis aus Szenarien und Simulationsergebnissen des Prozessmodells. Die Erstellung der Szenarien erfolgt nach einem trifaktoriellen Versuchsplan unter Einbeziehung der Heterogenität von Klima, Boden und Landnutzung als Faktoren. Mathematische Grundlage der Metamodelle sind lineare Regressionsfunktionen für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration. Diese Funktionen beschreiben relative

Änderungen der Zustandsindikatoren aus den relativen Variationen ihrer Antriebsindikatoren. Zusätzlich werden ein Fehlermaß der Regressionsfunktion (res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K}) sowie die Fehlerterme ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} integriert.

Im Rahmen dieser Arbeit erfolgte die Entwicklung von Metamodellen exemplarisch für vier Gebiete, die zur Lössregion des Elbegebietes gehören: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittelsächsisches Lösshügelland, Mulde-Lösshügelland (alle drei im Freistaat Sachsen) und Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet (Bundesland Sachsen-Anhalt).

Als Antriebsindikatoren für Grundwasserneubildung wurden in allen vier Gebieten die mittlere Jahresniederschlagssumme, die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität und der mittlere jährliche Bedeckungsgrad festgestellt. Den größten Einfluss besitzt die Jahresniederschlagssumme (Klima). Boden und Bewirtschaftung haben lediglich geringe Bedeutung.

Die Stickstoffauswaschung ist von mittlerem jährlichen Stickstoffsaldo, biologischer Aktivität und mittlerer jährlicher Kohlenstoffreproduktionsrate abhängig. Der Zustandsindikator wird am stärksten von der Landnutzung, ausgedrückt durch den Stickstoffsaldo beeinflusst. Die Wirkung der beiden anderen Indikatoren ist geringer.

Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration sind in den vier Gebieten die mittlere Jahresniederschlagssumme, der mittlere jährliche Bedeckungsgrad und der mittlere jährliche Stickstoffsaldo. In den Gebieten Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittelsächsisches Lösshügelland und Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet ist die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ein weiterer Antriebsindikator.

Anwendungen der Metamodelle erfolgten für die zur Lössregion des Elbegebietes gehörenden Gemeinden in Sachsen und Sachsen-Anhalt. Zum einem wurde die Stickstoffauswaschung für die aktuelle landwirtschaftliche Nutzung berechnet, zum anderen Bewirtschaftungsformen untersucht, die zur Reduktion der Stickstoffauswaschung führen.

Zur Realisierung dieser Anwendungen wurde ein DELPHI – Projekt entwickelt.

Das in dieser Arbeit entwickelte Verfahren ist auf andere Gebiete anwendbar. Es lässt sich auf weitere Zustandsindikatoren des Prozessmodells übertragen.

Summary

For the investigation of agroeco systems (agriculturally used ecology systems) for small catchments (areas), process models are often used. They illustrate details of the real systemic behaviour but need, however, specific input parameters. Therefore, their application in larger catchments often cause problems. On the one hand, the input parameters usually are not available and must be estimated, which causes uncertainties. On the other hand, physically justified parameters ranges in reality – both in space (heterogeneity) and in time (variability). A process simulation with such input parameters may produce errors of the model output. For larger catchments it is therefore more reasonable to use meta-models (simplify method, effective procedure) instead of process simulation, that characterise the real system in a similar way like the process model. With the help of such procedures variables of state of the process model (condition indicators) from sensitive and ,easy available‘ input data (drive indicators) can be determined. A consideration of their uncertainties is possible in an easy way.

In this thesis meta-models for the soil-process-model CANDY were developed. CANDY describes transport and turnover processes in the vadose zone of agricultural soils. Input data are parameters for soil physical properties, climate and management, which are available in different data bases. Three important variables of state are seepage, nitrate leaching and nitrate concentration in percolating water, for which in this thesis meta-models were developed.

This work starts with an exploration (overview) of various methods dealing with uncertainties in modelling. Furthermore, a description of the current level of development of the CANDY-model takes place, including an analysis of the uncertainty of its input data. A special role in this context plays the heterogeneity of soil texture. For the treatment of CANDY a simulation tool, the soil layer generator was created, which is introduced in a detailed section. This simulation tool can be applied to each homogeneous soil column of the CANDY soil data base, resulting in an ensemble of independent soil columns. Everyone of these columns represents the homogeneous soil column, but also differs from it slightly in soil physical properties. An important component of the soil layer generator are pedo-transfer functions which relate different soil properties with one another. By using the soil layer generator it is possible to calculate error terms for seepage, nitrate leaching and nitrate concentration in percolating water for maximum relative changes (ϵ_{GWB} , ϵ_{N_AUS} and ϵ_{NO3_K}). They describe the effects of heterogeneity of soil texture in the condition indicators.

The following section deals with the development of meta-models of larger catchments. The basis is a database containing scenarios and results of the process simulation. The creation of the scenarios is realised by a three-factorial plan of investigation including factors of different stages of heterogeneity of soil, climate and management. The mathematical basis of the meta-models are linear regression functions for seepage, nitrate leaching and nitrate concentration in percolating water. These functions describe relative changes of the condition indicators from the relative variations of their drive indicators. In addition, an error measure of the regression function (res_{GWB} , res_{N_AUS} and res_{NO3_K}) as well as the error terms (ϵ_{GWB} , ϵ_{N_AUS} and ϵ_{NO3_K}) was integrated.

In this thesis, meta-models for four catchments which belong to the loess region of Elbe river basin: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittelsächsisches Lösshügelland, Mulde-Lösshügelland (all three in the free state Saxony) and Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet (state Saxony-Anhalt) were developed.

As drive indicators for seepage in all four catchments the annual amount of precipitation (climate), the field moisture capacity (soil) and the annual amount of percentage of cover (management) were determined. The greatest influence shows the precipitation. Effects of soil and management only have less importance.

Nitrogen leaching in the four catchments depends on the annual nitrogen balance, the biological activity in topsoil and the annual amount of reproducing carbon in topsoil. The greatest influence has the nitrogen balance. Biological activity and reproducing carbon are not so important.

Drive indicators for nitrate concentration in percolating water are the annual amount of precipitation, the annual amount of percentage of cover and nitrogen balance. In the three catchments, Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittelsächsisches Lösshügelland and Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet, the field moisture capacity is an additional drive indicator.

Some practical applications took place for municipalities belonging to the loess region of Elbe river basin in Saxony and Saxony-Anhalt. The nitrogen leaching of the current farming practice was computed as well as different management systems which produce less nitrate leaching.

For a convenient use of such applications a DELPHI – project was developed.

The method developed in this thesis is applicable to other catchments in an easy way. It also can be transferred to further condition indicators of the CANDY-model.

Symbolverzeichnis

[*] bedeutet: Einheit ist vom konkreten Parameter abhängig.

Symbol	Bedeutung	Einheit
α	Anpassungsparameter der Pedotransferfunktion aus VERECKEN et al. (1989)	[-]
a	Konstante für Pedotransferfunktion aus RÜHLMANN (1998)	[-]
az_r	Anzahl der Residuen in der Datenbasis eines Gebietes (entspricht der Anzahl der Szenarien)	[-]
A	abschlammbare Teilchen	Masseprozent
Ai_GWB_0	Referenzwert des i-ten Antriebsindikators der Grundwasserneubildung im Metamodell, $i = 1, \dots, m1$	[*]
Ai_GWB_1	Zahlenwert des i-ten Antriebsindikators der Grundwasserneubildung im Metamodell, $i = 1, \dots, m1$	[*]
$Aj_N_AUS_0$	Referenzwert des j-ten Antriebsindikators der Stickstoffauswaschung im Metamodell $j = 1, \dots, m2$	[*]
$Aj_N_AUS_1$	Zahlenwert des j-ten Antriebsindikators der Stickstoffauswaschung im Metamodell $j = 1, \dots, m2$	[*]
$Ak_NO3_K_0$	Referenzwert des k-ten Antriebsindikators der Nitratkonzentration im Metamodell, $k = 1, \dots, m3$	[*]
$Ak_NO3_K_1$	Zahlenwert des k-ten Antriebsindikators der Nitratkonzentration im Metamodell, $k = 1, \dots, m3$	[*]
AET	aktuelle Evapotranspiration	mm/d
ANT_GWB	Summe der Wirkungen aller Antriebsindikatoren für Grundwasserneubildung im Metamodell	[-]
ANT_N_AUS	Summe der Wirkungen aller Antriebsindikatoren für Stickstoffauswaschung im Metamodell	[-]

Symbol	Bedeutung	Einheit
ANT_NO3_K	Summe der Wirkungen aller Antriebsindikatoren für Nitratkonzentration im Metamodell	[-]
AOS	aktive organische Substanz, Fraktion der organischen Substanz im Prozessmodell	[-]
b	Konstante für Pedotransferfunktion aus RÜHLMANN (1998)	[-]
\bar{b}	Element aus \mathbf{B}	
\mathbf{B}	Teilmenge des \mathbf{R}^q der ‚einfach verfügbaren‘ Bodendaten	[-]
$B_{GWB}, B_{N_AUS}, B_{NO3_K}$	Bestimmtheitsmaße der Regressionsfunktionen	[-]
β	Parameter für konvektiven Nitrattransport	[-]
BG	mittlerer jährlicher Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption	d/a
BG_0	Referenzwert des mittleren jährlichen Bedeckungsgrades in der Datenbasis eines Gebietes	d/a
c	Konstante für Pedotransferfunktion aus RÜHLMANN (1998)	[-]
C	Wärmekapazität der Bodenschicht	J/(cm ³ ·K)
C_{AOS}	Kohlenstoffmengen der AOS-Fraktionen	kg C/ha
C_{SOS}	Kohlenstoffmengen der SOS-Fraktionen	kg C/ha
C_{OPS}	Kohlenstoffmengen der OPS-Fraktionen	kg C/ha
$CINERT$	inert Kohlenstoff	
$CINERT\%$	prozentualer Masseanteil des inerten Kohlenstoffs	Masseprozent
C_i	Interzeptionskapazität des Pflanzenbestands	mm
$CORG$	organischer Kohlenstoff	[-]
$CORG\%$	prozentualer Masseanteil des organischen Kohlenstoffs	Masseprozent
C_{REP}	reproduktionswirksame Kohlenstoffmenge im Prozessmodell	kg C/(ha·d)
CREP	jährliche Kohlenstoffreproduktionsrate, Bezeichnung des Antriebsindikators im Metamodell	dt C/(ha·a)
CREP _{GWB}	Kohlenstoffreproduktionsrate des ‚mittleren Szenario‘ der Grundwasserneubildung	dt C/(ha·a)
CREP _{N_AUS}	Kohlenstoffreproduktionsrate des ‚mittleren Szenario‘ der Stickstoffauswaschung	dt C/(ha·a)

Symbol	Bedeutung	Einheit
$CREP_{NO3_K}$	Kohlenstoffreproduktionsrate des ‚mittleren Szenario‘ der Nitratkonzentration	dt C/(ha·a)
$CREP_0$	Referenzwert der Kohlenstoffreproduktionsrate in der Datenbasis eines Gebietes	dt C/(ha·a)
$CUMS\%$	prozentualer Masseanteil des umsetzbaren Kohlenstoffs	Masseprozent
$CUMS_m$	absolute Masse des umsetzbaren Kohlenstoffs	g
d	Anzahl der Abschnitte der Verteilungsfunktion bei der Latin-Hypercube-Methode	[-]
ΔT	Variationsbreite des Tongehaltes vom Feinboden	Masseprozent
ΔT_i	Variationsbreite des Tongehaltes vom Feinboden des i-ten Horizontes, $i = 1, \dots, n$	Masseprozent
ΔU	Variationsbreite des Schluffgehaltes vom Feinboden	Masseprozent
ΔU_i	Variationsbreite des Schluffgehaltes vom Feinboden des i-ten Horizontes, $i = 1, \dots, n$	Masseprozent
$DMIN$	Konstante für Pedotransferfunktion aus RÜHLMANN (1998)	[-]
η	Synthesekoeffizient	kg C/(ha·d)
ε_{GWB}	Fehlerterm zur Charakterisierung der Wirkung der Texturheterogenität auf Grundwasserneubildung im Prozessmodell	[-]
ε_{N_AUS}	Fehlerterm zur Charakterisierung der Wirkung der Texturheterogenität auf Stickstoffauswaschung im Prozessmodell	[-]
ε_{NO3_K}	Fehlerterm zur Charakterisierung der Wirkung der Texturheterogenität auf Nitratkonzentration im Prozessmodell	[-]
ε_{ZI}	Fehlerterm zur Charakterisierung der Wirkung der Texturheterogenität auf den Zustandsindikator ZI im Prozessmodell	[-]
$err_{GWB}, err_{N_AUS}, err_{NO3_K}$	Bezeichnung der zufälligen Fehler in den Regressionsmodellen für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration	[-]
E_L	relatives Bodenluftvolumen	[-]
E_p	relatives „pocket“-Volumen	[-]
h_{pl}	Bestandshöhe	cm

Symbol	Bedeutung	Einheit
f	allgemeine Pedotransferfunktion	[-]
$f1$	Proportionalitätsfaktor zur Beschreibung der Abhängigkeit des inerten Kohlenstoffgehaltes vom Feinanteil nach KÖRSCHENS (1980)	[-]
$f2$	Proportionalitätsfaktor zur Beschreibung der Änderung der Trockenrohdichte bei einer Änderung des organischen Kohlenstoffgehaltes von einem Prozent	[-]
F	Menge der Pedotransferfunktionen als Abbildung $\mathbf{R}^1 \rightarrow \mathbf{R}^1$	[-]
FAT	Feinanteilgehalt vom Feinboden	Masseprozent
FAT_i	Feinanteilgehalt vom Feinboden des i-ten Horizontes, $i = 1, \dots, n$	Masseprozent
$FKAP$	Feldkapazität	Volumenprozent
$FKAP_i$	Feldkapazität des i-ten Horizontes, $i = 1, \dots, n$	Volumenprozent
FM	Summe aus Fein- und Mittelschluff	Masseprozent
FM_i	Summe aus Fein- und Mittelschluff des i-ten Horizontes, $i = 1, \dots, n$	Masseprozent
FM_M	Mittelwert für Summe aus Fein- und Mittelschluff für einen homogenen Horizont	Masseprozent
FM_REL	Anteil des Fein- und Mittelschluffs am Gesamtschluff für einen homogenen Horizont	[-]
γ_{OPS}	C/N-Verhältnis in der OPS	[-]
γ_{AOS}	C/N-Verhältnis in der AOS	[-]
$GLOB$	Jahressumme der Globalstrahlung	MJ/m ²
GWB	mittlere jährliche Grundwasserneubildungsrate	mm/a
GWB_0	Referenzwert der Grundwasserneubildung im Metamodell	mm/a
GWB_1	Zahlenwert der Grundwasserneubildung im Metamodell	mm/a
GWB_i	aus Regressionsfunktion des Metamodells berechnete Grundwasserneubildung, $i = 1, \dots, az_r$	mm/a
GWB_M	Grundwasserneubildung des ‚mittleren Szenario‘	mm/a
GWB_{MIN}	Minimalwert der Grundwasserneubildung bei der Bestimmung von ε_{GWB}	mm/a

Symbol	Bedeutung	Einheit
GWB_{MIT}	Mittelwert der Grundwasserneubildung bei der Bestimmung von ε_{GWB}	mm/a
GWB_{MAX}	Maximalwert der Grundwasserneubildung bei der Bestimmung von ε_{GWB}	mm/a
\overline{GWB}_i	mit Prozessmodell simulierte Werte für Grundwasserneubildung in der Datenbasis, $i = 1, \dots, az_r$	mm/a
h_{pl}	Bestandshöhe	cm
i	Laufindex	[-]
j	Laufindex	[-]
k	Laufindex	[-]
K	Teilmenge des R^1 der ‚schwer zu beschaffenden‘ Bodendaten	[-]
k_{den}	Reaktionskoeffizient der Denitrifikation	kg N/(ha·d)
k_h	Ammoniumstickstoff-Konzentration, bei der die Hälfte der max. Nitrifizierungsgeschwindigkeit erreicht ist, Konstante: $k_h = 90$ ppm	ppm
k_a	Aktivierungskoeffizient (SOS → AOS)	kg C/(ha·d)
k_m	Reaktionskoeffizient für AOS-Abbau	kg C/(ha·d)
k_{ops}	Reaktionskoeffizient für OPS-Abbau	kg C/(ha·d)
k_s	Stabilisierungskoeffizient (AOS → SOS)	kg C/(ha·d)
K_s	gesättigte hydraulische Leitfähigkeit	cm/d
K_1	Konstante für Pedotransferfunktion aus RÜHLMANN (1998)	[-]
K_2	Konstante für Pedotransferfunktion aus RÜHLMANN (1998)	[-]
λ	Porengrößenindex	[-]
λ_{am}	Wärmeleitfähigkeit	J/(cm·s·K)
$LAMBDA$	Versickerungsparameter nach GLUGLA (1969)	1/(mm·d)
$LAMBDA_i$	Versickerungsparameter nach GLUGLA (1969) im i-ten Horizont, $i = 1, \dots, n$	1/(mm·d)
LT	Jahreslufttemperatur	°C
$m1$	Anzahl der Antriebsindikatoren der Grundwasserneubildung	[-]
$m2$	Anzahl der Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung	[-]
$m3$	Anzahl der Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration	[-]

Symbol	Bedeutung	Einheit
m_b	Mächtigkeit des Bearbeitungshorizontes	cm
m_{Ap}	Gesamtmasse von 1 ha Bearbeitungshorizont	g
M_A	Anpassungsparameter der Pedotransferfunktion aus VEREECKEN et al. (1989)	[-]
Min_ZI (Max_ZI)	Minimum (Maximum) des Zustandsindikators ZI in einer Menge S_i bei der Sensitivitätsanalyse, $i = 1, \dots, n$	[-]
n	Anzahl der Horizonte des Bodenprofils im Prozessmodell CANDY	[-]
N_A	Anpassungsparameter der Pedotransferfunktion aus VEREECKEN et al. (1989)	[-]
N_AUS	mittlere jährliche Stickstoffauswaschung	kg N/(ha·a)
N_AUS_0	Referenzwert der Stickstoffauswaschung im Metamodell	kg N/(ha·a)
N_AUS_i	Zahlenwert der Stickstoffauswaschung im Metamodell	kg N/(ha·a)
N_AUS_i	aus Regressionsfunktion des Metamodells berechnete Stickstoffauswaschung, $i = 1, \dots, az_r$	kg N/(ha·a)
N_AUS_M	Stickstoffauswaschung des ‚mittleren Szenario‘	kg N/(ha·a)
N_AUS_{MN}	Minimalwert der Stickstoffauswaschung bei der Bestimmung von ε_{N_AUS}	kg N/(ha·a)
N_AUS_{MT}	Mittelwert der Stickstoffauswaschung bei der Bestimmung von ε_{N_AUS}	kg N/(ha·a)
N_AUS_{MAX}	Maximalwert der Stickstoffauswaschung bei der Bestimmung von ε_{N_AUS}	kg N/(ha·a)
$\overline{N_AUS_i}$	mit Prozessmodell simulierte Werte für Stickstoffauswaschung der Datenbasis, $i = 1, \dots, az_r$	kg N/(ha·a)
N_SALDO	mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo	kg N/(ha·a)
N_SALDO_0	Referenzwert des mittleren jährlichen Stickstoffsaldo im Metamodell	kg N/(ha·a)
NFK	Summe der nutzbaren Feldkapazität im gesamten Bodenprofil	mm
NFK_{Mit}	Mittelwert der Summe der nutzbaren Feldkapazität im gesamten Bodenprofil der CANDY-Bodenprofile in der Datenbasis eines Gebietes	mm

Symbol	Bedeutung	Einheit
NFK_0	Referenzwert der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität im Metamodell	mm
NFKAP	nutzbare Feldkapazität, Differenz zwischen FKAP und PWP	Volumenprozent
NIED	Jahresniederschlagssumme	mm/a
NIED+	Jahresniederschlagssumme des Datensatzes mit erhöhten Tagesniederschlägen	mm/a
NIED-	Jahresniederschlagssumme des Datensatzes mit verringerten Tagesniederschlägen	mm/a
$NIED_0$	Referenzwert der Jahresniederschlagssumme im Metamodell	mm/a
$NIED_{Mit}$	Mittelwert der Jahresniederschlagssumme in der Datenbasis eines Gebietes	mm/a
N	Stickstoffvorrat	kg N/ha
N_{aut}	Stickstofffluss durch AOS-Autolyse	kg N/(ha·d)
N_{ERT}	Entzugsziel für Erntezeitpunkt im Prozessmodell	kg N/ha
NH_4_N	Ammoniumstickstoff-Konzentration	kg N/(ha·d)
N_{im}	Menge an immobilisierten Stickstoff	kg N/(ha·d)
N_{min}	Menge an mineralisierten Stickstoff	kg N/(ha·d)
N_{nit}	nitrifizierte Stickstoffmenge	kg N/(ha·d)
NO_3_{den}	denitrifizierte Stickstoffmenge	kg N/(ha·d)
NO_3_K	mittlere jährliche Nitratkonzentration	mg/l
$NO_3_K_0$	Referenzwert der Nitratkonzentration im Metamodell	mg/l
$NO_3_K_1$	Zahlenwert der Nitratkonzentration im Metamodell	mg/l
$NO_3_K_i$	aus Regressionsfunktion des Metamodells berechnete Nitratkonzentration, $i = 1, \dots, az_r$	mg/l
$NO_3_K_M$	Nitratkonzentration des ‚mittleren Szenario‘	mg/l
$NO_3_K_{MIN}$	Minimalwert der Nitratkonzentration bei der Bestimmung von $\varepsilon_{NO_3_K}$	mg/l
$NO_3_K_{MIT}$	Mittelwert der der Nitratkonzentration bei der Bestimmung von $\varepsilon_{NO_3_K}$	mg/l
$NO_3_K_{MAX}$	Maximalwert der Nitratkonzentration bei der Bestimmung von $\varepsilon_{NO_3_K}$	mg/l

XXX

Symbol	Bedeutung	Einheit
$\overline{NO3_K_i}$	mit Prozessmodell simulierte Werte für Nitratkonzentration der Datenbasis, $i = 1, \dots, az_r$	mg/l
$NO3_N$	Nitratmenge	kg N/(ha·d)
$N_{PFL}(t)$	am Tag t in Pflanzenbestand aufgenommene Stickstoffmenge	kg N/(ha·d)
OBS	organische Bodensubstanz	[-]
OBSM	Konstante für Pedotransferfunktion aus RÜHLMANN (1998)	[-]
OPS	organische Primärsubstanz	[-]
OS	organische Substanz	[-]
Ψ	Matrixpotential	hPa
Ψ_b	Luft Eintrittspunkt	hPa
p_min, p_max	Zahlenwerte von CANDY-Parameter der Bodenphysik bei der Bestimmung von ϵ_{GWB} , ϵ_{N_AUS} und ϵ_{NO3_K}	[*]
$p0, p1, p2$	Konstanten zur Berechnung der wirksamen Mineralisierungszeit WMZ nach FRANKO & OELSCHLÄGEL (1995)	[-]
P	Profilstichprobe: Menge von CANDY-Profilen, die mit dem Profilerzeuger erzeugt werden	[-]
P_NO3_N	in Bodenlösung transportierte Nitratmenge	kg N/(ha·d)
P	perkolierende Wassermenge	mm/d
Pi_GWB	Regressionskoeffizient des i-ten Antriebsindicators der Grundwasserneubildung, $i = 1, \dots, m1$	[-]
$P1_GWB$	Regressionskoeffizient für relative Änderung der Jahresniederschlagssumme	[-]
$P2_GWB$	Regressionskoeffizient für relative Änderung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	[-]
$P3_GWB$	Regressionskoeffizient für relative Änderung des Bedeckungsgrades	[-]
Pj_N_AUS	Regressionskoeffizient des j-ten Antriebsindicators der Stickstoffauswaschung, $j = 1, \dots, m2$	[-]
$P1_N_AUS$	Regressionskoeffizient für relative Änderung des mittleren jährlichen Stickstoffsaldo	[-]
$P2_N_AUS$	Regressionskoeffizient für relative Änderung der wirksamen Mineralisierungszeit	[-]

Symbol	Bedeutung	Einheit
$P3_N_AUS$	Regressionskoeffizient für relative Änderung der jährlichen Kohlenstoffreproduktionsrate	[-]
Pk_NO3_K	Regressionskoeffizient des k-ten Antriebsindicators der Nitratkonzentration, $k = 1, \dots, m3$	[-]
$P1_NO3_K$	Regressionskoeffizient für relative Änderung der Jahresniederschlagssumme	[-]
$P2_NO3_K$	Regressionskoeffizient für relative Änderung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	[-]
$P3_NO3_K$	Regressionskoeffizient für relative Änderung des Bedeckungsgrades	[-]
$P4_NO3_K$	Regressionskoeffizient für relative Änderung der jährlichen Kohlenstoffreproduktionsrate	[-]
P_MIN_ZI	CANDY-Parameter der Bodenphysik bei der Bestimmung von ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K}	[*]
P_MAX_ZI	CANDY-Parameter der Bodenphysik bei der Bestimmung von ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K}	[*]
PET	potentielle Evapotranspiration	mm/d
PTF	Pedotransferfunktion	[-]
PWP	Permanentwelkepunkt	Volumenprozent
PWP_i	Permanentwelkepunkt des i-ten Horizonts, $i = 1, \dots, n$	Volumenprozent
PV	Porenvolumen	[-]
q	Dimension des Raumes \mathbb{R}^q	[-]
Q	VAN'T HOFF-Konstante, $Q = 2,1$	
$res_{GWB}, res_{N_AUS}, res_{NO3_K}$	Fehlermaße: mittlere absolute Residuen der Regressionsansätze der Metamodelle	[-]
r_T	Temperatur-Responsefunktion	[-]
r_L	Durchlüftungs-Responsefunktion	[-]
r_w	Feuchte-Responsefunktion	[-]
R	Reduktionsfunktion: beschreibt Einfluss von Bodenfeuchte, -temperatur und -durchlüftung auf Mikroorganismenaktivität	[-]
\mathbb{R}^1	Menge der reellen Zahlen	[-]
\mathbb{R}^q	Menge der q-dimensionalen Vektoren mit reellen Komponenten	[-]
r_w^{den}	Feuchte-Responsefunktion für Denitrifikation	[-]
R_{den}	Reduktionsfunktion für Denitrifikation	[-]

Symbol	Bedeutung	Einheit
$s^2_{GWB}, s^2_{N_AUS}, s^2_{NO3_K}$	empirische Reststreuungen der Regressionsfunktionen	[-]
S_i	Mengen der Simulationsergebnisse der Varianten des Bezugsprofils des i-ten Horizontes bei Sensitivitätsanalyse, $i = 1, \dots, n$	[-]
S	Sandgehalt des Feinbodens	Masseprozent
S_{mod}	Modifizierter Sandgehalt: Kornfraktion von 50 bis 2000 μm , $S_{mod} := 100 - T - U + 0,0666 \cdot U$	Masseprozent
S_FAT	standortspezifischer Parameter (abhängig vom Feinanteil des Bodens) zur Berechnung von r_L	[-]
SOS	stabilisierte organische Substanz	[-]
St	Steilheit der Entzugskurve bei Stickstoff- aufnahme in Pflanzenbestand	[-]
t	Zeitpunkt, Zeitschritt	d bzw. 0,5 d
T	Tongehalt des Feinbodens	Masseprozent
T_i	Tongehalt des Feinbodens im i-ten Horizont, $i = 1, \dots, n$	Masseprozent
T_M	Mittelwert des Tongehaltes für einen homogenen Horizont	Masseprozent
$Temp$	Bodentemperatur	$^{\circ}\text{C}$ bzw. K
Θ	volumetrischer Wassergehalt	Volumenprozent
Θ_{krit}	kritischer Wert der Bodenfeuchte für Denitrifikation	Volumenprozent
Θ_r	Residualwassergehalt	Volumenprozent
Θ_s	Sättigungswassergehalt	Volumenprozent
TRD	Trockenrohddichte	g/cm^3
TRD_i	Trockenrohddichte des i-ten Horizonts, $i = 1, \dots, n$	g/cm^3
TRD_{REF}	Referenzwert der Trockenrohddichte	g/cm^3
TSD	Trockensubstanzdichte	g/cm^3
TSD_i	Trockensubstanzdichte des i-ten Horizonts, $i = 1, \dots, n$	g/cm^3
TSD_{REF}	Referenzwert der Trockensubstanzdichte	g/cm^3
U	Schluffgehalt des Feinbodens	Masseprozent
U_i	Schluffgehalt des Feinbodens des i-ten Horizonts, $i = 1, \dots, n$	Masseprozent

Symbol	Bedeutung	Einheit
U_M	Mittelwert des Schluffgehaltes für einen homogenen Horizont	Masseprozent
V	Volumen von 1 ha Bearbeitungshorizont, Konstante: $V = 3 \cdot 10^9 \text{ cm}^3$	cm^3
$V_{\text{veg}}_{\text{dau}}$	pflanzenspezifische Vegetationsdauer	d
v_{nit}	maximale Nitrifizierungsgeschwindigkeit, Konstante: $v_{\text{nit}} = 40 \text{ ppm/d R}(z, \text{Temp})$	ppm/d R(z, Temp)
WMZ	wirksame Mineralisierungszeit	d/a
WMZ_0	Referenzwert der wirksamen Mineralisierungszeit im Metamodell	d/a
z	Ortskoordinate der Bodentiefe	dm
ZI	Zustandsindikator, Bezeichnung für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung oder Nitratkonzentration bei der Bestimmung von ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K}	[-]
ZI_{MAX} , ZI_{MIN} , ZI_{MT}	Maximal-, Minimal- und Mittelwert des Zustandsindikator ZI bei der Bestimmung von ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K}	[*]
$ZI_{xxx}_i^+$ ($ZI_{xxx}_i^-$)	Simulationswert des Zustandsindikators ZI bei Belegung des bodenphysikalischen Parameters xxx des i-ten Horizonts ($i = 1, \dots, n$) vom Bezugsprofil der Sensitivitätsanalyse mit maximalem (minimalem) Wert von xxx in Profilstichprobe P xxx bezeichnet einen der bodenphysikalischen Parameter des Prozessmodells	[*]

1 Einleitung

1.1 Einführung

Die Problematik der nachhaltigen Nutzung natürlicher Ressourcen ist ein Schwerpunkt in der gegenwärtigen Wissenschaft und Forschung. Große Anstrengungen werden unternommen, um der ohnehin schon starken Verschmutzung und Zerstörung des Lebensraumes der Menschen Einhalt zu gebieten. Wichtige Ziele sind beispielsweise Reinhaltung von Luft und Wasser, Beseitigung von Abfällen, Schutz vor Lärm oder die langfristige Sicherung der Trinkwasserqualität (HEINRICH & HERGT 1998). Gerade letzteres ist eine Herausforderung, haben doch Nährstoffakkumulation im Boden und Einträge in Gewässer ein hohes Niveau erreicht (BASTIAN & SCHREIBER 1994). Insbesondere Stickstoff ist ein Problem: beispielsweise machen derzeit zwei Drittel aller anthropogenen Stoffeinträge in die Nordsee Stickstoffzufuhren aus (UMWELTBUNDESAMT 1994). Da als Hauptverursacher der Stickstoffbilanzüberschüsse die Landwirtschaft gilt (ISERMANN 1990), ist in dem Zusammenhang die Untersuchung agrarisch genutzter Ökosysteme von besonderem Interesse.

Zahlreiche Arbeiten waren notwendig, um das Zusammenspiel der anthropogenen Einflüsse mit den komplexen Vorgängen im Boden besser zu verstehen. Der Einsatz von Simulationsmodellen und die Verwendung leistungsfähiger Rechner hat sich hierfür als sehr nützlich erwiesen, beispielsweise können innerhalb kurzer Zeit die Wirkungen verschiedener Landnutzungsvarianten auf das Nährstoffangebot im Boden oder das Langzeitverhalten von Agrarökosystemen untersucht werden. Ein weiterer Vorteil der Modellanwendung ist die im Gegensatz zum Versuch am realen System risikolose Simulation, die zudem meist nur relativ geringe Kosten verursacht (BOSEL 1994). Nicht zuletzt deswegen hat sich die Computersimulation als Methode zur vorausschauenden oder retrospektiven Nachbildung des zeitlichen Ablaufes von Vorgängen zu einem bedeutenden Werkzeug für den Erkenntnisprozess entwickelt (BOSEL 1994).

Grundlage hierfür sind Modelle, mit denen in einem begrenzten Kontext ein Teil der Realität abgebildet wird (BOSEL 1994, LESER 1991). Als Abstraktion realer Objekte werden Simulationsobjekte gebildet. Das Verhalten des realen Systems wird durch Simulationen mit dem Modellsystem untersucht.

Wichtige Begriffe in der Modelltheorie sind *Modelleingangsgrößen* (Vorgabegrößen, Modelleingangsparameter, -daten) und *Zustandsgrößen* (Modellzustandsgrößen, Modellzustandsparameter). Während mit Letzteren Speichergrößen gemeint sind, „in denen sich der gegenwärtige Zustand eines Systems auch als Ausdruck seiner Geschichte widerspiegelt“ (BOSEL 1994: 93), werden mit den Modelleingangsgrößen die Systemelemente bezeichnet, „die auf das System einwirken, aber von diesem nicht beeinflusst und verändert werden können“ (BOSEL 1994: 93). Die Aufbereitung von Modelleingangsgrößen wird im Folgenden als *Präprozessing* bezeichnet. Je nach Modellzweck stehen verschiedene Größen im Mittelpunkt der Untersuchungen. In Abhängigkeit davon erfolgt eine Betrachtung von Teilmengen der Zustandsgrößen, welche als *Ausgabegrößen* (Modellausgabegrößen, -daten, -parameter) bezeichnet werden.

Ein Problem der Modellierung besteht darin, dass Modelle nur eine Vereinfachung der Wirklichkeit sind. Während Größen realer Systeme oft Variationsbreiten besitzen (Inhomogenität der Wirklichkeit), werden Modellgrößen meist mit festen Zahlen beschrieben (Homogenität im Modell). Davon ausgehend sind Kenntnisse über potentielle Variationsbreiten der Ausgabegrößen von großer Bedeutung, da Simulationsergebnisse dem Anwender häufig als Mittel zur Entscheidungsunterstützung dienen. So auch in den Geowissenschaften, dem Gebiet, in welchem die vorliegende Arbeit einzuordnen ist.

Hier werden Modelle auf verschiedenen Skalenebenen angewendet, um beispielsweise potentielle Gefährdungen des Grundwassers durch Stoffeinträge aus agrarisch genutzten Ökosystemen abzuschätzen. Mit dem Begriff der Skala wird dabei festgelegt, „in welchen Größenordnungen (zeitlich und räumlich) unterschiedliche physikalisch-chemische Prozesse von Bedeutung sind“ (in Anlehnung an NIESCHULZ (1997: 14)). Bei einem Skalenübergang werden einige Prozesse mehr, andere weniger relevant. Eine Skaleneinteilung kann nach verschiedenen Ansätzen erfolgen, zum Beispiel nach TIETJE (1993) (verändert in NIESCHULZ (1997)) oder BECKER (1995). Häufig werden in verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen gleiche Bezeichnungen für unterschiedliche Größenordnungen verwendet. In der vorliegenden Arbeit erfolgt die *räumliche* Einteilung in Anlehnung an DYCK & PESCHKE (1995) (Tabelle 1), wobei, im Gegensatz zur Literaturquelle, die Skalen scharf abgegrenzt sind. Die Verwendung der Skalenbegriffe *Mikro*, *Meso* und *Makro* in den folgenden Kapiteln ist auf die Angaben in der Tabelle bezogen.

Tab. 1: Räumliche Skalen zur Modellierung des Wasser- und Stofftransports (in Anlehnung an DYCK & PESCHKE (1995)).

Skala	charakteristische Merkmale	Längen/ Flächen
Mikro	elementare Flüsse, räumliche Homogenität: z.B. Lysimeter, Parzellen, Schläge, Standorte, Hydrotope, Teilflächen von Einzugsgebieten	1m bis 200 m/ 1 m ² bis 40.000
Meso	komplexe Flüsse, räumliche Homogenität: z. B. Grundwasserleiter, Teile von Flusseinzugsgebieten, Versorgungsgebiete	200 m bis 50 km/ 4 ha bis 2.500 km ²
Makro	komplexe regionale bzw. globale Flüsse, räumliche Heterogenität: z. B. Einzugsgebiete großer Flüsse, Raster für Klimamodelle, Kontinente	50 km bis 1.000 km/ 2.500 km ² bis 1.000.000 km ²

Als *zeitliche* Skala wird für den Mikrobereich (Prozessmodell) eine Einteilung in Tagesschritte (bzw. Halbtageesschritte) zugrunde gelegt. Auf der Meso- und Makroskala werden Systemgrößen zu Jahreswerten aggregiert, bzw. Prozesse auf Jahresniveau betrachtet.

Je nach Modellzweck und Skala werden unterschiedliche Konzepte angewendet. Im Mikrobereich dominieren prozessorientierte Modelle, welche für kleine Gebiete (sog. Schläge) sehr genaue Ergebnisse liefern. Auf Meso- und Makroskala wird häufig mit zum Teil stark vereinfachten Modellen gearbeitet, die zwar leicht anwendbar sind, aber nur grobe Ergebnisse liefern können. Häufig besteht daher der Bedarf, Prozessmodelle für Simulationen größerer Gebiete einzusetzen. Ein Weg dazu ist ihre räumliche Zerlegung in kleinere Teilgebiete der Mikroskala.

Neben hohem Rechenaufwand bereitet hier vor allem die Bereitstellung aller erforderlichen Eingangsdaten Schwierigkeiten, da diese oft nur in skalenabhängig aggregierter Form vorliegen. Die Aufbereitung und Disaggregation dieser Daten erzeugt Unsicherheiten, welche im allgemeinen unbekannt sind. Da eine Simulation mit derartigen Daten Fehler in den Ausgabegrößen hervorruft, erscheint es sinnvoll, für meso- und makroskalige Gebiete stark vereinfachte Verfahren (*Metamodelle*, effektive Verfahren) anzuwenden, die das System ähnlich gut beschreiben wie prozessorientierte Simulationsmodelle. Metamodelle gestatten es, Ausgabegrößen von Prozessmodellen aus leicht verfügbaren, sensitiven Modellgrößen zu bestimmen, was eine einfache Anwendbarkeit auf Meso- und Makroskala gewährleistet. Die Heterogenität eines Gebietes wird über die Variation der Modellgrößen beschrieben. Neben dem Wegfall der fehlerbehafteten Aufbereitung von Modelleingangsdaten bietet die Anwendung vereinfachter Verfahren Zeitvorteile. In der vorliegenden Arbeit wird für Systemgrößen der Begriff *Indikator* verwendet. Damit werden Größen bezeichnet, deren Quantität eine Einschätzung von Systemzustand und -verhalten ermöglicht. *Zustandsindikatoren* sind Modellzustandsgrößen, welche für die aktuell zu untersuchende Fragestellung relevant sind. Als *Antriebsindikatoren* werden Modellgrößen bezeichnet, die sensitive Wirkung auf Zustandsindikatoren besitzen. Ein wichtiges Kriterium ist die einfache Verfügbarkeit der Antriebsindikatoren, um eine problemlose praktische Anwendbarkeit der Metamodelle zu gewährleisten.

Wegen der leichten Handhabung auf verschiedenen Skalen kann eine Entwicklung von Metamodellen als Beitrag zur Regionalisierung angesehen werden, die im bodenphysikalisch-hydrologischen Kontext in Anlehnung an NIESCHULZ et al. (1995) und NIESCHULZ (1997: 13) durch die drei folgenden, sie definierenden, Aufgaben festgelegt ist.

- mathematische Beschreibung räumlicher und zeitlicher Entitäten,
- Beschreibung des Skalenüberganges für diese Entitäten (universelle Anwendbarkeit),
- Übertragung räumlicher und zeitlicher Entitäten von einem geografischen Ort zu einem anderen (Forderung der Allgemeingültigkeit).

Hierbei wird oft die Beschreibung des Skalenüberganges als ‚eigentliche‘ Regionalisierung betrachtet. Unter Entitäten werden verstanden:

- *Größen*, die berechnet oder gemessen werden (z. B. Jahresniederschlag, Bodenfeuchte, Bodentemperatur),
- *Berechnungsverfahren* für Größen, d. h. Modelle bzw. Modellansätze (z. B. Wärmeleitungsgleichung, Gleichungen für Umsatz der organischen Substanz) und
- *Parameter* bzw. *Parameterfunktionen*, welche für die Berechnungsverfahren benötigt werden (z. B. Reaktionskoeffizienten, Körnung).

1.2 Inhalt, Ziel und Aufbau der Arbeit

In der vorliegenden Arbeit wird ein Verfahren zur Entwicklung von Metamodellen der Zustandsindikatoren „mittlere Grundwasserneubildung“, „mittlere Stickstoffauswaschung aus der ungesättigten Zone“ und „mittlere Nitratkonzentration im Sickerwasser“ für meso- und makroskalige Anwendungen des Bodenprozessmodells CANDY beschrieben. Die Betrachtung der drei Indikatoren erfolgt auf der Ebene von Jahreswerten. Der hier verwendete Begriff „Grundwasserneubildung“ wird als mittlere jährliche Sickerwassermenge aus der ungesättigten Bodenzone verstanden. Die genannten Modellgrößen werden in der vorliegenden Arbeit zur Vereinfachung mit „*Grundwasserneubildung*“, „*Stickstoffauswaschung*“ und „*Nitratkonzentration*“ bezeichnet.

Es werden zunächst sensitive Größen des Prozessmodells als Antriebsindikatoren für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration bestimmt und anschließend deren Wirkung auf diese Zustandsindikatoren quantifiziert. Mathematische Grundlage der Metamodelle sind multiple lineare Regressionsgleichungen. Die Entwicklung der Methode erfolgt auf Basis von CANDY-Prozesssimulationen und Anwendung verschiedener Verfahren der multivariaten Statistik.

Nach dieser Beschreibung im einführenden Kapitel erfolgt in Kapitel 2 die Darstellung wichtiger Grundlagen. Neben dem komplexen System Boden-Pflanze-Atmosphäre, von welchem ein Ausschnitt mit dem Bodenprozessmodell CANDY abgebildet ist, wird auf die Behandlung von Unsicherheiten in der Modellierung sowie auf Metamodelle eingegangen. Es erfolgt eine Charakterisierung des aktuellen Entwicklungsstandes von CANDY, einschließlich einer Analyse der Unsicherheit wichtiger Modelleingangsgrößen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde für das Bodenprozessmodell zur Behandlung der Texturheterogenität ein Simulationswerkzeug entwickelt, welches in Kapitel 3 detailliert behandelt wird. Weiterhin ist in dem Kapitel das Verfahren zur Entwicklung der Metamodelle dargestellt. In Kapitel 4 sind Ergebnisse der exemplarischen Anwendung des Verfahrens auf die vier Gebiete

- Nordsächsisches Platten- und Hügelland,
- Mittelsächsisches Lösshügelland,
- Mulde-Lösshügelland und
- Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet

angegeben. Für jedes der Gebiete werden vereinfachte Berechnungsverfahren für die drei Zustandsindikatoren hergeleitet. In Kapitel 5 erfolgt eine Validierung der Metamodelle an verschiedenen Datensätzen sowie die Darstellung einiger praktischer Anwendungen.

Wichtige in dieser Arbeit verwendete Begriffe sind im Glossar kurz erläutert.

2 Grundlagen

2.1 Boden als Komponente von Ökosystemen

Böden sind Naturkörper im Überlagerungsbereich von Atmosphäre, Hydrosphäre, Lithosphäre und Biosphäre mit eigener Organisation und spezifischen Systemeigenschaften. Insbesondere in Agrar- und Forstökosystemen besitzen Böden als Pflanzenstandorte spezifische Bedeutung. Einerseits hängen Pflanzenwachstum sowie Kulturpflanzenenertrag stark von physikalischen, chemischen und biologischen Eigenschaften wie Durchwurzelbarkeit, Wasserspeichervermögen, Nährelementevorrat und -umsatz ab. Andererseits wird der Boden auch von der Vegetation beeinflusst, Beispiele sind Entzug von Nährelementen und Wasser, Änderungen des Bodengefüges oder die Zufuhr organischer Substanz. Ausführliche Informationen zu dieser Problematik geben beispielsweise HARTGE & HORN (1991),ILLEL (1998), KUNDLER (1989) und LIEBEROTH (1982). Das System Boden - Pflanze - Atmosphäre ist allerdings zu komplex, um alle Vorgänge zu erfassen. Ein vereinfachtes Schema dessen zeigt Abbildung 1.

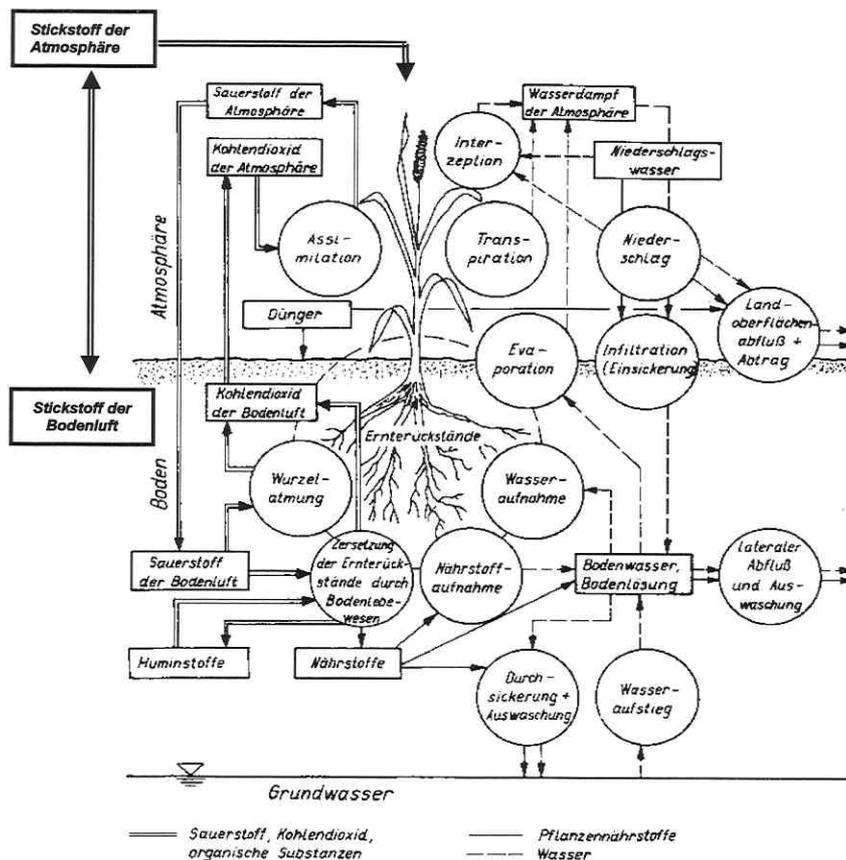


Abb. 1: Stoffaustausch und Prozesse im System Boden - Pflanze - Atmosphäre (nach DYCK & PESCHKE (1995), verändert).

Ein Merkmal von Böden ist die Durchdringung von drei Phasen Gas-, Flüssig- und Festphase. Der Anteil und die räumliche Aufteilung der drei Phasen haben wesentlichen Einfluss auf Bodeneigenschaften wie Wasserleitfähigkeit oder Wasserspeichervermögen und im Boden stattfindende Umsatz- und Transportprozesse (HARTGE & HORN 1991, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 1992). Ein Beispiel hierfür ist der Stickstoffkreislauf (Abbildung 2), welcher eine zentrale Rolle bei dem im Rahmen dieser Arbeit angewendeten Simulationsmodell CANDY spielt (vergleiche Abschnitt 2.4).

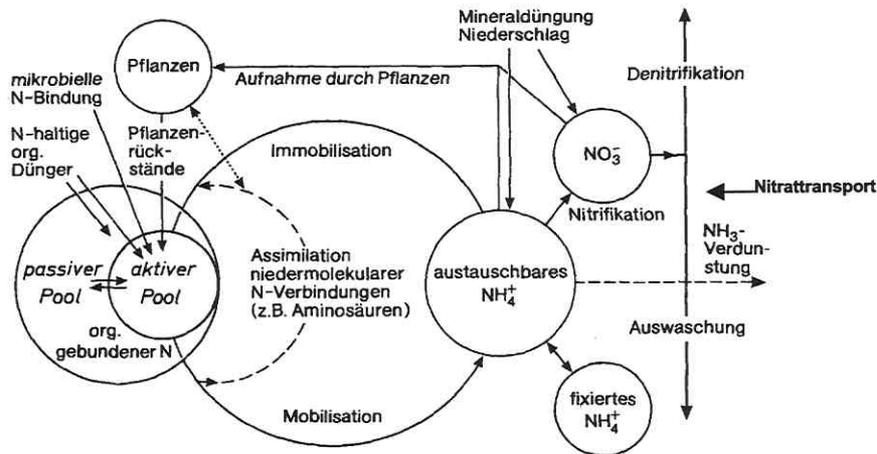


Abb. 2: Schema des landwirtschaftlichen Stickstoffkreislaufs (nach SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL (1992), verändert).

Gasphase (Bodenluft) und Flüssigphase stehen in engem Zusammenhang: sie füllen den Porenraum des Bodens, der durch das Porenvolumen (PV) charakterisiert werden kann.

Die Flüssigphase (Bodenwasser) ist ein wichtiger Faktor im Komplex Boden – Pflanze – Atmosphäre (HARTGE & HORN 1991). Das Wasser besitzt dabei sowohl als Stoff als auch Lösungsmittel, Transport- und Reaktionsmittel Bedeutung. Neben Grund- und Stauwasser sind Haft- und Gravitationswasser wichtige Erscheinungsformen des Bodenwassers (KUNTZE et al. 1994, siehe Abbildung 3).

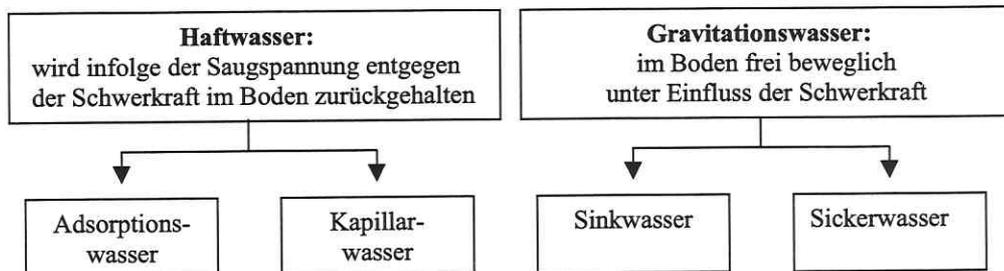


Abb. 3: Erscheinungsformen des Bodenwassers.

Haftwasser wird unterschieden in Adsorptionswasser, welches an der Oberfläche von Bodenteilchen angelagert ist ohne Menisken zu bilden, und Kapillarwasser, das durch Menisken gehalten wird. Das Gravitationswasser lässt sich in die Kompartimente Sinkwasser und Sickerwasser unterteilen (LIEBEROTH 1982). Während sich das Sinkwasser in Makroporen rasch vertikal bewegt, wird unter Sickerwasser die übrige, sich langsam abwärts bewegende Wassermenge verstanden.

Für die Beurteilung des Pflanzenwachstums sind Kenngrößen der Wasserspeicherung bzw. -bindung von Böden relevant. Unter *Feldkapazität* (FKAP) wird „die Wassermenge verstanden, die ein Boden maximal gegen die Schwerkraft zurückhalten kann“ (KA 4, AG BODEN 1994: 291), *Permanenzwelkepunkt* (PWP) bezeichnet den „Grenzwert des Bodenwassergehaltes, bei dessen Erreichen landwirtschaftliche Nutzpflanzen in der Regel irreversibel zu welken beginnen“ (KA 4, AG BODEN 1994: 291). Nach KA 4 (AG BODEN 1994: 291) wird die Feldkapazität bei einer Saugspannung von $pF = 1,8$ und der Permanenzwelkepunkt bei $pF = 4,2$ bestimmt. Die Differenz aus FKAP und PWP kennzeichnet den Bereich des pflanzenverfügbaren Wassers und wird mit nutzbarer Feldkapazität (NFKAP) bezeichnet. Sie entspricht dem Bereich von $pF 1,8$ bis $4,2$ (KA 4, AG BODEN 1994: 291).

Zur mathematischen Beschreibung der Wasserspannungskurve werden die Begriffe Sättigungswassergehalt und Restwassergehalt benötigt. Während der Sättigungswassergehalt dem Porenvolumen entspricht, wird mit dem Restwassergehalt die durch Adsorption gebundene Wassermenge charakterisiert.

Die Festphase des Bodens (Bodenmatrix) besteht aus Einzelteilchen (Mineralkörnchen, Gesteinsbruchstücke, organische Partikel), unterschiedlicher Größe, Form und Mischung. Zur Charakterisierung der Größe wird für jedes Teilchen der sogenannte Äquivalentdurchmesser angegeben, welcher dem Durchmesser einer Kugel entspricht, die sich bezüglich der Fallgeschwindigkeit so wie das Teilchen verhält. Eine Systematisierung aller im Boden vorkommenden Teilchen erfolgt durch ihre Einordnung in verschiedene Gruppen (Äquivalentgrößenklassen) – den Kornfraktionen. Ihre Definition ist leider nicht eindeutig. Es existiert eine Reihe verschiedener Einteilungssysteme (siehe beispielsweise HILLEL (1980)). Der vorliegenden Arbeit liegt die Einteilung der Korngrößen nach DIN 4220 (1987) des Fachnormenausschusses Wasserwesen zu Grunde (Tabelle 2).

Das Klassifikationssystem geht auf das von ATTERBERG (1908) entworfene logarithmische System zurück (HARTGE & HORN 1991). Es wird unterschieden zwischen Kornfraktionen des Feinbodens (Äquivalentdurchmesser $< 2000 \mu\text{m}$) und des Grobbodens (Äquivalentdurchmesser $> 2000 \mu\text{m}$).

Tab. 2: Einteilung der Körnungsklassen in Kornfraktionen und Unterklassen nach DIN 4220.

	Kornfraktion	Unterklasse	Äquivalentdurchmesser (in μm)
Fein-Boden	Ton (T)	fein	< 0,2
		mittel	0,2 - 0,6
		grob	0,6 - 2,0
	Schluff (U)	fein	2,0 - 6,3
		mittel	6,3 - 20
		grob	20 - 63
	Sand (S)	fein	63 - 200
		mittel	200 - 630
		grob	630 - 2.000
Grob-Boden	Kies	fein	2.000 - 6.300
		mittel	6.300 - 20.000
		grob	20.000 - 63.000
	Steine		63.000 - 200.000
	Blöcke		> 200.000

In den folgenden Kapiteln wird anstelle von Korngrößenzusammensetzung meist der Begriff *Textur* verwendet. Neben den in Tabelle 2 angeführten Kornfraktionen werden in dieser Arbeit noch *Feinanteilgehalt* (FAT) und *abschlämbbare Teilchen* (A) benötigt, die wie folgt definiert sind (FRANKO 1998a, LIEBEROTH 1982):

- FAT: Teilchen mit Äquivalentdurchmesser < 6,3 μm (entspricht der Ton- und Feinschlufffraktion),
- A : Teilchen mit Äquivalentdurchmesser < 20 μm (entspricht der Ton-, Feinschluff- und Mittelschlufffraktion).

Die Teilchen der Fein- und Mittelschlufffraktion (Äquivalentdurchmesser von 2 μm bis 20 μm) werden im Folgenden mit FM bezeichnet.

Neben der Korngrößenzusammensetzung werden die Bodeneigenschaften von der räumlichen Anordnung der Festphase und des Porenraumes beeinflusst (SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 1992). Dieses Merkmal, was als Bodengefüge bezeichnet wird, kann neben dem Porenvolumen durch Bodendichten als Materialkonstanten charakterisiert werden. Die *Trockenrohdichte* (TRD) gibt die Masse der Festsubstanz bezogen auf das Gesamtbodenvolumen an, die Dichte der Festsubstanz wird mit *Trockensubstanzdichte* (TSD) bezeichnet (HARTGE & HORN 1991).

In der vorliegenden Arbeit erfolgt die Betrachtung der räumlichen *und* zeitlichen Schwankungen einiger Eigenschaften von Boden, Klima und Landnutzung (Abschnitt 2.5, Kapitel 3). In Anlehnung an NEUMEISTER (1999) und NEUMEISTER & REGBER (2000) sind hierfür die Begriffe *Heterogenität* (für räumliche Änderungen) und *Variabilität* (für zeitliche Veränderlichkeiten) gewählt worden.

Die meisten in dieser Arbeit verwendeten Bezeichnungen für Bodentypen und Horizonte entsprechen nicht der KA 4. Sie sind nach der Mittelmaßstäbigen Landwirtschaftlichen Standortkartierung (MMK) (SCHMIDT & DIEMANN 1991) gewählt.

2.2 Behandlung von Heterogenitäten und Variabilitäten in der Modellierung

„Ein Modell ist immer eine vereinfachte Abbildung eines interessierenden Realitätsausschnitts“ (BOSSSEL 1994: 27). Häufig gehen hierbei jedoch wichtige Informationen verloren: während reale Größen durch Verteilungen oder Variationsbreiten beschrieben werden können, sind Modellgrößen oft durch ‚mittlere Werte‘ (feste Zahlen) charakterisiert.

Diese Vereinfachung beim Übergang der inhomogenen Wirklichkeit zur Homogenität im Modell ist von erheblicher Bedeutung, weil mit Simulationsergebnissen als Resultat der Modellanwendungen häufig Entscheidungen für die Praxis getroffen werden. Da durch effizientere Beschreibung der Realität Modellaussagen verbessert werden können, ist die Behandlung von Heterogenitäten und Variabilitäten ein wichtiges Arbeitsfeld in der Modellierung. Modelle können nach ihrer inneren Struktur unterschieden werden (BOSSSEL 1994):

Tab. 3: Modelltypen und Merkmale nach BOSSSEL (1994).

Modelltyp	Merkmal
WHITEBOX	* innere Struktur und alle Prozesse sind bekannt * alle Parameter sind messbar (prozessbasierte Ansätze) * Nachbildung der Systemstruktur
GREYBOX	* innere Struktur ist nur zum Teil bekannt * Modelle enthalten neben prozessbasierten auch empirische und halbempirische Ansätze
BLACKBOX	* keine Kenntnis der inneren Systemstruktur * Modelle enthalten empirische und halbempirische Ansätze * nur Modelleingangsgrößen und -ausgabegrößen werden zur Modellbeschreibung verwendet

Eine Berücksichtigung der Inhomogenität realer Objekte bereitet zum Teil erhebliche Schwierigkeiten, verschiedene Konzepte kommen hierbei zur Anwendung. Bei sehr einfach strukturierten WHITEBOX-Modellen kann aus Kenntnis der inneren Struktur eine direkte Fehleranalyse erfolgen. Dazu wird die Variation von Eingangsgrößen in Form von Intervallen beschrieben. Mittels Verfahren der Intervallarithmetik, beispielsweise Methode der Wertschranken, können dann auf relativ einfache Art Untersuchungen von Fehlerfortpflanzung und -wirkungen auf Ausgabegrößen erfolgen (BAUCH 1987, NEUMAIER 1990). Für letztere ergeben sich Intervalle, deren Größe abhängig ist von den Intervallbreiten der Eingangsparameter und den Prozessen im Modell. Dieses Verfahren der direkten Fehleranalyse hat allerdings bei komplexen WHITEBOX-Modellen den Nachteil, dass für Ausgabegrößen nur sehr breite Intervalle angegeben werden können, was praktisch kaum verwertbare Aussagen liefert. Hier müssen, ebenso wie bei GREYBOX- und BLACKBOX-Modellen, andere Methoden angewendet werden.

Ein häufig verwendetes Verfahren ist die Sensitivitätsanalyse, bei welcher der Einfluss von Änderungen einzelner Eingangsparameter auf den Modellausgangsgrößen untersucht wird (LAROCQUE & BANTON 1994, MCCUEN 1973). Die Eingangsparameter, welche den stärksten Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben (sensitive Parameter), sollten beim Präprozessing mit großer Sorgfalt festgelegt werden. Ein Problem kann hierbei die Abhängigkeit von Modellparametern sein, was bei Sensitivitätsanalysen durch simultane Parametervariation

gelöst wird, beispielsweise in HUWE (1992) und PIEHLER (1990). Weiterhin können sogenannte Sensitivitätssprünge auftreten: bei Erreichen bestimmter Schwellenwerte der Eingangsparameter erfolgt eine sprunghafte Änderung von Ergebnisgrößen (Nichtlinearität, siehe z. B. JOHANNSEN & UTERMANN (1997)). Ein Lösungsweg besteht hier in der Einführung einer Klasseneinteilung für Modellgrößen, womit anhand von Koeffizienten der relative Gesamteinfluss von Eingangsparametern und die Sensitivität von Klassenwechseln ermittelt werden kann (UTERMANN et al. 1997).

Ein weiteres Konzept zur Behandlung von Heterogenitäten komplexer Modelle ist die Anwendung verschiedener Monte-Carlo-Methoden, worunter „alle die Verfahren der numerischen Mathematik zusammengefasst werden, die sich zur Lösung deterministischer Aufgaben des Zufalls bedienen“ (GELLERT et al. 1983: 705). Es werden ein oder mehrere Modelleingangsparameter als Zufallsgröße mit bekannter mathematischer Verteilungsfunktion beschrieben. Die Erzeugung von Realisierungen erfolgt mittels Zufallszahlengeneratoren. Nach Simulation der Realisierungen können Verteilungen von Ausgabegrößen bestimmt werden, welche abhängig sind von den Verteilungen der Eingangsparameter. Beispiele für Anwendungen derartiger Verfahren in den Geowissenschaften sind in KUHN (1998), STOCK (1995) und SMITH & DIEKKRÜGER (1996) zu finden.

Ein spezielles Verfahren besteht in einer Kombination aus Monte-Carlo-Methode und Sensitivitätsanalyse. Hierbei erfolgt die direkte Transformation der Verteilungsfunktion eines Modelleingangsparameters in die Verteilung einer Ausgabegröße (HUWE 1992). Die hierzu benötigte Sensitivitätsfunktion muss zunächst als Beziehung zwischen dem Eingangsparameter und der Ausgabegröße ermittelt werden, wozu eine Reihe von Simulationsläufen mit verschiedenen Werten des Parameters erforderlich ist. Die Variationsspannweite des Parameters ist dabei so zu wählen, dass mit diesem Intervall der praktisch mögliche Bereich mit hoher Wahrscheinlichkeit überdeckt wird. Ist die Sensitivitätsfunktion ermittelt, kann für verschiedene Verteilungen des Eingangsparameters eine Analyse der Ausgabegröße erfolgen. Das Verfahren ist anwendbar für monoton steigende Sensitivitätsbeziehungen und in leichter Modifikation für monoton fallende. Beim Einsatz von Monte-Carlo-Verfahren ist oft eine große Anzahl von Simulationen durchzuführen, was hohe Rechen- und Speicherkapazität erfordert und damit praktisch nicht immer realisiert werden kann. Ein Verfahren zur Reduktion der Simulationsanzahl ist die Latin-Hypercube-Methode (MCKAY et al. 1979). Hierbei wird die Verteilungsfunktion eines jeden Parameters in d äquidistante Abschnitte unterteilt, deren Mittelpunkte die Parameterwerte bestimmen. Die Verteilungsfunktion eines Parameters wird damit durch d diskrete Punkte approximiert, was d Simulationsläufen entspricht. Mehrere Parameter können berücksichtigt werden, in dem für alle Kombinationen der durch diese Methode abgeleiteten Parameter die Simulation durchgeführt wird. Damit ergeben sich beispielsweise bei k Parametern, deren Verteilungsfunktionen jeweils in d Abschnitte unterteilt sind, d^k Simulationen. Eine weitere Reduktion der Simulationsanzahl von d^k auf d ist möglich, in dem nicht alle der d^k Parameterkombinationen gerechnet werden, sondern nur eine Auswahl (KUHN 1998, SMITH & DIEKKRÜGER 1996). Diese wird so festgelegt, dass jeder einzelne Parameterwert nur einmal vorkommt. Weitere Anwendungen der Latin-Hypercube-Methode sind zu finden in DIELS (1994) und SALZMANN (1993).

Häufig bereiten fehlende Kenntnis der Verteilungstypen von Eingangsgrößen Probleme bei Monte-Carlo-Verfahren. Ein Lösungsweg besteht hier in der Verwendung unscharfer Zahlen (Fuzzy-Zahlen) für Modelleingangsparameter anstelle der Verteilungsfunktionen. Bei dieser Methode ergeben sich für die Ausgabegrößen ebenso Fuzzy-Zahlen. Anwendungen sind zu finden in MERTENS & HUWE (1999), MERTENS (2001), SCHULZ & HUWE (1997) und SCHULZ (1997).

Alle diese Verfahren haben das Ziel, Informationen über mögliche Sensitivität von Modellausgabegrößen zu gewinnen - hervorgerufen durch Variation von Modelleingangsgrößen als Ausdruck natürlicher Heterogenität und Variabilität. Unsicherheiten wichtiger Eingangsgrößen des Bodenprozessmodells CANDY werden in Abschnitt 2.5 behandelt.

2.3 Metamodelle – ein kurzer Abriss

Die Anwendung komplexer Simulationsmodelle bereitet in der Praxis häufig Probleme. Zum einem benötigen sie eine Vielzahl von Eingangsgrößen, die oft nicht oder nur schwer verfügbar sind. Es werden dann „Ersatzdaten“ verwendet, die auf verschiedene Weise gewonnen werden, beispielsweise durch Schätzfunktionen oder aus Literaturangaben. Die Simulation mit derartigen Daten kann Fehler der Ausgabegrößen hervorrufen, was die Qualität der Modellanwendung verschlechtert.

Ein weiteres Problem ist der Rechenaufwand. Vor allem die Rechenzeit kann, trotz leistungsfähiger Computer, bei komplexen Anwendungen erheblich sein, was deren Realisierung erschwert. Um diese Nachteile zu beheben, werden anstelle der komplexen Modelle häufig *Metamodelle* (effektive Modelle) angewendet. Darunter sind Verfahren zu verstehen, die auf Basis weniger, leicht verfügbarer Daten (*Antriebsindikatoren*) die vereinfachte Berechnung von Systemzustandsgrößen (*Zustandsindikatoren*) ermöglichen. Dies gewährleistet eine gute Nutzbarkeit in der Praxis. Zur Entwicklung derartiger Ansätze können, je nach Kontext und Zielstellung, verschiedene Methoden angewendet werden.

Ein Weg ist die Beschreibung komplexer Vorgänge, in stark vereinfachter Form, als WHITEBOX-Modell. Beispiele hierfür enthält Tabelle 4.

Tab. 4: Beispiele der Beschreibung komplexer Vorgänge mit vereinfachten Modellen.

Literaturquelle	Modellkonzept
FREDE & DABBERT 1998	Abschätzung der Nitratkonzentration im Sickerwasser (Bilanzformel)
GEBEL 2001	Quantifizierung der Stickstoffeinträge in mesoskaligen Flussgebieten
HUWE 1992	Speicherzellenmodell zur Simulation des Nitrattransports im Winter
RENGER et al. 1990	Bodenfunktion zur Bestimmung der Grundwasserneubildungsraten

Obwohl mit solchen Ansätzen zum Teil gute Ergebnisse erzielt werden (HUWE et al. 1994), sind sie lediglich als Näherungsverfahren anzusehen. Wegen der stark vereinfachten Prozessbeschreibung werden einige Systemkomponenten nicht erfasst, in deren Folge Details des Systemverhaltens nur unzureichend charakterisiert werden.

Sehr verbreitet ist die Anwendung verschiedener Methoden der explorativen Datenanalyse auf komplexe Prozessmodelle, beispielsweise Verfahren der Regressions-, Zeitreihen-, Cluster- und Hauptkomponenten- bzw. Faktorenanalyse. Es erfolgt eine Herleitung von Beziehungen zwischen Eingangs- und Ausgabegrößen, welche dann als vereinfachte Verfahren anstelle des komplexen Modells angewendet werden. Aus Sicht der Modellkonzepte sind diese Methoden vorwiegend in die Gruppe der BLACKBOX-Modelle einzuordnen, da meist keine innere Struktur (d. h. keine Beschreibung physikalischer Prozesse) wiedergegeben wird.

Ein wesentliches Element des in der vorliegenden Arbeit entwickelten Verfahrens ist die Regressionsanalyse, deren Ziel die Beschreibung eines funktionalen Zusammenhangs (Regressionsfunktion) von zwei oder mehr Merkmalen (Einfluss- und Zielgrößen) ist (HARTUNG 1993, SACHS 1997). Hierzu muss zunächst eine Datenbasis vorhanden sein, die, je nach Modellzweck, unterschiedlicher Natur sein kann, Beispiele sind Tabelle 5 zu entnehmen.

Tab. 5: Beispiele für Anwendungen von Regressionsverfahren.

Literaturquelle	Datenbasis	Modellzweck
VERECKEN et al. 1989	Bodenwassergehalte bei versch. pF-Stufen, Textur und organischer Kohlenstoffgehalt für 182 Horizonte von 40 Böden in Belgien	Parameterschätzung für van-Genuchten-Gleichung als multipler Regressionsansatz
PIEHLER 1990	Ergebnisse aus Simulationsrechnungen mit dem Prozessmodell EPIC	Abschätzung der Stickstoffausträge aus Jahresniederschlag und Düngermenge als lineare Regression für Anwendung in Wasserschutzgebieten
HARTUNG 1993	Zahlen zur Bevölkerungsentwicklung (Fünfjahresabstände von 1935 bis 1980) in Nordrhein-Westfalen (Quelle: Statistisches Jahrbuch Nordrhein-Westfalens 1983)	Schätzung der Bevölkerungsentwicklung mit exponentiellen Ansatz (Mitscherlich-Funktion)

Allen Ansätzen gemeinsam ist die Möglichkeit einer breiten Anwendbarkeit, was durch Verwendung leicht verfügbarer Eingangsgrößen und einfacher Algorithmen gewährleistet wird. Es ist zu beachten, dass eine Anwendung nur in dem Kontext erfolgen darf, in welchem die Methoden Gültigkeit besitzen.

2.4 Bodenprozessmodell CANDY - Aufbau und Entwicklungsstand

Das Simulationssystem CANDY (CARbon and Nitrogen DYNAMics) wurde entwickelt, um die Dynamik des Kohlenstoff – und Stickstoffumsatzes im Boden sowie der Bodentemperatur und des Bodenwassergehaltes als eindimensionale Prozesse für ein Bodenprofil in der ungesättigten Zone agrarisch genutzter Ökosysteme zu beschreiben (FRANKO et al. 1995a). Um das komplexe System (siehe Abbildung 1) zu charakterisieren, sind im Modell einige Eigenschaften und Prozesse im Boden sowie oberirdische Vorgänge erfasst (Abbildung 4).

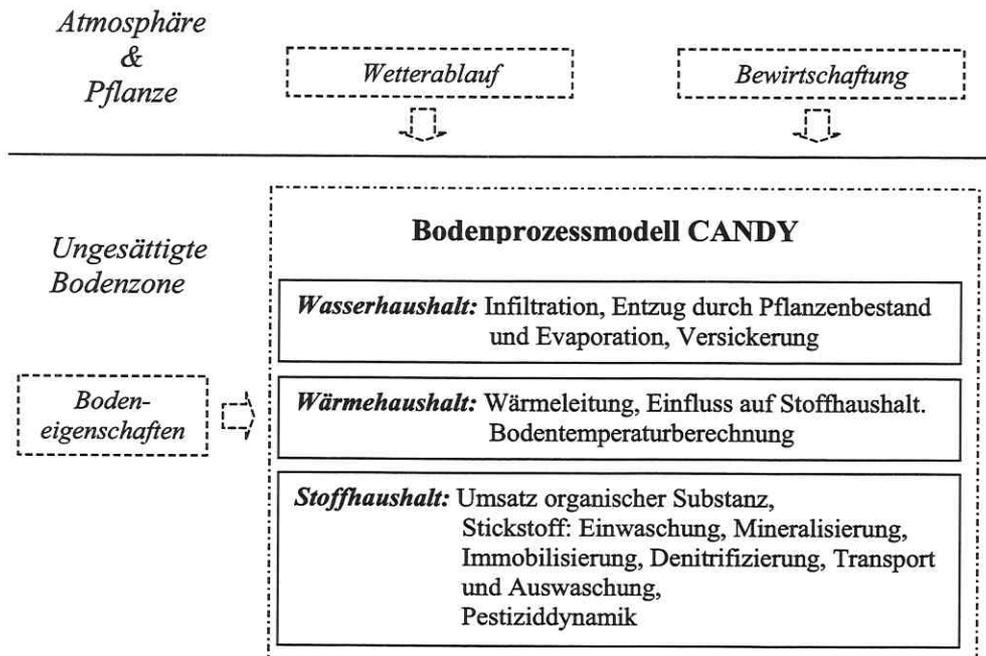


Abb. 4: Eingangsdaten und Prozesse des Simulationsmodells CANDY.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde für CANDY ein Profilvergenerator als Simulationswerkzeug zur Behandlung der Texturheterogenität entwickelt (Abschnitt 3.1), welche eine Form der Unsicherheit von CANDY-Eingangsdaten ist (Abschnitt 2.5).

Im Folgenden sind wichtige Informationen zum Bodenprozessmodell CANDY zusammengestellt. Details geben FRANKO et al. (1995a) und FRANKO et al. (1995b).

Das Bodenprofil ist im Modell aufgeteilt in homogene Rechenschichten mit je 10 cm Dicke, gleiche Schichten werden zu Horizonten zusammengefasst. Ein Bodenprofil besteht aus einem oder mehreren homogenen Horizonten. Jeder dieser Horizonte wird beschrieben durch bodenphysikalische Parameter von

- Körnung (Ton-, Schluff- und Feinanteilgehalt),
- Dichte (Trockenrohddichte, Trockensubstanzdichte),
- Bodenwasserhaushalt (Feldkapazität, Permanentwelkepunkt und Versickerungsparameter LAMBDA (abgeleitet aus Feinanteilgehalt)),

siehe Abbildung 5. Die Horizontgrenzen verlaufen parallel zur horizontalen Bodenoberfläche. Die Parameter Ton- und Schluffgehalt werden im Rechenprogramm nicht benötigt. Sie sind Bestandteil der CANDY-Datenbank und dienen der Ableitung der übrigen bodenphysikalischen Parameter, siehe hierzu Abschnitt 3.1.

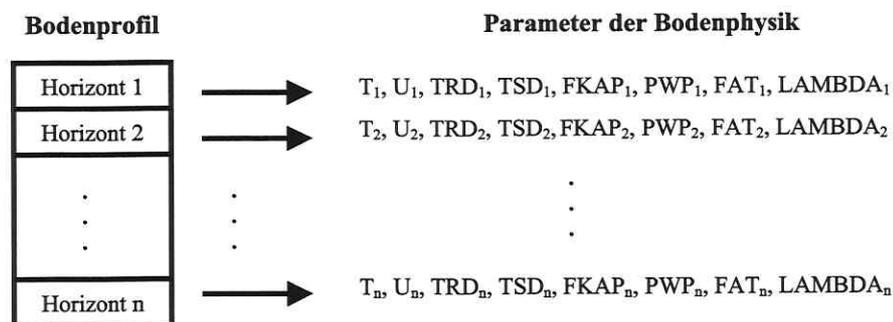


Abb. 5: Aufbau des Bodenprofils im Simulationsmodell CANDY aus den homogenen Horizonten 1, 2, ..., n. Beschreibung des i-ten Horizonts durch die bodenphysikalischen Parameter Ton (T_i), Schluff (U_i), Feinanteilgehalt (FAT_i), Trockenrohddichte (TRD_i), Trockensubstanzdichte (TSD_i), Feldkapazität ($FKAP_i$), Permanentwelkepunkt (PWP_i), und Versickerungsparameter ($LAMBDA_i$), $i = 1, 2, \dots, n$.

Das Standardsystem besteht aus einem in eine Bedieneroberfläche integrierten Simulationssystem und umgebenden Datenbanken, welche die Informationen zu den erforderlichen Modelleingangsdaten enthalten:

- Modellparameter (Umsatzraten, Bodeneigenschaften, Pflanzenparameter, Parameter für organische und mineralische Düngung),
- Modellantrieb (Wetter- und Bewirtschaftungsdaten),
- Startwerte der Zustandsgrößen,
- Festdaten der Simulationsobjekte und
- vorhandene Messwerte.

Die zeitliche Auflösung der Simulation erfolgt in Tagesschritten, der Modellantrieb geschieht über die Tageswerte der meteorologischen Daten. Die wichtigsten Zustandsgrößen sind Bodentemperatur, Bodenfeuchte, umsetzbare organische Substanz und Mineralstickstoff.

Das Simulationssystem besteht aus 7 Modulen (Präprozessing und Teilmodelle), die für sich abgeschlossene Funktionseinheiten darstellen. Sie sind teilweise miteinander verknüpft und nicht unabhängig voneinander lauffähig (Abbildung 6). Eine kurze Beschreibung der Module erfolgt im Anschluss.

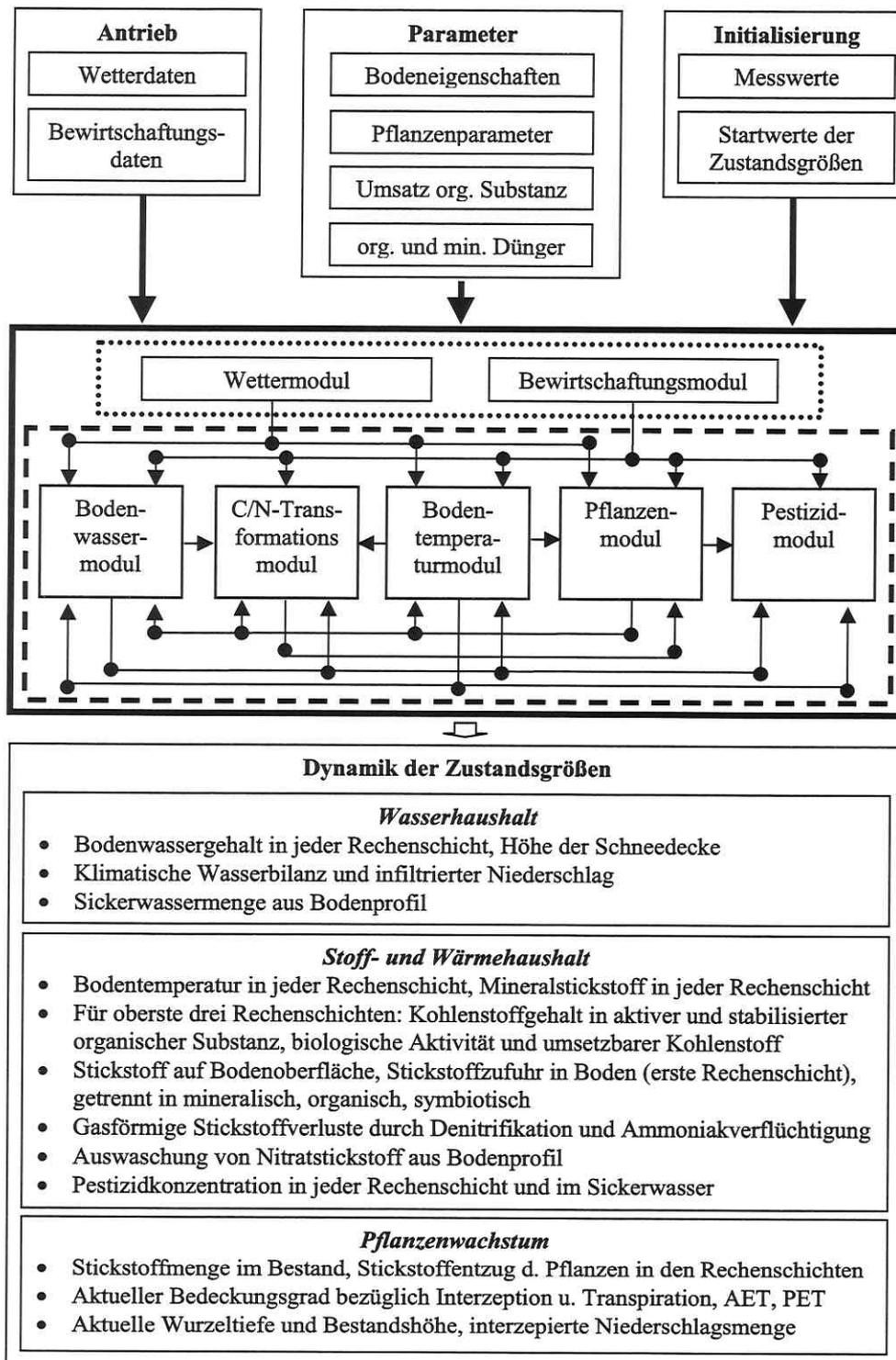


Abb. 6: Modularer Aufbau des Simulationssystems CANDY und Zusammenwirken der Teilsysteme.

Wettermodul (Präprozessing)

Es erfolgt die Aufbereitung der Wetterdaten, die für den zu simulierenden Standort als Tageswerte vorliegen müssen:

- Mittelwert der Lufttemperatur in zwei Meter Höhe,
- Niederschlagssumme und
- Summe der Globalstrahlung bzw. Sonnenscheindauer und geografische Breite.

Ist nur der Tageswert der Sonnenscheindauer gegeben, wird aus der geografischen Breite ein Näherungswert für die Globalstrahlung bestimmt.

Die Simulation erfolgt mit dem korrigierten Niederschlag, berechnet wird weiterhin die potentielle Evapotranspiration. Für Langzeitsimulationen existiert ein Wettergenerator, welcher die Erzeugung von Zufallswetterabläufen ermöglicht (OELSCHLÄGEL 1992). Für dessen Anwendung sind langjährige lückenlose Wetteraufzeichnungen von dem zu rechnenden Standort notwendig (mindestens 15 Jahre). Der Wettergenerator bildet die typischen Klimateigenschaften unter direkter Einbeziehung der Klimatelemente ab.

Bewirtschaftungsmodul (Präprozessing)

Es werden Managementinformationen in Form einer chronologischen Folge von Maßnahmen abgebildet, welche durch verschiedene Attribute charakterisiert sind (Tabelle 6). Während des Simulationslaufes werden diese Daten bei den Berechnungen des aktuellen Systemzustandes berücksichtigt.

Tab. 6: Maßnahmen und Attribute der Managementverarbeitung beim Simulationsmodell CANDY. Düngerb.: Düngerbezeichnung.

Maßnahme	Attribute
Aufgang	Fruchtart, Zielertragsmenge, Ziel für Stickstoffentzug
Ernte	Fruchtart, Ertragsmenge, Stickstoffentzug
Bodenbearbeitung	Tiefe der Bearbeitung
Organische Düngung	Düngerb., Aufwandsmenge, zugeführte Kohlenstoffmenge, C/N-Verhältnis
Mineralische Düngung	Düngerb., Ammonium-Anteil, zugeführte Stickstoffmenge
Beregnung	Beregnungsmenge
Pestizidbehandlung	Art des Pestizids und Aufwandsmenge

Pflanzenmodul (Teilmodell)

Während der Vegetationszeit wird der Stickstoffentzug durch die Pflanzenwurzeln in den einzelnen Bodenschichten abgebildet. CANDY enthält kein detailliertes Pflanzenmodell, das Pflanzenwachstum wird vorwiegend als Senke innerhalb des Bodenwasser- und Stickstoffhaushaltes beschrieben. Der Einfluss des Pflanzenbestands wird durch zwei zeitveränderliche Bedeckungsgrade (bezüglich Interzeptionsfähigkeit und Transpirationsfähigkeit) und zunehmender Wurzel-tiefe beschrieben. Weitere Informationen sind im Anhang A 8.1 enthalten.

Bodenwassermodul (Teilmodell)

In CANDY werden die hydrologischen Prozesse auf Basis eines Kapazitätskonzeptes behandelt, bei welchem der Boden in Schichten aufgeteilt wird (KOITZSCH & GÜNTHER 1990). Eine abwärts gerichtete Wasserbewegung ist nur durch Überschreiten des schichtspezifischen Feldkapazitätswertes in der Bodenfeuchte möglich. Der Wasseraufstieg kann einzig durch die Prozesse von Evaporation und Transpiration für Bodenfeuchten oberhalb des Permanentwelkepunktes erfolgen. Die Richardsgleichung (RICHARDS 1931) wird nicht gelöst. Im Modell sind die Teilprozesse Interzeption von Niederschlagswasser, Interzeptionsverdunstung und Schneedynamik, Transpiration und bedeckte Entnahme, unbedeckte Entnahme sowie Versickerung realisiert. Es erfolgt die Berücksichtigung von Oberflächenabfluss, mit Ausnahme von Modellanwendungen auf Lysimeter. Die Prozesse werden auf Tagesbasis nach folgendem Schema behandelt (Abbildung 7).

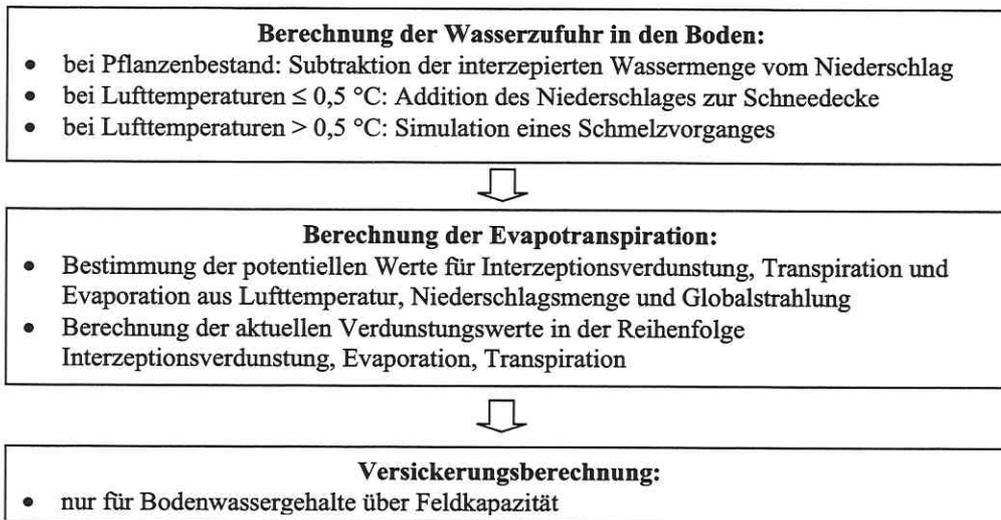


Abb. 7: Prozesse für einen Simulationstag des Bodenwassermoduls in CANDY (nach FRANKO et al. (1995a), verändert).

Interzeption von Niederschlagswasser, Interzeptionsverdunstung und Schneedynamik:

Die Grundlagen zur Modellierung von Interzeption, Interzeptionsverdunstung und Schneedynamik sind KOITZSCH & GÜNTHER (1990) zu entnehmen. Niederschläge werden in CANDY bei einer mittleren Tagestemperatur kleiner oder gleich 0,5 °C als Schnee behandelt und einer eventuell vorhandenen Schneedecke zugefügt. Bei Temperaturen über 0,5 °C und ausgebildeter Schneedecke wird unter Berücksichtigung des fühlbaren Wärmestroms, des latenten Wärmestroms (durch Evaporation und Kondensation von Wasserdampf in der Schneedecke) sowie der Wärmeabgabe (durch Abkühlung flüssiger Niederschläge auf die angenommene Schneedeckentemperatur von 0 °C) ein Schmelzvorgang simuliert und das Schmelzwasser in der ersten Bodenschicht infiltriert.

Bei Temperaturen über 0,5 °C und fehlender Schneedecke wird bei vorhandenem Pflanzenbestand die interzeptierte Wassermenge errechnet. Dies erfolgt in Abhängigkeit von aktueller Bestandshöhe und dem erreichten Bedeckungsgrad bezüglich Interzeptionsfähigkeit, welcher dem Anteil der mit interzeptionsfähigen Pflanzen bedeckten Bodenoberfläche entspricht (FRANKO et al. 1995a):

$$C_i = 2,5 \cdot BG \cdot h_{pl} \quad (2.1)$$

mit

C_i Interzeptionskapazität (in mm),

h_{pl} Bestandshöhe (in cm),

BG Bedeckungsgrad bezüglich Interzeptionsfähigkeit (in d/a).

Ist der Boden unbewachsen, wird bei Temperaturen über 0,5 °C und fehlender Schneedecke die aktuelle Tagesniederschlagssumme als infiltriertes Wasser behandelt.

Transpiration und bedeckte Entnahme:

Für einen Pflanzenbestand wird im Modell ausgehend vom aktuellen Transpirationsbedarf und der erreichten Durchwurzelungstiefe der Wasserentzug durch die Wurzeln aus den einzelnen Bodenschichten berechnet.

Unbedeckte Entnahme:

Bei unbedecktem Boden verdunstet an der Bodenoberfläche Wasser, welches aus tieferen Schichten geliefert wird. Dieser Wasserentzug wird im Modell an jedem Simulationstag für die Rechenschichten bestimmt.

Versickerung:

Der Versickerung von Bodenwasser durch Gravitationskräfte liegt die Annahme zugrunde, dass ein vertikaler Abfluss erst nach Überschreiten der Feldkapazität der Bodenschicht auftritt. Die Berechnungsreihenfolge ist sukzessive für jede Bodenschicht. Die Versickerungsmengen in den Rechenschichten werden mittels einer Differentialgleichung nach GLUGLA (1969) bestimmt (Formel (2.2)). Diese benötigt einen Parameter ($LAMBDA$), welcher die hydraulischen Bodeneigenschaften in Abhängigkeit von Textur und Bodenstruktur charakterisiert.

$$\frac{d\Theta}{dt} = -LAMBDA \cdot (\Theta - FKAP)^2, \Theta \geq FKAP \quad (2.2)$$

mit

Θ volumetrischer Wassergehalt,

$FKAP$ Feldkapazität (in Volumenprozent),

$LAMBDA$ halbempirischer Leitfähigkeitsparameter (in 1/(mm·d),

t Zeitpunkt.

Bei Bodentemperaturen unter 0 °C gibt es im Modell keinen Wassertransport.

Bodentemperaturmodul (Teilmodell)

Die Bodentemperatur beeinflusst die Kohlenstoff- und Stickstoffumsatzprozesse. Sie wird im Modell in jeder Rechenschicht bestimmt. Physikalische Grundlage ist die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung, für deren eindeutige Lösung eine Anfangstemperaturverteilung sowie obere und untere Randbedingungen vorgegeben sein müssen.

$$\frac{\partial}{\partial t}(C(\Theta), Temp(z,t)) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{am}(\Theta) \cdot \frac{\partial Temp(z,t)}{\partial z} \right) \quad (2.3)$$

mit

z	Ortskoordinate (Bodentiefe in dm), $0 < z < 20$, Bodenoberfläche: $z = 0$,
t	Zeitpunkt (in 0,5 d),
$Temp$	Temperatur (in K),
$\Theta = \Theta(z, t)$	volumetrische Bodenfeuchte am Tag t in der Tiefe z (Resultat des Bodenwassermoduls),
$C = C(\Theta)$	Wärmekapazität der Bodenschicht (in $J/(cm^3 \cdot K)$),
$\lambda_{am} = \lambda_{am}(\Theta)$	Wärmeleitfähigkeit der Bodenschicht (in $J/(cm \cdot s \cdot K)$).

Verwendet wurde hierfür ein Konzept von SUCKOW (1986). Die Wärmeleitungsgleichung wird durch ein zeitimplizites, finites Differenzenverfahren numerisch gelöst. Die partiellen Ableitungen werden dabei Ortsrichtung auf einem äquidistanten Gitter von 10 cm Abstand und in Zeitrichtung auf einem äquidistanten Gitter in einer Auflösung von 0,5 Tagen durch rückwärtige Differenzen approximiert.

Kohlenstoff-/ Stickstoff-Transformationsmodul (Teilmodell)

In CANDY wird unterschieden zwischen dem durch das C/N-Verhältnis bestimmten organischen Stickstoff und den anorganischen Anteilen Nitratstickstoff und Ammoniumstickstoff. Neben Abbau und Mineralisierung der organischen Substanz sind in CANDY die Teilprozesse Stickstoffeinwaschung, Stickstoffmineralisierung, Denitrifizierung, Nitrifizierung sowie Verlagerung und Auswaschung von Nitratstickstoff in unterschiedlicher Detailliertheit realisiert. Abbildung 8 zeigt die Reihenfolge der Prozesse, die im Modell in Tagesauflösung behandelt sind.

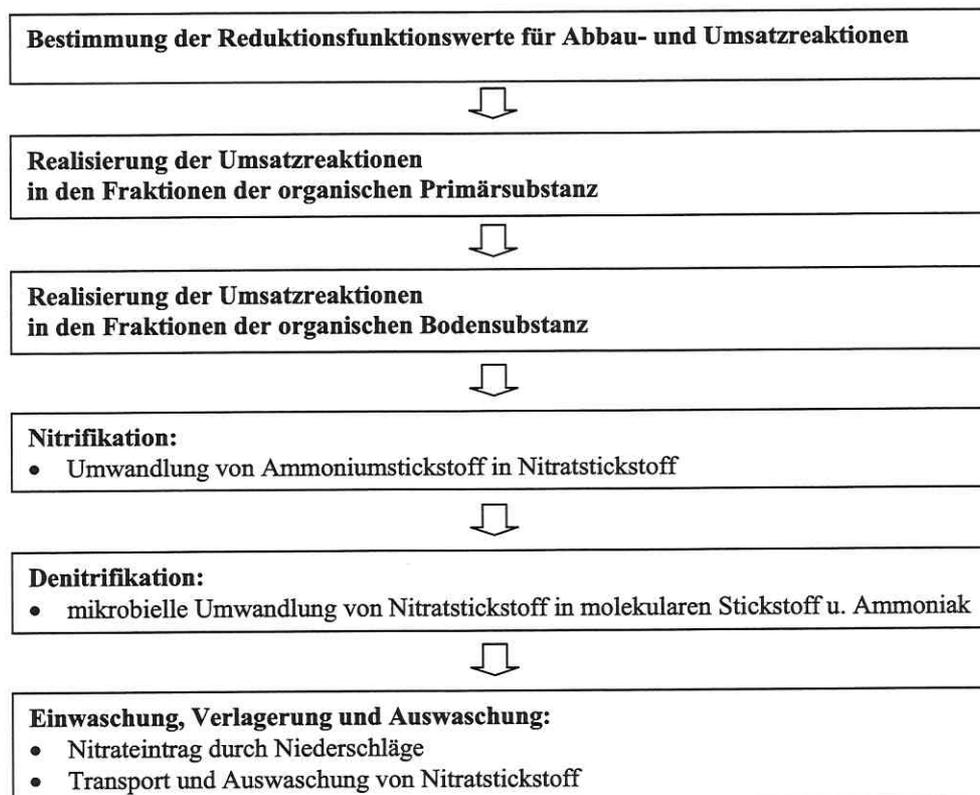


Abb. 8: Prozesse für einen Simulationstag des Kohlenstoff-/ Stickstoff-Transformationsmoduls in CANDY.

Abbau und Umsatz der organischen Substanz:

Der Umsatz der organischen Substanz und die Stickstoffdynamik wird in den obersten drei Rechenschichten (Bearbeitungshorizont) beschrieben. Grundlage ist die enge Kopplung von Kohlenstoff- und Stickstoffkreislauf im Boden. Durch die Kohlenstoffmineralisation wird primär Energie für eine Vielzahl von mikrobiellen Umsatzprozessen bereitgestellt, die Stickstoffreaktionen sind durch das spezifische Kohlenstoff/Stickstoff-Verhältnis an die Kohlenstoffreaktionen gekoppelt. Die organische Substanz (OS) ist unterteilt in organische Bodensubstanz (OBS) und organische Primärsubstanz (OPS). Letztere enthält frisches unzersetztes organisches Material, worunter alle organischen Dünger sowie Ernte- und Wurzelrückstände fallen. Die organische Bodensubstanz liegt in inerte und umsetzbarer Form vor, wobei der inerte Anteil bei der Betrachtung des Umsatzes der organischen Substanz unberücksichtigt bleibt. Der umsetzbare Anteil wird im Modell in die Kompartimente aktive organische Substanz (AOS) und stabilisierte organische Substanz (SOS) unterteilt. Zwischen beiden findet ein Stoffaustausch statt. Umsatzprozesse erfolgen nur in der AOS, welche der Biomasse entspricht. Abbildung 9 zeigt den Zusammenhang der einzelnen Fraktionen der organischen Substanz im Simulationsmodell.

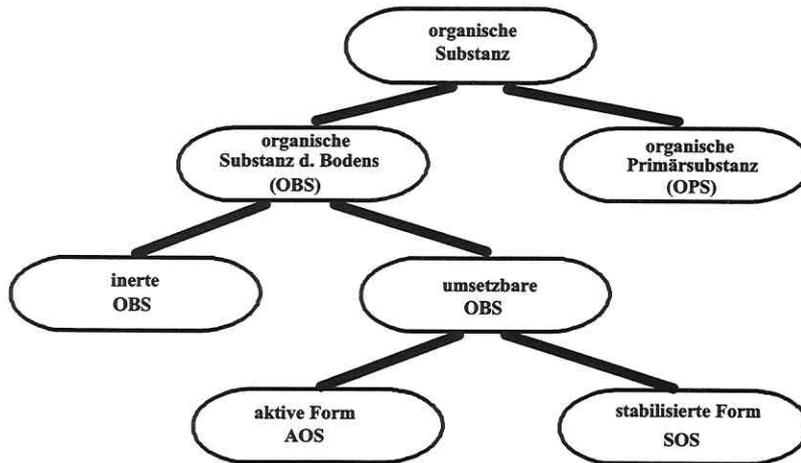


Abb. 9: Zusammenhang der einzelnen Fraktionen der organischen Substanz im Simulationsmodell CANDY (in FRANKO et al. (1995a)).

Die Beschreibung des OS-Umsatzes erfolgt aus Sicht des Kohlenstoffumsatzes in zwei Schritten. Während des organischen Primärumsatzes vollziehen sich der Abbau von OPS und die Synthese neuer Biomasse in der AOS, wobei der Anteil der umgesetzten Kohlenstoffmengen mit einem für jede OPS-Fraktion typischen Synthesekoeffizienten beschrieben wird. Im Modell können bis zu 6 verschiedenen OPS-Arten gleichzeitig berücksichtigt werden. Der Sekundärumsatz beschreibt anschließend die Kohlenstoffprozesse in AOS und SOS. Die Prozesse sind als Reaktionskinetiken 1. Ordnung implementiert. Details sind dem Anhang A 8.1 zu entnehmen.

Stickstoffmineralisierung und Immobilisierung:

Die Stickstoffmineralisierung ist der Kohlenstoffmineralisierung untergeordnet, weil erst durch den Kohlenstoffumsatz die Energie für die Aktivität der Mikroorganismen bereitgestellt wird. Die Stickstoffreaktionen werden aus den Kohlenstoffflüssen entsprechend des C/N-Verhältnisses der jeweiligen Fraktionen berechnet. Im Fall des OPS-Umsatzes ist zu berücksichtigen, dass neben der OPS-Mineralisierung eine AOS-Synthese stattfindet, die Stickstoff aus dem anorganischen Pool in die AOS-Fraktion überführt. Weitere Informationen sind dem Anhang A 8.1 zu entnehmen.

Nitrifizierung:

Die mikrobielle Umwandlung von Ammoniumstickstoff in Nitratstickstoff ist im Modell für die oberen drei Rechenschichten implementiert. Die Simulation der Nitrifizierung erfolgt nach RITCHIE et al. (1986) auf Grundlage eines reaktionskinetischen Ansatzes vom MICHAELIS-MENTEN-Typ:

$$N_{nit}(z,t) = v_{nit} \frac{NH4_N(z,t)}{k_h + NH4_N(z,t)} \quad (2.4)$$

mit

z	Bodentiefe (in dm): $z = 1, 2, 3$,
t	Zeitschritt (in d),
$N_{nit}(z, t)$	am Tag t in der Rechengeschicht (Bodentiefe) z nitrifizierte Stickstoffmenge,
$NH4_N(z, t)$	Ammoniumstickstoff-Konzentration am Tag t in der Rechengeschicht z ,
k_h	Ammoniumstickstoff-Konzentration bei der die Hälfte der max. Nitrifizierungsgeschwindigkeit erreicht ist,
v_{nit}	maximale Nitrifizierungsgeschwindigkeit.

Die Parameterwerte wurden aus dem Modell CERES (RITCHIE et al. 1986) übernommen: $v_{nit} = 40 \text{ ppm/d} \cdot R(z,t)$ und $k_h = 90 \text{ ppm}$. Die Berechnung der Nitrifizierung erfolgt mit der biologisch wirksamen Zeit (*wirksame Mineralisierungszeit* nach KARTSCHALL (1986)), welche wie für die Mineralisierung mittels der Reduktionsfunktion $R(z,t)$ bestimmt wird (siehe *Abbau und Umsatz der organischen Substanz*).

Stickstoffeinwaschung:

Der Eintrag von auf dem Boden aufliegenden anorganischen Stickstoff aus Immission und Düngung erfolgt als Nitratreintrag proportional mit der in die erste Bodenschicht eindringenden Niederschlagsmenge.

Verlagerung und Auswaschung:

CANDY berücksichtigt nur den Transport des Nitratstickstoffs, die Bewegung des Ammoniumstickstoffs wird im Modell vernachlässigt. Das im Boden vorhandene Nitrat wird in eine mobile und immobile Fraktion unterteilt. Das Verhältnis zwischen mobiler und immobilisierter Lösung ist durch den Permanentwelkepunkt bestimmt. Der Transport der mobilen Fraktion erfolgt durch Konvektion mit dem Feuchtefluss (BURNS 1974):

$$P_NO3_N(z,t) = \beta \cdot \frac{P(z,t)}{\Theta(z,t) + P(z,t)} NO3_N(z,t) \quad (2.5)$$

mit

β	Parameter,
z	Bodentiefe (in dm),
t	Zeitschritt (in d),
$P_NO3_N(z,t)$	in der Bodenlösung transportierte Nitratmenge am Tag t in der Tiefe z (in kg/ha),
$P(z,t)$	perkolierende Wassermenge am Tag t in der Tiefe z (in mm),
$\Theta(z,t)$	Bodenfeuchte (hier: in mm),
$NO3_N(z,t)$	Nitratmenge am Tag t in der Tiefe z (in kg/ha).

Denitrifizierung:

Die Umwandlung von Nitratstickstoff in gasförmige Stickstoffverbindungen durch Mikroorganismen besitzt in CANDY eine Reaktionskinetik erster Ordnung. Der Prozess ist für die oberen 30 cm des Bodens unter Berücksichtigung der Mengen an Nitratstickstoff und aktiver organischer Substanz realisiert:

$$NO3_{den}(z,t) = k_{den} \cdot NO3_N(z,t) \cdot C_{AOS}(z,t) \cdot R_{den}(Temp, \Theta) \quad (2.6)$$

mit

$NO3_N$	Nitratkonzentration (kg N/ha),
t	Zeit (in d),
z	Bodentiefe (in dm), $z = 1, 2, 3$,
$NO3_{den}(z,t)$	denitrifizierte Stickstoffmenge am Tag t in Tiefe z (in kg/ha),
C_{AOS}	Kohlenstoffgehalt in der AOS (in kg/ha),
k_{den}	Reaktionskoeffizient der Denitrifikation,
$R_{den}(Temp, \Theta)$	Reduktionsfunktion für Denitrifikation.

Die Berechnung der Reduktionsfunktionen ist im Anhang A 8.1 dargestellt.

Durch Ammoniakverflüchtigung entstehen weitere gasförmige Stickstoffverluste, welche nur dann berücksichtigt werden, wenn Gülle auf die Oberfläche ausgebracht und nicht eingearbeitet wird.

Pestizidmodul (Teilmodell)

In CANDY wird zur Modellierung der Pestiziddynamik ein Ansatz aus dem Programm PELMO verwendet. Es sind die Teilprozesse Gleichgewichtszustand Pestizid \leftrightarrow Boden, Pestizidabbau und -aufnahme in den Pflanzenbestand, Transport im Boden sowie Pestizidverlagerung und Volatilitätsfluss abgebildet.

Organisation der Simulation:

Die Simulation erfolgt auf Schlagebene für kleine Bewirtschaftungseinheiten der Mikroskala. Als Simulationsobjekte dienen Flächen (Patches), welche, als Vereinfachung der Realität, hinsichtlich der Angaben zu Startwerten, Modellparametern, Festdaten sowie Wetter- und Bewirtschaftungsdaten als quasihomogen angesehen werden. Für die Simulation größerer Gebiete (Meso- und Makroskala) wird das Gesamtgebiet in kleinere homogene Teilgebiete der Mikroskala zerlegt, welche separat simuliert werden müssen.

Die Simulationsobjekte können durch drei Klassen von Modelleingangsgrößen beschrieben werden: *Klima, Boden* und *Landnutzung* (Abbildung 10).

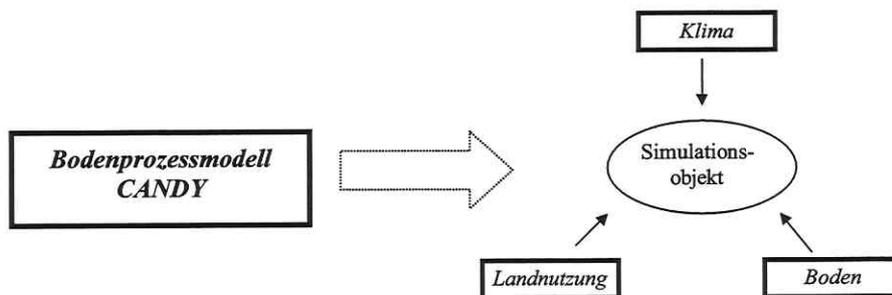


Abb. 10: Beschreibung der Simulationsobjekte von CANDY durch die Klassen *Klima*, *Boden* und *Landnutzung*.

Klima und Boden sind durch die Eigenschaften des Standortes geprägt (geogene Faktoren), die Landnutzung hingegen ist stark durch den Menschen beeinflusst (anthropogener Faktor).

In engen Zusammenhang mit den Simulationsobjekten steht der Begriff des *Szenario*, womit eine Kombination von Bewirtschaftung, Wetterablauf, Bodenprofil und Klimateigenschaften bezeichnet wird. Ein Szenario ist eine Folge von Maßnahmen (Bewirtschaftung), die in einem Zeitraum (Wetterablauf) auf einem bestimmten Standort (Bodenprofil und Klimateigenschaften) ausgeführt wird.

Starken Einfluss auf Modellzustandsgrößen haben Bodeneigenschaften und Wetterablauf im Simulationszeitraum.

Die Validierung des Simulationsmodells CANDY erfolgte unter anderem an den Parzellen des Messfeldes sowie am Statischen Experiment des mitteldeutschen Versuchsstandortes Bad Lauchstädt (FRANKO et al. 1995a) und an den Lysimeterversuchen der Lysimeterstation Brandis (RAMSBECK-ÜLLMANN 1999).

Einige ausgewählte Anwendungen des Modells sind:

- Simulation von Wasser- und Stoffhaushaltsgrößen für ackerbaulich genutzte Flächen der Kreise des Landes Sachsen-Anhalt (FRANKO et al. 1997),
- Modellierung von Bodentemperatur und -feuchte sowie Stickstoff für zwei Standorte Norddeutschlands (FRANKO et al. 1995b),
- Simulation der Auswirkung möglicher Klimaänderungen auf Größen des Wasser- und Stoffhaushalts für ein Testgebiet der Querfurter Platte (FRANKO et al. 1995a).

Rechentechnische Realisierung:

Der Quellcode des Modells ist in Turbo-PASCAL geschrieben, unter Anwendung einer objekt-orientierten Programmierung. Die Objekte ‚Wetter‘, ‚Pflanze‘ und ‚Boden‘ können je nach Fragestellung kombiniert werden. Zur Untersuchung territorialer Zusammenhänge ist eine Kopplung mit einem geografischen Informationssystem auf ARC/INFO - Basis realisiert. Die Bedienung des Modells erfolgt über eine in FOXPRO geschriebene Datenbankoberfläche, welche neben Managementinformationen, Bodenuntersuchungsergebnissen und Festdaten die Module zur Simulation in Tagesschritten, zur Prognose der Stickstoffnachlieferung sowie zur OS-Bilanz verwaltet. Als Datenbanksystem wird dBASE III verwendet. Weitere Informationen zum Simulationssystem CANDY und zur Datenbankstruktur sind im Internet zu finden auf der Seite <http://www.bdf.ufz.de/> unter den Verweisen

→ Themenbereiche

→ Modellierung und Regionalisierung

→ Weiterentwicklung des CANDY-Systems.

2.5 Beschreibung der inhomogenen Wirklichkeit

Im Vorfeld der Entwicklung von Metamodellen für die Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration ist es erforderlich, diejenigen Eingangsgrößen des Prozessmodells zu qualifizieren, welche die genannten Größen am stärksten beeinflussen. In diesem Zusammenhang werden im Folgenden zur genaueren Abbildung der Realität wesentliche Ursachen von Heterogenität und Variabilität für die drei Klassen der CANDY - Eingangsgrößen (vergleiche Abbildung 10) behandelt.

Klima:

Unter Klima wird die statistische Beschreibung der relevanten Klimaelemente für einen Standort (eine definierbare Region, ggf. auch global) verstanden, die für eine nicht zu kleine zeitliche Größenordnung die Gegebenheiten und Variationen der Erdatmosphäre hinreichend ausführlich charakterisiert (SCHÖNWIESE 1994). Die Gesamtheit der an einem Standort auftretenden Wetterabläufe, einschließlich ihrer typischen Aufeinanderfolge, ist vielgestaltig. Die Unsicherheiten im Wetterablauf sind einerseits bedingt durch unterschiedlich starke tages- und jahreszeitliche Schwankungen von Klimaelementen. Andererseits treten zufällige Phänomene auf, beispielsweise Starkniederschläge an aufeinanderfolgenden Tagen oder mehrwöchige Hitzeperioden im Sommer mit fehlenden Niederschlägen.

Weiterhin haben Beobachtungen gezeigt, dass Niederschläge stark lokalen Charakter besitzen (LILJEQUIST & CEHAK 1984, NIESCHULZ 1997), ihre Höhe kann auch kleinräumig stark variieren. Im Gegensatz dazu sind die Klimaelemente Lufttemperatur und Globalstrahlung räumlich weniger heterogen. Ihre Jahresmittelwerte können zum Teil auch für größere Gebiete als nahezu konstant (homogen) angesehen werden, was auch auf den mitteldeutschen Raum zutrifft.

Da eine Entwicklung von Metamodellen auf derartige Anwendungen (Gebiete, die homogen bezüglich Jahressumme der Globalstrahlung und Jahreslufttemperatur sind) beschränkt bleibt, wird im Rahmen dieser Arbeit nur die Heterogenität des Klimaelementes Niederschlag betrachtet (*Klimaheterogenität*).

Landnutzung:

Die Landnutzung wird in Form von Fruchtfolgen abgebildet. Zeitliche Variabilität und räumliche Heterogenität realer Bewirtschaftungsvarianten kommt beispielsweise durch verschiedene Abstufungen im Tierbesatz, dem Einsatz unterschiedlicher Mengen an Mineraldünger oder dem Anbau von Zwischenfrüchten bzw. im Fruchtartenwechsel zum Ausdruck, was jeweils unterschiedlichen Einfluss auf Modellzustandsgrößen hat. Zur Charakteristik der Landnutzung werden im Modell mittlere Jahreswerte verschiedener Modellgrößen verwendet: *Stickstoffsaldo*, *Bedeckungsgrad*, *Kohlenstoffreproduktionsrate*, Einsatz an organischen Düngemitteln, Einsatz an mineralischen Düngemitteln.

In der vorliegenden Arbeit erfolgt keine Bewertung von Grünland und Wald.

Boden:

Zur Behandlung der Heterogenität können innerhalb der Klasse Boden Unsicherheiten auf zwei Betrachtungsebenen unterschieden werden. Eine Form besteht in der Ausprägung mehrerer unterschiedlicher Bodenformen in einem Gebiet, was im Folgenden als *Standortheterogenität* bezeichnet wird (großräumige Bodenheterogenität). Tabelle 7 zeigt derartige Ausprägungen von Bodenformen am Beispiel des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes. Die Daten sind KÖRSCHENS (1998) und KREISCHE & KÖRSCHENS (1996) entnommen.

Tab. 7: Beispiele für mögliche Ausprägungen von Bodenformen im Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebiet. Neben Horizontanzahl sind Orte der Profilaufnahme (Standort) und Bodeneigenschaften angegeben. Tiefe: maximale Tiefe der Profile, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, FAT: Feinanteilgehalt des Bearbeitungshorizontes in Masseprozent (M-%).

Bodenform	Standort	Horizontanzahl	Tiefe [dm]	NFK [mm]	FAT [M-%]
Löss-Schwarzerde	Bad Lauchstädt	3	20	300	28
Löss-Schwarzerde	Seeben	6	15	188	35
Kolluviallöss-Schwarzerde	Polleben	6	13	175	24,4
Löss-Schwarzerde, lehmunterlagert	Klein-Wanzleben	4	20	205	29

Im Modell wird der Boden durch ein Profil, bestehend aus homogenen Horizonten, beschrieben (Abschnitt 2.4, siehe auch Abbildung 5). Dies entspricht jedoch nicht der Realität. Die bodenphysikalischen Eigenschaften werden wesentlich von den Kornfraktionen des Feinbodens und dem Kohlenstoffgehalt der Ackerkrume beeinflusst (HARTGE & HORN 1991, RÜHLMANN 1998, SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 1992, VERECKEN et al. 1989). Verschiedene Untersuchungen zeigen, dass selbst innerhalb eines kleinen mikroskaligen Gebietes starke Schwankungen verschiedener Größen und damit auch der von CANDY benötigten bodenphysikalischen Parameter auftreten können (BECHER 1998, GÖTTLEIN 1995, KUHN 1998, WALDSCHMIDT 1998).

Exemplarisch soll dies anhand von Untersuchungsergebnissen eines mitteldeutschen und eines norddeutschen Standortes demonstriert werden. Bodenuntersuchungen des mitteldeutschen Versuchsstandortes Bad Lauchstädt zeigen mögliche Variationsbreiten von Ton- und Schluffgehalt bei einer Löss-Schwarzerde (Tabelle 8). Die Proben wurden in Abständen von 15 und 45 Metern in jeweils vier Tiefen genommen mit jeweils zwei Wiederholungen, so dass insgesamt 64 Proben aus 8 Entnahmepunkten vorlagen (WALDSCHMIDT 1998).

Tab. 8: Untersuchungsergebnisse der Feinbodentextur des mitteldeutschen Löss-Schwarzerde-Standortes Bad Lauchstädt: Minima, Maxima, Mittelwerte und Streuungen des Ton- und Schluffgehaltes (Angaben in Masseprozent des Feinbodens).

Tiefe (cm)	Merkmal	Minimum	Maximum	Mittelwert	Streuung
20...24	Ton	21,9	25,7	23,4	1,1
	Schluff	69,1	72,8	70,8	0,9
45...49	Ton	18,2	27,6	23,9	2,4
	Schluff	70,1	76,0	72,6	1,7
115...119	Ton	9,9	13,8	11,7	1,2
	Schluff	75,8	87,7	84,4	3,2
185...189	Ton	13,2	19,2	16,7	1,8
	Schluff	21,6	28,3	25,5	2,1

Tabelle 9 zeigt Ergebnisse der Texturuntersuchungen zweier Flächen aus dem Einzugsgebiet des Eisenbachs, welche sich ca. 70 km nördlich von Braunschweig befindet (KUHN 1998). Die Untersuchungsflächen S1 (Größe: 3,2 ha) und S2 (Größe: 7,0 ha) sind landwirtschaftlich genutzte Schläge. Auf S1 erfolgte die Beprobung durch ein rechteckiges regelmäßiges dreiteiliges Raster mit Abständen von 5, 20 und 40 Metern, insgesamt 86 Probeentnahmepunkte. Proben von S2 wurden aus insgesamt 108 Probeentnahmepunkten nach einem rechteckigen Raster mit Äquidistanzen von 18 Metern entnommen. Auch bei diesem norddeutschen Parabraunerde-Braunerde-Standort sind erhebliche Variationsbreiten von Ton- und Schluffgehalt auf Mikroskala sichtbar.

Tab. 9: Untersuchungsergebnisse der Feinbodentextur der beiden Flächen S1 und S2 eines norddeutschen Parabraunerde-Braunerde-Standortes: Minima, Maxima, Mittelwerte und Streuungen des Ton- und Schluffgehaltes (Angaben in Masseprozent des Feinbodens).

Tiefe (cm)	Merkmal	Minimum	Maximum	Mittelwert	Streuung
10...15	Ton	2,3	7,3	4,8	1
	Schluff	8,5	28,7	21	5
40...45	Ton	1,1	11	4,3	1,9
	Schluff	2,3	36,3	15,6	7,8
10...15	Ton	1,4	8	4,3	1,5
	Schluff	4,2	28	15,6	5,4
40...45	Ton	0	10,2	2,9	1,8
	Schluff	0,1	45,8	11,6	9,7

Diese Form der (kleinräumigen) Bodenheterogenität wird im Folgenden als *Texturheterogenität* bezeichnet. Mit der homogenen Betrachtung der Horizonte wird diese bei der Modellierung nicht berücksichtigt. Auf Modellgrößen von CANDY kann die Texturheterogenität jedoch Einfluss haben (ABRAHAM 1997). Dies zeigt auch eine Sensitivitätsuntersuchung einer simulierten Realbewirtschaftung für den Zeitraum 1980 bis 1992 des mitteldeutschen Standortes Brandis bei Leipzig (UTHEMANN 1996). Untersucht wurde die erforderliche Variation verschiedener Modellparameter, um eine fünfprozentige Erhöhung der kumulierten Stickstoffauswaschung am Ende des Rechenzeitraumes zu erzielen. Tabelle 10 zeigt exemplarisch die Sensitivität des CANDY-Parameters Feldkapazität.

Tab. 10: Ergebnisse einer Sensitivitätsanalyse: Variationen des CANDY-Parameters Feldkapazität der Horizonte Ap (FKAP1), Bv (FKAP2) und Sw (FKAP3), um eine fünfprozentige Erhöhung der kumulierten Stickstoffauswaschung zu erreichen.

F_REF: Stickstoffauswaschung der Referenzvariante (in kg/(ha-a)), F_VAR: Stickstoffauswaschung bei Variation des Parameters (in kg/(ha-a)), P_REF: Referenzwert des Parameters (in Volumenprozent), P_VAR: Parameterwert im Ergebnis der Variation (in Volumenprozent), IDX_SENS: Sensibilitätsindex nach LAROCQUE & BANTON (1994).

Parameter	F_REF	F_VAR	P_REF	P_VAR	IDX_SENS
FKAP1	254	268	19,00	17,63	-0,76
FKAP2	254	266	11,00	10,00	-0,52
FKAP3	254	266	14,00	13,44	-1,18

Die Behandlung der Texturheterogenität kann für einige Bodengrößen durch mathematische Verteilungen erfolgen. So ist in der Literatur belegt, dass die hydraulische Leitfähigkeit logarithmisch normalverteilt (KUTILEK & NIELSEN 1994, RICHTER et al. 1996), der Tongehalt bei bestimmten Oberflächenformen annähernd normalverteilt ist (YOUNG et al. 1999). Oft lassen sich Bodengrößen jedoch nicht durch charakteristische Verteilungstypen beschreiben (RICHTER et al. 1996). Sinnvoll erscheint daher die Verwendung mathematischer Intervalle, deren Variationsbreiten anhand von Untersuchungsergebnissen festgelegt werden können, beispielsweise aus Mittelwert und Streuung von Daten wie in den Tabellen 8 und 9 dargestellt.

Zur Behandlung der Texturheterogenität wurde für CANDY ein Profilgenerator als spezielles Simulationswerkzeug entwickelt, worauf im ersten Abschnitt des folgenden Kapitels eingegangen wird. In Abschnitt 3.2 ist das Verfahren zur Entwicklung von Metamodellen dargestellt. Die Wirkung der Texturheterogenität auf die Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration wird in den Metamodellen durch Fehlerterme beschrieben, für deren Quantifizieren Anwendungen des Profilgenerators erforderlich sind (Abschnitt 3.2.4.2). Die Behandlung der zeitlichen Variabilität von Bodeneigenschaften bleibt im Rahmen dieser Arbeit unberücksichtigt.

3 Material und Methoden

3.1 Behandlung der Texturheterogenität

Die Texturheterogenität stellt eine bedeutende Fehlerquelle der CANDY - Eingangsdaten dar. Kleinräumige Schwankungen von Ton-, Schluff- und Sandgehalt rufen Variationen bodenphysikalischer Parameter auf Mikroskala hervor (siehe Abschnitt 2.5). Es ist daher nicht möglich, exakte Werte dieser Parameter anzugeben, da diese eine mehr oder minder große Variationsbreite haben. Bei der Verwendung von Profilen, die aus homogenen Horizonten bestehen, wird die Texturheterogenität nicht berücksichtigt. Im Folgenden wird der Profilgenerator als spezielles Simulationswerkzeug zur Behandlung der Texturheterogenität beim Bodenprozessmodell CANDY vorgestellt. Eine wichtige Komponente des Profilgenerator sind Pedotransferfunktionen, über welche im folgenden Abschnitt ein Überblick gegeben wird.

3.1.1 Pedotransferfunktionen als Werkzeug zur Modellierung der Texturheterogenität

Um den Zusammenhang verschiedener Bodeneigenschaften und -merkmale zu beschreiben, sind im Profilgenerator Pedotransferfunktionen implementiert. Für ihre Definition ist aus BOUMA (1989: 196) folgender Vorschlag entnommen :

„Pedotransfer functions relate different soil characteristics and properties with one another or to land qualities“.

Aus Sicht der Mathematik können in Anlehnung an NIESCHULZ (1997) Pedotransferfunktionen definiert werden als Menge \mathbf{F} von Funktionen, die eine Teilmenge $\mathbf{B} \subseteq \mathbb{R}^q$ in eine Teilmenge $\mathbf{K} \subseteq \mathbb{R}^1$ abbildet:

$$\mathbf{F} = \left\{ f: \vec{b} \mapsto k, \vec{b} \in \mathbf{B}, k \in \mathbf{K} \mid \mathbf{B} = \begin{pmatrix} S \\ T \\ CORG \\ \dots \end{pmatrix}, \mathbf{K} = \{\Theta_r, \Theta_s, TSD, K_s, \dots\} \right\}.$$

Die Menge \mathbf{B} der Argumente enthält in Form q-dimensionaler Vektoren „einfach verfügbare“ oder bereits vorliegende Daten zur Bodenbeschreibung, z. B. Sand- (S) und Tongehalt (T) oder Gehalt an organischem Kohlenstoff ($CORG$). In der Menge \mathbf{K} der Funktionswerte werden Bodengrößen zusammengefasst, die nur mit großem Aufwand zu ermitteln sind, beispielsweise Parameter der Bodenwasserbewegung für Retentionsfunktionen (residualer Wassergehalt Θ_r , Sättigungswassergehalt Θ_s), Trockensubstanzdichte TSD oder gesättigte hydraulische Leitfähigkeit K_s . Hierzu zählen auch statistische Eigenschaften der Argumente (COSBY et al. 1984). Als Menge \mathbf{F} werden alle funktionalen Beziehungen zusammengefasst, mit denen Elemente aus der Menge \mathbf{B} Bodenkenngrößen der Menge \mathbf{K} zugeordnet werden.

Nach der Verschiedenheit ihrer Ansätze ist eine Klassifikation der Pedotransferfunktionen in drei Gruppen möglich (DIEKKRÜGER 1992, TIETJE 1993, TIETJE & HENNIGS 1993):

- Punktregression (PUCKETT et al. 1985),
- Parameterregression (VERECKEN et al. 1989) und
- Physiko-empirische Ansätze (CAMPBELL 1985).

Punktregressionsverfahren erlauben beispielsweise eine direkte Schätzung von Bodenwassergehalten für ausgewählte diskrete Potentiale der Bodenmatrix. Bei Parameterregressionsmethoden wird von Retentionsfunktionen ausgegangen, deren Parameter mit Pedotransferfunktionen aus Bodeneigenschaften zu bestimmen sind. Im Gegensatz zu Punktregressionsverfahren sind Letztere für Bereiche von Texturklassen anwendbar (TIETJE & TAPKENHINRICHS 1993).

Mit physikalisch basierten Ansätzen wird aus Korngrößenverteilung die Porengrößenverteilung bestimmt und über die Kapillaritätsgleichung die Retentionsfunktion ermittelt.

Einige Literaturbeispiele für Anwendungen von Pedotransferfunktionen sind DIEKKRÜGER (1992), KUHN (1998) und NIESCHULZ (1997) zu entnehmen. Eine Einschätzung der Pedotransferfunktionen in Bezug auf Anwendbarkeit und Genauigkeit ist in TIETJE & TAPKENHINRICHS (1993) enthalten.

Neben „klassischen“ Regressionsverfahren erfolgt in letzter Zeit die Verwendung neuronaler Netze zur Quantifizierung von Pedotransferfunktionen, wobei zum Teil bessere Ergebnisse erzielt wurden (PACHEPSKY et al. 1996, SCHAAP et al. 1998, TAMARI et al. 1996). Ein Anwendungsbeispiel solcher Verfahren ist in GÖBEL (2000) enthalten.

Nach ihrer Systematik können Pedotransferfunktionen in zwei Gruppen eingeteilt werden (WÖSTEN et al. 1995):

- *kontinuierlich* (continuous pedotransfer functions),
z. B. in VERECKEN et al. (1989), RAWLS & BRAKENSIEK (1985) und
- *diskret* (Klassenpedotransferfunktionen, class pedotransfer functions),
beispielsweise in ZACHARIAS & BOHNE (1997).

Im Unterschied zu kontinuierlichen Pedotransferfunktionen liefern letztere für verschiedene Argumente innerhalb einer Texturklasse keine Differenzen der Funktionswerte, lediglich bei verschiedenen Texturklassen werden solche sichtbar. Um Wirkungen kleinräumiger Variationen der Feinbodentextur abzubilden sind daher die kontinuierliche Verfahren besser geeignet, da diese bei verschiedenen Argumenten unterschiedliche Funktionswerte liefern. Sie werden deshalb auch zur Bestimmung der bodenphysikalischen Parameter des Modells CANDY im Profilgenerator verwendet. Mit diesem kann für jedes homogene Bodenprofil der CANDY-Datenbank eine Menge von Profilen erzeugt werden, deren Elemente (CANDY-Profile) sich in den bodenphysikalischen Eigenschaften unterscheiden.

3.1.2 Aufbau und Funktionsweise des Profilgenerators

Für die Anwendung des Profilgenerators auf einen Standort sind vom Klima die langjährigen Mittelwerte von Lufttemperatur (LT) und Niederschlagssumme (NIED) erforderlich, von der Landnutzung muss die mittlere jährliche Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) bekannt sein. Der Boden wird beschrieben als Profil der CANDY-Datenbank bestehend aus homogenen Horizonten (Abbildung 5, Abschnitt 2.4). Für diese müssen Mittelwerte und Schwankungsbreiten von Ton- (T) und Schluffgehalt (U) sowie der Mittelwert für Summe aus Fein- und Mittelschluff (FM) bekannt sein oder geschätzt werden.

Auf dieser Datengrundlage werden für jeden Horizont variable Werte von Ton und Schluff erzeugt und daraus die von CANDY benötigten bodenphysikalischen Parameter generiert: Trockenrohddichte, Trockensubstanzdichte, Feldkapazität, Permanentwelkepunkt, Feinanteilgehalt und Versickerungsparameter LAMBDA. Ergebnis der Anwendung des Profilgenerators ist eine Stichprobe \mathcal{P} von Profilen, deren Elemente durch Zusammenbau aus Horizonten mit unterschiedlichen bodenphysikalischen Eigenschaften entstehen. Jedes von ihnen ist als unabhängige Bodensäule ein Repräsentant des homogenen Bodens des Standortes und kann für Rechnungen mit dem Prozessmodell verwendet werden.

Abbildung 11 zeigt ein Anwendungsschema des Profilgenerators.

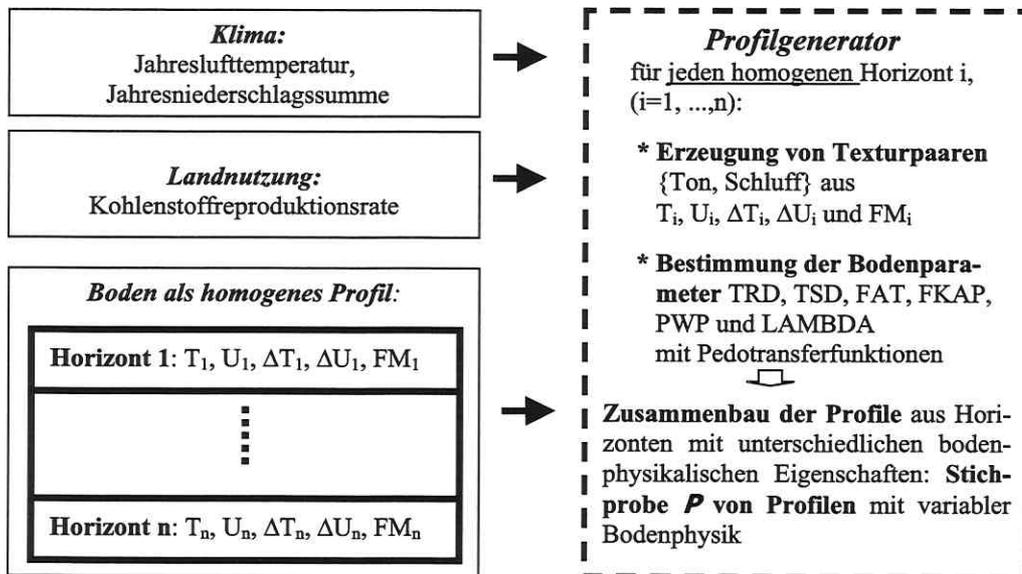


Abb. 11: Anwendung des Profilgenerators: Erzeugung von Texturpaaren {Ton, Schluff} aus Informationen zu Klima, Landnutzung und ‚mittleren‘ Bodenkennwerten; Generierung der CANDY-Parameter der Bodenphysik für jeden Horizont; Zusammenbau der Profile. Abkürzungen. Mittelwerte für Textur des i -ten Horizonts, $i = 1, \dots, n$: T_i : Tongehalt, U_i : Schluffgehalt, ΔT_i : Variationsbreite des Tongehalts, ΔU_i : Variationsbreite des Schluffgehalts, FM_i : Summe aus Fein- und Mittelschluff. Bodenparameter: TRD: Trockenrohddichte, TSD: Trockensubstanzdichte, FAT: Feinanteilgehalt, FKAP: Feldkapazität, PWP: Permanentwelkepunkt, LAMBDA: Versickerungsparameter.

Um die Wirkung der Texturheterogenität auf eine Fruchtfolge bei einem Wetterablauf zu untersuchen, müssen alle Profile der Stichprobe simuliert werden. Aus den Rechenergebnissen sind mathematische Verteilungen für Zustandsgrößen konstruierbar (Abbildung 15). Diese Verteilungen sind abhängig von Fruchtfolge, Wetterablauf sowie Eigenschaften des homogenen Profils, was Anwendungen des Profilgenerators auf verschiedene Profile und Simulation unterschiedlicher Szenarien gezeigt haben.

Im Folgenden werden die beiden Teilschritte des Profilgenerators *Erzeugung von Texturpaaren* und *Generierung der Modellparameter* im Detail erläutert. Die Methoden können anhand von Beispielen nachvollzogen werden.

Beispiel 3.1:

Der Profilgenerator soll auf die Bodenform Lehm-Parabraunerde eines Standortes mit 604 mm Jahresniederschlag und 9,3 °C Jahreslufttemperatur angewendet werden.

Das Profil besteht aus drei Horizonten (Ap, Bt und Cc), deren bodenphysikalische Eigenschaften durch Untersuchungen bestimmt worden sind. In die CANDY-Datenbank werden für dieses Beispiel die in Tabelle 11 stehenden Parameter eingetragen, die Werte des Versickerungsparameters wurden jeweils aus dem Feinanteil bestimmt.

Tab. 11: Bodenphysikalische Parameter der CANDY-Datenbank für die drei Horizonte Ap, Bt und Cc der Bodenform Lehm-Parabraunerde. Einheiten: M% = Masseprozent des Feinbodens, Vol.% = Volumenprozent, M% = Masseprozent.

Parameter	Horizont und Tiefe		
	Ap	Bt	Cc
	0 bis 3 dm	3 bis 6 dm	6 bis 20 dm
	Wert		
Ton [M%]	14	23	16
Schluff [M%]	31	32	32
Summe Fein- und Mittelschluff [M%]	12	13	14
abschlämmbare Teilchen [M%]	26	36	30
Feinanteilgehalt [M%]	17,8	26,4	19,8
Trockenrohddichte [g/ccm]	1,66	1,63	1,79
Trockensubstanzdichte [g/ccm]	2,63	2,67	2,67
Feldkapazität [Vol.%]	24	27	25
Permanentwelkepunkt [Vol.%]	9	16	14
Versickerungsparameter LAMBDA [1/mm/d]	0,125	0,075	0,079
organischer Kohlenstoffgehalt [M% Gesamtboden]	1,6	0,0	0,0

Für die Kohlenstoffreproduktionsrate als Eingangsgröße des Profilgenerators (Abbildung 11) wird ein Wert von 9 dt/(ha-a) angenommen, welcher als ‚Standardwert‘ für normal versorgte Böden gilt (FRANKO & SCHENK 2001). Grundlage der bodenphysikalischen Parameter sind die Kennwerte der Hauptbodenform Lehm – Parabraunerde aus KUNDLER (1989: 90).

3.1.2.1 Erzeugung von Texturpaaren

Die Beschreibung der Texturheterogenität eines homogenen Horizontes durch verschiedene Texturpaare {T, U} kann sowohl stochastisch als auch deterministisch erfolgen. Als Grundlage dafür benötigen beide Verfahren Mittelwert sowie Schwankungsbreite von Tongehalt (T_M und ΔT) sowie Schluffgehalt (U_M und ΔU) des Horizontes.

Bei der stochastischen Modellierung der Texturheterogenität werden Ton- und Schluffgehalt als Realisierungen einer zweidimensionalen Zufallsgröße betrachtet, deren Verteilungsfunktion bekannt sein muss. Die rechentechnische Realisierung erfolgt unter Verwendung von T_M , ΔT , U_M und ΔU mit verschiedenen Algorithmen (ZIELINSKI 1978). Es muss beachtet werden, dass die Summe aus Ton und Schluff immer kleiner oder gleich 100 ist.

Beim deterministischen Verfahren werden ausgehend von T_M , ΔT , U_M , ΔU alle ganzzahligen Texturpaare $\{T; U\}$ gebildet, die im Gitter $[T_M - \Delta T, T_M + \Delta T] \times [U_M - \Delta U, U_M + \Delta U]$ liegen (Abbildung 12). Mit dieser Auflösung des Texturgitters ergibt sich die Gesamtanzahl der für einen Horizont verschiedenen Texturpaare, in Abhängigkeit von ΔT und ΔU , als Produkt aus den Anzahlen der generierten Ton- und Schluffwerte: $(2 \cdot \Delta T + 1) \cdot (2 \cdot \Delta U + 1)$.

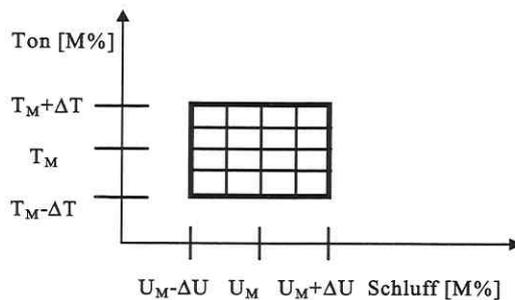


Abb. 12: Stützstellenwahl für Ton und Schluff zur deterministischen Beschreibung der Texturheterogenität eines Horizontes. T_M : Mittelwert Tongehalt, ΔT : Variationsbreite Tongehalt, U_M : Mittelwert Schluffgehalt, ΔU : Variationsbreite Schluffgehalt, alle Angaben in Masseprozent des Feinbodens [M%].

Beispiel 3.2:

Für die drei Horizonte Ap, Bt und Cc der Lehm-Parabraunerde aus Beispiel 3.1 soll die Texturheterogenität deterministisch beschrieben werden.

Aus Untersuchungen des Profils seien folgende mittlere Variationsbreiten von Ton- (ΔT) und Schluffgehalt (ΔU) bekannt (in Masseprozent des Feinbodens): Horizont Ap: $\Delta T = 1$, $\Delta U = 3$; Horizont Bt: $\Delta T = 1$, $\Delta U = 1$; Horizont Cc: $\Delta T = 2$, $\Delta U = 1$. Für die Mittelwerte von Ton- (T_M) und Schluffgehalt (U_M) werden die Zahlen aus Tabelle 11, Beispiel 3.1 entnommen, womit die Texturheterogenität der Horizonte durch folgende Gitter charakterisiert werden kann (Tabelle 12).

Tab. 12: Mittelwerte und Variationsbreiten von Ton- und Schluffgehalt sowie Texturgitter zur deterministischen Beschreibung der Texturheterogenität für das Beispiel der Lehm-Parabraunerde.

Horizont	Ton		Schluff		Texturgitter
	T_M	ΔT	U_M	ΔU	
Ap	14	1	31	3	[13; 15]x[28; 34]
Bt	23	1	32	1	[22; 24]x[31; 33]
Cc	16	2	32	1	[14; 18]x[31; 33]

Laut Tabelle 12 ergeben sich für den Ap-Horizont die 21 Texturpaare {13, 28}, {13, 29}, {13, 30}, {13, 31}, {13, 32}, {13, 33}, {13, 34}, {14, 28}, {14, 29}, {14, 30}, {14, 31}, {14, 32}, {14, 33}, {14, 34}, {15, 28}, {15, 29}, {15, 30}, {15, 31}, {15, 32}, {15, 33} und {15, 34}. Für den Horizont Bt werden folgende 9 Texturpaare erhalten: {22, 31}, {22, 32}, {22, 33}, {23, 31}, {23, 32}, {23, 33}, {24, 31}, {24, 32} und {24, 33}. Die Heterogenität des Horizonts Cc wird beschrieben durch die 15 Texturpaare {14, 31}, {14, 32}, {14, 33}, {15, 31}, {15, 32}, {15, 33}, {16, 31}, {16, 32}, {16, 33}, {17, 31}, {17, 32}, {17, 33}, {18, 31}, {18, 32} und {18, 33}.

3.1.2.2 Generierung der Modellparameter

Zur Abbildung der Texturheterogenität werden im Profilgenerator kontinuierliche Pedotransferfunktionen angewendet (vergl. Abschnitt 3.1.1). Verschiedene Texturpaare $\{T, U\}$ bewirken Parameterdifferenzen. Die Variation der Parameterwerte ist abhängig von den Schwankungsbreiten von Ton und Schluff. Der Algorithmus der Generierung (Abbildung 13) ist auf jeden Horizont des Profils in der CANDY-Datenbank anzuwenden.

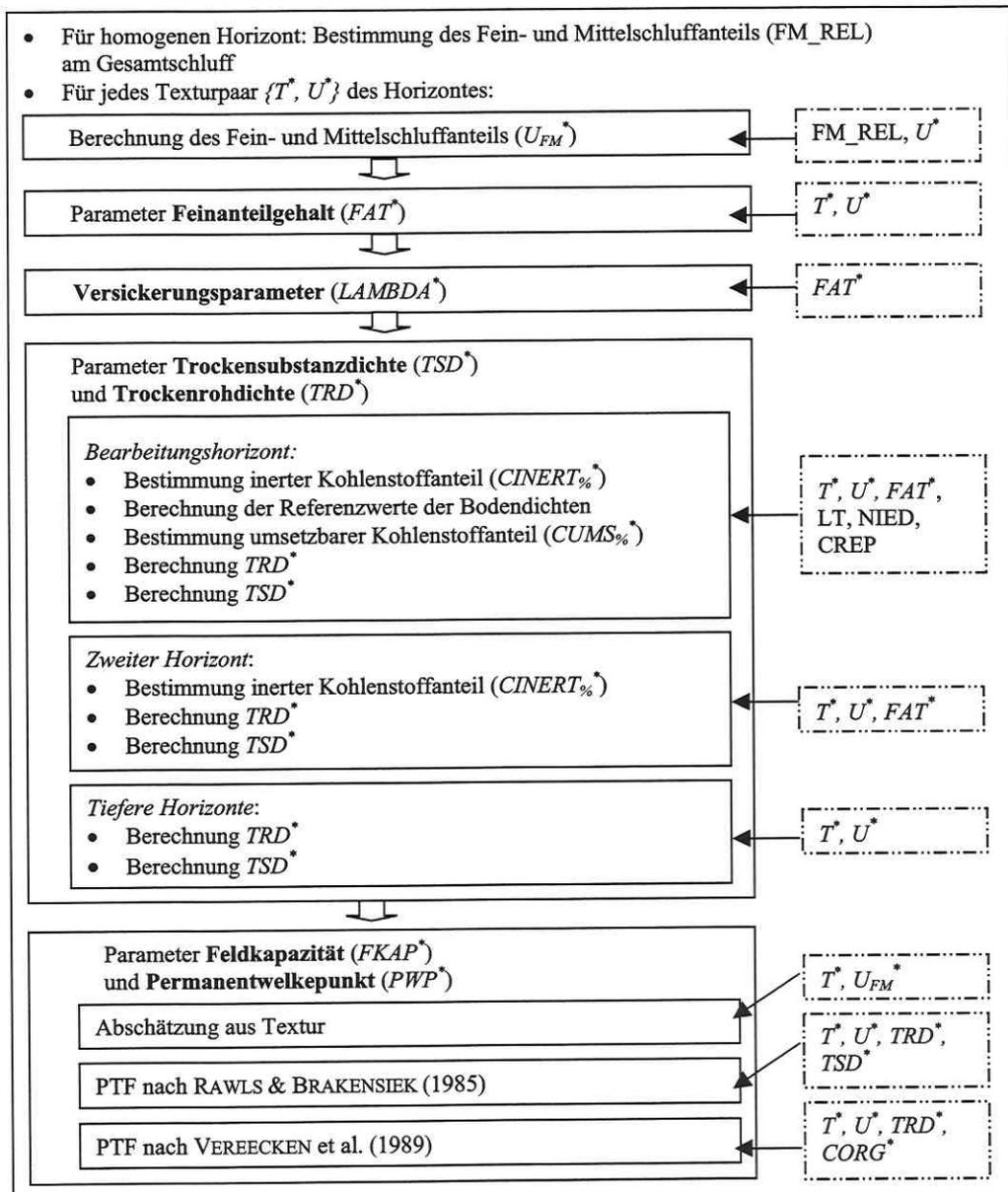


Abb. 13: Algorithmus der Parametergenerierung. PTF: Pedotransferfunktion.

Im Folgenden wird exemplarisch die Behandlung des Texturpaares $\{T^*, U^*\}$ eines Horizontes beschrieben, wobei für die Eingangsdaten des Profilgenerators folgende Bezeichnungen verwendet werden:

- LT* langjähriges Mittel der Lufttemperatur des Standortes (in °C),
NIED langjähriges Mittel der Niederschlagssumme des Standortes (in mm/a),
CREP langjährige Kohlenstoffproduktionsrate (in dt C/(ha·a)),
T_M mittlerer Tongehalt des homogenen Horizontes,
U_M mittlerer Schluffgehalt des homogenen Horizontes und
FM_M Mittelwert für Summe aus Fein- und Mittelschluff des homogenen Horizonts
 (*T_M*, *U_M* und *FM_M* in Masseprozent des Feinbodens).

Zuerst wird für den homogenen Horizont der Anteil von Fein- und Mittelschluff am Gesamtschluff bestimmt:

$$FM_REL = \frac{FM_M}{U_M} \quad (3.1)$$

mit

- FM_REL* Anteil des Fein- und Mittelschluffs am Gesamtschluff für homogenen Horizont,
U_M Mittelwert für Schluff des homogenen Horizonts,
FM_M Mittelwert für Fein- und Mittelschluff des homogenen Horizonts
 (*U_M* und *FM_M* in Masseprozent des Feinbodens).

Anmerkung:

FM_REL ist eine Konstante des homogenen Horizontes, mit welcher für jedes generierte Texturpaar die Summe aus Fein- und Mittelschluff berechnet wird.

Bestimmung des Masseanteils von Fein- und Mittelschluff am Gesamtschluff für $\{T^*, U^*\}$:

$$U_{FM}^* = FM_REL \cdot U^* \quad (3.2)$$

mit

- FM_REL* Anteil des Fein- und Mittelschluffs am Gesamtschluff des homogenen Horizonts,
U_{FM}^{}* Fein- und Mittelschluffgehalt,
U^{}* Schluffgehalt (*U_{FM}^{*}* und *U^{*}* in Masseprozent des Feinbodens).

Der Parameter Feinanteilgehalt, welcher der Summe aus Ton und Feinschluff entspricht (Kapitel 1), wird aus $\{T^*, U^*\}$ mit folgender Beziehung bestimmt (FRANKO 1998a):

$$FAT^* = 1,22 + 0,104 \cdot U^* + 0,952 \cdot T^* \quad (3.3)$$

mit

T^* Tongehalt,
 U^* Schluffgehalt,
 FAT^* Feinanteilgehalt (alle Angaben in Masseprozent des Feinbodens).

Der Versickerungsparameter $LAMBDA^*$ kann nun aus FAT^* bestimmt werden (FRANKO 1998b):

$$\begin{aligned} LAMBDA^* &= 1,6 - 0,187 \cdot FAT^* + 0,00905 \cdot FAT^{*2} && \text{für } FAT^* \leq 20 \\ &\quad - 0,000213 \cdot FAT^{*3} + 0,00000187 \cdot FAT^{*4} \\ LAMBDA^* &= 0,075 && \text{für } FAT^* > 20 \end{aligned} \quad (3.4)$$

mit

$LAMBDA^*$ Versickerungsparameter (in 1/(mm·d)) nach GLUGLA (1969).

Beispiel 3.3:

Für den Horizont A_p der Lehm-Parabraunerde sollen für das Texturpaar {15; 34} die CANDY-Parameter der Bodenphysik bestimmt werden.

Nach Formel (3.1) ist

$$FM_REL = \frac{FM_M}{U_M} = \frac{12}{31} = 0,387,$$

und damit $U_{FM}^* = FM_REL \cdot U^* = 0,387 \cdot 34 = 13,2$ (Anwendung von Formel (3.2)).

Der Anteil abschlämmbarer Teilchen (A^*) kann für das Texturpaar {15; 34} berechnet werden aus $A^* = T^* + U_{FM}^* = 15 + 13,2 = 28,2$.

Feinanteilgehalt und Versickerungsparameter ergeben sich nach den Formeln (3.3) und (3.4) zu

$$FAT^* = 1,22 + 0,104 \cdot 34 + 0,952 \cdot 15 = 19 \text{ und}$$

$$\begin{aligned} LAMBDA^* &= 1,6 - 0,187 \cdot 19 + 0,00905 \cdot 19^2 \\ &\quad - 0,000213 \cdot 19^3 + 0,00000187 \cdot 19^4 = 0,100. \end{aligned}$$

Da Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte in enger Beziehung zum organischen Kohlenstoff stehen, wird bei der Generierung der Modellparameter zwischen Bearbeitungshorizont, zweitem und tieferen Horizonten unterschieden.

Bearbeitungshorizont:

Der organische Kohlenstoff besteht aus inerten und umsetzbaren Anteil (vergl. Abbildung 9 sowie in Abschnitt 2.4: *Abbau und Umsatz der organischen Substanz*). Letzterer wird stark von der biologischen Aktivität beeinflusst, die in Form der wirksamen Mineralisierungszeit in Abhängigkeit von Jahreslufttemperatur, Jahresniederschlag und Feinanteilgehalt geschätzt werden kann.

Zur Generierung der Modellparameter Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte des Bearbeitungshorizontes sind die Teilschritte (K1) bis (K4) auszuführen (Abbildung 14).

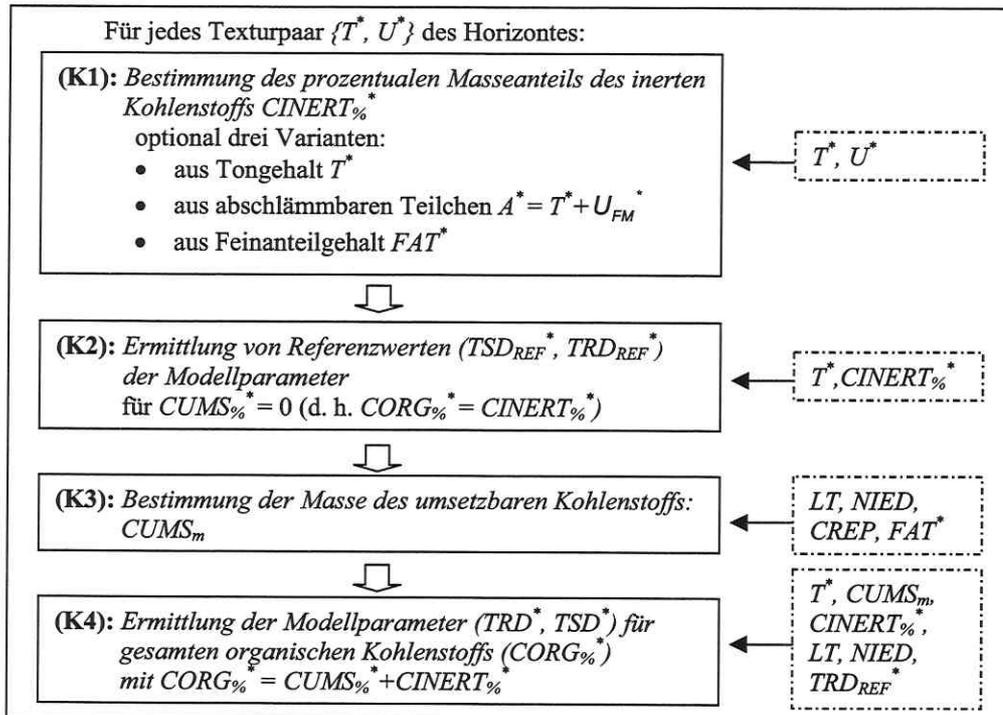


Abb. 14: Teilschritte der Generierung von Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte des Bearbeitungshorizontes.

(K1) Bestimmung des prozentualen Masseanteils des inerten Kohlenstoffs.

Um eine Anpassung an unterschiedliche Standorte vorzunehmen, bestehen folgende Berechnungsmöglichkeiten:

a) aus dem Tongehalt T^* des Texturpaares $\{T^*, U^*\}$ (RÜHLMANN 1998):

$$CINERT\%^* = 1,097 \cdot (1 - \exp(-0,0747 \cdot T^*)) \quad (3.5)$$

mit

$CINERT\%^*$ prozentualer Masseanteil des inerten Kohlenstoffs,
 T^* Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),

b) aus dem errechneten Gehalt an abschlämbaren Teilchen A^* (RÜHLMANN 1998):

$$CINERT\%^* = 0,017 \cdot A^* - 0,001 \cdot \exp(0,075 \cdot A^*) \quad (3.6)$$

mit

$CINERT\%^*$ prozentualer Masseanteil des inerten Kohlenstoffs,

A^* abschlämmbare Teilchen (in Masseprozent des Feinbodens),
 $A^* = T^* + U_{FM}^*$, U_{FM}^* Summe aus Fein- und Mittelschluff (aus Formel (3.2)),
 T^* Tongehalt des Texturpaares $\{T^*, U^*\}$,

c) aus dem errechneten Feinanteilgehalt FAT^* (KÖRSCHENS 1980):

$$CINERT_{\%}^* = f_1 \cdot FAT^* \quad (3.7)$$

mit

$CINERT_{\%}^*$ prozentualer Masseanteil des inerten Kohlenstoffs,
 FAT^* Feinanteilgehalt in Masseprozent des Feinbodens (aus Beziehung (3.3)).
 f_1 Proportionalitätsfaktor zur Beschreibung der Abhängigkeit
des inerten Kohlenstoffgehaltes vom Feinanteil.

Anmerkung:

In der vorliegenden Arbeit wurde nach KÖRSCHENS (1980) für f_1 der Wert 0,05 verwendet.

(K2) Bestimmung der Referenzwerte von Trockensubstanzdichte und Trockenrohichte für den inerten Kohlenstoff.

Verwendet wird ein Ansatz nach RÜHLMANN (1998). Die Referenzwerte beider Modellparameter werden ohne Berücksichtigung des umsetzbaren Kohlenstoffs berechnet.

$$TSD_{REF}^* = \frac{1}{\frac{1 - OBSM}{DMIN} + \frac{OBSM}{0,488 + 0,7359 \cdot \frac{CINERT_{\%}^*}{100}}} \quad (3.8)$$

mit

$$DMIN = 2,659 + 0,003 \cdot T^*, \quad OBSM = \frac{\frac{CINERT_{\%}^*}{100}}{0,488 + 0,2 \cdot \frac{CINERT_{\%}^*}{100}}$$

T^* Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),
 $CINERT_{\%}^*$ prozentualer Anteil des inerten Kohlenstoffs,
 TSD_{REF}^* Referenzwert der Trockensubstanzdichte (in g/cm^3)

und

$$TRD_{REF}^* = a \cdot \exp(K_1 \cdot CINERT_{\%}^*) + b \cdot \exp(K_2 \cdot T^*) + c \cdot TSD_{REF}^* \quad (3.9)$$

mit

$a = 0,4981$, $b = 0,2471$, $c = 0,3787$, $K_1 = -0,5389$, $K_2 = -0,0234$,
 T^* Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),
 $CINERT_{\%}^*$ prozentualer Anteil des inerten Kohlenstoffs,
 TSD_{REF}^* Referenzwert der Trockensubstanzdichte (in g/cm^3),
 TRD_{REF}^* Referenzwert der Trockenrohichte (in g/cm^3).

Die Masse des umsetzbaren Kohlenstoffs wird in Teilschritt **(K3)** bestimmt, sein Einfluss auf die Modellparameter in **(K4)**.

(K3) Schätzung der biologischen Aktivität und Berechnung der Masse des umsetzbaren Kohlenstoffs.

Nach FRANKO & OELSCHLÄGEL (1995) kann die biologische Aktivität in Form der wirksamen Mineralisierungszeit in Tagen pro Jahr für den Standort bestimmt werden aus:

$$WMZ = p0 + p1 \cdot LT + p2 \cdot NIED \quad (3.10)$$

mit

WMZ wirksame Mineralisierungszeit (in d/a),

LT langjähriges Mittel der Lufttemperatur (in °C),

$NIED$ langjähriges Mittel der Niederschlagssumme (in mm).

Die Koeffizienten $p0$, $p1$ und $p2$ sind in Abhängigkeit vom Feinanteilgehalt (FAT^* aus Beziehung (3.3)) zu schätzen (FRANKO & OELSCHLÄGEL 1995).

Die Berechnung der Absolutmasse des umsetzbaren Kohlenstoffs im Bearbeitungshorizont ($CUMS_m$) erfolgt aus biologischer Aktivität und Kohlenstoffreproduktionsrate (FRANKO 1996):

$$CUMS_m = CREP \cdot \frac{683}{WMZ} \cdot 100000 \quad (3.11)$$

mit

$CUMS_m$ absolute Masse des umsetzbaren Kohlenstoffs (in g bezogen auf 1 ha des Bearbeitungshorizontes),

$CREP$ Kohlenstoffreproduktionsrate (in dt C/(ha·a)),

WMZ wirksame Mineralisierungszeit (in d/a).

(K4) Berechnung von Trockensubstanzdichte und Trockenrohddichte für den gesamten organischen Kohlenstoff.

Zunächst muss die in Schritt **(K3)** erhaltene Absolutmasse des umsetzbaren Kohlenstoffs in eine Relativzahl umgerechnet werden:

$$CUMS_{\%}^* = \frac{CUMS_m}{m_{Ap}} \cdot 100 = \frac{CUMS_m}{V \cdot TRD^*} \cdot 100 \quad (3.12)$$

mit

$CUMS_{\%}^*$ prozentualer Anteil des umsetzbaren Kohlenstoffs im Bearbeitungshorizont,

$V = m_b \cdot 10^8$ Volumen von 1 ha Bearbeitungshorizont (in cm³), wobei m_b die Mächtigkeit des Bearbeitungshorizontes ist (in cm),

m_{Ap} Gesamtmasse von 1 ha Bearbeitungshorizont (in g),

$CUMS_m$ Masse des umsetzbaren Kohlenstoffs (in g),

TRD^* Trockenrohddichte des Bearbeitungshorizontes bei Berücksichtigung des gesamten organischen Kohlenstoffs (in g/cm³).

Die Trockenrohddichte des Bearbeitungshorizontes mit Berücksichtigung des umsetzbaren Kohlenstoffs kann aus dem Referenzwert der Trockenrohddichte (TRD_{REF}^* aus Schritt (K2)) bestimmt werden. Der Einfluss des Kohlenstoffgehaltes auf die Änderung dieser Größe lässt sich beschreiben durch:

$$TRD^* = TRD_{REF}^* - f2 \cdot (CORG_{\%}^* - CINERT_{\%}^*) = TRD_{REF}^* - f2 \cdot CUMS_{\%}^* \quad (3.13)$$

mit

TRD^*	Trockenrohddichte (in g/cm^3),
$f2$	Proportionalitätsfaktor zur Beschreibung der Änderung der Trockenrohddichte bei einer Änderung des organischen Kohlenstoffgehaltes von einem Prozent,
$CUMS_{\%}^*$	prozentualer Anteil des umsetzbaren Kohlenstoffs,
$CINERT_{\%}^*$	prozentualer Anteil des inerten Kohlenstoffs,
$CORG_{\%}^*$	prozentualer Anteil des gesamten organischen Kohlenstoffs, $CORG_{\%}^* = CINERT_{\%}^* + CUMS_{\%}^*$.

Unter Verwendung von Formel (3.12) erhält man aus Beziehung (3.13):

$$TRD^* = TRD_{REF}^* - f2 \cdot \frac{CUMS_m}{m_b \cdot 10^8 \cdot TRD^*} \cdot 100. \quad (3.14)$$

Umstellen von Formel (3.13) und Multiplikation mit TRD^* liefert die quadratische Gleichung

$$TRD^{*2} - TRD_{REF}^* \cdot TRD^* + f2 \cdot \frac{CUMS_m \cdot 100}{V} = 0 \quad (3.15)$$

die als Lösungen

$$TRD^* = \frac{TRD_{REF}^*}{2} \pm \sqrt{\frac{TRD_{REF}^{*2}}{4} - f2 \cdot \frac{CUMS_m \cdot 100}{m_b \cdot 10^8}} \quad (3.16)$$

hat, wobei nur

$$TRD^* = \frac{TRD_{REF}^*}{2} + \sqrt{\frac{TRD_{REF}^{*2}}{4} - f2 \cdot \frac{CUMS_m \cdot 100}{m_b \cdot 10^8}} \quad (3.17)$$

eine bodenphysikalisch sinnvolle Lösung ist.

Anmerkung:

Nach KÖRSCHENS (1980) wird für f_2 ein sehr großer Bereich angegeben. In der vorliegenden Arbeit wurde nach BAUER (1974), TIETJEN & SAUERLANDT (1974) und COOKE (1977) für den Proportionalitätsfaktor der Wert -0,15 als gerundeter Mittelwert verwendet.

Zur Bestimmung des prozentualen Masseanteils vom umsetzbaren Kohlenstoff ($CUMS\%$) wird der mit Formel (3.17) erhaltene Wert für TRD^* in Gleichung (3.12) eingesetzt.

Die Trockensubstanzdichte des Bearbeitungshorizontes kann nun nach RÜHLMANN (1998) für den gesamten organischen Kohlenstoff berechnet werden:

$$TSD^* = \frac{1}{\frac{1-OBSM}{DMIN} + \frac{OBSM}{0,488 + 0,7359 \cdot \frac{CORG\%}{100}}}$$

mit

$$DMIN = 2,659 + 0,003 \cdot T^*,$$

$$OBSM = \frac{\frac{CORG\%}{100}}{0,488 + 0,2 \cdot \frac{CORG\%}{100}},$$

T^* Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),

TSD^* Trockensubstanzdichte des Bearbeitungshorizontes (in g/cm^3),

$$CORG\% = CINERT\% + CUMS\%.$$

Für den Fall, dass das Texturpaar $\{T^*, U^*\}$ zum Bearbeitungshorizont gehört, sind mit TRD^* bzw. TSD^* die Werte der Modellparameter Trockenrohddichte bzw. Trockensubstanzdichte berechnet.

Beispiel 3.4:

Für das Texturpaar $\{15; 34\}$ des Horizonts Ap (Bearbeitungshorizont der Lehm-Parabraunerde) sollen die CANDY-Modellparameter Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte bestimmt werden.

Es sind die Teilschritte (K1) bis (K4) auszuführen.

(K1) Zur Bestimmung des prozentualen Anteils vom inerten Kohlenstoff wird Formel (3.6) verwendet, mit den in Beispiel 3.3 ermittelten Wert der abschlämmbaren Teilchen:

$$CINERT\% = 0,017 \cdot A^* - 0,001 \cdot \exp(0,075 \cdot A^*) = 0,017 \cdot 28,2 - 0,001 \cdot \exp(0,075 \cdot 28,2) = 0,47.$$

(K2) Die Referenzwerte der Modellparameter ergeben sich nach den Formeln (3.8) und (3.9) zu

$$TSD_{REF}^* = \frac{1}{\frac{1-OBSM}{DMIN} + \frac{OBSM}{0,488 + 0,7359 \cdot \frac{CINERT_{\%}^*}{100}}}$$

$$= \frac{1}{\frac{1-0,0096}{2,704} + \frac{0,0096}{0,488 + 0,7359 \cdot \frac{0,47}{100}}} = 2,59$$

mit

$$DMIN = 2,659 + 0,003 \cdot T^* = 2,659 + 0,003 \cdot 15 = 2,704,$$

$$OBSM = \frac{\frac{CINERT_{\%}^*}{100}}{0,488 + 0,2 \cdot \frac{CINERT_{\%}^*}{100}} = \frac{\frac{0,47}{100}}{0,488 + 0,2 \cdot \frac{0,47}{100}} = 0,0096,$$

$$TRD_{REF}^* = 0,4981 \cdot \exp(-0,5389 \cdot 0,47) + 0,2471 \cdot \exp(-0,0234 \cdot 15) + 0,3787 \cdot 2,59 = 1,54$$

(K3) Nach Formel (3.10) wird die wirksame Mineralisierungszeit bestimmt:

$$WMZ = 23,37 + 2,175 \cdot 9,3 - 0,01987 \cdot 604 = 31,6,$$

wobei die Parameter p_0 , p_1 und p_2 nach FRANKO & OELSCHLÄGEL (1995) durch Interpolation ermittelt wurden. Jahreslufttemperatur und -niederschlag sind Beispiel 3.1 entnommen.

Die Masse des umsetzbaren Kohlenstoffs (in g) wird mit Formel (3.11) berechnet, wobei die Kohlenstoffproduktionsrate $9 \text{ dt}/(\text{ha} \cdot \text{a})$ beträgt, vergleiche Beispiel 3.1:

$$CUMS_m = CREP \cdot \frac{683}{WMZ} \cdot 100000 = 9 \cdot \frac{683}{31,6} \cdot 100000 = 19452532.$$

(K4) Bestimmung der Modellparameter nach den Formeln (3.12) bis (3.17).

Aus $CUMS_m = 19452532$ und dem Referenzwert $TRD_{REF} = 1,54 \text{ g/cm}^3$ kann mit Formel (3.17) die Trockenrohichte berechnet werden:

$$TRD^* = \frac{1,54}{2} + \sqrt{\frac{1,54^2}{4} - 0,15 \cdot \frac{19452532 \cdot 100}{30 \cdot 10^8}} = 1,47,$$

der prozentuale Anteil des umsetzbaren Kohlenstoffs beträgt nach Formel (3.12)

$$CUMS_{\%}^* = \frac{CUMS_m}{V \cdot TRD^*} \cdot 100 = \frac{19452532}{30 \cdot 10^8 \cdot 1,47} \cdot 100 = 0,44.$$

Die Trockensubstanzdichte TSD^* kann nun für den Gesamtgehalt des organischen Kohlenstoffs von $0,47+0,44 = 0,91$ Masseprozent bestimmt werden:

$$TSD^* = \frac{1}{\frac{1-OBSM}{DMIN} + \frac{OBSM}{0,488 + 0,7359 \cdot \frac{CORG_{\%}^*}{100}}}$$

$$= \frac{1}{\frac{1-0,0186}{2,704} + \frac{0,0186}{0,488 + 0,7359 \cdot \frac{0,91}{100}}} = 2,50$$

mit

$$OBSM = \frac{\frac{CORG_{\%}^*}{100}}{0,488 + 0,2 \cdot \frac{CORG_{\%}^*}{100}} = \frac{0,91}{0,488 + 0,2 \cdot \frac{0,91}{100}} = 0,0186 \text{ und } DMIN = 2,704$$

(vergleiche Schritt (K2)).

Zweiter Horizont:

Im Modell wird angenommen, dass unterhalb des Bearbeitungshorizontes die Kohlenstoffumsatzprozesse vernachlässigbar sind. Der organische Kohlenstoff entspricht also dem Anteil der inerten Fraktion, welcher, analog zum Bearbeitungshorizont, mit einer der Formeln (3.5), (3.6) oder (3.7) bestimmt wird. Anschließend erfolgt durch Anwendung der Formeln (3.8) und (3.9) die Berechnung von Trockenrohdichte und Trockensubstanzdichte des zweiten Horizontes.

Beispiel 3.5:

Für das Texturpaar {23; 32} des Horizonts Bt (zweiter Horizont der Lehm-Parabraunerde) sollen die CANDY-Modellparameter Trockenrohdichte und Trockensubstanzdichte bestimmt werden. Der Anteil des inerten Kohlenstoffs wird nach Formel (3.5) berechnet:

$$CINERT_{\%}^* = 1,097 \cdot (1 - \exp(-0,0747 \cdot T^*)) = 1,097 \cdot (1 - \exp(-0,0747 \cdot 23)) = 0,90.$$

Die Anwendung der Formeln (3.8) und (3.9) ergibt für die Modellparameter

$$TSD^* = \frac{1}{\frac{1-OBSM}{DMIN} + \frac{OBSM}{0,488 + 0,7359 \cdot \frac{CINERT_{\%}^*}{100}}}$$

$$= \frac{1}{\frac{1-0,0184}{2,728} + \frac{0,0184}{0,488 + 0,7359 \cdot \frac{0,90}{100}}} = 2,52$$

mit

$$DMIN = 2,659 + 0,003 \cdot T^* = 2,659 + 0,003 \cdot 23 = 2,728,$$

$$OBSM = \frac{\frac{CINERT_{\%}^*}{100}}{0,488 + 0,2 \cdot \frac{CINERT_{\%}^*}{100}} = \frac{\frac{0,90}{100}}{0,488 + 0,2 \cdot \frac{0,90}{100}} = 0,0184,$$

und

$$TRD^* = 0,4981 \cdot \exp(-0,5389 \cdot 0,90) + 0,2471 \cdot \exp(-0,0234 \cdot 23) + 0,3787 \cdot 2,52 = 1,41$$

Tiefere Horizonte:

Im Modell wird angenommen, dass der organische Kohlenstoff vernachlässigt werden kann. Die Formeln (3.8) und (3.9) vereinfachen sich zu:

$$TSD^* = DMIN = 2,659 + 0,003 \cdot T^* \quad (3.18)$$

mit

T^* Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),
 TSD^* Trockensubstanzdichte des Horizonts (in g/cm^3)
 und

$$TRD^* = a + b \cdot \exp(K_2 \cdot T^*) + c \cdot TSD^* \quad (3.19)$$

mit

$a = 0,4981$, $b = 0,2471$, $c = 0,3787$, $K_2 = -0,0234$,
 T^* Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),
 TSD^* Trockensubstanzdichte des Horizonts (in g/cm^3),
 TRD^* Trockenrohddichte des Horizonts (in g/cm^3).

Beispiel 3.6:

Für das Texturpaar {16; 32} des Horizonts Cc der Lehm-Parabraunerde sollen die CANDY-Modellparameter Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte berechnet werden. Die Anwendung der Formeln (3.18) und (3.19) liefert:

$$TSD^* = 2,659 + 0,003 \cdot T^* = 2,659 + 0,003 \cdot 16 = 2,71 \text{ und}$$

$$TRD^* = 0,4981 + 0,2471 \cdot \exp(-0,0234 \cdot 16) + 0,3787 \cdot 2,71 = 1,32.$$

Abschließend werden die CANDY-Parameter Feldkapazität ($FKAP^*$) und Permanentwelkepunkt (PWP^*) bestimmt. Eine Anpassung an verschiedene Bodenformen wird mit Verfahren realisiert, die zum einen nur die Textur ((a)), zum anderen die Bodenwassergehalts - Saugspannungsbeziehung berücksichtigen ((b) und (c)). Für letztere sind unter verschiedenen Parameterregressionsansätzen Pedotransferfunktionen nach VERECKEN et al. (1989) und RAWLS & BRAKENSIEK (1985) gewählt worden, die gute Genauigkeit gewährleisten und für viele Texturklassen anwendbar sind (DIEKKRÜGER 1992, KUHN 1998, TIETJE & TAPKENHINRICHS 1993, TIETJE & HENNIGS 1993).

Bei Anwendung der Verfahren (b) und (c) muss beachtet werden, dass der Sandgehalt auf die Kornfraktion von 50 bis 2000 μm bezogen ist, während für diese Fraktion in der vorliegenden Arbeit der Bereich von 63 bis 2000 μm vorausgesetzt wurde (Tabelle 2, Abschnitt 2.1). Dieses Problem wird durch Zuschlag eines kleinen Teils der Schlufffraktion zur Sandfraktion gelöst (NEMES et al. 1999): $S_{\text{mod}} = 100 - T - U + 0,0666 \cdot U$. Die Verfahren (b) und (c) sind mit dem modifizierten Sandgehalt $S = S_{\text{mod}}$ anzuwenden.

(a) Abschätzung aus der Textur des Feinbodens nach LIEBEROTH (1982):

$$FKAP^* = 3,4 + 0,85 \cdot A^*, \text{ für } A^* < 22, \quad (3.20)$$

$$FKAP^* = 11,0 + 0,52 \cdot A^*, \text{ für } 22 \leq A^* \leq 60 \quad (3.21)$$

mit

A^* abschlämmbare Teilchen $A^* = T^* + U_{FM}^*$, U_{FM}^* Summe aus Fein- und Mittelschluff aus Formel (3.2), T^* Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),
 $FKAP^*$ Feldkapazität (in Volumenprozent)

und

$$PWP^* = 1,23 + 0,74 \cdot T^* \quad (3.22)$$

mit

T^* Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),
 PWP^* Permanentwelkepunkt (in Volumenprozent).

(b) Pedotransferfunktion nach RAWLS & BRAKENSIEK (1985).

Ausgegangen wird von der Retentionsfunktion nach Brooks und Corey (BROOKS & COREY 1964):

$$\Theta(\Psi) = \begin{cases} \Theta_r + (\Theta_s - \Theta_r) \cdot \left(\frac{\Psi}{\Psi_b} \right)^{-\lambda} & \text{für } \Psi > \Psi_b > 0, \lambda > 0 \\ \Theta_s & \text{für } \Psi \geq \Psi_b \geq 0 \end{cases} \quad (3.23)$$

mit

$\Theta(\Psi)$ Wassergehalt (in Volumenprozent) als Funktion des Matrixpotentials,
 Ψ Matrixpotential (in hPa),
 Ψ_b Lufteintrittspunkt (in hPa),
 Θ_r residualer Wassergehalt (in Volumenprozent),
 Θ_s Sättigungswassergehalt (in Volumenprozent),
 λ Porengrößenindex.

Die Parameter werden als Wassergehalte für die Matrixpotentiale $\Psi = 60$ hPa (Feldkapazität) bzw. $\Psi = 15000$ hPa (Permanentwelkepunkt) berechnet. Die Pedotransferfunktion kann angewendet werden für Bodenhorizonte mit einem Tongehalt T von $5 \leq T \leq 60$ und einem Sandgehalt S von $5 \leq S \leq 70$ (TIETJE & TAPKENHINRICHS 1993). Die Bestimmung der Brooks–Corey-Parameter Ψ_b , Θ_r , Θ_s , λ in (3.23) erfolgt aus dem Texturpaar und den vorher generierten Modellparametern für Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte (Anhang A 8.3.1):

c) Pedotransferfunktion nach VERECKEN et al. (1989).

Grundlage ist die Beziehung zwischen Bodenwasser und Saugspannung in einer modifizierten Form aus VAN GENUCHTEN (1980):

$$\Theta(\Psi) = \Theta_r + \frac{\Theta_s - \Theta_r}{\left(1 + (\alpha \cdot |\Psi|)^{N-A}\right)^{M-A}} \quad (3.24)$$

mit

$\Theta(\Psi)$	Wassergehalt (in Volumenprozent) als Funktion des Matrixpotentials,
Ψ	Matrixpotential (in hPa),
Θ_r	residualer Wassergehalt (in Volumenprozent),
Θ_s	Sättigungswassergehalt (in Volumenprozent),
α, N_A, M_A	Anpassungsparameter.

Wie auch bei der Pedotransferfunktion nach RAWLS & BRAKENSIEK (1985) werden die Parameter als Wassergehalte für die Matrixpotentiale $\Psi = 60$ hPa (Feldkapazität) bzw. $\Psi = 15000$ hPa (Permanentwelkepunkt) berechnet. Das Verfahren kann angewendet werden für Bodenhorizonte mit einem Tongehalt T von $0 \leq T \leq 54$, einem Schluffgehalt U von $0 \leq U \leq 80$ und einem Sandgehalt S von $5 \leq S \leq 97$ (TIETJE & TAPKENHINRICHS 1993). Der Wert für M_A ist mit 1 festgelegt (VERECKEN et al. 1989). Die Bestimmung von Θ_r , Θ_s , α , N_A in (3.24) erfolgt aus dem Texturpaar, den vorher bestimmten Werten für Trockenrohddichte und prozentualen Anteil des organischen Kohlenstoffs (Anhang A 8.3.1).

Beispiel 3.7:

Exemplarisch sollen für drei Texturpaare der Lehm-Parabraunerde die Modellparameter Feldkapazität und Permanentwelkepunkt bestimmt werden: Horizont Ap: {15; 34}, Horizont Bt: {23; 32} und Horizont Cc: {16; 32}.

Die Tabellen 13, 14 und 15 zeigen die unterschiedlichen Ergebnisse der drei Verfahren zur Bestimmung von Feldkapazität und Permanentwelkepunkt. Zuerst sollen die Verfahren nach LIEBEROTH (1982) Anwendung finden, wozu der Gehalt an abschlämmbaren Teilchen (A') benötigt wird, welcher nach Formel (3.2) aus Tongehalt, Schluffgehalt und dem Verhältnis FM_REL (Formel (3.1)) bestimmt werden kann. Die Anwendung der Formeln (3.21) und (3.22) liefert dann die Werte der Modellparameter (Tabelle 13).

Tab. 13: Berechnung der CANDY-Modellparameter Feldkapazität (FKAP) und Permanentwelkepunkt (PWP) mit den Formeln (3.20) – (3.22) nach LIEBEROTH (1982).
A: abschlämmbare Teilchen.

Horizont	Ton	Schluff	A	FKAP	PWP
Ap	15	34	28,2	25,6	12,3
Bt	23	32	36	29,7	18,3
Cc	16	32	30	26,6	13,1

Im Vergleich dazu wird in den Tabellen 14 und 15 die Bestimmung der Modellparameter mit den Formeln (3.23) und (3.34) nach VEREecken et al. (1989) sowie RAWLS & BRAKENSIEK (1985) dargestellt. Der inerte Kohlenstoff wurde für die Horizonte Ap und Bt nach Formel (3.6) berechnet.

Tab. 14: Berechnung der CANDY-Modellparameter Feldkapazität (FKAP) und Permanentwelkepunkt (PWP) mit Formel (3.23) nach RAWLS & BRAKENSIEK (1985).
 Ψ_b , Θ_s , Θ_r und λ : Brooks-Corey-Parameter für die drei Horizonte.

Horizont	Ψ_b	Θ_s	Θ_r	λ	FKAP	PWP
Ap	19,91	0,335	0,075	0,364	24,9	9,8
Bt	22,83	0,334	0,092	0,298	27,3	12,7
Cc	23,98	0,296	0,078	0,362	23,5	10,0

Tab. 15: Berechnung der CANDY-Modellparameter Feldkapazität (FKAP) und Permanentwelkepunkt (PWP) mit Formel (3.24) nach VEREecken et al. (1989).
 α , Θ_s , Θ_r und N_A : Parameter der Pedotransferfunktion für die drei Horizonte.

Horizont	Θ_s	Θ_r	α	N_A	FKAP	PWP
Ap	0,407	0,103	0,0066	0,822	31,0	11,0
Bt	0,413	0,138	0,0052	0,714	33,0	15,0
Cc	0,347	0,095	0,0057	0,8166	27,3	10,2

Ein Vergleich mit den Werten von Feldkapazität und Permanentwelkepunkt der homogenen Horizonte (Beispiel 3.1, Tabelle 11) zeigt, dass beide Parameter in diesem Beispiel am besten mit dem Verfahren von RAWLS & BRAKENSIEK (1985) bestimmt werden können.

Die Ergebnisse von Beispiel 3.6 sind aber keinesfalls zu verallgemeinern. Die Resultate der Validierung des Profilgenerators zeigen, dass die Pedotransferfunktion nach VEREecken et al. (1989) sehr gute Genauigkeit besitzt, was auch in DIEKKRÜGER (1992) und TIETJE & TAPKENHINRICHS (1993) bestätigt wird.

Mit Feldkapazität und Permanentwelkepunkt sind alle von CANDY benötigten bodenphysikalischen Parameter erzeugt. Der zum Texturpaar $\{T^*, U^*\}$ gehörende Parametersatz $\{LAMBDA^*, FAT^*, TRD^*, TSD^*, FKAP^*, PWP^*\}$ beschreibt eine mögliche Variante der Bodenphysik des Horizontes, die anderen werden durch Berechnung der Bodenparameter für die übrigen Texturpaare $\{T, U\}$ erhalten.

Sind für alle Horizonte eines Profils sämtliche Bodendatensätze generiert, wird die Menge der Profile, die Profilstichprobe \mathbf{P} , erzeugt: sämtliche Bodendatensätze eines Horizontes werden mit denen der anderen Horizonte kombiniert. Die Elementanzahl in \mathbf{P} kann sehr groß sein. Sie ergibt sich als Produkt aus den Anzahlen der erzeugten Bodendatensätze der Horizonte.

Beispiel 3.8:

Für die in Beispiel 3.2 (deterministische Beschreibung der Texturheterogenität) erzeugten Anzahlen von Bodendatensätzen für die drei Horizonte der Lehm-Parabraunerde ergeben sich $((2 \cdot 1 + 1) \cdot (2 \cdot 3 + 1)) \cdot ((2 \cdot 1 + 1) \cdot (2 \cdot 1 + 1)) \cdot ((2 \cdot 2 + 1) \cdot (2 \cdot 1 + 1)) = 2835$ CANDY-Profile mit variabler Bodenphysik. Wird die Texturheterogenität deterministisch beschrieben mit Variationsbreiten des Ton- und Schluffgehaltes von jeweils zwei Masseprozent ergeben sich für dasselbe Profil $((2 \cdot 2 + 1) \cdot (2 \cdot 2 + 1))^3 = 15625$ Profile mit variabler Bodenphysik.

Für einen Sandlösstieflerhm-Staugley mit fünf Horizonten ergeben sich unter denselben Bedingungen $((2 \cdot 2 + 1) \cdot (2 \cdot 2 + 1))^5 = 9765620$ CANDY-Profile mit variabler Bodenphysik.

Um mathematische Verteilungen der Modellzustandsgrößen zu bestimmen, müssen alle Elemente der Profilstichprobe simuliert werden. Da diese Verteilungen neben den bodenphysikalischen Eigenschaften noch von Wetterablauf und Landnutzung abhängen, können keine Verallgemeinerungen bezüglich Verteilungsart und -parametern getroffen werden. Zur Untersuchung von Modellgrößen unter konkreten Bedingungen eines Standortes (Bewirtschaftung und Wetterablauf in einem Zeitraum) bleibt daher nur die CANDY-Prozesssimulation aller Profile einschließlich Rechnungsauswertung und Ergebnisanalyse.

In Abbildung 15 wird beispielhaft als Wirkung der Texturheterogenität auf Simulationsergebnisse des Modells CANDY die empirische Verteilung der Stickstoffauswaschung aus der ungesättigten Zone im Monat August 1987 dargestellt. Gerechnet wurde eine reale Landbewirtschaftung von 1980 bis 1992 für eine erodierte Braunerde des mitteldeutschen Standortes Brandis, die Daten sind HAFERKORN (2000) entnommen. Mit dem Profilgenerator wurden für dieses Bodenprofil insgesamt 2835 Bodendatensätze mit variabler Bodenphysik erzeugt.

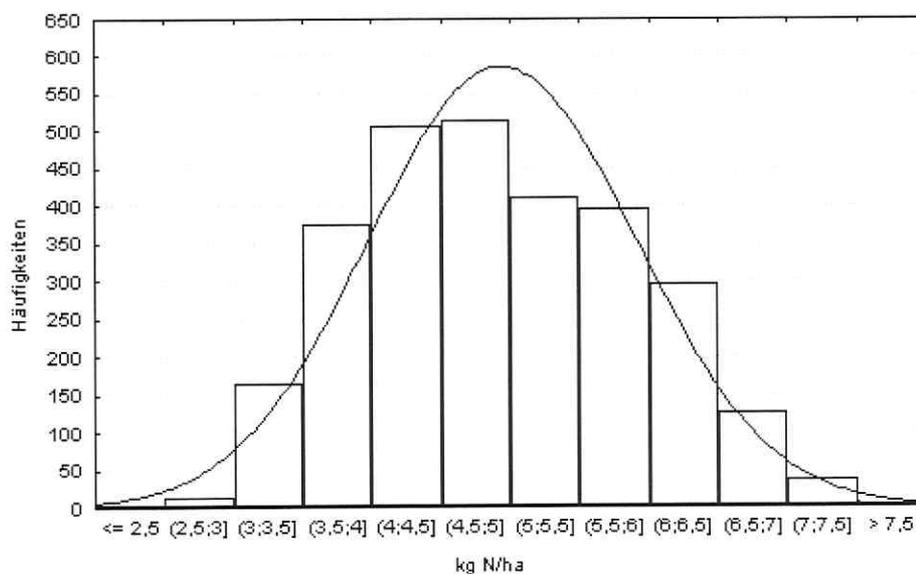


Abb. 15: Empirische Verteilung der Stickstoffauswaschung (Monatssumme in kg/ha) aus der ungesättigten Zone für den Monat August 1987 bei einer Landnutzungsvariante von 1980 bis 1992 auf einer erodierten Braunerde des mitteldeutschen Standortes Brandis.

3.1.3 Validierung des Profilgenerators

Zur Prüfung der Gültigkeit wurde der Profilgenerator exemplarisch auf verschiedene Standorte Mitteldeutschlands angewendet (Tabelle 16).

Tab. 16: Datensätze zur Validierung des Profilgenerators: Charakteristika der Standorte und Datenquellen.

Standort	LT [°C]	NIED [mm/a]	Bodenform oder Bodentyp	Datenquelle
Bad Lauchstädt	8,8	480	Löss-Schwarzerde	FRANKO et al. 1995a KÖRSCHENS 1998
Brandis	9,3	604	Erodierte Braunerde	HAFERKORN 2000, RAMSBECK-ULLMANN 1999
Brandis	9,3	604	Braunerde-Pseudogley	HAFERKORN 2000, RAMSBECK-ULLMANN 1999
Magdeburg	9,0	486	Schwarzerde aus Löss über Lehm	KREISCHE & KÖRSCHENS 1996, DWD
Noitzsch	8,7	558	Sand-Rosterde	KÖRSCHENS 2000, KUNDLER 1989
Thyrow	8,6	520	Tieflehm-Fahlerde	KÖRSCHENS 2000, KUNDLER 1989
Torgau	8,9	533	Auenlehm-(Norm-) Vega	FRANKO et al. 2001, ROSCHE 2001

Zusammenfassend muss festgestellt werden, dass bezüglich der Genauigkeit der im Profilgenerator angewendeten Pedotransferfunktionen noch Verbesserungspotential besteht. Als Forschungsbedarf ist hier die Weiterentwicklung der Berechnungsverfahren zu sehen, ebenso eine Entwicklung neuer Methoden.

Insbesondere trifft das auf die drei Verfahren zur Bestimmung von Feldkapazität und Permanentwelkepunkt zu (Formeln (3.20) bis (3.24)), da mit diesen die für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration sensiblen Parameter des Prozessmodells bestimmt werden (vergleiche Abschnitt 3.2.2 und Anhang A 8.3.2). Anhand der Ergebnisse (Tabellen A 8.25, A 8.26 und A 8.27 im Anhang A 8.3.2) konnte keine allgemeine Regel zur Verwendung der drei Verfahren gefunden werden. Bei der Anwendung des Profilgenerators ist daher folgendermaßen zu verfahren: falls sich bei einer Bodenform keine Einschränkungen aus den Gültigkeitsbereichen der Pedotransferfunktionen ergeben (vergleiche Abschnitt 3.1.2.2), ist die Genauigkeit der einzelnen Verfahren an den Daten der Horizonte (Ton-, Schluff-, Sandgehalt, Trockenrohddichte, Trockensubstanzdichte, Gehalt an organischen Kohlenstoff) in der CANDY-Datenbank zu testen. Es ist dann für jeden Horizont eines Profils diejenige Pedotransferfunktion zu verwenden, welche im Vergleich zu diesen Angaben die geringsten Abweichungen für Feldkapazität und Permanentwelkepunkt liefert.

Bei den Pedotransferfunktionen zur Berechnung von Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte des Bearbeitungshorizontes und des zweiten Horizontes wurde festgestellt, dass die Formeln (3.5) und (3.6) die beste Genauigkeit liefern (Tabelle A 8.23). Lediglich bei sehr sandigen Böden kann Formel (3.7) bessere Ergebnisse liefern.

Da bei tieferen Horizonten keine Berücksichtigung des organischen Kohlenstoffs erfolgt, werden zur Bestimmung der beiden Modellparameter die Formeln (3.18) und (3.19) angewendet (Abschnitt 3.1.2.2). Hier weisen vor allem die Werte der Trockenrohddichte starke Abweichungen auf (Tabelle A 8.24).

Da auch bei der Ermittlung des Feinanteilgehaltes Differenzen zwischen Messwerten und Ergebnissen des Profilgenerators auftreten (Tabelle A 8.22), ist die Verbesserung der Formel (3.3) als Aufgabe zu sehen.

Anmerkungen:

- 1) Die Anwendung der im Profilgenerator implementierten Pedotransferfunktionen zur Parametergenerierung stellt nur einen Kompromiss dar. Die einerseits zum Teil recht genaue Abbildung bodenphysikalischer Prozesse kann durch falsche Parameterwerte zu Fehlern der Resultate des Prozessmodells führen. Eine bessere Qualität der Modellierung kann hier durch Weiterentwicklung der Pedotransferfunktionen erreicht werden, war jedoch nicht Ziel der vorliegenden Arbeit.
- 2) Der Profilgenerator ist als zusätzliche Komponente des Bodenprozessmodells CANDY zu betrachten. Die Entwicklung von Metamodellen (Abschnitt 3.2) erfolgt unabhängig von diesem Simulationswerkzeug. Durch Anwendung des Profilgenerators kann jedoch die Wirkung der Texturheterogenität als weitere Komponente in die Metamodelle integriert werden (Abschnitt 3.2.4.2)
- 3) Die rechentechnische Realisierung des Profilgenerators erfolgte als DELPHI - Projekt.

3.2 Entwicklung von Metamodellen für das Bodenprozessmodell CANDY

3.2.1 Vorbetrachtungen

Wie auch andere mikroskalige Bodenprozessmodelle wurde CANDY in verschiedenen landschaftsräumlichen Einheiten der Meso- und Makroskala angewendet. Ziel war es, für die Ackerflächen der Gebiete Auswirkungen unterschiedlicher Nutzungsvarianten zu simulieren. So erfolgten beispielsweise Anwendungen auf eine ca. 7500 ha große Testregion im Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebiet (FRANKO et al. 1995a), auf das Gebiet des Schaugrabens mit 1483 ha Ackerland (SEEGER et al. 2001) oder auf Gebiete des etwa 700 km² großen ‚Torgauer Raumes‘ (FRANKO et al. 2001).

Zur Erzeugung von CANDY-Simulationsobjekten wurden die Gesamtgebiete jeweils in quasi-homogene Teilgebiete der Mikroskala zerlegt. Die Beschaffung der Modelleingangsdaten zur Charakterisierung von Boden, Klima und Landnutzung war zum Teil sehr aufwendig, wie das Beispiel ‚Torgauer Raum‘ zeigt.

Zur Gewinnung von Bodendaten wurden im Altkreis Torgau fünf Schürfe angelegt und für insgesamt 24 Horizonte Feinbodentextur sowie hydraulische Kennwerte bestimmt (ROSCHE 2001). Das Gebiet lässt sich in die beiden Landschaftsräume ‚Elbaue‘ und ‚Heide‘ gliedern, jeweils mit den Restriktionen ‚Trinkwasserschutzgebiet‘ und ‚Nicht-Trinkwasserschutzgebiet‘ (FRANKO et al. 2001). Für jede dieser vier Einheiten sind auf Basis von Agrarstatistiken charakteristische Fruchtfolgen entwickelt worden. Die Beschreibung des Klimas erfolgte mit Wetterdaten der Station Oschatz, deren Niederschlagsniveau durch Korrekturfaktoren an die vier Einheiten angepasst wurde. Insgesamt sind für das Gebiet 360 CANDY – Simulationsobjekte erzeugt worden, die in einer reinen Rechenzeit von 120 Stunden auf einem Pentium II Rechner (400 MHz) simuliert wurden.

Dieses Beispiel zeigt den Aufwand, welcher bei Anwendung mikroskaliger Prozessmodelle in größeren (heterogenen) Gebieten entstehen kann. Zusätzliches Fehlerpotential entsteht durch Unsicherheiten der Modelleingangsdaten.

Um derartige Nachteile zu beheben, werden für das Bodenprozessmodell CANDY Metamodelle entwickelt. Im Folgenden wird das Prinzip der Herleitung dieser Verfahren zur Bestimmung von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration für meso- und makroskalige Anwendungsgebiete von CANDY dargestellt. Mittels mikroskaliger Prozesssimulation wird zunächst eine Datenbasis erzeugt. Diese besteht aus einer Menge von Rechenszenarien und Simulationsergebnissen des Bodenprozessmodells, welches wegen seiner komplexen inneren Struktur als BLACKBOX-Modell betrachtet wird. Nur Eingangs- und Ausgabegrößen von CANDY finden Berücksichtigung, lediglich zur Auswahl der Systemgrößen werden Modellprozesse herangezogen. Durch Anwendung verschiedener statistischer Methoden erfolgt anschließend die Herleitung der Metamodelle. Diese beschreiben, in Form multipler linearer Regressionsfunktionen, relative Änderungen eines Zustandsindikators als Summe der relativen Änderungen seiner Antriebsindikatoren, welche zunächst aus der Datenbasis zu bestimmen sind.

Die Regressionsfunktionen werden noch durch je zwei zusätzliche Komponenten ergänzt:

- Fehlerterme ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und $\varepsilon_{NO_3_K}$ zur Charakterisierung der Wirkung der Texturheterogenität auf Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration für Simulationen mit dem Prozessmodell (Abschnitt 3.2.4.2),
- Fehlermaße res_{GWB} , res_{N_AUS} und $res_{NO_3_K}$ welche den Fehler der Regressionsansätze beschreiben (Abschnitt 3.2.4.1).

Die Komponenten werden als Summanden in die Regressionsmodelle integriert.

Die charakteristischen Größen- und Längenverhältnisse der in den folgenden Kapiteln verwendeten Skalenbezeichnungen Mikro, Meso und Makro ist Tabelle 1, Spalte ‚Längen/ Flächen‘ zu entnehmen.

3.2.2 Generierung und Simulation der Szenarien

Zur Generierung der Datenbasis ist es primär erforderlich, potentielle Antriebsindikatoren von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration zu kennen. Hierzu erfolgte eine Analyse der Klasse *Boden* der CANDY-Eingangsdaten, die als Sensitivitätsstudie unter Verwendung folgender Daten durchgeführt wurde:

- vier unterschiedliche Profile der CANDY-Datenbank, die jeweils eine Bodenartenhauptgruppe nach KA 4 (AG BODEN 1994) repräsentieren: Parabraunerde-Haftnässestaugley in Decklöss (Ton), Staugley-Parabraunerde in Sandlöss (Lehm), Löss-Redzina (Schluff) und Sand-Braunerde (Sand),
- eine siebenjährige Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung sowie eine siebenjährige Fruchtfolge des ökologischen Landbaus mit Tierbesatz von 1,4 Großvieheinheiten je ha landwirtschaftlicher Nutzfläche,
- ein mit dem CANDY-Wettergenerator erzeugter künstlicher Wetterablauf auf Basis von Daten der mitteldeutschen Station Leipzig-West.

Ziel der Sensitivitätsstudie war die Ermittlung derjenigen bodenphysikalischen Parameter, welche im Prozessmodell die Zustandsgrößen Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung (und damit Nitratkonzentration) am stärksten beeinflussen. Um bei jedem Profil Sensitivitäten der bodenphysikalischen Parameter zu ermitteln, wurde sukzessive jeder Parameter unabhängig von den anderen um 10 Prozent erhöht bzw. vermindert. Bei sechs Parametern ergeben sich damit für jeden Horizont eines Profils $6 \cdot 2 = 12$ Varianten, d. h. bei drei bzw. vier Horizonten je Profil $12 \cdot 3 = 36$ bzw. $12 \cdot 4 = 48$ Varianten. Alle sind mit dem künstlichen Wetterablauf und den beiden Fruchtfolgen gerechnet worden, insgesamt 336 Simulationen mit dem Prozessmodell. Die Untersuchungsergebnisse sind im Anhang A 8.3.2 dargestellt.

Es wurde ermittelt, dass Feldkapazität und Permanentwelkepunkt in jedem Horizont die Grundwasserneubildung sehr stark und die Stickstoffauswaschung stark beeinflussen. Die anderen Parameter der Bodenphysik haben nur geringen oder keinen Einfluss. Als Resultat

der Studie wurden die CANDY-Parameter Feldkapazität und Permanentwelkepunkt aller Horizonte eines Bodenprofils zusammengefasst zur bodenphysikalischen Eigenschaft „*Profilsumme der nutzbaren Feldkapazität*“. Diese kommt für die Klasse *Boden* als Antriebsindikator in den Metamodellen in Frage und ist Grundlage für die Auswahl repräsentativer Bodenprofile zur Erstellung der Datenbasis eines Gebietes.

Da im Rahmen dieser Arbeit die Entwicklung von Metamodellen auf Gebiete mit nahezu konstanter Jahressumme der Globalstrahlung und Jahreslufttemperatur beschränkt bleibt (Abschnitt 2.5), ist für die Klasse *Klima* nur die Berücksichtigung der Heterogenität des Niederschlages notwendig. Dieser wird für die Entwicklung der Metamodelle auf Jahresebene aggregiert.

Eine Analyse von Größen der *Landnutzung* erfolgt wegen der Vielfalt der Einflüsse und der zum Teil starken Interaktionen mit anderen Modellgrößen nicht als Sensitivitätsstudie. Die Ermittlung potentieller Antriebsindikatoren aus den Größen der Landnutzung ist im Anschluss an die Simulationsrechnungen realisiert. Dann werden auch Modellgrößen getestet, welche die sogenannte *Standortwirkung* widerspiegeln. Darunter sind Größen des Prozessmodells zu verstehen, welche von der Kombination der Klimaelemente Lufttemperatur, Niederschlag, Globalstrahlung und den bodenphysikalischen Parametern Feldkapazität, Permanentwelkepunkt, Trockenroh-dichte, Trockensubstanzdichte und Feinanteilgehalt beeinflusst werden.

Zur Erstellung der Datenbasis wird die Landnutzung in Form einer Vielzahl unterschiedlicher Fruchtfolgen abgebildet, was im Folgenden beschrieben wird.

Die natürliche Heterogenität von Klima, Boden und Landnutzung eines zu behandelnden Gebietes wird über die Variation verschiedener Kenngrößen abgebildet, deren sensitive Wirkung bei der Generierung von CANDY-Szenarien berücksichtigt werden muss. Zur Entwicklung von Metamodellen ist es daher erforderlich, für das Anwendungsgebiet Variationsbreiten von Größen zu kennen, die als potentielle Antriebsindikatoren in Frage kommen. Dazu müssen die Komponenten Boden, Klima und Landnutzung des Gebietes analysiert werden, unter Verwendung von Boden- und Klimakarten sowie Gemeindestatistiken der Landnutzung. Im Ergebnis dessen gelangt man zu regionsspezifischen Kenntnissen über

- räumliche Verteilung der Jahreslufttemperaturen, -niederschlagssummen und -globalstrahlungssummen,
- Vorkommen von Bodensubstraten, -arten, -formen und -typen,
- Kennziffern der landwirtschaftlichen Nutzung in den Gemeinden, wie beispielsweise Anbaustatistiken, Viehbesatz, Düngemittleinsatz.

Bei Regionen, in denen die Heterogenität in einzelnen Komponenten zu groß ist, muss das Gesamtgebiet in kleinere Teilgebiete zerlegt werden, die gekennzeichnet sind durch ähnliche Substrate und Leitbodenformen sowie relative Konstanz der Klimaelemente Lufttemperatur und Globalstrahlungssumme. Ebenso darf keine zu starke Diversität in der landwirtschaftlichen Nutzung auftreten.

Zur Beschreibung der natürlichen Heterogenität eines solchen Gebietes mit einer begrenzten Anzahl von CANDY-Szenarien wurde folgender trifaktorieller Versuchsplan entwickelt.

Um als ersten Faktor die räumliche Heterogenität des Klimas abzubilden, wird eine für das Gebiet repräsentative Klimastation als Referenzstation gewählt, von welcher langjährige lückenlose Aufzeichnungen der mittleren Tageswerte von Niederschlag, Lufttemperatur und Sonnenscheindauer bzw. Globalstrahlung verfügbar sein müssen. Aus diesen Daten wird mit dem CANDY-Wettergenerator ein zufälliger Wetterablauf erzeugt, der in Tagesauflösung als Referenzwetter für das Gebiet verwendet wird. Die Beschreibung der Variation der Jahresniederschlagssummen im Gebiet erfolgt mit zwei Datensätzen des Referenzwetters, bei denen die Tagesniederschläge um 10 Prozent erhöht bzw. vermindert sind, womit höhere bzw. geringere Jahresniederschlagssummen im Vergleich zum Referenzwetter erzeugt werden. Diese drei Werte der Jahresniederschlagssummen, welche für das Gebiet mit ‚niedrig‘, ‚mittel‘ und ‚hoch‘ bezeichnet werden, bilden die Stufen des ersten Faktors.

Mit dem zweiten Faktor wird die Standortheterogenität des Gebietes beschrieben. Als Stufen dieses Faktors erfolgt mit einer Bodenkarte die Wahl repräsentativer Profile, die mehr als 50 Prozent Anteil an der Gesamtfläche des Gebietes besitzen und sich in der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (Antriebsindikator) unterscheiden. Es werden auch die Profile einbezogen, welche minimale und maximale Werte dieser Größe aufweisen, so dass das gesamte Spektrum der im Gebiet möglichen Werte dieses potentiellen Antriebsindikators erfasst wird.

Zur Beschreibung der Diversität von Agrarstrukturen sind als Stufen des Faktors Landnutzung auf Basis von Agrarstatistiken eine begrenzte Anzahl unterschiedlicher Fruchtfolgen zu konstruieren, welche Variabilität und Heterogenität realer Bewirtschaftungsvarianten widerspiegeln. Beispiele hierfür sind verschiedene Abstufungen im Tierbesatz, der Einsatz unterschiedlicher Mengen an Mineraldünger, der Anbau von Zwischenfrüchten bzw. ein Wechsel der Fruchtarten, was jeweils unterschiedlichen Einfluss auf Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration hat.

Die CANDY-Szenarien (Simulationsobjekte) für das Gebiet werden durch Kombination aller Stufen der Faktoren generiert: es erfolgt eine Verknüpfung der Fruchtfolgen mit den drei Datensätzen des Referenzwetters und allen repräsentativen Profilen (Abbildung 16).

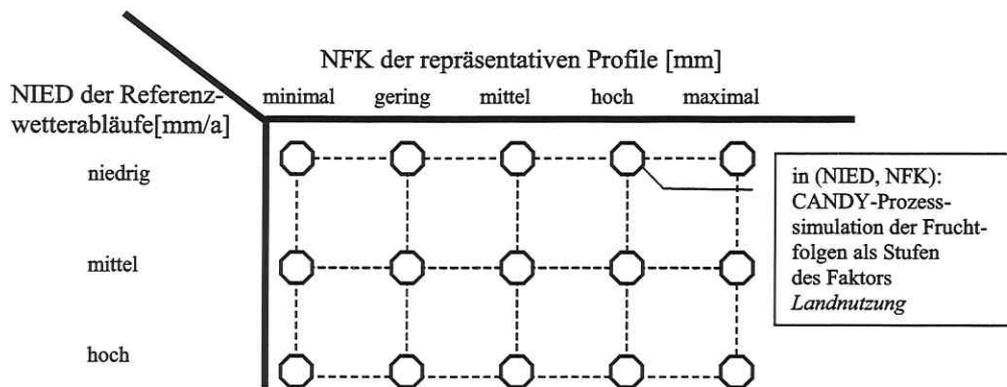


Abb. 16: Versuchsplan zur Erstellung von CANDY-Simulationsobjekten für ein Gebiet.

Abszisse: Abbildung der *Standortheterogenität* durch die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) der repräsentativen Profile. Ordinate: Abbildung der *Klimaheterogenität* durch die Jahresniederschlagssumme (NIED) der Referenzwetterabläufe). Es werden alle Stufen der beiden Faktoren verknüpft (gekennzeichnet durch Achtecke). In jeder Faktorstufenkombination (NIED, NFK) wird die CANDY-Prozesssimulation aller für das Gebiet konstruierten Fruchtfolgen durchgeführt.

Auf dieser Datengrundlage kann mit dem Modell CANDY die Simulation der Prozesse im Boden erfolgen. Um einen Gleichgewichtszustand des mineralischen Stickstoffs für ein Szenario zu erreichen, ist jede Fruchtfolge mehrmals periodisch zu rechnen. Es wird so gesichert, dass die Startwerte keinen Einfluss mehr auf Modellzustandsgrößen haben, womit eine Bewertung der Wirkung der Bewirtschaftung (Fruchtfolge) unter den konkreten Standortbedingungen (Boden und Klima) erfolgen kann.

Bei allen im Rahmen der vorliegenden Arbeit ausgeführten Prozesssimulationen wurde eine Stickstoffimmission von 60 kg/(ha·a) zugrunde gelegt. Dieser Wert muss zumindest für einige Standorte von Dauerfeldversuchen als realistisch angesehen werden (WEIGEL et al. 2000).

Ausgewertet wird der letzte Teil des Rechenzeitraumes, Simulationsergebnisse sind die Jahresmittelwerte von Modellgrößen. Sie bilden zusammen mit den Szenarien die Datenbasis zur Erstellung der Metamodelle des Gebietes.

Beispiel 3.9:

Um für die Ackerflächen eines 1600 km² großen Gebietes die Auswirkungen unterschiedlicher landwirtschaftlicher Nutzungsvarianten mit dem Bodenprozessmodell CANDY zu untersuchen, sollen Metamodelle für die drei Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration entwickelt werden.

Für das Gebiet wurde eine repräsentative Klimastation gewählt, deren mittlere Jahresniederschlagssumme 604 mm beträgt. Aus den Zeitreihen ihrer Tageswerte von Niederschlag, Lufttemperatur und Globalstrahlung wurde mit dem CANDY-Wettergenerator ein Referenzwetterablauf für die Station erzeugt. Außerdem wurden zwei Datensätze von diesem mit 664 mm bzw. 545 mm Jahresniederschlag abgeleitet. Zusammen mit dem Ausgangswert von 604 mm/a beschreiben diese beiden Zahlen den Faktor Klimaheterogenität des zu behandelnden Gebietes.

Als Bodenformen kommen in dem Gebiet vorwiegend Parabraunerden vor. Aus einer Bodenkarte wurden zur Modellierung die drei Profile Parabraunerde in Decksalm, Lehm-Parabraunerde und Löss-Parabraunerde gewählt. Ihre bodenphysikalischen Parameter konnten aus den Erläuterungen der Karte in die CANDY-Datenbank übernommen werden. Die Stufen des Faktors Standortheterogenität bilden die Profilsommen der nutzbaren Feldkapazität dieser drei Profile: 201, 232 und 397 mm.

Anhand von Gemeindestatistiken konnten zur Beschreibung der agrarischen Nutzung für das Gebiet fünf charakteristische vierjährige Fruchtfolgen entwickelt werden. Für diese sind CANDY-Prozesssimulationen in allen neun Faktorstufenkombinationen (545, 201), (545, 232), (545, 397), (604, 201), (604, 232), (604, 397), (664, 201), (664, 232), (664, 397) von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität auszuführen: die fünf Fruchtfolgen sind für jede Kombination der drei Profile und der drei Datensätze des Referenzwetters zu rechnen. Die Datenbasis dieses zu behandelnden Parabraunerde-Gebietes besteht somit aus den 45 CANDY-Szenarien und den Simulationsergebnissen.

3.2.3 Auswertung der Szenarien

Die Auswertung der Datenbasis erfolgt in vier Schritten unter Anwendung verschiedener mathematischer Methoden (vergleiche Abbildung 17). Es wurde hierbei auf die Wahl parameterfreier Verfahren geachtet, da das Vorliegen von Normalverteilungen bei den im Rahmen dieser Arbeit zu untersuchenden Größen nicht immer erfüllt ist. Es wären dann als notwendige Vorarbeit zum Teil aufwendige Datentransformationen zu leisten (z. B. logarithmische oder quadratische Transformation in HARTUNG (1993) und SACHS (1997)), wodurch der Arbeitsaufwand für die Entwicklung der Metamodelle stark anwachsen würde.

In den ersten beiden Schritten erfolgt eine Prüfung der Faktoren Klimaheterogenität und Standortheterogenität. Anschließend wird im dritten Schritt der Einfluss derjenigen Modellgrößen getestet, welche die Standortwirkung widerspiegeln. Im letzten Schritt sind schließlich unter den Modellgrößen der Landnutzung weitere Antriebsindikatoren für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration zu ermitteln. Abbildung 17 zeigt eine schematische Darstellung des Algorithmus zur Auswertung der Datenbasis.

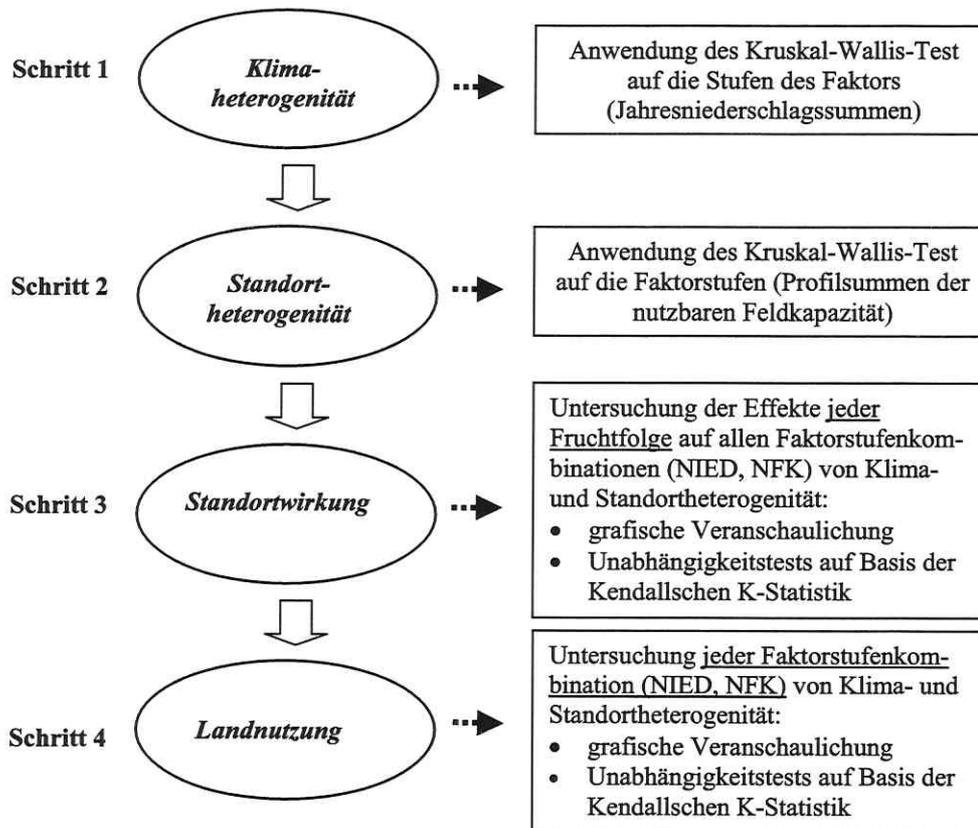


Abb. 17: Schema des Auswertungsalgorithmus der Datenbasis für ein Gebiet.

Ellipsen: Faktoren bzw. Faktorkombinationen, Rechtecke: mathematische Methoden zur Behandlung der Faktoren bzw. Faktorkombinationen. NIED: Jahresniederschlagssumme, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität.

Zur Problemlösung sind in den **Schritten 1 und 2** Klimaheterogenität und Standortheterogenität separat zu betrachten. Die Simulationsergebnisse werden hierzu jeweils für die Faktorstufen (d. h. Jahresniederschlagssummen bzw. Profilsommen der nutzbaren Feldkapazität) als unabhängige Stichproben interpretiert.

Mit dem Kruskal-Wallis-Test wird für jeden Faktor geprüft, ob die Mittelwerte der drei Zustandsindikatoren in den jeweiligen Stichproben signifikant verschieden sind (HARTUNG 1993). Eine Normalverteilung wird nicht vorausgesetzt, lediglich das Vorliegen einer stetigen Verteilung. Um den Test auf einen Faktor anzuwenden, werden für die Simulationsergebnisse jeweils Rangzahlen vergeben und die Rangsummen der Faktorstufen bestimmt. Mit einer Testgröße wird geprüft, ob die Varianz der Rangsummen einer χ^2 -Verteilung genügt. Ist die Testgröße zu einem vorgegebenen Niveau größer als das entsprechende χ^2 -Quantil, wird auf signifikante Unterschiede der Mittelwerte geschlossen. Sind für einen Faktor derartige Unterschiede festgestellt worden, ist dieser als Antriebsindikator des entsprechenden Zustandsindikators bestätigt.

Bei der Behandlung eines Gebietes muss der Kruskal-Wallis-Test zur Signifikanzprüfung von Klima- und Standortheterogenität auf Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration insgesamt sechs mal angewendet werden: für zwei Faktoren und je drei Zustandsindikatoren.

Zur Ermittlung des Einflusses von Modellgrößen der Standortwirkung ist in **Schritt 3** jede Fruchtfolge des Gebietes separat zu betrachten. Für eine Fruchtfolge sind dazu die entsprechenden CANDY-Szenarien und –simulationsergebnisse aller Faktorstufenkombinationen von Klima- und Standortheterogenität als Menge zusammenzufassen. Aus Streudiagrammen (Punktwolken) werden erste Grundvorstellungen über Zusammenhänge der Zustandsindikatoren und Größen der Standortwirkung erhalten. Die Signifikanz dieser Beziehungen wird mit Unabhängigkeitstests geprüft. Aus der Datenbasis sind dazu die Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten zu bestimmen und darauf die Kendallsche K-Statistik anzuwenden (HARTUNG 1993). Ist der Betrag einer daraus berechneten Testgröße zu einem Niveau größer als das Quantil der $N(0; 1)$ -Verteilung, wird die Hypothese der Unabhängigkeit verworfen. Das Verfahren verzichtet auf die Voraussetzung der Normalverteilung, die Berechnung der Rangkorrelationskoeffizienten erfolgt auf Basis von Ranginformationen. Wenn mit diesem Verfahren für mehr als die Hälfte der Fruchtfolgen des Gebietes die Abhängigkeit bestätigt wird, ist eine Modellgröße der Standortwirkung Antriebsindikator für einen der drei Zustandsindikatoren. Da diese Methode auf alle Fruchtfolgen anzuwenden ist, kann der Arbeitsaufwand des Schrittes 3 sehr hoch sein.

In **Schritt 4** sind unter den Modellgrößen der Landnutzung Antriebsindikatoren zu identifizieren. Um die Wirkungen von Klima- und Standortheterogenität auszuschalten, erfolgen die Untersuchungen separat für jede Faktorstufenkombination der beiden Faktoren. Zur Prüfung einer beliebigen Kombination (NIED*, NFK*) ist wie in Schritt 2 zu verfahren. Der Zusammenhang zwischen einen der drei Zustandsindikatoren und den zu untersuchenden Modellgrößen wird zunächst grafisch in Form von Streudiagrammen veranschaulicht. Die Signifikanzprüfungen dieser Beziehungen erfolgen mit Unabhängigkeitstests auf Basis der Kendallschen K-Statistik, wozu die Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten zwischen Modellgröße und Zustandsindikatoren zu berechnen sind. Auch hier wird auf das Vorliegen der Normalverteilung verzichtet.

Die Überprüfungen im Schritt 4 sind für alle Faktorstufenkombinationen (NIED, NFK) des Gebietes durchzuführen. Eine Modellgröße ist dann Antriebsindikator im Metamodell, wenn für mehr als die Hälfte der Kombinationen (NIED, NFK) des Gebietes die Abhängigkeit zwischen der Größe und Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung oder Nitratkonzentration besteht.

Mit Kenntnis der Antriebsindikatoren können nun Metamodelle entwickelt werden, was im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

Beispiel 3.10:

Um den Auswertungsalgorithmus auf das Beispiel des Parabraunerde-Gebietes anzuwenden ist folgendermaßen vorzugehen:

In **Schritt 1** sind Simulationsergebnisse von jeweils 15 Szenarien zusammenzufassen, die sich ergeben, wenn jede der 3 Stufen 545, 604 und 664 mm der Jahresniederschlagssumme als eine separate Menge betrachtet wird. Der Kruskal-Wallis-Test ist auf diese drei mal anzuwenden: für die Simulationsergebnisse von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration. Für das Beispiel möge sich hierbei ergeben, dass die Stichprobenmittelwerte von Grundwasserneubildung und Nitratkonzentration signifikant verschieden sind, womit die Jahresniederschlagssumme als Antriebsindikator bestätigt ist. Für die Stickstoffauswaschung seien im Beispiel keine signifikanten Unterschiede zwischen den Mittelwerten der 3 Stichproben ermittelt worden.

In **Schritt 2** werden dann die Simulationsergebnisse von jeweils 15 Szenarien zusammengefasst, welche sich für jede der 3 Stufen 201, 232 und 397 mm der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ergeben. Wie in Schritt 1 erfolgt zur Untersuchung dieser Mengen die zweimalige Anwendung des Kruskal-Wallis-Test. Im Beispiel seien die Mittelwerte der Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration signifikant verschieden. Für die drei Zustandsindikatoren ist die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität somit Antriebsindikator.

Zur Untersuchung von Modellgrößen der Standortwirkung ist in **Schritt 3** jede der fünf Fruchtfolgen separat zu betrachten. Für eine Fruchtfolge erfolgt die Zusammenfassung der Simulationsergebnisse und Szenarien, welche bei der CANDY-Prozesssimulation dieser Fruchtfolge für die neun Kombinationen (545, 201), (545, 232), (545, 397), (604, 201), (604, 232), (604, 397), (664, 201), (664, 232), (664, 397) von Jahresniederschlagssumme (Wetterablauf) und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (Boden) erzielt wurden. Der Zusammenhang zwischen Modellgrößen der Standortwirkung und den Zustandsindikatoren wird zunächst grafisch als Streudiagramm veranschaulicht. Bei der Untersuchung einer Fruchtfolge sei im Beispiel die wirksame Mineralisierungszeit als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung gefunden worden, was auch durch den nachfolgenden Unabhängigkeitstest bestätigt wird. Auch für die anderen vier Fruchtfolgen möge auf diese Art die wirksame Mineralisierungszeit als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung bestätigt worden sein.

In **Schritt 4** des Auswertungsalgorithmus werden Modellgrößen der Landnutzung untersucht, wozu separat für jede der neun Faktorstufenkombinationen (545, 201), (545, 232), (545, 397), (604, 201), (604, 232), (604, 397), (664, 201), (664, 232), (664, 397) von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität die Simulationsergebnisse und Szenarien zusammenzufassen und zu untersuchen sind. Wie auch in Schritt 3 wird für eine Faktorstufenkombination der Zusammenhang zwischen Modellgrößen der Landnutzung und einen der drei Zustandsindikatoren zunächst grafisch dargestellt und anschließend durch Unabhängigkeitstests bestätigt. Im Beispiel seien auf diese Art der mittlere jährliche Stickstoffsaldo als Antriebsindikator von Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration für alle 9 Faktorstufenkombinationen des Gebietes gefunden worden.

Als Ergebnis der Auswertung der Datenbasis des modellierten Parabraunerde-Gebietes sind folgende Antriebsindikatoren ermittelt worden:

- für Grundwasserneubildung: Jahresniederschlagssumme (aus **Schritt 1**) und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (aus **Schritt 2**),
- für Stickstoffauswaschung: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (aus **Schritt 2**), wirksame Mineralisierungszeit (aus **Schritt 3**) und mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo (aus **Schritt 4**),
- für Nitratkonzentration: Jahresniederschlagssumme (aus **Schritt 1**), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (aus **Schritt 2**) und mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo (aus **Schritt 4**).

3.2.4 Entwicklung der Metamodelle

3.2.4.1 Herleitung der Regressionsansätze

Die Entwicklung von Metamodellen für ein Gebiet erfolgt mit verschiedenen statistischen Methoden. Um den Zusammenhang der Modellgrößen zu quantifizieren sind einige Vorarbeiten notwendig (Abbildung 18).

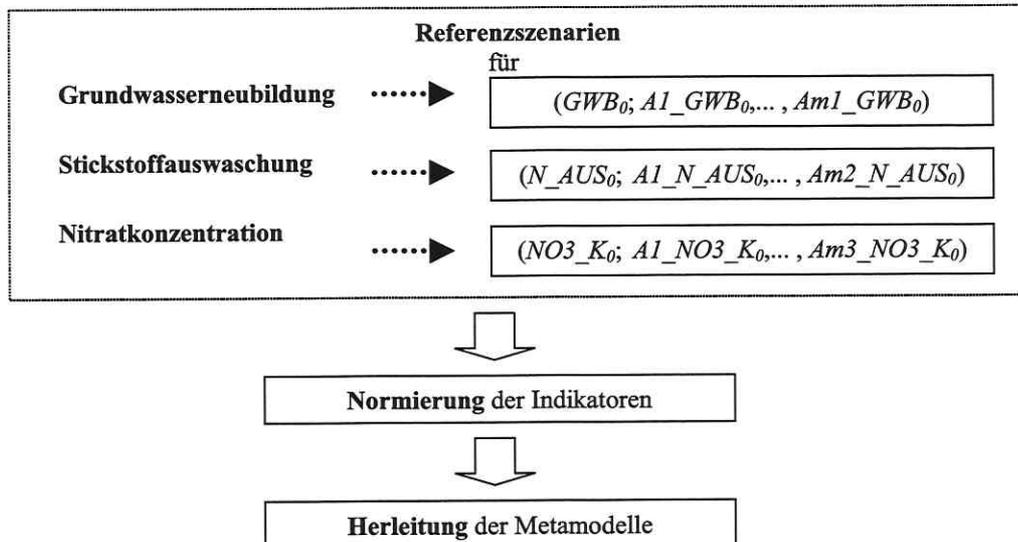


Abb. 18: Arbeitsschritte zur Entwicklung von Metamodellen aus der Datenbasis eines Gebietes: Zuweisung von Referenzszenarien für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration unter Verwendung von Mittelwerten der Modellgrößen: GWB_0 Mittelwert der Grundwasserneubildung, $A_i_GWB_0$ Mittelwert des i -ten Antriebsindikatoren ($i = 1, \dots, m1$), N_AUS_0 Mittelwert der Stickstoffauswaschung, $A_j_N_AUS_0$ Mittelwert des j -ten Antriebsindikatoren ($j = 1, \dots, m2$), $NO3_K_0$ Mittelwert der Nitratkonzentration, $A_k_N_AUS_0$ Mittelwert des k -ten Antriebsindikatoren ($k = 1, \dots, m3$).

Es wird zunächst für jeden Zustandsindikator ein Referenzszenario angegeben, welches in Vektorenform als Kennzahlen die jeweiligen Indikatorenmittelwerte aus der Datenbasis des Gebietes enthält. Mit den Referenzszenarien erfolgt die Normierung der Indikatoren, in dem jeder Indikator in Relation zu seinem Mittelwert gesetzt wird. Auf dieser Basis können in den vereinfachten Verfahren zur Charakteristik des Modellverhaltens relative Änderungen von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration aus den relativen Variationen ihrer Antriebsindikatoren beschrieben werden.

Als mathematische Ansätze zur Beschreibung des Zusammenhanges von Zustands- und Antriebsindikatoren sind multiple lineare Regressionsgleichungen gewählt worden, welche durch den Koordinatenursprung verlaufen (d. h. das Absolutglied ist Null). Wegen der Darstellung der Regressoren als relative Änderungen bezogen auf einen Referenzwert können die Regressionskoeffizienten somit als Sensitivitätsmaße interpretiert werden.

Wie in der Regressionsanalyse üblich wird vorausgesetzt, dass für beliebige, aber feste Werte der Regressoren (normierte Antriebsindikatoren) die Regressanden (normierte Zustandsindikatoren) untereinander unabhängig und normalverteilt sind (SACHS 1997: 550). Der Erwartungswert des Regressanden ist abhängig von der konkreten Regressorenbelegung, die Varianz ist konstant und unabhängig von den Werten der Regressoren.

Die Formeln (3.25), (3.26) und (3.27) zeigen die Regressionsmodelle, welche in den Metamodellen für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration Verwendung finden:

$$\begin{aligned} \frac{GWB_1 - GWB_0}{GWB_0} &= P1_GWB \cdot \frac{AI_GWB_1 - AI_GWB_0}{AI_GWB_0} \\ &+ \dots + Pm1_GWB \cdot \frac{Am1_GWB_1 - Am1_GWB_0}{Am1_GWB_0} + err_{GWB} \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{N_AUS_1 - N_AUS_0}{N_AUS_0} &= P1_N_AUS \cdot \frac{AI_N_AUS_1 - AI_N_AUS_0}{AI_N_AUS_0} \\ &+ \dots + Pm2_N_AUS \cdot \frac{Am2_N_AUS_1 - Am2_N_AUS_0}{Am2_N_AUS_0} + err_{N_AUS} \end{aligned} \quad (3.26)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{NO3_K_1 - NO3_K_0}{NO3_K_0} &= P1_NO3_K \cdot \frac{AI_NO3_K_1 - AI_NO3_K_0}{AI_NO3_K_0} \\ &+ \dots + Pm3_NO3_K \cdot \frac{Am3_NO3_K_1 - Am3_NO3_K_0}{Am3_NO3_K_0} + err_{NO3_K} \end{aligned} \quad (3.27)$$

mit

* $GWB_0, AI_GWB_0, \dots, Am1_GWB_0$

Kennzahlen des Referenzszenarios für Grundwasserneubildung: GWB_0 Mittelwert der Grundwasserneubildung, Ai_GWB_0 Mittelwert des i -ten Antriebsindikatoren, $i = 1, \dots, m1$,

* $N_AUS_0, AI_N_AUS_0, \dots, Am2_N_AUS_0$

Kennzahlen des Referenzszenarios für Stickstoffauswaschung: N_AUS_0 Mittelwert der Stickstoffauswaschung, $Aj_N_AUS_0$ Mittelwert des j -ten Antriebsindikatoren, $j = 1, \dots, m2$,

* $NO3_K_0, AI_NO3_K_0, \dots, Am3_NO3_K_0$

Kennzahlen des Referenzszenarios für Grundwasserneubildung: $NO3_K_0$ Mittelwert der Nitratkonzentration, $Ak_NO3_K_0$ Mittelwert des k -ten Antriebsindikatoren, $k = 1, \dots, m3$,

- * P_i_GWB Regressionskoeffizient des i -ten Antriebsindikators der Grundwasserneubildung,
 $i = 1, \dots, m1$,
- * $P_j_N_AUS$ Regressionskoeffizient des j -ten Antriebsindikators der Stickstoffauswaschung,
 $j = 1, \dots, m2$
- * $P_k_NO3_K$ Regressionskoeffizient des k -ten Antriebsindikators der Nitratkonzentration,
 $k = 1, \dots, m3$
- * $GWB_1, A1_GWB_1, \dots, Am1_GWB_1, N_AUS_1, A1_N_AUS_1, \dots, Am2_N_AUS_1,$
 $NO3_K_1, A1_NO3_K_1, \dots, Am3_NO3_K_1$ als Kennzahlen eines beliebigen Szenarios: $GWB_1,$
 $N_AUS_1, NO3_K_1$: Werte für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration, Ai_GWB_1 Wert des i -ten Antriebsindikators für Grundwasserneubildung $i = 1, \dots,$
 $m1, Aj_N_AUS_1$ Wert des j -ten Antriebsindikators für Stickstoffauswaschung, $j = 1, \dots, m2,$
 $Ak_NO3_K_1$ Wert des k -ten Antriebsindikators für Nitratkonzentration, $k = 1, \dots, m3,$
- * err_{GWB}, err_{N_AUS} und err_{NO3_K} als Fehler der Regressionsmodelle.

Zum Quantifizieren der Regressionskoeffizienten P_i_GWB ($i = 1, \dots, m1$), $P_j_N_AUS$ ($j = 1, \dots, m2$) und $P_k_NO3_K$ ($k = 1, \dots, m3$) ist für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration unter Verwendung der normierten Indikatoren je eine multiple Regressionsanalyse durchzuführen (HARTUNG 1993). Aus den Normalgleichungssystemen werden $P1_GWB, \dots, Pm1_GWB, P1_N_AUS, \dots, Pm2_N_AUS, P1_NO3_K, \dots, Pm3_NO3_K$ als Kleinste-Quadrate-Schätzer ermittelt.

Mit den Formeln (3.25), (3.26) und (3.27) kann für jedes beliebige Szenario des Gebietes eine Abschätzung von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration erfolgen. Die Regressionskoeffizienten $P1_GWB, \dots, Pm1_GWB, P1_N_AUS, \dots, Pm2_N_AUS, P1_NO3_K, \dots, Pm3_NO3_K$ spiegeln Sensitivitäten der einzelnen Antriebsindikatoren wider. Nach Quantifizieren der Regressionskoeffizienten erfolgen für jeden Regressionsansatz eine Reihe weiterer Prüfungen (Abbildung 19).

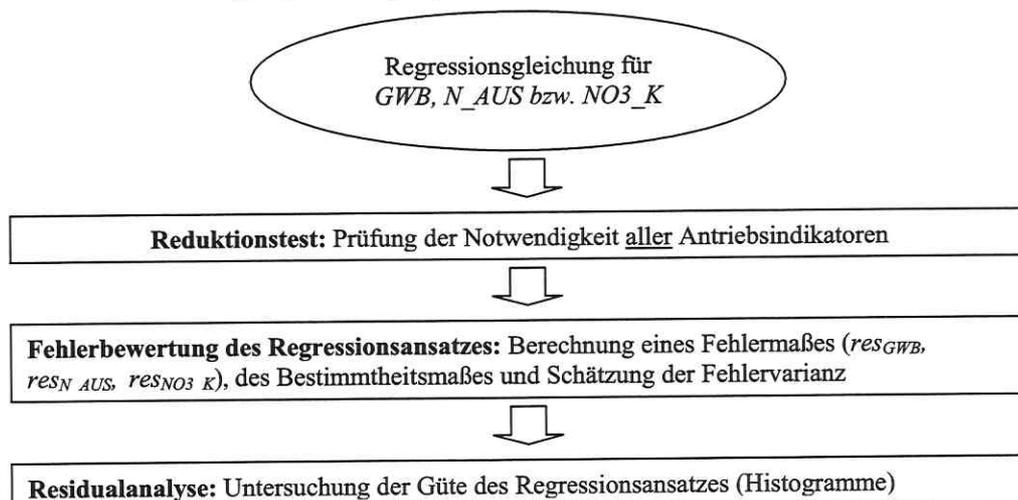


Abb. 19: Reihenfolge der Untersuchungen der Regressionsansätze. Die Anwendung erfolgt auf jede der drei Regressionsfunktionen.

Mit Reduktionstests wird zunächst geprüft, ob es notwendig ist, im Regressionsansatz alle Regressoren zu berücksichtigen oder ob einige von ihnen überflüssig sind. Hierbei werden Regressoren (normierte Antriebsindikatoren) sukzessive aus dem Ansatz entfernt und für jedes dieser reduzierten Modelle die Reduktionsquadratsumme (Produkt aus multiplen Bestimmtheitsmaß und Summe der Quadrate der mittleren Abweichungen, siehe HARTUNG & ELPELT (1995)) bestimmt. Ist eine daraus abgeleitete Testgröße zu einem Niveau kleiner als das entsprechende Quantil der F-Verteilung, wird die Redundanz des im aktuellen Schritt aus dem Modell entfernten Regressors gezeigt (HARTUNG 1993, HARTUNG & ELPELT 1995). Bei gleichzeitiger Berücksichtigung der noch in der Regressionsgleichung verbliebenen Regressoren leistet dieser keinen wesentlichen Beitrag zur Erklärung des Regressanden (HARTUNG & ELPELT 1995). Für jedes Gebiet ist dann individuell zu entscheiden, ob der betreffende Antriebsindikator aus dem Metamodell entfernt wird.

Zur Abschätzung der zufälligen Fehler err_{GWB} , err_{N_AUS} und err_{NO3_K} wird für jede der Formeln (3.25), (3.26) und (3.27) ein Fehlermaß in Form eines mittleren absoluten Residuums (res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K}) bestimmt. Diese werden, zur Charakterisierung des Fehlers der Regressionsfunktionen, als zusätzliche Komponente in diese integriert. Für die Fehlermaße wurde ein Ansatz gewählt, welcher die durchschnittliche betragsmäßige Abweichung der Residuen bezogen auf einen Referenzwert (GWB_0 , N_AUS_0 und $NO3_K_0$) beschreibt:

$$\begin{aligned} res_{GWB} &:= \frac{1}{az_r} \cdot \sum_{i=1}^{az_r} \left| \frac{\overline{GWB}_i - GWB_0}{GWB_0} - \frac{GWB_i - GWB_0}{GWB_0} \right| \\ &= \frac{1}{az_r} \cdot \sum_{i=1}^{az_r} \left| \frac{\overline{GWB}_i - GWB_i}{GWB_0} \right| \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} res_{N_AUS} &:= \frac{1}{az_r} \cdot \sum_{i=1}^{az_r} \left| \frac{\overline{N_AUS}_i - N_AUS_0}{N_AUS_0} - \frac{N_AUS_i - N_AUS_0}{N_AUS_0} \right| \\ &= \frac{1}{az_r} \cdot \sum_{i=1}^{az_r} \left| \frac{\overline{N_AUS}_i - N_AUS_i}{N_AUS_0} \right| \end{aligned} \quad (3.29)$$

und

$$\begin{aligned} res_{NO3_K} &:= \frac{1}{az_r} \cdot \sum_{i=1}^{az_r} \left| \frac{\overline{NO3_K}_i - NO3_K_0}{NO3_K_0} - \frac{NO3_K_i - NO3_K_0}{NO3_K_0} \right| \\ &= \frac{1}{az_r} \cdot \sum_{i=1}^{az_r} \left| \frac{\overline{NO3_K}_i - NO3_K_i}{NO3_K_0} \right| \end{aligned} \quad (3.30)$$

wobei

GWB_0	Mittelwert der Grundwasserneubildung (Kennzahl des Referenzszenarios),
N_AUS_0	Mittelwert der Stickstoffauswaschung (Kennzahl des Referenzszenarios),
$NO3_K_0$	Mittelwert der Nitratkonzentration (Kennzahl des Referenzszenarios),
$GWB_i, N_AUS_i, NO3_K_i$	aus Regressionsfunktion berechnete Werte für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration,
$\overline{N_AUS_i}, \overline{GWB_i}, \overline{NO3_K_i}$	mit Prozessmodell simulierte Werte für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration der Datenbasis,
az_r	Anzahl der Szenarien in der Datenbasis.

Durch Hinzunahme der Fehlermaße ergeben sich für die Formeln (3.25), (3.26) und (3.27):

$$\frac{GWB_1 - GWB_0}{GWB_0} = P1_GWB \cdot \frac{AI_GWB_1 - AI_GWB_0}{AI_GWB_0} + \dots + Pm1_GWB \cdot \frac{Am1_GWB_1 - Am1_GWB_0}{Am1_GWB_0} \pm res_{GWB} \quad (3.25a)$$

$$\frac{N_AUS_1 - N_AUS_0}{N_AUS_0} = P1_N_AUS \cdot \frac{AI_N_AUS_1 - AI_N_AUS_0}{AI_N_AUS_0} + \dots + Pm2_N_AUS \cdot \frac{Am2_N_AUS_1 - Am2_N_AUS_0}{Am2_N_AUS_0} \pm res_{N_AUS} \quad (3.26a)$$

und

$$\frac{NO3_K_1 - NO3_K_0}{NO3_K_0} = P1_NO3_K \cdot \frac{AI_NO3_K_1 - AI_NO3_K_0}{AI_NO3_K_0} + \dots + Pm3_NO3_K \cdot \frac{Am3_NO3_K_1 - Am3_NO3_K_0}{Am3_NO3_K_0} \pm res_{NO3_K} \quad (3.27a)$$

Die Bedeutung der Größen ist dieselbe wie bei den Formeln (3.25), (3.26) und (3.27).

Beispiel 3.11:

Für das zu behandelnde Parabraunerde-Gebiet können nun mit Kenntnis der Antriebsindikatoren für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration (Beispiel 3.10) die Regressionsansätze der Metamodelle entwickelt werden.

Zunächst ist aus der Datenbasis für jeden Zustandsindikator ein Referenzszenario zu berechnen. Im Beispiel mögen sich für die Indikatoren folgende Mittelwerte ergeben:

Grundwasserneubildung: $GWB_0 = 170$ mm/a, Stickstoffauswaschung: $N_AUS_0 = 37$ kg/(ha-a), Nitratkonzentration: $NO3_K_0 = 94$ mg/l, Jahresniederschlagssumme: $NIED_0 = 604$ mm/a, Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität: $NFK_0 = 277$ mm, wirksame Mineralisierungszeit $WMZ_0 = 32$ d/a, mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo $N_SALDO_0 = 57$ kg/(ha-a).

Die Referenzszenarien können damit angegeben werden als
 $(GWB_0; NIED_0, NFK_0) = (170; 604, 277)$, $(N_AUS_0; NFK_0, WMZ_0, N_SALDO_0) = (37; 277, 32, 57)$ und
 $(NO3_K_0; NIED_0, NFK_0, N_SALDO_0) = (94; 604, 277, 57)$. Nach den Formeln (3.25), (3.26) und (3.27)
 lauten die allgemeinen Regressionsgleichungen der Metamodelle

$$\frac{GWB_1 - 170}{170} = P1_GWB \cdot \frac{NIED_1 - 604}{604} + P2_GWB \cdot \frac{NFK_1 - 277}{277} + err_{GWB}$$

$$\frac{N_AUS_1 - 37}{37} = P1_N_AUS \cdot \frac{NFK_1 - 277}{277} + P2_N_AUS \cdot \frac{WMZ_1 - 32}{32}$$

und

$$+ P3_N_AUS \cdot \frac{N_SALDO_1 - 57}{57} + err_{N_AUS}$$

$$\frac{NO3_K_1 - 94}{94} = P1_NO3_K \cdot \frac{NIED_1 - 604}{604} + P2_NO3_K \cdot \frac{NFK_1 - 277}{277}$$

$$+ P3_NO3_K \cdot \frac{N_SALDO_1 - 57}{57} + err_{NO3_K}$$

mit den Regressionskoeffizienten $P1_GWB$, $P2_GWB$, $P1_N_AUS$, $P2_N_AUS$, $P3_N_AUS$, $P1_NO3_K$,
 $P2_NO3_K$ und $P3_NO3_K$ sowie den zufälligen Fehlern err_{GWB} , err_{N_AUS} und err_{NO3_K} . Für die Regressi-
 onskoeffizienten seien im Beispiel mit einem Statistikprogramm folgende konkrete Werte bestimmt wor-
 den: $P1_GWB = 1,340$, $P2_GWB = 0,830$, $P1_N_AUS = -0,345$, $P2_N_AUS = 0,800$,
 $P3_N_AUS = 2,700$, $P1_NO3_K = -2,137$, $P2_NO3_K = 1,127$ und $P3_NO3_K = 2,569$.
 Die Fehlermaße zur Abschätzung von err_{GWB} , err_{N_AUS} und err_{NO3_K} seien mit $res_{GWB} = 0,072$,
 $res_{N_AUS} = 0,031$ und $res_{NO3_K} = 0,091$ bestimmt worden. Die Regressionsgleichungen haben damit die Gestalt

$$\frac{GWB_1 - 170}{170} = 1,340 \cdot \frac{NIED_1 - 604}{604} + 0,830 \cdot \frac{NFK_1 - 277}{277} \pm 0,072,$$

$$\frac{N_AUS_1 - 37}{37} = -0,345 \cdot \frac{NFK_1 - 277}{277} + 0,800 \cdot \frac{WMZ_1 - 32}{32}$$

und

$$+ 2,700 \cdot \frac{N_SALDO_1 - 57}{57} \pm 0,031$$

$$\frac{NO3_K_1 - 94}{94} = -2,137 \cdot \frac{NIED_1 - 604}{604} + 1,127 \cdot \frac{NFK_1 - 277}{277}$$

$$+ 2,569 \cdot \frac{N_SALDO_1 - 57}{57} \pm 0,091$$

Durch eine Prüfung dieser Ansätze mit Reduktionstests sei die Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren
 bestätigt worden.

Zur Überprüfung der Güte des Regressionsansatzes ist für jedes Metamodell eine Residual-
 analyse durchzuführen, bei welcher die Verteilung der normierten Residuen getestet wird. Letz-
 tere werden als Quotient aus zufälligen Fehlern und dem Schätzer der Standardabweichung
 berechnet (HARTUNG 1993). Ist der Regressionsansatz richtig, müssen die normierten Residuen
 standardnormalverteilt sein, was im Rahmen dieser Arbeit grafisch durch Histogramme über-
 prüft wird.

Zur Berücksichtigung der Wirkung der Texturheterogenität auf Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration im Prozessmodell (d. h. auf Mikroskala) wird in jede Regressionsgleichung ein Fehlerterm ε_{GWB} , ε_{N_AUS} bzw. ε_{NO3_K} eingefügt, deren Bestimmung im folgenden Abschnitt detailliert dargestellt ist. Auch dort werden die Methoden am Beispiel der Behandlung des Parabraunerde-Gebietes veranschaulicht.

3.2.4.2 Quantifizieren der Wirkung der Texturheterogenität

Mit dem Profilgenerator ist eine Beschreibung der Wirkung der Texturheterogenität auf Mikroskala möglich, wobei für das homogene Profil des Standortes eine Stichprobe von Elementen mit variabler Bodenphysik erzeugt wird (vergleiche Abschnitt 3.1). Zur Untersuchung der Verteilungen von Modellzustandsgrößen sind bei nur einer Fruchtfolge und einem Wetterablauf sämtliche Elemente aus der Stichprobe zu simulieren.

Dies wäre auch bei der Entwicklung von Metamodellen für meso- und makrokalige Gebiete der Fall: mit dem Profilgenerator müsste für jedes repräsentative Profil eine separate Stichprobe erzeugt werden. Für sämtliche Elemente dieser Stichproben wären alle Fruchtfolgen bei den drei Datensätzen des Referenzwetterablaufs zu simulieren.

Beispiel 3.12:

Für das Parabraunerde-Gebiet (vergleiche Beispiel 3.9) wäre der Profilgenerator auf die repräsentativen Profile Parabraunerde in Decksalm, Löss-Parabraunerde und Lehm-Parabraunerde anzuwenden. Unter der Annahme, dass für jedes der drei Profile eine Stichprobe mit je 300 Elementen erzeugt wird, wären für fünf Fruchtfolgen und drei Datensätze des Referenzwetters 300-300-300-5-3 = 405 000 000 Szenarien zu rechnen und auszuwerten.

Da ein solches Vorgehen wegen des hohen Zeit- und Rechenaufwandes kaum realisierbar ist, kommt im Rahmen dieser Arbeit ein Verfahren zur Anwendung, mit welchem für das Prozessmodell die relative Änderung eines Zustandsindikators in Bezug auf seinen Referenzwert angegeben werden kann. Die Wirkung der Texturheterogenität auf eine Modellgröße wird somit in der Mikroskala mit einem Fehlerterm beschrieben. Dieser wird, analog zu den Fehlermaßen res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K} , in die Gleichungen der Metamodelle des Gebietes (Formeln (3.25a), (3.26a) und (3.27a), Abschnitt 3.2.4.1) integriert. Die in diesem Abschnitt verwendete Abkürzung ZI steht für einen der drei Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung Stickstoffauswaschung oder Nitratkonzentration. Das Verfahren wird allgemein für ZI beschrieben.

Die Realisierung der Methode erfolgt im Anschluss an das Quantifizieren der Regressionskoeffizienten. Benötigt wird für den Zustandsindikator ZI ein ‚mittleres Szenario‘, welches sich folgendermaßen aus der Datenbasis (siehe Versuchsplan in Abschnitt 3.2.2) ableiten lässt.

Betrachtet wird die Teilmenge der Szenarien, deren Elemente ‚mittlere Eigenschaften‘ der Faktorstufenkombination von Klima- und Standortheterogenität besitzen:

- als Stufe des Faktors Klimaheterogenität: den Datensatz des Referenzwetters, welches annähernd den Mittelwert der Jahresniederschlagssumme ($NIED_{Mit}$) besitzt,
- als Stufe des Faktors Standortheterogenität: dasjenige repräsentative Profil, welches etwa den Mittelwert der Summe der nutzbaren Feldkapazität im Gesamtprofil (NFK_{Mit}) repräsentiert.

Aus dieser Teilmenge ist als ‚mittleres Szenario‘ für den Zustandsindikator ZI dasjenige zu wählen, dessen Simulationsergebnis annähernd den Mittelwert von ZI trifft. Zur Reduktion des Arbeitsaufwandes werden die Untersuchungen zum Quantifizieren des Fehlerterms auf dieses Szenario eingeschränkt. Die Wirkung der Texturheterogenität wird damit auf Ebene des Prozessmodells für den Mittelwert dieses Zustandsindikators beschrieben.

Beispiel 3.13:

Für das Parabraunerde-Gebiet soll die Wirkung der Texturheterogenität auf Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung untersucht werden.

Es sind hierzu genau die fünf Fruchtfolgen zu wählen, welche für die Faktorstufenkombinationen (604, 232) simuliert wurden, d. h. $NIED_{Mit} = 604$ mm/a und $NFK_{Mit} = 232$ mm. Sie bilden die Teilmenge der Szenarien mit ‚mittleren Eigenschaften‘ von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration des modellierten Gebietes. Aus dieser Teilmenge sind die drei Szenarien zu wählen, welche etwa die Mittelwerte von Grundwasserneubildung (170 mm/a), Stickstoffauswaschung (37 kg/(ha-a)) und Nitratkonzentration (94 mg/l) treffen (vergleiche Beispiel 3.11). Diese Szenarien sollen im Beispiel folgende Eigenschaften besitzen:

- a) *erstes Szenario (‚mittleres Szenario‘ für Grundwasserneubildung):
162 mm Grundwasserneubildung, Kohlenstoffreproduktionsrate 6,8 dt/(ha-a),*
- b) *zweites Szenario (‚mittleres Szenario‘ für Stickstoffauswaschung):
Stickstoffauswaschung 39 kg/(ha-a), Kohlenstoffreproduktionsrate 9,8 dt/(ha-a),*
- c) *drittes Szenario (‚mittleres Szenario‘ für Nitratkonzentration):
Nitratkonzentration 101 mg/l, Kohlenstoffreproduktionsrate 8,7 dt/(ha-a).*

Das Verfahren kann nun durchgeführt werden, wobei zunächst die Anwendung des Profilgenerators auf das ausgewählte repräsentative Profil mit Kenngröße NFK_{Mit} erfolgt. Kern der Methode ist eine Sensitivitätsanalyse, in deren Ergebnis aus der generierten Stichprobe diejenigen Bodenprofile selektiert werden, die für den Zustandsindikator ZI minimale, mittlere und maximale Jahresmittelwerte liefern.

Abbildung 20 zeigt schematisch das Verfahren, welches für das zu behandelnde Gebiet auf jeden der Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration angewendet wird.

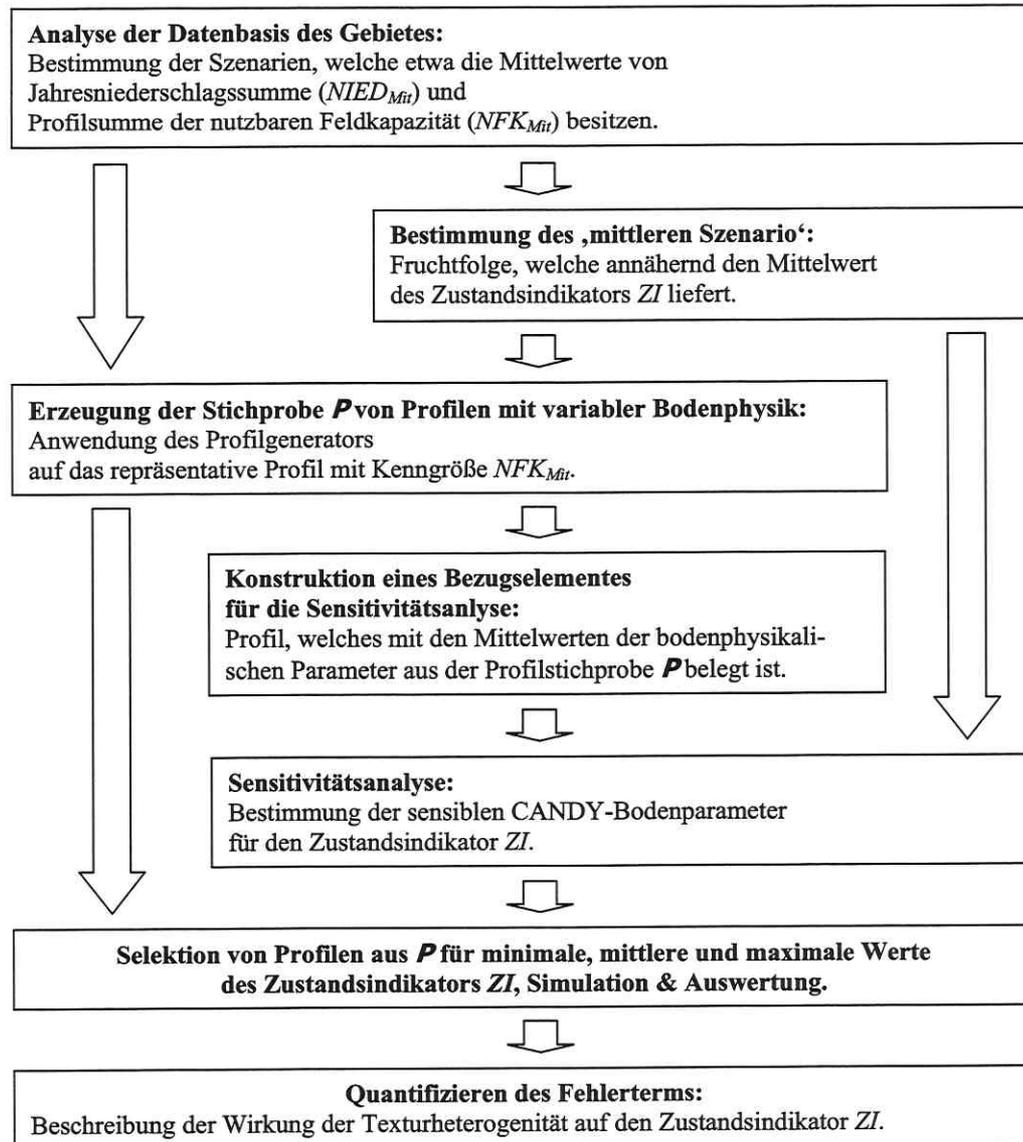


Abb. 20: Schrittfolge zum Quantifizieren des Fehlerterms als Wirkung der Texturheterogenität auf den Zustandsindikator ZI .

Im Folgenden wird bei der Beschreibung des Verfahrens davon ausgegangen, dass das gewählte repräsentative Bodenprofil mit Kenngröße NFK_{Mit} aus insgesamt n homogenen Horizonten besteht (vergleiche Abbildung 5, Abschnitt 2.4). Auf dieses wird unter Verwendung der Kohlenstoffreproduktionsrate des ‚mittleren Szenario‘ des Zustandsindikators ZI der Profilgenerator angewendet. Aus der erzeugten Stichprobe kann nun ein Bezugs-element (CANDY-Bodenprofil) für die Sensitivitätsanalyse konstruiert werden, in dem die Stichprobenmittelwerte von

Trockenrohdichte, Trockensubstanzdichte, Feldkapazität, Permanentwelkepunkt, Feinanteilgehalt und des Versickerungsparameters LAMBDA in jedem der n Horizonte als bodenphysikalische Parameter verwendet werden.

Durch sukzessive Veränderung dieser Parameter werden Varianten des Bezugsprofils erzeugt. Die Variationen eines einzelnen Parameters ergeben sich aus dessen Spannweite in der erzeugten Stichprobe. Für jeden Horizont erhält man 12 Varianten, bei denen jeweils einer der sechs bodenphysikalischen Parameter mit dem entsprechenden minimalen oder maximalen Wert belegt ist. Die übrigen Parameter und die der anderen Horizonte entsprechen denen des Bezugsprofils. In Abhängigkeit von der Horizontanzahl n des gewählten repräsentativen Profils ergeben sich somit $12 \cdot n$ Varianten des Bezugsprofils, welche zusammen mit diesen für die Sensitivitätsanalyse benötigt werden.

Beispiel 3.14:

Um für den Zustandsindikator Grundwasserneubildung des Parabraunerde-Gebietes die Sensitivitätsanalyse auszuführen, ist folgendermaßen vorzugehen.

Zunächst ist der Profilerzeuger auf das Profil Lehm-Parabraunerde ($NFK_{MI} = 232$ mm) anzuwenden, welches aus den drei Horizonten Ap, Bt und Cc besteht (siehe Beispiel 3.1). Entsprechend des ‚mittleren Szenario‘ der Grundwasserneubildung (vergl. Beispiel 3.13) werden die Kohlenstoffproduktionsrate mit $6,8$ dt/(ha-a) und die Jahresniederschlagssumme ($NIED_{MI}$) mit 604 mm/a gewählt sowie die Jahreslufttemperatur entsprechend der repräsentativen Klimastation mit $9,3$ °C (Beispiel 3.1). Die Modellierung der Texturheterogenität erfolgt deterministisch mit den in Beispiel 3.2 angegebenen Variationsbreiten für Ton- und Schluffgehalt. Zur Bestimmung des inerten Kohlenstoffanteils wird in den Horizonten Ap und Bt Formel (3.6) angewendet. Die Berechnung von Feldkapazität und Permanentwelkepunkt erfolgt in den Horizonten Ap und Bt nach Formel (3.23), für Horizont Cc durch Anwendung der Formeln (3.20)-(3.22). Entsprechend Beispiel 3.2 sind in der Profilstichprobe 2835 CANDY-Profile mit verschiedener Bodenphysik enthalten (siehe auch Beispiel 3.8). Tabelle 17 zeigt Eigenschaften der erzeugten CANDY-Parameter der Bodenphysik in der Stichprobe.

Tab. 17: Minimum, Maximum und Mittelwert von Trockenrohdichte (TRD), Trockensubstanzdichte (TSD), Feinanteilgehalt (FAT), Versickerungsparameter (LAMBDA), Feldkapazität (FKAP) und Permanentwelkepunkt (PWP) in der generierten Profilstichprobe für Lehm-Parabraunerde mit den drei Horizonten Ap, Bt, Cc.

Horizont	Parameter	Minimum	Maximum	Mittelwert
Ap	TRD	1,49	1,52	1,51
	TSD	2,52	2,53	2,52
	FAT	16,6	18,9	17,8
	FKAP	22,7	24,5	23,6
	PWP	9,0	9,8	9,4
	LAMBDA	0,100	0,157	0,125
Bt	TRD	1,46	1,50	1,48
	TSD	2,58	2,58	2,58
	FAT	24,3	28,6	26,4
	FKAP	26,0	28,7	27,3
	PWP	12,0	13,5	12,7
	LAMBDA	0,075	0,075	0,075
Cc	TRD	1,69	1,69	1,69
	TSD	2,70	2,71	2,70
	FAT	18,7	20,8	19,8
	FKAP	25,6	27,3	26,6
	PWP	12,3	13,8	13,1
	LAMBDA	0,075	0,104	0,083

Aus der Profilstichprobe ist das Bezugsselement für die Sensitivitätsanalyse zu konstruieren: ein CANDY-Bodenprofil für Lehm-Parabraunerde, bei welchem für jeden bodenphysikalischen Parameter sein Mittelwert aus der Profilstichprobe verwendet wird (Spalte MW in Tabelle 17).

Ausgehend von diesem Bezugsselement werden $3 \cdot 12 = 36$ Varianten konstruiert. Die ersten beiden Varianten erhält man, in dem für Horizont Ap die Trockenrohdichte mit dem Maximum von 1,52 (Variante 1) und dann mit dem Minimum 1,49 (Variante 2) belegt wird, unter Beibehaltung der übrigen Parameterwerte. Zur Konstruktion der weiteren Varianten wird die Trockenrohdichte des Ap-Horizonts wieder mit ihrem Ausgangswert 1,51 belegt. Das Verfahren wird mit der Trockensubstanzdichte des Horizonts Ap fortgesetzt (Varianten 3 und 4). Die Varianten 35 und 36 ergeben sich durch Belegung des Versickerungsparameters LAMBDA des Cc-Horizonts mit 0,104 und 0,075.

Bei der Sensitivitätsanalyse sind zunächst alle Varianten des Bezugsprofils mit der Fruchtfolge des ‚mittleren Szenario‘ vom Zustandsindikator ZI zu rechnen, wobei der Datensatz des Referenzwettlers mit Jahresniederschlagssumme $NIED_{Mit}$ verwendet wird. Wie auch bei den Simulationen zur Erstellung der Datenbasis (Abschnitt 3.2.2), ist hier zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes des Mineralstickstoffs die Fruchtfolge mehrfach periodisch zu rechnen. Die Simulationsergebnisse sind Jahresmittelwerte von Modellgrößen im letzten Teil des Rechenzeitraumes. Um Profile zu selektieren, welche für den Zustandsindikator ZI minimale und maximale Jahreswerte liefern, werden für jeden der n Horizonte die Simulationsergebnisse seiner Varianten des Bezugsprofils zu Mengen S_i zusammengefasst, $i = 1, \dots, n$.

Beispiel 3.15:

Das Beispiel 3.14 der Sensitivitätsanalyse wird fortgeführt.

Nach Simulation des Bezugsprofils und seiner 36 Varianten mit der Fruchtfolge des ‚mittleren Szenario‘ (vergleiche Beispiel 3.13) erhält man für den Zustandsindikator drei Mengen \mathbf{S}_1 , \mathbf{S}_2 und \mathbf{S}_3 von Simulationsergebnissen der Grundwasserneubildung. In \mathbf{S}_1 sind die 12 Werte enthalten, welche als Resultate der 12 Varianten des Bezugsprofils bei Variation der bodenphysikalischen Parameter des Ap-Horizonts erhalten wurden: $\mathbf{S}_1 = \{162; 162; 162; 162, 162; 162; 173; 151; 166, 157; 161; 164\}$.

\mathbf{S}_2 umfasst die Zahlen, welche nach Simulation der 12 Varianten des Bezugsprofils erhalten wurden, bei denen Variationen der bodenphysikalischen Parameter des Horizonts Bt erfolgten: $\mathbf{S}_2 = \{162; 162; 162; 162, 162; 168; 156; 168, 159; 162; 162\}$.

Schließlich enthält \mathbf{S}_3 die 12 Rechenergebnisse der Grundwasserneubildung von den Varianten des Bezugsprofils, die durch Änderung eines der 6 Parameter des Horizonts Cc entstanden sind: $\mathbf{S}_3 = \{162; 162; 162; 162; 162; 157, 165; 163; 160; 166; 158\}$.

Die Elemente in \mathbf{S}_1 , \mathbf{S}_2 und \mathbf{S}_3 sind so geordnet, dass sie die Grundwasserneubildungsraten in der Reihenfolge der Varianten bei maximaler Trockenrohddichte, minimaler Trockenrohddichte, maximaler Trockensubstanzdichte, minimaler Trockensubstanzdichte, maximalem Feinanteilgehalt, minimalem Feinanteilgehalt, maximaler Feldkapazität, minimaler Feldkapazität, maximalem Permanentwelkepunkt, minimalem Permanentwelkepunkt, maximalem Versickerungsparameter und minimalem Versickerungsparameter enthalten.

Die Selektion der Profile erfolgt durch sukzessive Auswertung der Mengen \mathbf{S}_i ($i = 1, \dots, n$), was jeweils der Behandlung eines Horizontes des Bezugsprofils entspricht. In jedem Schritt erfolgt eine Reduktion der Elementanzahl in der Profilstichprobe \mathbf{P} . Diese enthält nach Bearbeitung des letzten (n -ten) Horizontes genau die Profile, welche für den Zustandsindikator ZI die gewünschten Eigenschaften besitzen (Abbildung 21).

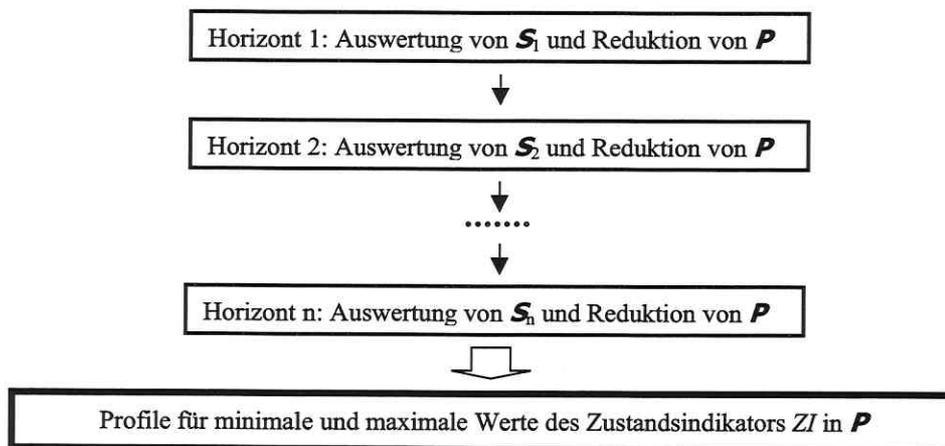


Abb. 21: Reduktion der Elemente in der Profilstichprobe \mathbf{P} durch sukzessive Auswertung der Simulationsergebnisse \mathbf{S}_i der Varianten aller n Horizonte des Bezugsprofils.

Im Folgenden wird die in Abbildung 21 dargestellte Vorgehensweise am Beispiel des i -ten Horizontes im Detail demonstriert (Abbildung 22).

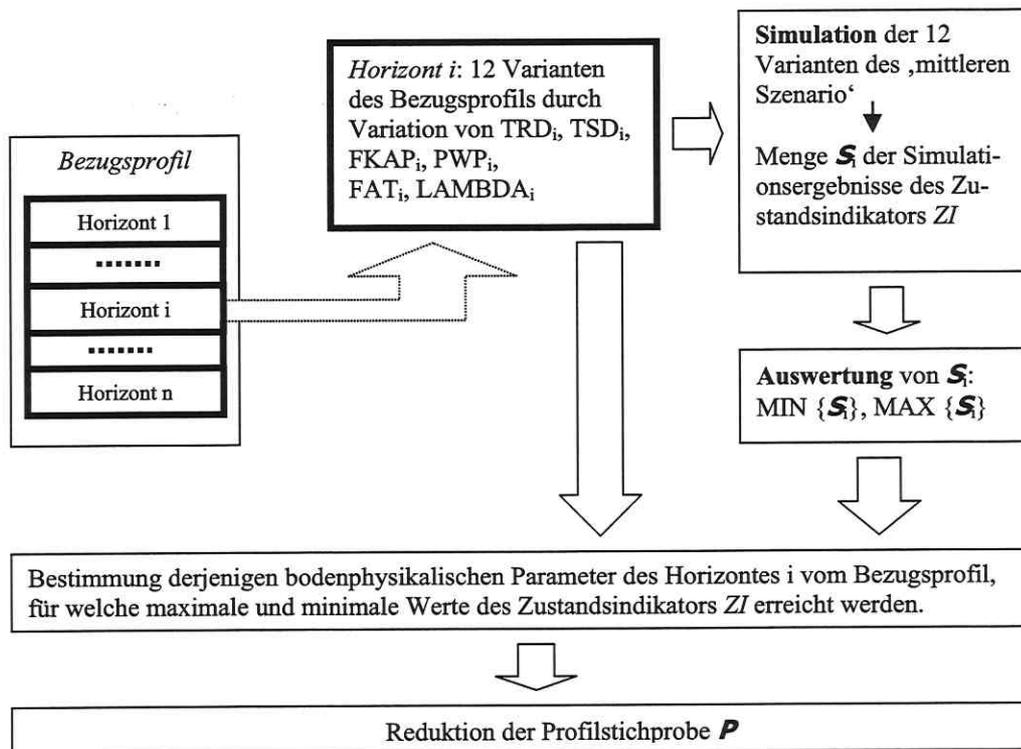


Abb. 22: Behandlung des i -ten Horizontes: Simulation der Varianten des Bezugsprofils, Untersuchung der Simulationsergebnisse von ZI (Menge S_i) und Reduktion der Elemente der Profilstichprobe P .

Zur Behandlung des i -ten Horizontes werden die Rechenergebnisse derjenigen Varianten des Bezugsprofils betrachtet, welche durch Variation eines der bodenphysikalischen Parameter des Horizontes entstanden sind. Diese 12 Zahlenwerte des Zustandsindikators ZI werden zusammengefasst zur geordneten Menge S_i mit

$$S_i = \left\{ \begin{array}{l} ZI_{TRD_i^+}, ZI_{TRD_i^-}, ZI_{TSD_i^+}, ZI_{TSD_i^-}, ZI_{FAT_i^+}, ZI_{FAT_i^-}, \\ ZI_{FKAP_i^+}, ZI_{FKAP_i^-}, ZI_{PWP_i^+}, ZI_{PWP_i^-}, ZI_{LAMBDA_i^+}, ZI_{LAMBDA_i^-} \end{array} \right\}$$

mit den Werten des Zustandsindikators

$ZI_{TRD_i^+}$ bei maximaler Trockenrohddichte,

$ZI_{TRD_i^-}$ bei minimaler Trockenrohddichte,

$ZI_{TSD_i^+}$ bei maximaler Trockensubstanzdichte,

$ZI_{TSD_i^-}$ bei minimaler Trockensubstanzdichte,

$ZI_FAT_i^+$	bei maximalem Feinanteilgehalt,
$ZI_FAT_i^-$	bei minimalem Feinanteilgehalt,
$ZI_FKAP_i^+$	bei maximaler Feldkapazität,
$ZI_FKAP_i^-$	bei minimaler Feldkapazität,
$ZI_PWP_i^+$	bei maximalem Permanentwelkepunkt,
$ZI_PWP_i^-$	bei minimalem Permanentwelkepunkt,
$ZI_LAMBDA_i^+$	bei Maximalwert des Versickerungsparameters,
$ZI_LAMBDA_i^-$	bei Minimalwert des Versickerungsparameters.

Die Elemente in \mathbf{S}_i sind so zu ordnen, dass sie die Werte des Zustandsindikators ZI in der Reihenfolge der Varianten bei maximaler Trockenrohdichte, minimaler Trockenrohdichte, maximaler Trockensubstanzdichte, minimaler Trockensubstanzdichte, maximalem Feinanteilgehalt, minimalem Feinanteilgehalt, maximaler Feldkapazität, minimaler Feldkapazität, maximalem Permanentwelkepunkt, minimalem Permanentwelkepunkt, maximalem Versickerungsparameter und minimalem Versickerungsparameter enthalten, vergleiche auch Beispiel 3.15.

In der Menge \mathbf{S}_i sind zu bestimmen:

- Minimum und Maximum des Zustandsindikators ZI :
 $Min_ZI := \text{MIN} \{ \mathbf{S}_i \}$ und $Max_ZI := \text{MAX} \{ \mathbf{S}_i \}$,
- die beiden bodenphysikalischen Parameter, welche diese Extrema liefern, einschließlich ihrer konkreten Werte:
 P_MIN_ZI mit Wert p_min und P_MAX_ZI mit Wert p_max .

Mit diesen Kenntnissen wird die Profilstichprobe editiert: entfernt werden die Elemente in \mathbf{P} , deren Parameter $P_MIN_ZI \neq p_min$ und $P_MAX_ZI \neq p_max$ sind. Es verbleiben somit die Profile, welche die minimalen und maximalen Werte des Zustandsindikators ZI liefern, als Ergebnis der Variation bodenphysikalischer Parameter des Horizontes i .

Nach Anwendung des Verfahrens auf alle n Horizonte des Profils enthält \mathbf{P} die Elemente, welche bei Simulation des ‚mittleren Szenario‘ minimale (ZI_{MIN}) und maximale (ZI_{MAX}) Jahresmittelwerte des Zustandsindikators ZI liefern. Die Differenz $ZI_{MAX} - ZI_{MIN}$ kann als größtmögliche Variationsbreite interpretiert werden, die verursacht ist durch Texturheterogenität.

Beispiel 3.16:

Die Beispiele 3.14 und 3.15 werden mit der Anwendung des Verfahrens auf die drei Horizonte der Lehm-Parabraunerde fortgesetzt. Zu bestimmen sind diejenigen Elemente (CANDY-Bodenprofile) in der Profilstichprobe (vergl. Beispiel 3.14), die minimale und maximale Grundwasserneubildung liefern.

Es ist mit der Auswertung der Menge $\mathbf{S}_i = \{162; 162; 162; 162; 162; 173; 151; 166; 157; 161; 164\}$ zu beginnen. Zu bestimmen sind die Zahlen Min_GWB und Max_GWB : $Min_GWB := \text{MIN} \{ \mathbf{S}_i \} = 151$ und $Max_GWB := \text{MAX} \{ \mathbf{S}_i \} = 173$. Beide sind durch Variation der Feldkapazität verursacht. Der Wert 151 wurde mit der Variante des Bezugsprofils simuliert, bei welcher die Feldkapazität des Horizonts A_p 24,5 beträgt, der Wert 173 ist mit einer Feldkapazität von 22,7 erreicht worden. Es gilt damit für den Horizont A_p : P_Min_GWB ist Feldkapazität mit $p_min = 24,5$ und P_Max_GWB ist Feldkapazität mit $p_max = 22,7$.

Die für Lehm-Parabraunerde erzeugte Profilstichprobe (siehe Beispiel 3.14) wird nun editiert: entfernt werden die Profile, deren Feldkapazität des Ap-Horizonts nicht den Wert 22,7 oder den Wert 24,5 haben. Die Anzahl der Elemente in der Profilstichprobe wird nun im zweiten Schritt erneut reduziert. Dazu ist die Menge $S_2 = \{162; 162; 162; 162, 162; 162; 168; 156; 168, 159; 162; 162\}$ auszuwerten. Es gilt: $Min_GWB:=MIN \{S_2\} = 156$ und $Max_GWB:=MAX \{S_2\} = 168$, wobei Min_GWB von der Variation der Feldkapazität des Bt-Horizonts verursacht wird (Simulation mit dem Maximalwert 28,7). Der Wert 168 von Max_GWB ist hier nicht eindeutig: er wird sowohl durch Variation des Permanentwelkepunktes erreicht (Simulation mit Maximalwert 13,5) als auch der Feldkapazität (Simulation mit Minimalwert 26) erreicht. Es gilt damit für den Bt-Horizont: P_Min_GWB ist Feldkapazität mit $p_min = 28,7$ und P_Max_GWB sind sowohl Feldkapazität (mit $p_max = 26$) als auch Permanentwelkepunkt (mit $p_max = 13,5$).

Aus der im ersten Schritt reduzierten Stichprobe werden nun die Profile entfernt, deren Permanentwelkepunkt des Bt-Horizontes nicht den Wert 13,5 hat und die Profile, deren Feldkapazität des Bt-Horizontes nicht den Wert 26 oder 28,7 aufweist.

Eine weitere Reduktion erfährt die Profilstichprobe im dritten und zugleich letzten Schritt. Für die Lehm-Parabraunerde mit drei Horizonten wird das Verfahren damit beendet. Es ist die Menge $S_3 = \{162; 162; 162; 162, 162; 162; 157, 165; 163; 160; 166; 158\}$ zu behandeln: $Min_GWB:=MIN \{S_3\} = 157$ und $Max_GWB:=MAX \{S_3\} = 166$, wobei Min_GWB durch Variation der Feldkapazität (Simulation mit Maximalwert 27,3) und Max_GWB durch die Variante des Bezugsprofils mit maximalem Versickerungsparameter erreicht wird. Für den Horizont Cc der Lehm-Parabraunerde gilt damit: P_Min_GWB ist Feldkapazität mit $p_min = 27,3$ und P_Max_GWB ist der Versickerungsparameter mit $p_max = 0,103$.

Es werden somit aus der Stichprobe die Profile entfernt, deren Permanentwelkepunkt der Bodendatensätze des Cc-Horizonts nicht den Wert 27,3 haben und die Profile, deren Versickerungsparameter des Cc-Horizonts nicht mit den Wert 0,103 belegt ist.

Die Reduktion der Profilstichprobe für die Lehm-Parabraunerde des Beispiels ist jetzt abgeschlossen: es sind nur noch die Profile enthalten, welche für das ‚mittlere Szenario‘ der Grundwasserneubildung minimale und maximale Werte dieses Zustandsindikators liefern.

Durch Simulation der Fruchtfolge des ‚mittleren Szenario‘ können aus den Rechenergebnissen die Werte für ZI_{MIN} und ZI_{MAX} erhalten werden, als Grundlage zum Quantifizieren der Wirkung der Texturheterogenität.

Um einen Mittelwert (ZI_{Mit}) des Zustandsindikators ZI zu erhalten, wird das Bezugsprofil der Sensitivitätsanalyse mit der Fruchtfolge des ‚mittleren Szenario‘ und dem Datensatz des Referenzwetters mit Jahresniederschlagssumme $NIED_{Mit}$ simuliert und ausgewertet.

Das Quantifizieren des Fehlerterms ε_{ZI} erfolgt aus den Rechenergebnissen mit einem Ansatz, der die größtmögliche Änderung des Zustandsindikators ZI in Bezug auf seinen Mittelwert als Referenzwert angibt:

$$\varepsilon_{ZI} = Max \left\{ \left| \frac{ZI_{MIN} - ZI_{MIT}}{ZI_{MIT}} \right|, \left| \frac{ZI_{MAX} - ZI_{MIT}}{ZI_{MIT}} \right| \right\} \quad (3.31)$$

mit

ZI_{MIN} Rechenergebnis des Profils für minimale Jahreswerte des Zustandsindikators ZI ,

ZI_{MIT} Rechenergebnis des Profils für mittlere Jahreswerte des Zustandsindikators ZI ,

ZI_{MAX} Rechenergebnis des Profils für maximale Jahreswerte des Zustandsindikators ZI und

ε_{ZI} größtmögliche relative Änderung des mittleren Jahreswertes vom Zustandsindikator ZI .

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Verfahren auf Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration angewendet.

In Anlehnung an Formel (3.31) ergeben sich für die Zustandsindikatoren:

$$\varepsilon_{GWB} = \text{Max} \left\{ \left| \frac{GWB_{MIN} - GWB_{MIT}}{GWB_{MIT}} \right|, \left| \frac{GWB_{MAX} - GWB_{MIT}}{GWB_{MIT}} \right| \right\}, \quad (3.32)$$

$$\varepsilon_{N_AUS} = \text{Max} \left\{ \left| \frac{N_AUS_{MIN} - N_AUS_{MIT}}{N_AUS_{MIT}} \right|, \left| \frac{N_AUS_{MAX} - N_AUS_{MIT}}{N_AUS_{MIT}} \right| \right\} \quad (3.33)$$

und

$$\varepsilon_{NO3_K} = \text{Max} \left\{ \left| \frac{NO3_K_AUS_{MIN} - NO3_K_{MIT}}{NO3_K_{MIT}} \right|, \left| \frac{NO3_K_{MAX} - NO3_K_{MIT}}{NO3_K_{MIT}} \right| \right\} \quad (3.34)$$

mit

- GWB_{MIN} Rechenergebnis des Profils für minimale jährliche Grundwasserneubildung,
 GWB_{MIT} Rechenergebnis des Profils für Mittelwert der jährlichen Grundwasserneubildung,
 GWB_{MAX} Rechenergebnis des Profils für maximale jährliche Grundwasserneubildung,
 N_AUS_{MIN} Rechenergebnis des Profils für minimale jährliche Stickstoffauswaschung,
 N_AUS_{MIT} Rechenergebnis des Profils für Mittelwert der jährlichen Stickstoffauswaschung,
 N_AUS_{MAX} Rechenergebnis des Profils für maximale jährliche Stickstoffauswaschung,
 $NO3_K_{MIN}$ Rechenergebnis des Profils für minimale jährliche Nitratkonzentration,
 $NO3_K_{MIT}$ Rechenergebnis des Profils für Mittelwert der jährlichen Nitratkonzentration,
 $NO3_K_{MAX}$ Rechenergebnis des Profils für maximale jährliche Nitratkonzentration.
 Einheiten: GWB_{MIN} , GWB_{MIT} , GWB_{MAX} in mm/a, N_AUS_{MIN} , N_AUS_{MIT} , N_AUS_{MAX} in kg/(ha·a),
 $NO3_K_{MIN}$, $NO3_K_{MIT}$, $NO3_K_{MAX}$ in mg/l.

Die Fehlerterme ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} werden als Summanden in die Metamodelle (Regressionsgleichungen mit Fehlermaßen, Formeln (3.25a), (3.26a) und (3.27a)) integriert. Die vollständigen Metamodelle für Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung erhalten damit folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \frac{GWB_1 - GWB_0}{GWB_0} &= P1_GWB \cdot \frac{AI_GWB_1 - AI_GWB_0}{AI_GWB_0} \\ &+ \dots + Pm1_GWB \cdot \frac{Am1_GWB_1 - Am1_GWB_0}{Am1_GWB_0} \pm res_{GWB} \pm \varepsilon_{GWB} \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} \frac{N_AUS_1 - N_AUS_0}{N_AUS_0} &= P1_N_AUS \cdot \frac{AI_N_AUS_1 - AI_N_AUS_0}{AI_N_AUS_0} \\ &+ \dots + Pm2_N_AUS \cdot \frac{Am2_N_AUS_1 - Am2_N_AUS_0}{Am2_N_AUS_0} \pm res_{N_AUS} \pm \varepsilon_{N_AUS} \end{aligned} \quad (3.36)$$

und

$$\begin{aligned} \frac{NO3_K_1 - NO3_K_0}{NO3_K_0} &= P1_NO3_K \cdot \frac{AI_NO3_K_1 - AI_NO3_K_0}{AI_NO3_K_0} \\ &+ \dots + Pm3_NO3_K \cdot \frac{Am3_NO3_K_1 - Am3_NO3_K_0}{Am3_NO3_K_0} \pm res_{NO3_K} \pm \epsilon_{NO3_K} \end{aligned} \quad (3.37)$$

mit den Fehlertermen ϵ_{GWB} , ϵ_{N_AUS} und ϵ_{NO3_K} zur Charakterisierung der Texturheterogenität. Die anderen Symbole besitzen dieselbe Bedeutung wie in den Formeln (3.25), (3.26), (3.27) und (3.25a), (3.26a), (3.27a).

Beispiel 3.17:

Unter Bezugnahme auf die Beispiele 3.13 bis 3.16 ist für Lehm-Parabraunerde der Fehlerterm ϵ_{GWB} der Grundwasserneubildung zu bestimmen.

Es sind hierzu drei Prozesssimulationen der Fruchtfolge des ‚mittleren Szenario‘ (162 mm Grundwasserneubildung, Kohlenstoffreproduktionsrate 6,8 dt/(ha-a), vergl. Beispiel 3.13) erforderlich. Zum einen sind die beiden CANDY-Profile für minimale und maximale Werte (erhalten aus der Profilstichprobe, siehe Beispiel 3.16) zu simulieren. Zum anderen ist das Bezugsprofil der Sensitivitätsanalyse zu simulieren, um mittlere Werte der Grundwasserneubildung zu erhalten (vergleiche Beispiel 3.14).

Als Ergebnisse der CANDY-Prozesssimulation sollen folgende Resultate erhalten worden sein: $Z_{MIT} = 162$ mm, $Z_{MAX} = 175$ mm sowie $Z_{MIN} = 150$ mm.

Für den Fehlerterm der Grundwasserneubildung ergibt sich somit:

$$\epsilon_{GWB} = \text{Max} \left\{ \left| \frac{150 - 162}{162} \right|, \left| \frac{175 - 162}{162} \right| \right\} = \text{Max} \{ | -0,074 |, | 0,080 | \} = 0,080 .$$

Für das modellierte Parabraunerde-Gebiet kann das Metamodell der Grundwasserneubildung (vergleiche Beispiel 3.11) nun in seiner vollständigen Form aufgeschrieben werden als:

$$\frac{GWB_1 - 170}{170} = 1,34 \cdot \frac{NIED_1 - 604}{604} + 0,830 \cdot \frac{NFK_1 - 277}{277} \pm 0,072 \pm 0,08 .$$

Anmerkungen:

- 1) Die Fehlerterme ϵ_{GWB} , ϵ_{N_AUS} und ϵ_{NO3_K} sind abhängig von den Variationsbreiten des Ton- und Schluffgehaltes, von der Fruchtfolge und vom Bodenprofil, welches für die Anwendung des Profilgenerators gewählt wurde (Abschnitt 3.1). Die Beschränkung der Untersuchungen auf das ‚mittlere Szenario‘ von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration bei der Modellierung der Texturheterogenität eines Gebietes ist deswegen als starke Vereinfachung anzusehen. Da jedoch im Rahmen dieser Arbeit die Behandlung von vier Gebieten vorgesehen war (siehe Kapitel 1 und Kapitel 4), wurde aus Zeitgründen so verfahren.
- 2) Zusätzliche Fehler entstehen dadurch, dass die Variation der Parameter eines Horizontes unabhängig voneinander erfolgt ist, was nicht immer der Realität entspricht. Eine Lösung wäre hier die Anwendung simultaner Parametervariationen, siehe beispielsweise HUWE (1992).

- 3) Eine weitere Fehlerquelle ist in der unabhängigen Behandlung der Horizonte zu sehen: die Effekte von Wechselwirkungen der Parameter verschiedener Horizonte werden dadurch nicht berücksichtigt. Eine Lösung des Problems wäre auch hier durch simultane Parametervariation möglich, ist aber aus Zeitgründen nicht realisiert worden.
- 4) Die rechten Seiten der Formeln (3.35), (3.36) und (3.37) können als simultane Wirkungen der jeweiligen Antriebsindikatoren, Fehlereinflüsse der Regressionsansätze (res_{GWB} , res_{N_AUS} , res_{NO3_K}) und Wirkungen der Texturheterogenität (ε_{GWB} , ε_{N_AUS} , ε_{NO3_K}) auf relative Änderungen von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration interpretiert werden. Mit den Abkürzungen

$$ANT_GWB := \left(P1_GWB \cdot \frac{AI_GWB_1 - AI_GWB_0}{AI_GWB_0} + \dots + Pm1_GWB \cdot \frac{Am1_GWB_1 - Am1_GWB_0}{Am1_GWB_0} \pm res_{GWB} \pm \varepsilon_{GWB} \right),$$

$$ANT_N_AUS := \left(P1_N_AUS \cdot \frac{AI_N_AUS_1 - AI_N_AUS_0}{AI_N_AUS_0} + \dots + Pm2_N_AUS \cdot \frac{Am2_N_AUS_1 - Am2_N_AUS_0}{Am2_N_AUS_0} \pm res_{N_AUS} \pm \varepsilon_{N_AUS} \right)$$

und

$$ANT_NO3_K := \left(P1_NO3_K \cdot \frac{AI_NO3_K_1 - AI_NO3_K_0}{AI_NO3_K_0} + \dots + Pm3_NO3_K \cdot \frac{Am3_NO3_K_1 - Am3_NO3_K_0}{Am3_NO3_K_0} \pm res_{NO3_K} \pm \varepsilon_{NO3_K} \right)$$

können die Formeln (3.35), (3.36) und (3.37) vereinfacht dargestellt werden als

$$\frac{GWB_1 - GWB_0}{GWB_0} = ANT_GWB, \quad (3.35a)$$

$$\frac{N_AUS_1 - N_AUS_0}{N_AUS_0} = ANT_N_AUS \quad (3.36a)$$

und

$$\frac{NO3_K_1 - NO3_K_0}{NO3_K_0} = ANT_NO3_K. \quad (3.37a)$$

- 5) Wie bei allen Regressionsfunktionen sind auch die Formeln (3.35), (3.36) und (3.37) nur in solchen Bereichen der Regressoren (das heisst der Antriebsindikatoren Ai_GWB ($i = 1, \dots, m1$), Aj_N_AUS ($j = 1, \dots, m2$), Ak_NO3_K ($k = 1, \dots, m3$)) anzuwenden, für die sie auch entwickelt wurden. Als Definitionsbereich können Minima und Maxima der Indikatoren in der Datenbasis des Gebietes herangezogen werden. Zur Vermeidung negativer Werte für Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung ist es darüber hinaus erforderlich, in den Formeln (3.35), (3.36) und (3.37) für GWB_I , N_AUS_I und $NO3_K_I$ die Zahl Null als kleinsten Wert festzusetzen. Weiterhin ist zu beachten, dass die Metamodelle für Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration (Formeln (3.36) und (3.37)) zunächst die Anwendung des Metamodells der Grundwasserneubildung (Formel (3.35)) erfordern. Es muss primär gesichert sein, dass bei einem Szenario überhaupt Grundwasserneubildung eintritt. Ist dies nicht der Fall, kann natürlich auch keine Stickstoffauswaschung auftreten.
- 6) Als Folge der Verwendung von ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} sowie res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K} ist es nicht möglich, für ein Szenario durch Anwendung der Metamodelle ‚exakte‘ Zahlenwerte der Zustandsindikatoren zu erhalten, es ergeben sich stets Intervalle. Nur bei Vernachlässigung der Fehlerterme und –maße (was einem Ignorieren von Texturheterogenität und Fehlern der Regressionsansätze entspricht) können ‚konkrete‘ Zahlenwerte für Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung angegeben werden. Dies sollte allerdings nur mit dem Hinweis auf die vernachlässigten Fehlereinflüsse geschehen.
- 7) Werden neben ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} sowie res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K} die Spannweiten sämtlicher Antriebsindikatoren aus allen für das Gebiet gerechneten Szenarien in den Formeln (3.35), (3.36) und (3.37) berücksichtigt, können für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration Intervalle angegeben werden, welche die Variation der Zustandsindikatoren im modellierten Gebiet beschreiben. Diese Aussagen sind bezogen auf eine Variation der Antriebsindikatoren, welche bei der Generierung der Szenarien zugrunde lag. Die ‚echte‘ Heterogenität im Gebiet muss mit Hilfe von Karten oder aus anderen Datenquellen ermittelt werden.

In den hier beschriebenen vereinfachten Verfahren sind diejenigen Größen als Antriebsindikatoren enthalten, welche im Prozessmodell die Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration bei den Simulationsrechnungen des Gebietes am stärksten beeinflussen. Wie auch bei anderen Regressionsansätzen gehen Antriebsindikatoren als getrennte Komponenten in die Berechnung der Zustandsindikatoren ein. Eine vergleichbare Anwendung von Regressionsfunktionen in den Geowissenschaften ist PIEHLER (1990) zu entnehmen.

Ein Unterschied zu anderen Ansätzen ist die Verwendung relativer Änderungen von Modellgrößen, was auch als Darstellung relativer Fehler der Indikatoren interpretiert werden kann. Der Fehler eines Zustandsindikators setzt sich demnach zusammen aus einzelnen Fehlerkomponenten (seinen Antriebsindikatoren), die jeweils entsprechend gewichtet sind (Regressionskoeffizienten). Hinzu kommt der Fehler der Regressionsfunktion (ausgedrückt durch res_{GWB} , res_{N_AUS} , res_{NO3_K}) sowie eine weitere Fehlergröße, welche den Einfluss der Texturheterogenität auf einen Zustandsindikator beschreibt (Fehlerterme ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K}).

Für die hier entwickelten Metamodelle sind zwei Anwendungsprinzipien denkbar:

- Berechnung der Zustandsindikatoren für beliebige Vektoren der Antriebsindikatoren,
- Bestimmung möglicher Vektoren der Antriebsindikatoren für vorgegebene Werte von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration.

Derartige Anwendungen sind in Kapitel 5 zu finden. In Kapitel 4 erfolgt die Darstellung von Ergebnissen der exemplarischen Entwicklung von Metamodellen für Gebiete im Bundesland Sachsen-Anhalt und im Freistaat Sachsen.

4 Exemplarische Entwicklung von Metamodellen

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die in Abschnitt 3.2 entwickelten Methoden auf folgende Gebiete der Lössregion des Elbeeinzugsgebietes im Bundesland Sachsen-Anhalt und im Freistaat Sachsen angewendet:

- Nordsächsisches Platten- und Hügelland,
- Mittelsächsisches Lösshügelland,
- Mulde-Lösshügelland,
- Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet.

Die ersten drei Gebiete zählen zum Einzugsgebiet der mittleren Mulde (Westsachsen) und sind von ihrer Größe in die Mesoskala einzuordnen. Das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet ist ein makrokalisches Agrargebiet.

Diese Arbeiten waren eingebunden in das BMBF-Projekt „Gebietswasserhaushalt und Stoffhaushalt in der Lössregion des Elbegebietes als Grundlage für die Durchsetzung einer nachhaltigen Landnutzung“. Ein Teilziel innerhalb des Projektes bestand in der Abschätzung der Stickstoffausträge unter Ackerflächen bei verschiedenen Bewirtschaftungsvarianten. Hierzu hätte das Bodenprozessmodell CANDY angewendet werden können. Dessen flächendeckender Einsatz wäre jedoch nur schwer zu realisieren gewesen, da Eingangsdatenbereitstellung und Rechenaufwand sehr aufwendig gewesen wären. Eine Lösung des Problems bestand in der Anwendung von Metamodellen.

In diesem Kapitel werden derartige Berechnungsverfahren bereitgestellt. Nach einer Beschreibung der Datengrundlagen (Abschnitt 4.1 und 4.2) werden für jedes der vier Gebiete Metamodelle zur Bestimmung von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration angegeben (Abschnitt 4.3). In Abschnitt 4.4 erfolgt eine vergleichende Betrachtung der vier behandelten Gebiete.

4.1 Datengrundlagen

Die zur Lössregion gehörenden Gebiete Mitteldeutschlands haben eine besondere Bedeutung, da sie zu den wichtigsten landwirtschaftlichen Produktionsgebieten in den neuen Bundesländern zählen (KRÖNERT 2002, OELKE 1997). Abbildung 23 zeigt die geografische Lage der vier behandelten Gebiete.

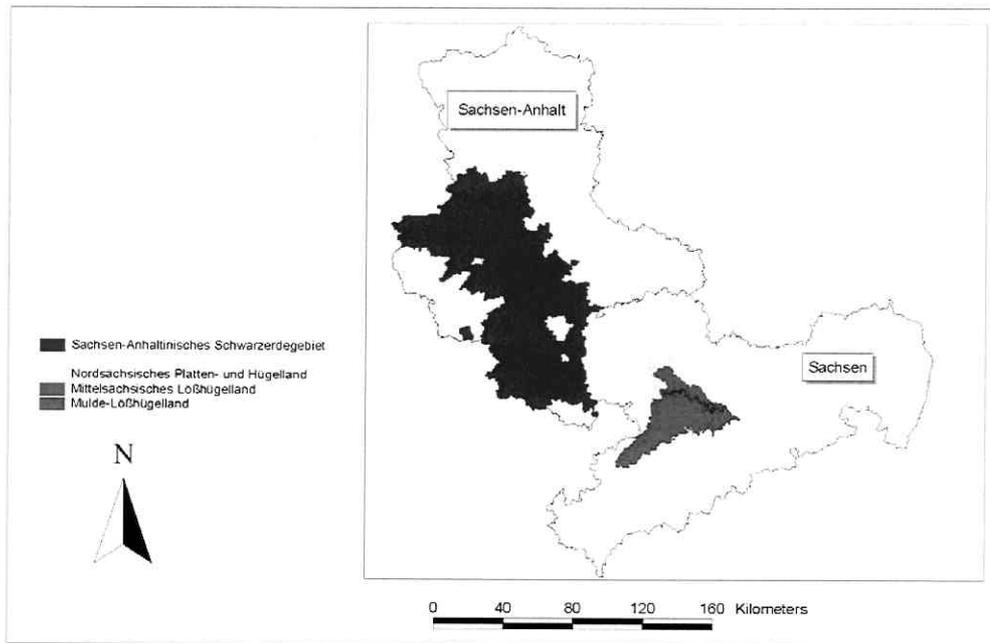


Abb. 23: Geografische Lage der behandelten Gebiete.

Quellen: Administrative Gliederung von Sachsen, Nachnutzung und Digitalisierung mit Genehm.-Nr.: DN d 635/92 2/93 des Landesvermessungsamtes Sachsen. Administrative Gliederung von Sachsen-Anhalt, Darstellung auf Grundlage der Topografischen Karte 1:100.000. Mit Genehmigung des Landesamtes für Landesvermessung und Datenverarbeitung Sachsen-Anhalt, Genehm.-Nr.: LVD/G/146/95. Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie Freiberg – Mittelmaßstäbige Landwirtschaftliche Standortkartierung MMK.

Das Nordsächsische Platten- und Hügelland, das Mittelsächsische Lösshügelland und das Mulde-Lösshügelland zählen zum Einzugsgebiet der mittleren Mulde. Die naturräumliche Gliederung ist in Anlehnung an MANNFELD & RICHTER (1995) vorgenommen worden, siehe auch KRÖNERT (2002). Das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet ist eins von sechs Agrargebieten im Bundesland Sachsen-Anhalt (OELKE 1997: 200 ff). Die Grenzen wurden in Anlehnung an HEINRICH et al. (1995) festgelegt, wobei nur die Gemeinden berücksichtigt wurden, die zur Lössregion des Elbeeinzugsgebietes gehören. Das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet hat Anteil an sieben verschiedenen naturräumlichen Einheiten (OELKE 1997: 64 ff).

Die Größe der vier behandelten Gebiete ist Tabelle 18 zu entnehmen.

Tab. 18: Größe der behandelten Gebiete.

Gebiet	Größe [km ²]
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	572
Mittelsächsisches Lösshügelland	293
Mulde-Lösshügelland	1218
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	7900

4.1.1 Boden

Als Grundlage der Wahl repräsentativer Profile (vergleiche Abschnitt 3.2.2) in den zu behandelnden Gebieten dienten Blätter der Mittelmaßstäbigen Landwirtschaftlichen Standortkartierung (MMK), welche in SCHMIDT & DIEMANN (1991) detailliert erläutert sind.

Um den Arbeitsaufwand zu begrenzen, wurden für jedes der vier Gebiete sechs repräsentative Profile gewählt (Tabelle 19), welche die in Abschnitt 3.2.2 genannten Bedingungen erfüllen: sie besitzen mehr als 50 Prozent Anteil an der Ackerfläche des Gebietes und repräsentieren verschiedene Abstufungen der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, einschließlich des kleinsten und größten Wertes.

Tab. 19: Repräsentative Bodenprofile der behandelten Gebiete.
Tiefe: Profiltiefe, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität.

Gebiet	Bezeichnung nach MMK	Tiefe (dm)	NFK (mm)
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	sehr flacher Gley aus Sand	6	57
	sehr tiefe Parabraunerde aus Salm über Geröll	15	111
	Parabraunerde aus Decksandlöss	20	180
	Parabraunerde-Staugley aus Sandlöss über Lehm	20	246
	Braunerde aus Decksandlöss	20	279
	Braunerde aus Sandlöss über Lehm	20	293
Mittelsächsisches Lösshügelland	mittlere Vega aus Auenlehm	10	94
	Braunerde aus Decksalm	20	180
	tiefer Parabraunerde-Staugley aus Löss	12	196
	Pseudogley aus Löss	20	282
	Staugley-Parabraunerde aus Löss	20	354
	Parabraunerde aus Löss	20	401
Mulde-Lösshügelland	sehr flache Gley-Vega aus Auenlehm	6	87
	mittlere Vega aus Auenlehm	10	94
	sehr tiefer Braunerde-Staugley aus Berglöss über tiefem Geröll	15	175
	Staugley-Parabraunerde aus Decklöss	20	255
	Staugley-Parabraunerde aus Löss	20	354
	Parabraunerde aus Löss	20	401
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	Löss über Bergton - Staugley	10	181
	Decklöss-Schwarzerde	20	241
	Löss-Rendzina	20	293
	Lössstieglehm-Schwarzerde	20	340
	Löss-Schwarzerde	20	380
	Löss-Braunschwarzerde	20	412

4.1.2 Klima

Zur Beschreibung des Klimas wurden für die Gebiete in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe Landschaftsökologie der Sektion Angewandte Landschaftsökologie des Umweltforschungszentrums Leipzig als repräsentative Klimastationen (vergl. Abschnitt 3.2.2) Magdeburg, Leipzig-West und Chemnitz gewählt.

Wesentlich für die Anwendung des CANDY-Wettergenerators auf eine Klimastation ist die Verfügbarkeit mindestens 15 Jahre lückenloser Aufzeichnungen der mittleren Tageswerte der Klimaelemente Lufttemperatur, Niederschlagssumme und Globalstrahlungssumme bzw. Sonnenscheindauer (Abschnitt 2.4). Mit Leipzig-West bzw. Magdeburg existieren solche Klimastationen für das Nordsächsische Platten- und Hügelland bzw. das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet. Im Mittelsächsischen Lösshügelland und Mulde-Lösshügelland gibt es dagegen Stationen mit derart kontinuierlichen Messungen bis in die Gegenwart nicht (KRÖNERT 2002). Aus diesem Grund wurden für beide Gebiete repräsentative Klimastationen in der Nachbarschaft mit annähernd gleicher Niederschlagsverteilung im Jahresverlauf gesucht. Für das Mittelsächsische Lösshügelland ist mit gleichen Wetterlagen zu rechnen, wie sie auch im Nordsächsischen Platten- und Hügelland auftreten, aber mit etwa zehn Prozent höheren Jahresmittelwerten der Niederschlagssumme (KRÖNERT 2002). Deswegen wurde hierfür die Station Leipzig-West gewählt und mit einer 60 mm höheren Jahresniederschlagssumme simuliert.

Das Erzgebirgsbecken mit der Station Chemnitz ist im Wetterablauf dem Mulde-Lösshügelland bei annähernd gleichen Niederschlagsmittelwerten sehr ähnlich, für dieses Gebiet wurde daher Chemnitz als repräsentative Station gewählt (KRÖNERT 2002).

Aus den umfangreichen Datensätzen des Deutschen Wetterdienstes konnte mit dem CANDY-Wettergenerator für jede der Stationen Magdeburg, Leipzig-West und Chemnitz ein Referenzwetterablauf erzeugt werden. Zur Beschreibung der räumlichen Heterogenität wurden für jeden Referenzwetterablauf zwei weitere Datensätze generiert, bei denen die Tagesniederschläge um zehn Prozent vermindert bzw. erhöht sind (Abschnitt 3.2.2). Die Tagesmittel der Lufttemperatur und die Tagessummen der Globalstrahlung wurden vom jeweiligen Referenzwetterablauf übernommen. Tabelle 20 zeigt für die Referenzwetterabläufe Eigenschaften der Jahreswerte der von CANDY benötigten Klimaelemente.

Tab. 20: Repräsentative Klimastationen und Eigenschaften der Klimaelemente der Referenzwetterabläufe.

NIED: Jahresniederschlagssumme, NIED+: Jahresniederschlagssumme des Datensatzes mit erhöhten Niederschlägen, NIED-: Jahresniederschlagssumme des Datensatzes mit verringerten Niederschlägen, LT: Mittelwert Jahreslufttemperatur, GLOB: Jahressumme der Globalstrahlung. Sachsen-Anhalt.: Sachsen-Anhaltinisch.

Gebiet	Repräsentative Klimastation	NIED	NIED+	NIED-	LT	GLOB
		[mm/a]	[mm/a]	[mm/a]	[°C]	[MJ/m ²]
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	Leipzig-West	598	658	538	9,5	3479
Mittelsächsisches Lösshügelland	Leipzig-West (*)	652	717	587	9,5	3479
Mulde-Lösshügelland	Chemnitz	707	778	636	8,0	3495
Sachsen-Anhalt. Schwarzerdegebiet	Magdeburg	486	535	437	9,0	3467

(*) für das Mittelsächsische Lösshügelland wurde als repräsentative Klimastation Leipzig-West gewählt und mit zehn Prozent höheren Tagesniederschlägen simuliert.

4.1.3 Landnutzung

Zur Abbildung der Vielfalt realer Bewirtschaftungsvarianten in den Gebieten wurden in Zusammenarbeit mit der landwirtschaftlichen Fakultät der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg mit dem Betriebsbilanzierungsmodell REPRO (HÜLSBERGEN 1997, DUBSKY et al. 1997) sogenannte virtuelle Agrarbetriebe erstellt. Diese landwirtschaftlichen Modellbetriebe sind stofflich und energetisch ausgeglichene Systeme und repräsentieren die Bewirtschaftung verschiedener Intensitätsklassen (KRÖNERT 2002).

Ansatz zur Erstellung der Modellbetriebe war eine Clusteranalyse von Daten der aktuellen landwirtschaftlichen Nutzung (Zeitraum 1995 bis 1999) der Gemeinden Sachsens und Sachsen-Anhalts, die zur Lössregion des Elbeeinzugsgebietes gehören (KRÖNERT 2002). Für jedes Cluster ist zunächst ein Modellbetrieb abgeleitet worden, welcher die Gesamtstruktur des jeweiligen Clusters annähernd repräsentiert (Cluster-Realbetrieb). Ausgehend von diesem Clustervertreter sind weitere Betriebsvarianten entwickelt worden, sowohl Betriebe des konventionellen als auch des ökologischen Landbaus, so dass mit der Gesamtheit der Modellbetriebe die Abbildung der Diversität möglicher Agrarstrukturen in den Gebieten erfolgen konnte. Ein Modellbetrieb besteht jeweils aus einer oder zwei siebenjährigen Fruchtfolgen. Da das Modell CANDY nicht auf Betriebsebene, sondern schlagbezogen arbeitet, wird jede Fruchtfolge als separate Landnutzungsvariante behandelt.

Für die vier zu behandelnden Gebiete ist eine Einteilung in insgesamt fünf Cluster vorgenommen worden (bezeichnet mit Cluster 1, 2, 3, 4 und 5). Für die Simulationsrechnungen standen folgende Anzahlen von Modellbetrieben zur Verfügung:

- Cluster 1: 8 Modellbetriebe mit insgesamt 15 Fruchtfolgen,
- Cluster 2: 13 Modellbetriebe mit insgesamt 21 Fruchtfolgen,
- Cluster 3: 1 Modellbetrieb mit 2 Fruchtfolgen,
- Cluster 4: 8 Modellbetriebe mit insgesamt 12 Fruchtfolgen und
- Cluster 5: 8 Modellbetriebe mit insgesamt 13 Fruchtfolgen.

Da die Gebietsgrenzen und die Clusterabgrenzungen nicht identisch sind, werden jedem Gebiet die Betriebe verschiedener Cluster zugeordnet. Es ergeben sich hierdurch unterschiedliche Anzahlen von Landnutzungsvarianten in Form der CANDY-Fruchtfolgen (Tabelle 21).

Tab. 21: Anzahl der Fruchtfolgen und Modellbetriebe in den Gebieten. Sachsen-Anhalt.: Sachsen-Anhaltinisch.

	Gebiet			
	Nordsächsisches Platten- und Hügelland	Mittelsächsisches Lösshügelland	Mulde-Lösshügelland	Sachsen-Anhalt. Schwarzerdegebiet
Anzahl Betriebe	29	16	28	18
Anzahl Fruchtfolgen	48	28	48	31

4.2 Generierung der Datenbasen, Simulationsauswertung und Quantifizieren der Texturheterogenität

Mit den im letzten Abschnitt beschriebenen Datengrundlagen konnte für jedes Gebiet eine begrenzte Menge von CANDY-Szenarien erzeugt werden: als Kombination sämtlicher Fruchtfolgen mit den drei Datensätzen des Referenzwetters und den sechs repräsentativen Profilen. Im Einzelnen sind folgende Anzahlen von Simulationsobjekten erzeugt und gerechnet worden: Nordsächsisches Platten- und Hügelland: 864, Mittelsächsisches Lösshügelland: 504, Mulde-Lösshügelland: 864, Sachsen-Anhalt. Schwarzerdegebiet: 558.

Simulation und Auswertung:

Zum Erreichen des Gleichgewichtszustandes vom Mineralstickstoff wurde jede der siebenjährigen Fruchtfolgen jeweils 50 - mal zyklisch gerechnet, was einem Simulationszeitraum von insgesamt 350 Jahren entspricht. Als Simulationsergebnisse wurden die mittleren Jahreswerte von Modellgrößen der letzten 70 Rechenjahre (d. h. der letzten 10 Zyklen) verwendet. Für jedes einzelne Gebiet wird die Menge der Szenarien und Simulationsergebnisse zu einer Datenbasis (Abschnitte 3.2.2 und 3.2.3) zusammengefasst, aus welcher die Metamodelle anschließend hergeleitet werden können (Abschnitt 4.3).

Zum Quantifizieren der Fehlerterme ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} als Wirkung der Texturheterogenität auf Ebene des Prozessmodells wurde in jedem einzelnen Gebiet wie folgt vorgegangen (vergleiche Abschnitt 3.2.4.2). In der Datenbasis sind zunächst die Szenarien spezifiziert worden, die den Datensatz des Referenzwetters repräsentieren, der etwa den Mittelwert der Jahresniederschlagssumme ($NIED_{Mit}$) besitzt und dasjenige repräsentative Profil enthält, welches etwa dem Mittelwert der nutzbaren Feldkapazität in der Profilsomme (NFK_{Mit}) entspricht.

Aus dieser Menge der Szenarien mit ‚mittleren Eigenschaften‘ sind dann die beiden Fruchtfolgen gewählt worden, bei denen die Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung bzw. Nitratkonzentration annähernd den Mittelwert der gerechneten Szenarien treffen (Tabelle 22, vergleiche auch die Tabellen A 8.41, A 8.48, A 8.55 und A 8.62).

Tab. 22: Kennwerte der Szenarien mit ‚mittleren Eigenschaften‘ für Grundwasserneubildung (Grundwasserneubldg.), Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration in den vier Gebieten: GWB_M : Grundwasserneubildung, $CREP_{GWB}$: Kohlenstoffproduktionsrate, N_AUS_M : Stickstoffauswaschung, $CREP_{N_AUS}$: Kohlenstoffproduktionsrate, $NO3_K_M$: Nitratkonzentration, $CREP_{NO3_K}$: Kohlenstoffproduktionsrate. Nords. Pl.- u. Hügell.: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittels. Lösshügell.: Mittelsächsisches Lösshügelland, S.-A. Schwarzerdeg.: Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet.

Gebiet	Grundwasserneubldg.		Stickstoffauswaschung		Nitratkonzentration	
	GWB_M [mm/a]	$CREP_{GWB}$ [dt/ha*a]	N_AUS_M [kg/ha*a]	$CREP_{N_AUS}$ [dt/ha*a]	$NO3_K_M$ [mg/l]	$CREP_{NO3_K}$ [dt/ha*a]
Nords. Pl.- u. Hügell.	143,2	14,7	40,4	15,3	138,0	14,7
Mittels. Lösshügell.	183,0	12,8	31,7	6,0	92,0	11,1
Mulde-Lösshügelland	216,1	14,7	30,7	15,3	74,0	6,7
S.-A. Schwarzerdeg.	34,6	8,8	28,0	19,2	837,0	17,0

Die drei Fruchtfolgen bilden in jedem Gebiet die Grundlage für die Simulationen zum Quantifizieren von ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und $\varepsilon_{NO_3_K}$. Die zur Anwendung des Profilgenerators erforderlichen Kohlenstoffreproduktionsraten sind anhand dieser Fruchtfolgen festgelegt worden (Tabelle 22). Für Jahreslufttemperatur und Jahresniederschlagssumme ($NIED_{Mit}$) wurden die Werte des Datensatzes vom Referenzwetterablauf verwendet (Spalten NIED und LT, Tabelle 20). Der Profilgenerator wurde in jedem Gebiet auf dasjenige repräsentative Profil angewendet, welches etwa den Mittelwert der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK_{Mit}) besitzt (Tabelle 19). Für die Variationsbreiten von Ton- und Schluffgehalt wurde angenommen, dass diese in jedem Horizont der repräsentativen Profile zwei Masseprozent betragen (Abschnitt 2.5).

Die Mittelwerte für Ton- und Schluffgehalt sind den Blätter der Mittelmaßstäbigen Landwirtschaftlichen Standortkartierung entnommen. Die Beschreibung der Texturheterogenität für die Horizonte der Profile erfolgte jeweils deterministisch mit dem Texturgitter $[T_M-2, T_M+2] \times [U_M-2, U_M+2]$ (Abschnitt 3.1.2.1), wobei T_M bzw. U_M den Mittelwert von Ton- bzw. Schluffgehalt eines Horizontes bezeichnet.

Tabelle 23 gibt eine Übersicht über die Bedingungen, unter denen der Profilgenerator in jedem Gebiet angewendet wurde.

Tab. 23: Bedingungen, unter denen der Profilgenerator in den vier Gebieten angewendet wurde.

Eingangsdaten: Jahresniederschlagssumme (NIED), Jahreslufttemperatur (LT), Bodenformen und Horizonte. Die Bezeichnungen sind nach MMK gewählt. Für jeden Horizont: Gitter zur deterministischen Beschreibung der Texturheterogenität (Spalte ‚Texturgitter‘), Verfahren zur Bestimmung des inerten Kohlenstoffanteils (Spalte ‚CINERT‘) und der Parameter Feldkapazität und Permanentwelkepunkt (Spalte ‚FKAP/PWP‘). Die Bezeichnung der Formeln ist auf Abschnitt 3.1.2 bezogen. S.-Anhalt. Sachsen-Anhaltinisch.

Gebiet	NIED mm/a	LT °C	Bodenform	Horizont	Texturgitter	CINERT	FKAP/ PWP
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	598	9,5	Parabraunerde aus Decksandlöss	Ap	[13; 17]x[46; 50]	(3.5)	(3.23)
				Al	[13; 17]x[47; 51]	(3.5)	(3.24)
				Bt	[15; 19]x[42; 46]		(3.23)
				C	[0; 4]x[3; 7]		(3.20) - (3.22)
Mittel-Sächsisches Lösshügelland	652	9,5	tiefer Parabraunerde-Staugley aus Löss	Ap	[15; 19]x[73; 77]	(3.6)	(3.20) - (3.22)
				AlSw	[16; 20]x[69; 73]	(3.6)	(3.24)
				BtSd	[20; 24]x[67; 71]		(3.24)
				Sd	[17; 21]x[69; 73]		(3.24)
Mulde-Lösshügelland	707	8,0	Staugley-Parabraunerde aus Decklöss	Ap	[16; 20]x[72; 76]	(3.6)	(3.23)
				SwAl	[16; 20]x[71; 75]	(3.6)	(3.24)
				SdBt	[20; 24]x[64; 68]		(3.24)
				lIC	[6; 10]x[31; 35]		(3.23)
S.-Anhalt. Schwarzerdegebiet	486	9,0	Löss-Rendzina	Ap	[13; 17]x[68; 72]	(3.5)	(3.23)
				Ah	[13; 17]x[64; 68]	(3.5)	(3.24)
				C	[13; 17]x[67; 71]		(3.24)

Das Quantifizieren eines Fehlerterms ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} erfordert je eine Anwendung des Profilgenerators. Das Simulationstool wurde im Rahmen dieser Arbeit zur Behandlung der vier Gebiete insgesamt 12 - mal eingesetzt. Tabelle 24 zeigt die Ergebnisse.

Tab. 24: Zusammenfassung der Werte für ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} als Wirkung der Texturheterogenität auf Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration in den vier Gebieten.

Gebiet	ε_{GWB}	ε_{NAUS}	ε_{NO3_K}
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	0,06	0,04	0,03
Mittelsächsisches Lösshügelland	0,01	0,06	0,03
Mulde-Lösshügelland	0,01	0,02	0,01
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	0,12	0,07	0,08

4.3 Parametrisierung der Metamodelle

Als Resultat der Untersuchungen ist zunächst festzustellen, dass die Grundwasserneubildung und die Stickstoffauswaschung in jedem der vier behandelten Gebiete von jeweils denselben Größen des Prozessmodells am stärksten beeinflusst werden. Für die Nitratkonzentration trifft dies nur auf drei der Gebiete zu. In diesen Abschnitt sind die wichtigsten Ergebnisse zusammengestellt. Als Resultat der in Abschnitt 3.2.4 beschriebenen Methoden wurden folgende Antriebsindikatoren ermittelt:

- für Grundwasserneubildung (GWB):
 - mittlere Jahresniederschlagssumme (NIED),
 - Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK),
 - mittlerer jährlicher Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption (BG),
- für Stickstoffauswaschung (N_AUS):
 - mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo (N_SALDO),
 - wirksame Mineralisierungszeit (WMZ),
 - jährliche Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP),
- für Nitratkonzentration (NO3_K) im Nordsächsischen Platten- und Hügelland, im Mittelsächsischen Lösshügelland und im Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebiet:
 - mittlere Jahresniederschlagssumme (NIED),
 - Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK),
 - mittlerer jährlicher Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption (BG),
 - mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo (N_SALDO).

Im Mulde-Lösshügelland hat sich die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität für die Nitratkonzentration als nicht signifikant erwiesen (Anhang A 8.4.2.3), so dass hier lediglich Jahresniederschlagssumme, Bedeckungsgrad und Stickstoffsaldo die Antriebsindikatoren sind.

Die allgemeine Regressionsfunktion des Metamodells der Grundwasserneubildung (Formel (3.25)) kann somit in jedem Gebiet dargestellt werden als:

$$\begin{aligned} \frac{GWB_1 - GWB_0}{GWB_0} = & P1_GWB \cdot \frac{NIED_1 - NIED_0}{NIED_0} + P2_GWB \cdot \frac{NFK_1 - NFK_0}{NFK_0} \\ & + P3_GWB \cdot \frac{BG_1 - BG_0}{BG_0} \end{aligned} \quad (3.40)$$

mit

GWB_0 , $NIED_0$, NFK_0 und BG_0 als Kennzahlen des Referenzszenarios,
 GWB_1 , $NIED_1$, NFK_1 und BG_1 als Kennzahlen eines beliebigen Szenarios
sowie den Regressionskoeffizienten $P1_GWB$, $P2_GWB$ und $P3_GWB$.

Entsprechend hat die allgemeine Regressionsfunktion des Metamodells der Stickstoffauswaschung (Formel (3.26)) in jedem Gebiet folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \frac{N_AUS_1 - N_AUS_0}{N_AUS_0} = & P1_N_AUS \cdot \frac{N_SALDO_1 - N_SALDO_0}{N_SALDO_0} \\ & + P2_N_AUS \cdot \frac{WMZ_1 - WMZ_0}{WMZ_0} + P3_N_AUS \cdot \frac{CREP_1 - CREP_0}{CREP_0} \end{aligned} \quad (3.41)$$

mit

N_AUS_0 , N_SALDO_0 , WMZ_0 und $CREP_0$ als Kennzahlen des Referenzszenarios,
 N_AUS_1 , N_SALDO_1 , WMZ_1 und $CREP_1$ als Kennzahlen eines beliebigen Szenarios
sowie den Regressionskoeffizienten $P1_N_AUS$, $P2_N_AUS$ und $P3_N_AUS$.

Eine allgemeine Regressionsfunktion für das Metamodell der Nitratkonzentration (Formel (3.27)) kann angegeben werden als

$$\begin{aligned} \frac{NO3_K_1 - NO3_K_0}{NO3_K_0} = & P1_NO3_K \cdot \frac{NIED_1 - NIED_0}{NIED_0} + P2_NO3_K \cdot \frac{NFK_1 - NFK_0}{NFK_0} \\ & + P3_NO3_K \cdot \frac{BG_1 - BG_0}{BG_0} + P4_NO3_K \cdot \frac{N_SALDO_1 - N_SALDO_0}{N_SALDO_0} \end{aligned} \quad (3.42)$$

mit

$NO3_K_0$, $NIED_0$, NFK_0 , BG_0 und N_SALDO_0 als Kennzahlen des Referenzszenarios,
 $NO3_K_1$, $NIED_1$, NFK_1 , BG_1 und N_SALDO_1 als Kennzahlen eines beliebigen Szenarios
sowie den Regressionskoeffizienten $P1_NO3_K$, $P2_NO3_K$, $P3_NO3_K$ und $P4_NO3_K$.
Der Regressionskoeffizient $P3_NO3_K$ hat für das Mulde-Lösshügelland den Wert Null.

Mit Kenntnis der Antriebsindikatoren können Referenzszenarien (Abschnitt 3.2.4.1) angegeben werden als (GWB₀; NIED₀, NFK₀, BG₀), (N_AUS₀; N_SALDO₀, WMZ₀, CREP₀) und (NO₃_K₀; NIED₀, NFK₀, BG₀, N_SALDO₀), das Quantifizieren der Komponenten ist anhand der Indikatorenmittelwerte (Tabellen A 8.41, A 8.48, A 8.55 und A 8.62) möglich. Die entsprechenden Zahlen für die vier Gebiete sind den Tabellen 25, 26 und 27 zu entnehmen.

Tab. 25: Kennwerte der Referenzszenarien für Grundwasserneubildung.

GWB₀: Mittelwert Grundwasserneubildung, NIED₀: Mittelwert Jahresniederschlagssumme, NFK₀: Mittelwert Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, BG₀: Mittelwert des jährlichen Bedeckungsgrades bezüglich Interzeption.

Gebiet	GWB ₀ [mm/a]	NIED ₀ [mm/a]	NFK ₀ [mm]	BG ₀ [d/a]
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	143	598	194	132
Mittelsächsisches Lösshügelland	183	652	251	128
Mulde-Lösshügelland	216	707	228	121
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	37	486	281	115

Tab. 26: Kennwerte der Referenzszenarien für Stickstoffauswaschung.

N_AUS₀: Mittelwert Stickstoffauswaschung, N_SALDO₀: Mittelwert Stickstoffsaldo, WMZ₀: Mittelwert wirksame Mineralisierungszeit, CREP₀: Mittelwert Kohlenstoffproduktionsrate.

Gebiet	N_AUS ₀ [kg/ha*a]	N_SALDO ₀ [kg/ha*a]	WMZ ₀ [d/a]	CREP ₀ [dt/ha*a]
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	41	68	27	15
Mittelsächsisches Lösshügelland	36	64	26	14
Mulde-Lösshügelland	35	68	21	15
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	28	62	31	14

Tab. 27: Kennwerte der Referenzszenarien für Nitratkonzentration.

NO₃_K₀: Mittelwert Nitratkonzentration, NIED₀: Mittelwert Jahresniederschlagssumme, NFK₀: Mittelwert Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, BG₀: Mittelwert des jährlichen Bedeckungsgrades bezüglich Interzeption, N_SALDO₀: Mittelwert Stickstoffsaldo, Nordsächsisches Pl.- u. Hügell.: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Sachsen-Anhalt.: Sachsen-Anhaltinisch.

Gebiet	NO ₃ _K ₀ [mg/l]	NIED ₀ [mm/a]	NFK ₀ [mm]	BG ₀ [d/a]	N_SALDO ₀ [kg/ha*a]
Nordsächsisches Pl.- u. Hügelland	135	598	194	132	68
Mittelsächsisches Lösshügelland	94	652	251	128	64
Mulde-Lösshügelland	74	705	228	121	68
Sachsen-Anhalt. Schwarzerdegebiet	792	486	281	115	62

Als Ergebnis der multiplen Regressionsanalysen (siehe Abschnitt 3.2.4.1) sind für die vier behandelten Gebiete die Regressionskoeffizienten $P1_{GWB}$, $P2_{GWB}$, $P3_{GWB}$ (Tabelle 28), $P1_{N_AUS}$, $P2_{N_AUS}$, $P3_{N_AUS}$ (Tabelle 29) sowie $P1_{NO3_K}$, $P2_{NO3_K}$, $P3_{NO3_K}$ und $P4_{NO3_K}$ (Tabelle 30) ermittelt worden.

Tab. 28: Zusammenfassung der Regressionskoeffizienten der Metamodelle für Grundwasserneubildung der vier Gebiete. $P1_GWB$: Regressionskoeffizient für relative Änderung der Jahresniederschlagssumme, $P2_GWB$: Regressionskoeffizient für relative Änderung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, $P3_GWB$: Regressionskoeffizient für relative Änderung des Bedeckungsgrades.

Gebiet	$P1_GWB$	$P2_GWB$	$P3_GWB$
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	2,95	-0,50	-0,43
Mittelsächsisches Lösshügelland	2,84	-0,32	-0,42
Mulde-Lösshügelland	3,21	-0,15	-0,35
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	6,23	-1,15	-1,17

Tab. 29: Zusammenfassung der Regressionskoeffizienten der Metamodelle für Stickstoffauswaschung der vier Gebiete. $P1_N_AUS$: Regressionskoeffizient für relative Änderung des mittleren jährlichen Stickstoffsaldo, $P2_N_AUS$: Regressionskoeffizient für relative Änderung der wirksamen Mineralisierungszeit, $P3_N_AUS$: Regressionskoeffizient für relative Änderung der jährlichen Kohlenstoffreproduktionsrate.

Gebiet	$P1_N_AUS$	$P2_N_AUS$	$P3_N_AUS$
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	1,44	0,33	0,04
Mittelsächsisches Lösshügelland	1,55	0,26	0,01
Mulde-Lösshügelland	1,67	0,22	0,01
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	1,61	0,18	-0,08

Tab. 30: Zusammenfassung der Regressionskoeffizienten der Metamodelle für Nitratkonzentration der vier Gebiete. $P1_NO3_K$: Regressionskoeffizient für relative Änderung der Jahresniederschlagssumme, $P2_NO3_K$: Regressionskoeffizient für relative Änderung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, $P3_NO3_K$: Regressionskoeffizient für relative Änderung des Bedeckungsgrades, $P4_NO3_K$: Regressionskoeffizient für relative Änderung des mittleren jährlichen Stickstoffsaldo.

Gebiet	$P1_NO3_K$	$P2_NO3_K$	$P3_NO3_K$	$P4_NO3_K$
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	-3,34	0,36	0,48	1,58
Mittelsächsisches Lösshügelland	-3,29	0,19	0,68	1,79
Mulde-Lösshügelland (*)	-3,49	0,00	0,37	1,73
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	-8,95	1,94	2,05	1,80

(*) beim Metamodell der Nitratkonzentration des Mulde-Lösshügellandes ist die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität kein Antriebsindikator. $P2_NO3_K$ wurde daher mit 0,00 belegt.

Eine Einschätzung der 12 parametrisierten Regressionsfunktionen kann anhand der multiplen Bestimmtheitsmaße und empirischen Reststreuungen vorgenommen werden. Die ermittelten Zahlenwerte sind in Tabelle 31 enthalten.

Tab. 31: Bestimmtheitsmaße (B_{GWB} , B_{N_AUS} und B_{NO3_K}) sowie empirische Reststreuungen (s^2_{GWB} , $s^2_{N_AUS}$ und $s^2_{NO3_K}$) der Regressionsfunktionen für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration der vier Gebiete. Nords. Pl.- u. Hügell.: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittels. Lösshügell.: Mittelsächsisches Lösshügelland, S.-A. Schwarzerdeg.: Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet.

Gebiet	Grundwasserneubldg.		Stickstoffauswaschung		Nitratkonzentration	
	B_{GWB}	s^2_{GWB}	B_{N_AUS}	$s^2_{N_AUS}$	B_{NO3_K}	$s^2_{NO3_K}$
Nords. Pl.- u. Hügell.	0,95	0,0796	0,99	0,0583	0,84	0,3000
Mittels. Lösshügell.	0,67	0,1856	0,98	0,0881	0,86	0,3155
Mulde-Lösshügelland	0,94	0,0611	0,99	0,0711	0,91	0,2203
S.-A. Schwarzerdeg.	0,87	0,2476	0,94	0,2093	0,36	1,7677

Zur Charakterisierung des Fehlers ist für jede der 12 Regressionsfunktionen aus den Residuen eine mittlere absolute Abweichung berechnet worden (res_{GWB} nach Formel (3.28), res_{N_AUS} nach Formel (3.29) und res_{NO3_K} nach Formel (3.30)), deren Zahlenwerte Tabelle 32 zu entnehmen sind.

Tab. 32: mittlere absolute Residuen der Regressionsfunktionen für Grundwasserneubildung (GWB), Stickstoffauswaschung (N_AUS) und Nitratkonzentration (NO3_K) der vier Gebiete.

Gebiet	GWB res_{GWB}	N_AUS res_{N_AUS}	NO3_K res_{NO3_K}
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	0,0675	0,0455	0,2014
Mittelsächsisches Lösshügelland	0,1206	0,0674	0,2150
Mulde-Lösshügelland	0,0490	0,0573	0,1565
Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	0,1919	0,1364	0,9250

Zur Bewertung der Güte wurden für die 12 Regressionsfunktionen die Verteilungen der normierten Residuen als Histogramme dargestellt (Abbildungen A 8.1, A 8.2, A 8.3, A 8.4, A 8.5, A 8.6, A 8.7, A 8.8, A 8.9, A 8.10, A 8.11 und A 8.12 im Anhang A 8.4). Bis auf die Regressionsfunktionen der Nitratkonzentration des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes sowie des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes ist aus den grafischen Darstellungen eine annähernde Normalverteilung zu entnehmen.

Aus den Regressionsfunktionen (Formeln (3.40), (3.41) und (3.42)) können durch Hinzunahme der Fehlerterme (ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} Tabelle 24) und Fehlermaße (res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K} Tabelle 32) die Metamodelle der drei Zustandsindikatoren dargestellt werden, vergleiche auch Formeln (3.35a), (3.36a) und (3.37a):

$$\begin{aligned} \frac{GWB_1 - GWB_0}{GWB_0} &= P1_GWB \cdot \frac{NIED_1 - NIED_0}{NIED_0} + P2_GWB \cdot \frac{NFK_1 - NFK_0}{NFK_0} \\ &+ P3_GWB \cdot \frac{BG_1 - BG_0}{BG_0} \pm res_{GWB} \pm \varepsilon_{GWB} \end{aligned} \quad , \quad (3.40a)$$

$$\Rightarrow: ANT_GWB$$

$$\begin{aligned} \frac{N_AUS_1 - N_AUS_0}{N_AUS_0} &= P1_N_AUS \cdot \frac{N_SALDO_1 - N_SALDO_0}{N_SALDO_0} \\ &+ P2_N_AUS \cdot \frac{WMZ_1 - WMZ_0}{WMZ_0} + P3_N_AUS \cdot \frac{CREP_1 - CREP_0}{CREP_0} \end{aligned} \quad (3.41a)$$

$$\pm res_{N_AUS} \pm \varepsilon_{N_AUS}$$

$$=: ANT_N_AUS$$

und

$$\begin{aligned} \frac{NO3_K_1 - NO3_K_0}{NO3_K_0} &= \\ &P1_NO3_K \cdot \frac{NIED_1 - NIED_0}{NIED_0} + P2_NO3_K \cdot \frac{NFK_1 - NFK_0}{NFK_0} \end{aligned} \quad (3.42a)$$

$$+ P3_NO3_K \cdot \frac{BG_1 - BG_0}{BG_0} + P4_NO3_K \cdot \frac{N_SALDO_1 - N_SALDO_0}{N_SALDO_0}$$

$$\pm res_{NO3_K} \pm \varepsilon_{NO3_K} =: ANT_NO3_K$$

mit

$GWB_0, NIED_0, NFK_0, BG_0$ und $N_AUS_0, N_SALDO_0, WMZ_0, CREP_0$ sowie $NO3_K_0, NIED_0, NFK_0, BG_0, N_SALDO_0$ als Kennzahlen der Referenzszenarien (Tabellen 25, 26 und 27), $GWB_1, NIED_1, NFK_1, BG_1$ und $N_AUS_1, N_SALDO_1, WMZ_1, CREP_1$ sowie $NO3_K_1, NIED_1, NFK_1, BG_1, N_SALDO_1$ als Kennzahlen eines beliebigen Szenarios und den Regressionskoeffizienten $P1_GWB, P2_GWB, P3_GWB$ und $P1_N_AUS, P2_N_AUS, P3_N_AUS$ sowie $P1_NO3_K, P2_NO3_K, P3_NO3_K$ und $P4_NO3_K$ (Tabellen 28, 29 und 30).

Die Anwendungsbereiche der Metamodelle in den einzelnen Gebieten ist den Tabellen 33, 34 und 35 zu entnehmen. Grundlage sind die Minima und Maxima der Antriebsindikatoren in den Datenbasen (vergleiche Tabellen A 8.41, A 8.48, A 8.55 und A 8.62).

Tab. 33: Anwendungsbereiche der Metamodelle für Grundwasserneubildung.

NIED: Jahresniederschlagssumme, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, BG: Bedeckungsgrad. Nords. Pl.- u. Hügelland: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittels. Lösshügelland: Mittelsächsisches Lösshügelland, S.-A. Schwarzerdegebiet: Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet.

Gebiet	NIED [mm/a]		NFK [mm]		BG [d/a]	
	von	bis	von	bis	von	bis
Nords. Pl.- und Hügelland	538	658	57	293	90	180
Mittels. Lösshügelland	587	717	94	401	90	180
Mulde-Lösshügelland	636	778	87	401	81	173
S.-A. Schwarzerdegebiet	437	535	175	412	88	174

Tab. 34: Anwendungsbereiche der Metamodelle für Stickstoffauswaschung.

N_SALDO: Stickstoffsaldo, WMZ: wirksame Mineralisierungszeit, CREP: Kohlenstoffreproduktionsrate. Nords. Pl.- u. Hügelland: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittels. Lösshügelland: Mittelsächsisches Lösshügelland, S.-A. Schwarzerdegebiet: Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet.

Gebiet	N_SALDO [kg/(ha*a)]		WMZ [d/a]		CREP [dt/(ha*a)]	
	von	bis	von	bis	von	Bis
Nords. Pl.- und Hügelland	22	149	16	49	7	22
Mittels. Lösshügelland	21	121	9	41	6	19
Mulde-Lösshügelland	24	141	9	38	6	22
S.-A. Schwarzerdegebiet	21	141	23	40	7	19

Tab. 35: Anwendungsbereiche der Metamodelle für Nitratkonzentration.

NIED: Jahresniederschlagssumme, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, BG: Bedeckungsgrad, N_SALDO: Stickstoffsaldo, Nords. Pl.- u. Hügelland: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittels. Lösshügelland: Mittelsächsisches Lösshügelland, S.-A. Schwarzerdegebiet: Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet.

Gebiet	NIED [mm/a]		NFK [mm]		BG [d/a]		N_SALDO [kg/(ha*a)]	
	von	bis	von	bis	von	bis	von	bis
Nords. Pl.- und Hügelland	538	658	57	293	90	180	22	149
Mittels. Lösshügelland	587	717	94	401	90	180	21	121
Mulde-Lösshügelland	636	778	87	401	81	173	24	141
S.-A. Schwarzerdegebiet	437	535	175	412	88	174	21	141

4.4 Vergleichende Betrachtung der Metamodelle der vier Gebiete

Als Untersuchungsergebnis der vier behandelten Gebiete können für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration die Zusammenhänge der Zustands- und Antriebsindikatoren grafisch verdeutlicht werden (Abbildung 24). Es ist zu beachten, dass die Nitratkonzentration nur in drei der vier Gebiete von der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität abhängig ist.

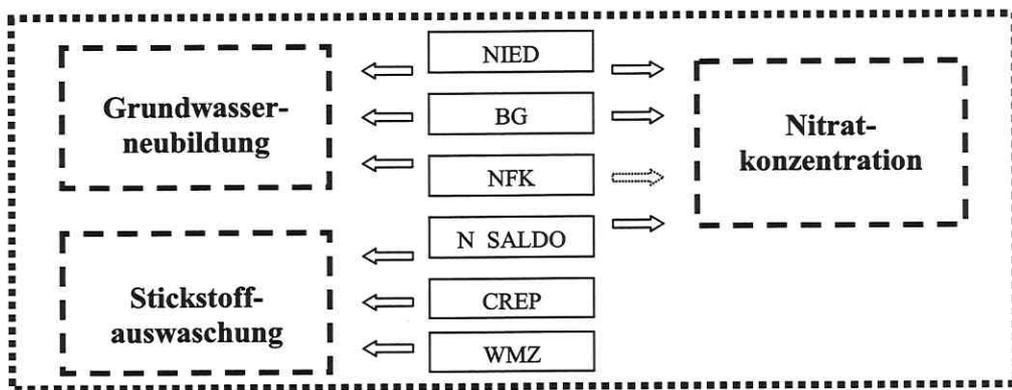


Abb. 24: Wirkungsprinzip der Antriebsindikatoren in den vier Gebieten: Beschreibung von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration in Abhängigkeit ihrer Antriebsindikatoren. NIED: mittlere Jahresniederschlagssumme, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, BG mittlerer jährlicher Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption, N_SALDO: mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo, WMZ: mittlere jährliche wirksame Mineralisierungszeit, CREP: mittlere jährliche Kohlenstoffreproduktionsrate.

Die Sensitivität der einzelnen Antriebsindikatoren (Abschnitt 3.2.4) wird durch Vergleich der Regressionskoeffizienten deutlich (siehe Tabellen 28, 29 und 30). Hierbei zeigt sich, dass auf die Grundwasserneubildung der Faktor Klima (Jahresniederschlagssummen) den stärksten Einfluss besitzt, Bodeneigenschaften und Landnutzung spielen eher untergeordnete Rollen: die Beträge der Werte für PI_{GWB} sind stets wesentlich größer als die Beträge der für $P2_{GWB}$ und $P3_{GWB}$ ermittelten Zahlen (Tabelle 28).

Tabelle 29 zeigt, dass die Stickstoffauswaschung am stärksten von der Bewirtschaftung in Form des Stickstoffsaldos beeinflusst wird, ausgedrückt durch betragsmäßig relativ große Regressionskoeffizienten $PI_{N_{AUS}}$ in allen vier Gebieten. Zwischen den Gebieten bestehen lediglich geringe Differenzen. Als weitere Antriebsindikatoren wurden Modellgrößen der Landnutzung (jährliche Kohlenstoffreproduktionsrate) sowie der Standortwirkung (biologische Aktivität in Form der wirksamen Mineralisierungszeit) ermittelt. Die Kohlenstoffreproduktionsraten sind im Vergleich zur biologischen Aktivität jedoch kaum wirksam (Tabelle 29), wurden aber anhand der Reduktionstests als Antriebsindikatoren bestätigt (Anhang A 8.4). Der Einfluss von Boden (Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität) und Klima (Jahresniederschlagssumme) hat sich nicht als signifikant erwiesen (siehe Anhang A 8.4).

Tabelle 30 zeigt, dass die Nitratkonzentration am stärksten von der Jahresniederschlagssumme (Beträge von PI_{NO3_K}) beeinflusst wird, eine etwas geringere Wirkung besitzt der

Stickstoffsaldo (ausgedrückt durch $P4_NO3_K$). Bis auf das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet ist der Einfluss von Bedeckungsgrad bzw. Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität als gering bzw. sehr gering anzusehen (Beträge von $P3_NO3_K$ und $P2_NO3_K$). Im Mulde-Lösshügelland wurde die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität als Antriebsindikator der Nitratkonzentration nicht bestätigt (vergleiche Anhang A 8.4.2.3).

Das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet zeigt einige Besonderheiten. So ist für den Zustandsindikator Grundwasserneubildung der Regressionskoeffizient $P1_GWB$ mit 6,23 annähernd doppelt so groß wie in den übrigen drei Gebieten. Der Bedeckungsgrad besitzt etwa die dreifache Sensitivität (ausgedrückt durch $P3_GWB$), auch die Wirkung des Bodens ist im Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebiet deutlich stärker (Werte von $P2_GWB$). Für die Nitratkonzentration treffen auf die entsprechenden Regressionskoeffizienten $P1_NO3_K$, $P2_NO3_K$ und $P3_NO3_K$ analoge Aussagen zu. Die Ursache dieser vergleichsweise starken Sensitivitäten von Jahresniederschlag, Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität und Bedeckungsgrad ist in den sehr geringen Grundwasserneubildungsraten zu sehen, welche bedingt sind durch das hohe Speichervermögen der Schwarzerden und dem vergleichsweise niedrigen Niederschlagsniveau (siehe Tabellen 20 und A 8.62). Weiterhin hat die Kohlenstoffreproduktionsrate im Vergleich zu den drei anderen Gebieten eine entgegengesetzte Wirkung: der Regressionskoeffizient $P3_N_AUS$ besitzt ein negatives Vorzeichen. Eine solche Aussage kann getroffen werden, da in den vier Gebieten jeweils dieselben drei Antriebsindikatoren in der Regressionsfunktion der Stickstoffauswaschung enthalten sind. Die Ursache kann in den zahlenmäßig sehr kleinen Werten von $P3_N_AUS$ zu finden sein, so dass ein Vorzeichenwechsel nicht ungewöhnlich ist.

Die Zahlenwerte für ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} belegen deutliche Unterschiede in den einzelnen Bodenformen (Tabelle 24).

An dieser Stelle sei noch einmal auf die Grenzen der Bestimmungsmethode hingewiesen, die sich aus Gründen der Vereinfachung und der Reduktion des Arbeitsaufwandes ergeben haben (vergleiche Abschnitt 3.2.4.2).

- in jedem Gebiet wurde nur eines der sechs repräsentativen Bodenprofile mit dem Profilgenerator behandelt und lediglich jeweils eine Fruchtfolge mit ‚mittleren‘ Eigenschaften für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration untersucht,
- die Beschreibung der Texturheterogenität erfolgte mit einer Variation des Ton- und Schluffgehaltes von zwei Masseprozent in allen Horizonten der Bodenprofile (Abschnitt 4.2, Tabelle 23),
- die Untersuchungen bei der Sensitivitätsanalyse erfolgten separat für jeden Horizont eines Profils,
- in jedem Horizonten wurden die bodenphysikalischen Parameter unabhängig voneinander variiert.

Darüber hinaus wurden jeweils unterschiedliche Referenzwetterabläufe simuliert, so dass ein direkter Vergleich der Werte von ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} zwischen den Gebieten nicht möglich ist.

Die Zahlenwerte der Referenzszenarien (Tabellen 25, 26 und 27) spiegeln die Durchschnittswerte der Kennzahlen aller gerechneten Szenarien der Gebiete wider, da sie gerade den Mittelwerten der Indikatoren in den Datenbasen entsprechen (siehe Abschnitt 3.2.4.1, vergleiche auch Tabellen A 8.41, A 8.48, A 8.55 und A 8.62).

Unter den Kennwerten in Tabelle 25 fällt das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet durch eine sehr geringe Grundwasserneubildung von 37 mm/a auf, welche in Übereinstimmung mit Simulationsergebnissen aus FRANKO et al. (1997) und FRANKO & SCHENK (2000) steht. Bei der Stickstoffauswaschung tritt ein derartiges Extrem nicht auf. Zwar steht auch hier das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet mit 28 kg/(ha·a) an letzter Stelle, aber im Vergleich zur Grundwasserneubildung ist der relative Unterschied zu den anderen Gebieten wesentlich kleiner (Tabelle 26). Eine Folge dieser Situation sind die sehr hohen Nitratkonzentrationen im Sickerwasser, welche für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet simuliert wurden (Tabellen 27 und A 8.62).

Bei der Betrachtung der in Tabelle 32 stehenden Fehlermaße zeigt sich für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet im Gegensatz zu den drei Gebieten der mittleren Mulde eine schlechtere Güte der Regressionsfunktionen der drei Zustandsindikatoren. Dies spiegelt sich auch in den ermittelten Bestimmtheitsmaßen wider, siehe Tabelle 31.

An dieser Stelle soll eine Zusammenstellung der maximalen relativen Fehleranteile der in den Metamodellen enthaltenen Komponenten erfolgen. Dies sind Einflüsse, die verursacht werden

- durch jeden einzelnen Antriebsindikator (wenn dessen genauer Wert unbekannt ist),
- als Wirkung der Texturheterogenität (Fehlerterme ε_{GWB} , ε_{N_AUS} , ε_{NO3_K}),
- durch den Regressionsansatz selbst (mittlere absolute Residuen res_{GWB} , res_{N_AUS} , res_{NO3_K} als Fehlermaße der Regressionsansätze).

Grundlage hierfür sind die in Abschnitt 4.3 erhaltenen allgemeinen Gleichungen der Metamodelle für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration, die für jedes Gebiet mit ihren entsprechenden Parametern (Regressionskoeffizienten und Kennwerten der Referenzszenarien) betrachtet werden. Davon ausgehend ist der maximale Fehler zu quantifizieren, den jede einzelne Komponente auf die relative Änderung von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung oder Nitratkonzentration haben kann.

Um den Fehleranteil eines einzelnen Antriebsindikators zu erhalten, wird für diesen die größtmögliche Variation aus Minimum und Maximum bestimmt (Tabellen 33, 34 und 35) und mit dem entsprechenden Regressionskoeffizienten P_i_{GWB} , $P_j_{N_AUS}$ bzw. $P_k_{NO3_K}$ (Tabellen 28, 29 und 30) multipliziert. Die anderen Antriebsindikatoren werden als konstant betrachtet. Der durch die Texturheterogenität verursachte Fehleranteil kann direkt aus den ermittelten Zahlenwerten für ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} charakterisiert werden (Tabelle 24). Eine Beschreibung des durch den Regressionsansatz verursachten Fehleranteils ist mit res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K} möglich (Tabelle 32).

In den Tabellen 36, 37 und 38 sind die Anteile der einzelnen Fehlerkomponenten für die Metamodelle von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration der vier Gebiete als relative Fehler dargestellt.

Tab. 36: Relative Fehleranteile der einzelnen Komponenten des Metamodells für Grundwasserneubildung an der relativen Änderung des Zustandsindikators. Fehleranteile der Antriebsindikatoren Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), Bedeckungsgrad (BG), res_{GWB} : Fehleranteil aus Regressionsansatz, ε_{GWB} : Fehleranteil aus Wirkung der Texturheterogenität. Sachsen-Anhalt.: Sachsen-Anhaltinisch.

Gebiet	Antriebsindikatoren			res_{GWB}	ε_{GWB}
	NIED	NFK	BG		
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	0,30	0,35	0,16	0,07	0,06
Mittelsächsisches Lösshügelland	0,29	0,20	0,17	0,12	0,01
Mulde-Lösshügelland	0,33	0,11	0,15	0,05	0,01
Sachsen-Anhalt. Schwarzerdegebiet	0,63	0,54	0,60	0,19	0,12

Aus Tabelle 36 wird deutlich, dass bei der Grundwasserneubildung, mit Ausnahme des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes, der Einfluss des Klimas (Jahresniederschlagssumme) den größten relativen Fehleranteil unter den Antriebsindikatoren besitzt. Sowohl die Wirkung des Bodens (Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität) als auch der Landnutzung (Bedeckungsgrad) sind allerdings ebenfalls als hoch anzusehen. Die von Texturheterogenität bzw. Regressionsfunktion verursachten Fehleranteile ε_{GWB} bzw. res_{GWB} sind hingegen verhältnismäßig klein.

Tab. 37: Relative Fehleranteile der einzelnen Komponenten des Metamodells für Stickstoffauswaschung an der relativen Änderung des Zustandsindikators. Fehleranteile der Antriebsindikatoren Stickstoffsaldo (N_SALDO), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ), Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP), res_{N_AUS} : Fehleranteil aus Regressionsansatz, ε_{N_AUS} : Fehleranteil aus Wirkung der Texturheterogenität. Sachsen-Anhalt.: Sachsen-Anhaltinisch.

Gebiet	Antriebsindikatoren			res_{N_AUS}	ε_{N_AUS}
	N_SALDO	WMZ	CREP		
Nordsächsisches Platten- und Hügelland	1,72	0,27	0,02	0,05	0,04
Mittelsächsisches Lösshügelland	1,38	0,17	0,01	0,07	0,06
Mulde-Lösshügelland	1,79	0,18	0,01	0,06	0,02
Sachsen-Anhalt. Schwarzerdegebiet	2,05	0,54	0,60	0,14	0,07

Aus Tabelle 37 wird deutlich, dass bei der Stickstoffauswaschung der mittlere jährliche Stickstoffsaldo mit Abstand den größten Fehler hervorrufen kann, der Einfluss der Standortwirkung (wirksame Mineralisierungszeit) ist hingegen vergleichsweise gering. Ein noch kleinerer relativer Fehleranteil wird verursacht durch die Kohlenstoffreproduktionsrate, deren Effekt noch unter der Texturheterogenität (ε_{N_AUS}) und der Regressionsfunktion (res_{N_AUS}) liegt. Eine Ausnahme ist hier das Schwarzerdegebiet, bei welchem die Kohlenstoffreproduktionsrate mit 0,60 den Anteil der wirksamen Mineralisierungszeit übertrifft.

Tab. 38: Relative Fehleranteile der einzelnen Komponenten des Metamodells für Nitratkonzentration an der relativen Änderung des Zustandsindikators. Fehleranteile der Antriebsindikatoren Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), Bedeckungsgrad (BG), Stickstoffsaldo (N_SALDO), $res_{NO_3_K}$: Fehleranteil aus Regressionsansatz, $\varepsilon_{NO_3_K}$: Fehleranteil aus Wirkung der Texturheterogenität, Nords. Pl.- u. Hügell.: Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittels. Lösshügell.: Mittelsächsisches Lösshügelland. S.-A.: Sachsen-Anhaltinisch.

Gebiet	Antriebsindikatoren				$res_{NO_3_K}$	$\varepsilon_{NO_3_K}$
	NIED	NFK	BG	N_SALDO		
Nords. Pl.- und Hügelland	0,34	0,25	0,17	1,88	0,20	0,03
Mittels. Lösshügelland	0,33	0,12	0,28	1,59	0,22	0,03
Mulde-Lösshügelland	0,36	0,00	0,16	1,86	0,16	0,01
S.-A. Schwarzerdegebiet	0,90	0,90	1,05	2,29	0,93	0,08

Wie auch beim Zustandsindikator Stickstoffauswaschung wird bei der Nitratkonzentration der mit Abstand größte Fehleranteil durch den mittleren jährlichen Stickstoffsaldo verursacht (Tabelle 38). Die Wirkung von Jahresniederschlagssumme, Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität und Bedeckungsgrad sind demgegenüber relativ gering.

Der durch die Regressionsfunktion hervorgerufene Fehleranteil ist, im Gegensatz zu Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung, hier in ähnlicher Größenordnung wie die Anteile der zuletzt genannten Antriebsindikatoren. Der geringste Anteil wird von der Texturheterogenität verursacht ($\varepsilon_{NO_3_K}$).

Eine Alternative zur linearen Regression sind verschiedene nichtlineare Ansätze, wie logarithmische, exponentielle oder quadratische Funktionen (HARTUNG 1993, SACHS 1997), mit denen sich möglicherweise einige Zusammenhänge exakter beschreiben lassen. Ein Beispiel ist die Abhängigkeit des im Boden gespeicherten Stickstoffs von der applizierten Düngermenge (ADDISCOTT et al. 1991, ‚surplus nitrate‘ aus CHANEY (1990)). Bis zum Erreichen eines Schwellenwertes (Sättigungspunkt) kann der Zusammenhang durch eine lineare Funktion sehr gut dargestellt werden. Danach erfolgt ein starker Anstieg der gespeicherten Stickstoffmenge. Das Überschreiten dieses Schwellenwertes wird durch die Wahl eines linearen Ansatzes nicht berücksichtigt. Bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten CANDY-Prozesssimulationen ist ein solcher Effekt im Modell allerdings nicht zu beobachten (siehe Abbildungen im Anhang A 8.4.3). Auch an den Bestimmtheitsmaßen und empirischen Reststreuungen der Regressionsfunktionen (Tabelle 31) sowie an den Fehlermaßen (Tabelle 32) ist zu erkennen, dass die Anwendung linearer Funktionen zur Beschreibung der Zusammenhänge gute Ergebnisse liefert. Eine Untersuchung nichtlinearer Regressionsansätze wurde im Rahmen dieser Arbeit daher nicht ausgeführt. Für weitergehende Studien wären Verwendung und Test solcher Regressionsansätze jedoch unerlässlich.

5 Validierung und Anwendung von Metamodellen

In diesem Kapitel werden Ergebnisse praktischer Anwendungen der in Kapitel 4 entwickelten Metamodelle vorgestellt. Ein Aspekt der Modellierung ist die Überprüfung der Modellgültigkeit an unabhängigen Datensätzen – die sogenannte Validierung (BOSSSEL 1994, LESER 1991). Dieser wichtige Arbeitsschritt wurde für die Metamodelle zum einem am Beispiel des in Westsachsen gelegenen Einzugsgebietes der Parthe durchgeführt. In Abschnitt 5.1 erfolgt dazu ein direkter Vergleich mit entsprechenden Simulationsergebnissen des Prozessmodells.

Zum anderen werden in Abschnitt 5.2 die Kennwerte der Referenzszenarien für Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung der drei Gebiete der mittleren Mulde mit Resultaten eines Verfahrens zur Abschätzung diffuser Stickstoffeinträge verglichen (HIRT 2002, KRÖNERT et al. 2002).

Abschließend erfolgen einige regionale Anwendungen der Metamodelle auf zur Lössregion des Elbeeinzugsgebietes gehörenden Gemeinden von Sachsen und Sachsen-Anhalt.

5.1 Validierung von Metamodellen am Einzugsgebiet der Parthe

Das Parthegebiet ist ein Teileinzugsgebiet der Elbe (Abbildung 25) mit etwa 366 km² Fläche. Es wird etwa zur Hälfte ackerbaulich genutzt und ist charakteristisch für die Landnutzung im nordwestsächsischen Raum (RAMSBECK-ULLMANN 1999).

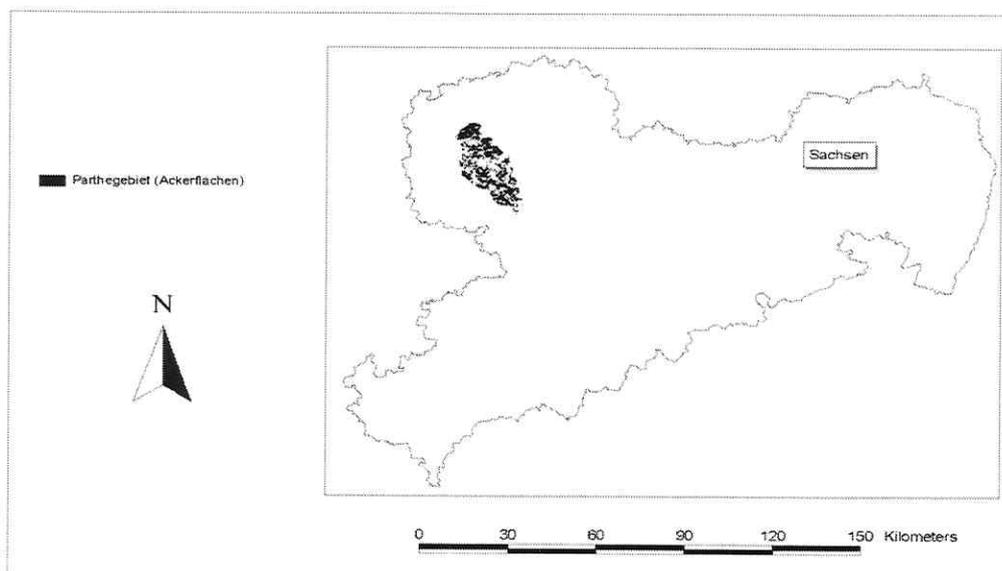


Abb. 25: Geografische Lage des Parthegebietes.

Datengrundlagen: Administrative Gliederung von Sachsen, Nachnutzung und Digitalisierung mit Genehm- Nr.: DN d 635/92 2/93 des Landesvermessungsamtes Sachsen. THOMAS, M.: Einzugsgebiet der Parthe – Karte der Bodenformen 1:25 000 (1968/69).

Grundlage der CANDY-Prozesssimulation war eine Aufteilung des Gebietes in die Landkreise Eilenburg, Delitzsch, Leipzig Land, Leipzig, Wurzen, Grimma, Borna und Geithain. Die Datengrundlagen zur Anwendung des Prozessmodells wurden aus verschiedenen Quellen zusammengestellt.

Unter Verwendung betrieblicher Statistiken für DDR-Betriebe und amtlicher Statistiken des Freistaates Sachsen sind auf Ebene der Landkreise typische Fruchtfolgen erarbeitet worden, welche die Spezifik der Landnutzung in den Zeiträumen 1980 bis 1989 und 1990 bis 1997 abbilden (RAMSBECK-ULLMANN 1999). Typische Bodenformen konnten aus einer Bodenkarte abgeleitet werden (THOMAS 1968/69). Die Informationen zu Boden und Landnutzung wurden in Form thematischer Karten mit ArcView verarbeitet.

Weiterhin konnten von der Wetterstation in Brandis die Tageswerte der von CANDY benötigten Klimaelemente (Abschnitt 2.4) für den Zeitraum 1980 bis 1997 zur Verfügung gestellt werden. Um das Niederschlagsniveau von Brandis an die Heterogenität im Parthegebiet anzupassen, wurden für die Gemeinden der Landkreise Korrekturfaktoren erarbeitet (RAMSBECK-ULLMANN 1999). Die Variationsbreiten und Mittelwerte der auf diese Art erhaltenen Jahresniederschlagssummen sind im Anhang A 8.5, Tabelle A 8.68, enthalten. Insgesamt sind für das Parthegebiet 950 verschiedene Simulationsobjekte mit dem Prozessmodell gerechnet worden (RAMSBECK-ULLMANN 1999).

Die Voraussetzungen der Anwendbarkeit von Metamodellen wurde zunächst anhand der Variationsbreiten der Antriebsindikatoren geprüft (Tabellen 33, 34 und 35). Dazu sind in den Landkreisen neben den in Tabelle A 8.68 (Anhang A 8.5) angegebenen Jahresniederschlagssummen die Profilschichten der nutzbaren Feldkapazität der Böden und die aus Jahresniederschlag und Feinanteil abgeleitete wirksame Mineralisierungszeit bestimmt worden (Tabelle A 8.69 im Anhang A 8.5). Anhand der für die Landkreise erstellten Fruchtfolgen konnten die zur Anwendung der Metamodelle erforderlichen Kenngrößen der Landnutzung des Zeitraumes 1980 bis 1997 abgeleitet werden (Anhang A 8.5, Tabelle A 8.70).

Die Anwendbarkeit von Metamodellen ergibt sich durch einen Vergleich der in den Tabellen A 8.68 bis A 8.70 stehenden Zahlen mit den Variationsbreiten der Antriebsindikatoren (Tabellen 33, 34 und 35). Aufgrund des geringen Jahresniederschlagsniveaus im Schwarzerdegebiet können diese Metamodelle im Parthegebiet nicht angewendet werden. Ebenso wenig die für das Mulde-Lösshügelland entwickelten Verfahren, deren Einsatzfeld auf Anwendungen mit Jahresniederschlagssummen von 636 mm bis 778 mm beschränkt bleibt. Für das Parthegebiet kommen daher nur die für das Nordsächsische Platten- und Hügelland und Mittelsächsische Lösshügelland entwickelten Verfahren in Frage. Es muss jedoch darauf verwiesen werden, dass auch bei diesen in manchen Landkreisen die Bereiche einiger Antriebsindikatoren leicht über- bzw. unterschritten werden (Tabellen 33, 34 und 35 in Abschnitt 4.3 und Tabellen A 8.68 bis A 8.70, Anhang 8.5).

Die Validierung erfolgte so, dass zunächst die Metamodelle des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes (Abbildungen 26, 27 und 28) und anschließend die für das Mittelsächsische Lösshügelland entwickelten Verfahren (Abbildungen 29, 30 und 31) auf die Landkreise und das Gesamtgebiet angewendet wurden. Die sechs Abbildungen zeigen den Vergleich der

CANDY-Prozesssimulation mit den Resultaten der Metamodelle. Als Ergebnis sind jeweils Variationsbreiten der Zustandsindikatoren angegeben, die wie folgt erhalten wurden.

Als Metamodelle wurden die Formeln (3.35), (3.36) und (3.37) verwendet mit den in Abschnitt 4.3 angegebenen Parametern des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes und des Mittelsächsischen Lösshügellandes. Aus den Variationsbreiten der Antriebsindikatoren (Tabellen A 8.68 bis A 8.70 im Anhang 8.5) sowie den Einflüssen der Fehlerkomponenten ε_{GWB} , $\varepsilon_{N_{AUS}}$, ε_{NO3_K} (Tabelle 24) und res_{GWB} , $res_{N_{AUS}}$, res_{NO3_K} (Tabelle 32) ergeben sich die Spannweiten der Zustandsindikatoren. Ihre Mittelwerte werden durch Verwendung der Mittelwerte der Antriebsindikatoren erhalten, zusätzlich bleiben die Wirkung der Texturheterogenität und die Fehlermaße der Metamodelle unberücksichtigt (vergleiche hierzu auch Anmerkung 6, Abschnitt 3.2.4.2).

Durch Auswertung der CANDY-Prozesssimulationen können Variationsbreiten sowie Mittelwerte von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration für die Landkreise und das gesamte Parthegebiet angegeben werden. Allgemein ist festzustellen, dass die Variationsbreiten der Zustandsindikatoren mit den Metamodellen oft nicht exakt berechnet werden. Die Ursache kann in den Zahlenbelegungen der Vektoren der Antriebsindikatoren zu finden sein. Falls hier Kombinationen auftreten, die mit dem Prozessmodell nicht simuliert wurden, kann dies zu anderen Zahlen für die Minima und Maxima von Zustandsindikatoren führen. Die Differenzen zwischen den Metamodellen des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes und des Mittelsächsischen Lösshügellandes werden beim Vergleich der Abbildungen 26 und 29, 27 und 30 sowie 28 und 31 deutlich.

Die Abbildungen 26, 27 und 28 demonstrieren Ergebnisse der Anwendungen der Metamodelle des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes. Abbildung 26 zeigt für die Grundwasserneubildung, dass die Mittelwerte der CANDY-Prozesssimulation in manchen Landkreisen mit dem Metamodell leicht überschritten werden, im Durchschnitt etwa 8 %. Die Schwankungsbreite des Zustandsindikators wird in den meisten Landkreisen überschätzt, maximal 24 % im Landkreis Leipzig Land.

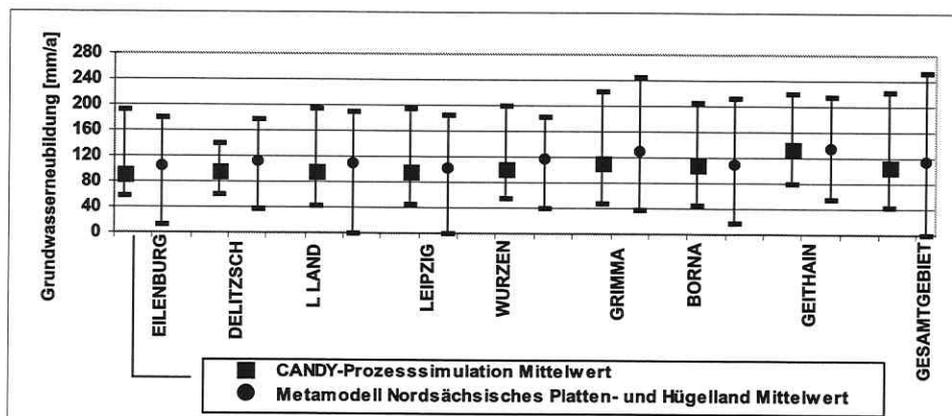


Abb. 26: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Nordsächsisches Platten- und Hügelland) für Grundwasserneubildung im Parthegebiet: Mittelwerte und Variationsbreiten für Landkreise und Gesamtgebiet. L. LAND: Landkreis Leipzig Land.

Für die Stickstoffauswaschung ist eine gute Übereinstimmung der Mittelwerte beider Verfahren festzustellen. Die mit dem Prozessmodell berechnete Variationsbreite wird allerdings durch das Metamodell in einigen Landkreisen unterschätzt (Abbildung 27). Vor allem die Maximalwerte werden mit dem Metamodell nicht getroffen. Für das Gesamtgebiet wird mit dem Prozessmodell eine etwa 22 % größere Variationsbreite berechnet.

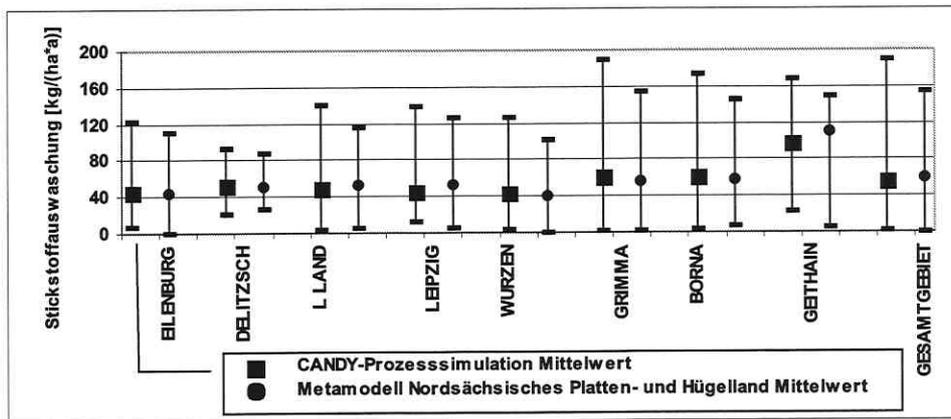


Abb. 27: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Nordsächsisches Platten- und Hügelland) für Stickstoffauswaschung im Parthegebiet: Mittelwerte und Variationsbreiten für Landkreise und Gesamtgebiet. L. LAND: Landkreis Leipzig Land.

Abbildung 28 zeigt, dass die mit dem Prozessmodell berechneten Mittelwerte der Nitratkonzentration durch das Metamodell in den meisten Landkreisen nicht so gut getroffen werden. Eine Ursache kann in dem vergleichsweise großen Fehler der Regressionsfunktion liegen (Tabelle 32). Im Unterschied zur Stickstoffauswaschung werden in einigen Landkreisen die mit dem Prozessmodell bestimmten Variationsbreiten durch das Metamodell übertroffen.

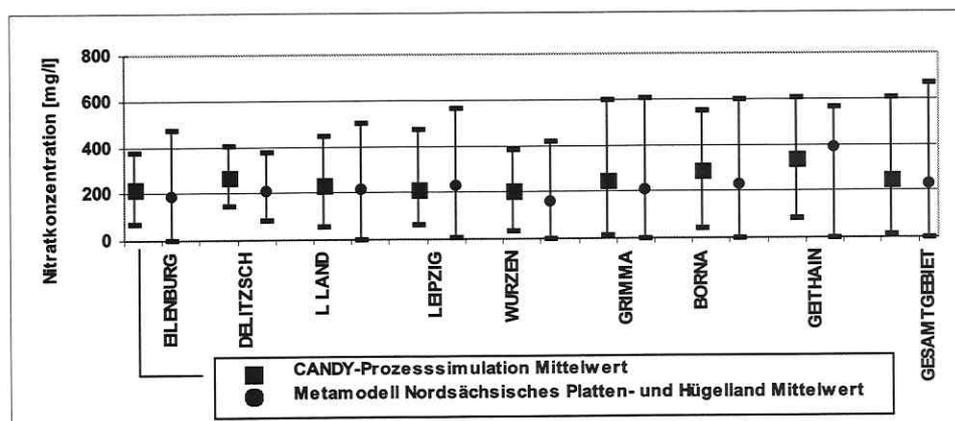


Abb. 28: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Nordsächsisches Platten- und Hügelland) für Nitratkonzentration im Parthegebiet: Mittelwerte und Variationsbreiten für Landkreise und Gesamtgebiet. L. LAND: Landkreis Leipzig Land.

Die Abbildungen 29, 30 und 31 zeigen im direkten Vergleich dazu die Ergebnisse der Metamodelle des Mittelsächsischen Lösshügellandes. Hier treffen im Prinzip analoge Aussagen zu. Für die Grundwasserneubildung (Abbildung 29) ist eine noch stärkere Überschätzung der Mittelwerte festzustellen (im Durchschnitt etwa 19 %). Im Vergleich zum Metamodell des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes werden etwas größere Spannweiten berechnet.

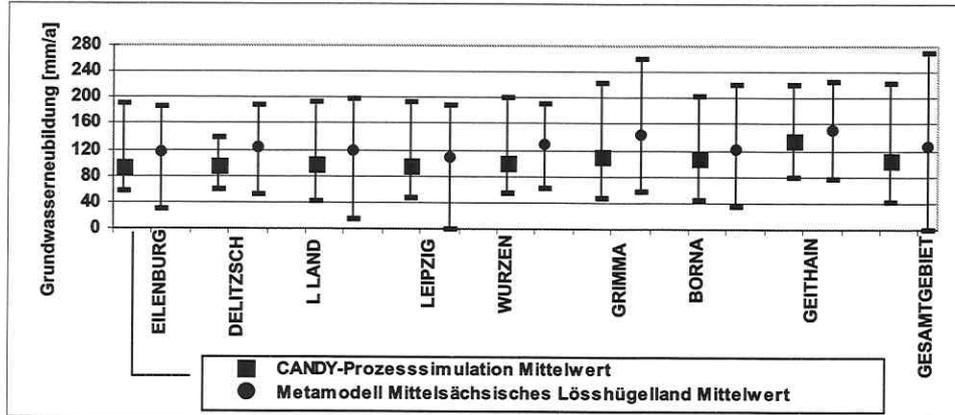


Abb. 29: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Mittelsächsisches Lösshügelland) für Grundwasserneubildung im Parthegebiet: Mittelwerte und Variationsbreiten für Landkreise und Gesamtgebiet. L LAND: Landkreis Leipzig Land.

Für die Stickstoffauswaschung sind zwischen den Ergebnissen der Metamodelle des Mittelsächsischen Lösshügellandes (Abbildung 30) und des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes (Abbildung 27) kaum Unterschiede festzustellen.

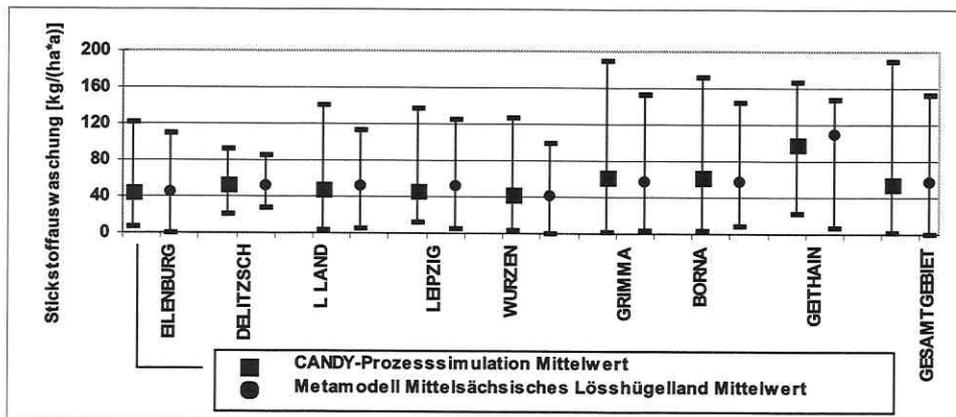


Abb. 30: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Mittelsächsisches Lösshügelland) für Stickstoffauswaschung im Parthegebiet: Mittelwerte und Variationsbreiten für Landkreise und Gesamtgebiet. L LAND: Landkreis Leipzig Land.

Die deutlichsten Unterschiede werden bei der Nitratkonzentration sichtbar (Abbildung 31 im Vergleich mit Abbildung 28). Es wird in den meisten Landkreisen mit dem Metamodell des Mittelsächsischen Lösshügellandes eine kleinere Spannweite für den Zustandsindikator berechnet. Die mit dem Prozessmodell berechneten Variationsbreiten werden auch mit diesem Metamodell meist übertroffen. Die Mittelwerte der Nitratkonzentration liegen etwa 13 % unter den mit dem Metamodell des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes berechneten Zahlen (siehe Abbildung 28).

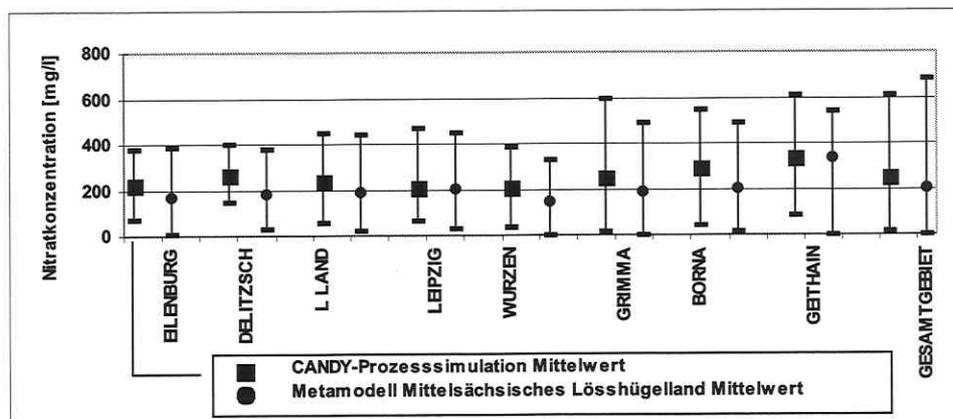


Abb. 31: Vergleich von CANDY-Prozesssimulation und Ergebnissen des Metamodells (Mittelsächsisches Lösshügelland) für Nitratkonzentration im Parthegebiet: Mittelwerte und Variationsbreiten für Landkreise und Gesamtgebiet. L LAND: Landkreis Leipzig Land.

Im folgenden Abschnitt wird für die drei Gebiete der mittleren Mulde ein Vergleich mit einem nicht auf CANDY-Prozesssimulation basierenden Verfahren dargestellt.

5.2 Validierung von Metamodellen am Einzugsgebiet der mittleren Mulde

Im Rahmen des BMBF-Projektes „Gebietswasserhaushalt und Stoffhaushalt in der Lössregion des Elbegebietes als Grundlage für die Durchsetzung einer nachhaltigen Landnutzung“ wurden für die Naturräume des Einzugsgebietes der mittleren Mulde Grundwasserneubildungsraten und Stickstoffausträge berechnet (HIRT 2002), wobei die Landnutzung allerdings in der Gesamtheit betrachtet wurde. Für die Ackerflächen der Gebiete können lediglich Mittelwerte von Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung ausgewiesen werden, jedoch keine Schwankungsbreiten. Es ist daher nur möglich, die Kennwerte der Referenzszenarien mit den für die Naturräume erhaltenen Ergebnissen zu vergleichen.

Die Berechnung der Grundwasserneubildungsraten nach HIRT (2002) erfolgte auf Basis von Simulationen mit dem Modell ABIMO (GLUGLA & FÜRTIG 1997). Einen Vergleich dieser Zahlen mit den Kennwerten der Referenzszenarien der drei Naturräume der mittleren Mulde zeigt Abbildung 32.

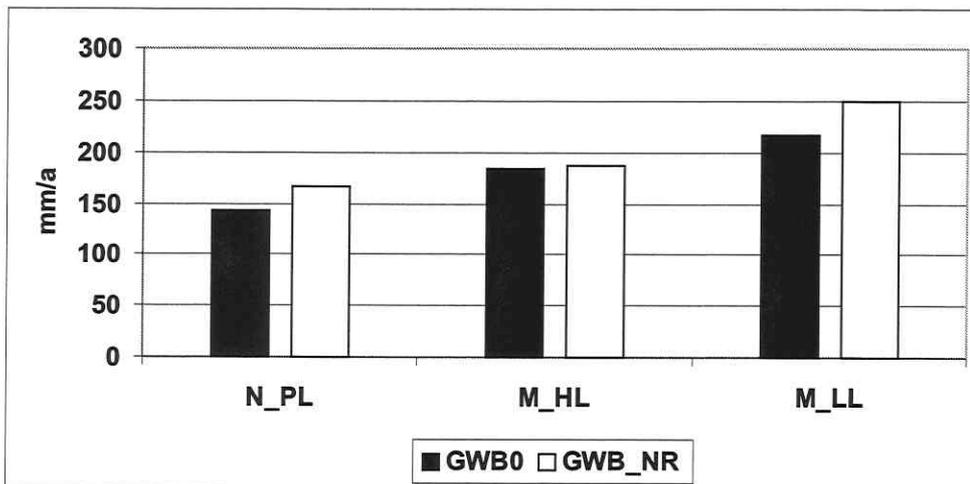


Abb. 32: Vergleich der Grundwasserneubildungsraten: Referenzszenarien der Metamodelle für Grundwasserneubildung (GWB0) und der mit ABIMO ermittelten Zahlen (GWB_NR) der Naturräume Nordsächsisches Platten- und Hügelland (N_PL), Mittelsächsisches Lösshügelland (M_HL) und Mulde-Lösshügelland (M_LL).

Hier zeigt sich für das Mittelsächsische Lösshügelland eine sehr gute Übereinstimmung: die Abweichung des Zahlenwertes vom Referenzszenario ist kleiner als 3 %. Für das Nordsächsische Platten- und Hügelland sowie das Mulde-Lösshügelland sind die Differenzen mit - 14 % bzw. - 13 % jedoch größer.

Die Ermittlung der Stickstofffrachten erfolgte auf Grundlage eines in FREDE & DABBERT (1998) dargestellten Verfahrens, was allerdings in modifizierter Form angewendet wurde (HIRT 2002). Hierbei wurde zwischen diffusen und punktuellen Stickstoffausträgen unterschieden, die jeweils in weitere Komponenten unterteilt sind (KRÖNERT 2002). Die für Ackerland ermittelten Zahlen können direkt mit den CANDY-Simulationsergebnissen verglichen werden, welche zur Erstellung der Datenbasen der Metamodelle verwendet wurden. Unter Einbeziehung der Kennwerte der Referenzszenarien (Tabellen 25, 26 und 27) kann eine Validierung der berechneten Stickstoffausträge erfolgen: es werden dazu für das Nordsächsische Platten- und Hügelland, Mittelsächsische Lösshügelland und Mulde-Lösshügelland die Zahlenwerte der Stickstoffauswaschung herangezogen. Diese entsprechen dem Durchschnittswert des für einen ha Ackerfläche simulierten Austrages im jeweiligen Gebiet.

Eine entsprechende Umrechnung der Stickstofffrachten aus HIRT (2002) erlaubt den Vergleich mit diesen Zahlen (Abbildung 33).

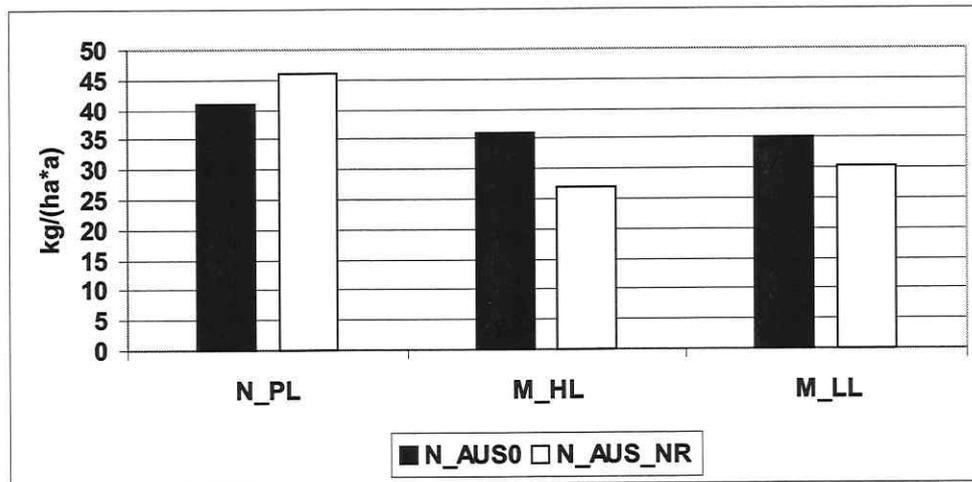


Abb. 33: Vergleich der Stickstoffausträge: Referenzszenarien der Metamodelle für Stickstoffauswaschung (N_AUS0) und umgerechnete Stickstofffrachten (N_AUS_NR) der Naturräume Nordsächsisches Platten- und Hügelland (N_PL), Mittelsächsisches Lösshügelland (M_HL) und Mulde-Lösshügelland (M_LL).

Für das Nordsächsische Platten- und Hügelland sowie das Mulde-Lösshügelland zeigt sich eine gute Übereinstimmung: die Zahlen der Referenzszenarien weichen nur relativ wenig von den Werten aus HIRT (2002) ab (+ 12 % bzw. - 14 %). Eine größere Differenz ist jedoch für das Mittelsächsische Lösshügelland festzustellen, wo die Stickstoffauswaschung des Referenzszenarios mit 36 kg/(ha-a) etwa 33 % größer ist, als der in HIRT (2002) angegebene Wert von 27 kg/(ha-a).

5.3 Anwendung von Metamodellen auf Gebiete im Bundesland Sachsen-Anhalt und im Freistaat Sachsen

Abschließend sollen noch einige regionale Anwendungen der Metamodelle dargestellt werden. Datengrundlage hierfür bildet die Bodenübersichtskarte der Bundesrepublik Deutschland im Maßstab 1:1 000 000 (BÜK 1000dig), die Karte mit den Verwaltungsgrenzen von Sachsen (Quelle: Landesvermessungsamt Sachsen/ Institut für Länderkunde) sowie die Karte mit den Verwaltungsgrenzen von Sachsen-Anhalt (Quelle: Landesamt für Landesvermessung und Datenverarbeitung Sachsen-Anhalts). Weiterhin standen eine Karte mit Niederschlägen auf Gemeindebasis (Quelle: Deutscher Wetterdienst Jahresmittelwerte für Niederschlag 1961 bis 1990) und Kennzahlen verschiedener REPRO-Modellbetriebe der Cluster 1, 2, 3, 4 und 5 zur Verfügung (Abschnitt 4.1.3). Die Anwendung der Metamodelle erfolgte auf der Ebene der Gemeinden. Eine Zuordnung der REPRO-Modellbetriebe zu den Gemeinden konnte eindeutig über die Clusterbezeichnungen realisiert werden. Die Zuordnung der Metamodelle zu den Gemeinden erfolgte über die Jahresniederschläge mit Hilfe einer Karte des DWD und Tabelle 34. Zur rechentechnischen Verarbeitung wurde ein DELPHI – Projekt entwickelt.

5.3.1 Abschätzung der Stickstoffauswaschung aus Ackerflächen für die aktuelle landwirtschaftliche Betriebsstruktur

Eine erste Anwendung ist die Darstellung der mittleren jährlichen Stickstoffauswaschung aus den Ackerflächen in den zur Lössregion gehörenden Gemeinden Sachsens und Sachsen-Anhalts (Abbildung 34). Hierbei wurde von der aktuellen landwirtschaftlichen Betriebsstruktur, repräsentiert durch die Cluster-Realbetriebe, ausgegangen (vergleiche Abschnitt 4.1.3). Mit den Metamodellen der Grundwasserneubildung (Formel (3.40a)) wurde zunächst geprüft, ob überhaupt Sickerwasser anfällt und damit Stickstoff ausgewaschen werden kann. Diese wurden dazu nach GWB_t aufgelöst, vergleiche Formel (3.35):

$$\begin{aligned}
 GWB_t &= (ANT_GWB + 1) \cdot GWB_0 \\
 &= \left(\left(P1_GWB \cdot \frac{NIED_t - NIED_0}{NIED_0} + P2_GWB \cdot \frac{NFK_t - NFK_0}{NFK_0} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + P3_GWB \cdot \frac{BG_t - BG_0}{BG_0} \pm res_{GWB} \pm \varepsilon_{GWB} \right) + 1 \right) \cdot GWB_0
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Die Berechnung der Stickstoffauswaschung erfolgte nach Formel (3.41a), die nach N_AUS_t aufgelöst wurde (vergleiche auch Formel (3.36)):

$$\begin{aligned}
 N_AUS_t &= (ANT_N_AUS + 1) \cdot N_AUS_0 \\
 &= \left(\left(P1_N_AUS \cdot \frac{N_SALDO_t - N_SALDO_0}{N_SALDO_0} + P2_N_AUS \cdot \frac{WMZ_t - WMZ_0}{WMZ_0} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + P3_N_AUS \cdot \frac{CREP_t - CREP_0}{CREP_0} \pm res_{N_AUS} \pm \varepsilon_{N_AUS} \right) + 1 \right) \cdot N_AUS_0
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

Wegen der Wirkungen von Texturheterogenität und der Fehler der Metamodelle ergibt sich für die Stickstoffauswaschung in jeder Gemeinde ein Intervall. Grafisch dargestellt werden hier die jeweils ungünstigsten Werte des Zustandsindikators (d. h. die oberen Grenzen der Intervalle, Abbildung 34).

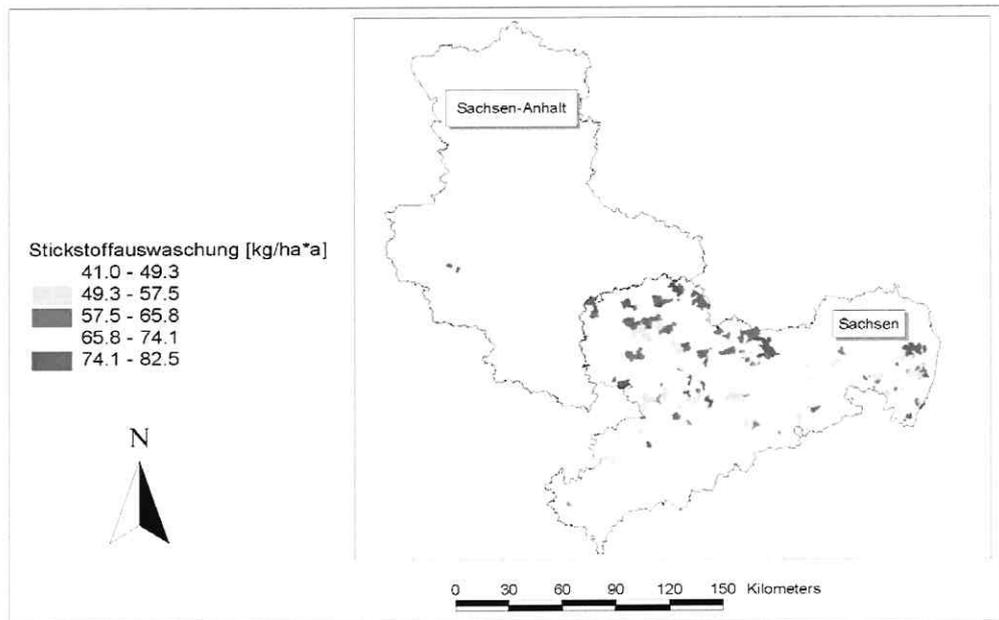


Abb. 34: Jährliche Stickstoffauswaschung in den zur Lössregion gehörenden Gemeinden Sachsens und Sachsen-Anhalts für die Bewirtschaftungsart Cluster-Realbetriebe. Quellen: Administrative Gliederung von Sachsen, Nachnutzung und Digitalisierung mit Genehm.-Nr.: DN d 635/92 2/93 des Landesvermessungsamtes Sachsen. Administrative Gliederung von Sachsen-Anhalt, Darstellung auf Grundlage der Topografischen Karte 1:100.000. Mit Genehmigung des Landesamtes für Landesvermessung und Datenverarbeitung Sachsen-Anhalt, Genehm.-Nr.: LVD/G/146/95. BGR (1998). Mit Genehmigung der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover (BGR) vom 05.06.2000. Deutscher Wetterdienst: Jahresmittelwerte für Niederschlag 1961 – 1990. Bearbeitung: Jens Dreyhaupt.

Die Datengrundlagen zur Erstellung der Karte können folgendermaßen beschrieben werden. Für die Stickstoffsalden standen Kennwerte der REPRO-Betriebe zur Verfügung. Die Jahresniederschläge konnten der Karte des DWD entnommen werden, die Profilsummen der nutzbaren Feldkapazität wurden aus der Bodenübersichtskarte abgeleitet. Die Antriebsindikatoren Kohlenstoffproduktionsrate und Bedeckungsgrad wurden als unsichere Größen behandelt, für ihren Variationsbereich sind die in Abschnitt 4.3 angegebenen Spannweiten verwendet worden. Da die Jahreslufttemperatur nicht auf Gemeindeebene regionalisiert war, wurde für die wirksame Mineralisierungszeit mit Formel (3.10) (siehe Abschnitt 3.1.2.2) unter Einbeziehung von Feinanteilgehalt (abgeleitet aus Bodenübersichtskarte) und Jahresniederschlag (DWD-Karte) eine Spannweite bestimmt.

5.3.2 Einhaltung von Höchstwerten der Stickstoffauswaschung

In Kapitel 4 wurde gezeigt, dass der mittlere jährliche Stickstoffsaldo die Haupttriebkraft der Stickstoffauswaschung ist (Abschnitt 4.4). Als weitere Anwendung kann daher mit den entwickelten Metamodellen eine Abschätzung der Stickstoffsalden erfolgen, die unterschritten werden müssen, um vorgegebene Höchstwerte der jährlichen Auswaschung einzuhalten. Hierzu wird Formel (3.41a) nach N_SALDO_I umgestellt:

$$\begin{aligned}
 N_SALDO_I = & \\
 & \left(\frac{N_AUS_I - N_AUS_0}{N_AUS_0} - P2_N_AUS \cdot \frac{WMZ_I - WMZ_0}{WMZ_0} \right. \\
 & \left. - P3_N_AUS \cdot \frac{CREP_I - CREP_0}{CREP_0} \pm res_{GWB} \pm \varepsilon_{N_AUS} \right) \cdot \frac{N_SALDO_0}{PI_N_AUS} + N_SALDO_0
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

mit

PI_N_AUS , $P2_N_AUS$ und $P3_N_AUS$ als Regressionskoeffizienten (Tabelle 29) und N_AUS_0 , N_SALDO_0 , WMZ_0 und $CREP_0$ als Kennziffern der Referenzszenarien (Tabelle 26).

Als Zielgröße wurde für die maximale Stickstoffauswaschung N_AUS_I ein Höchstwert von 23 kg/(ha·a) angesetzt (ISERMANN & ISERMANN 1995), der in keiner Gemeinde überschritten werden soll. Vor der Berechnung der Salden wurde mit Formel (5.1) geprüft, ob überhaupt Grundwasserneubildung auftritt. Die Datengrundlagen zur Erstellung der Karte sind dieselben, wie im letzten Abschnitt beschrieben.

Da bei dieser Anwendung der Metamodelle sowohl die Wirkungen von Texturheterogenität und Fehlern der Metamodelle als auch die Variationsbreiten der Antriebsindikatoren berücksichtigt wurden, ergibt sich auch hier in jeder Gemeinde ein Intervall des maximal tolerierbaren Stickstoffsaldos. Bei der Kartendarstellung wurde vom jeweils ungünstigsten Wert (d. h. von der unteren Grenze dieses Intervalls) ausgegangen (Abbildung 35).

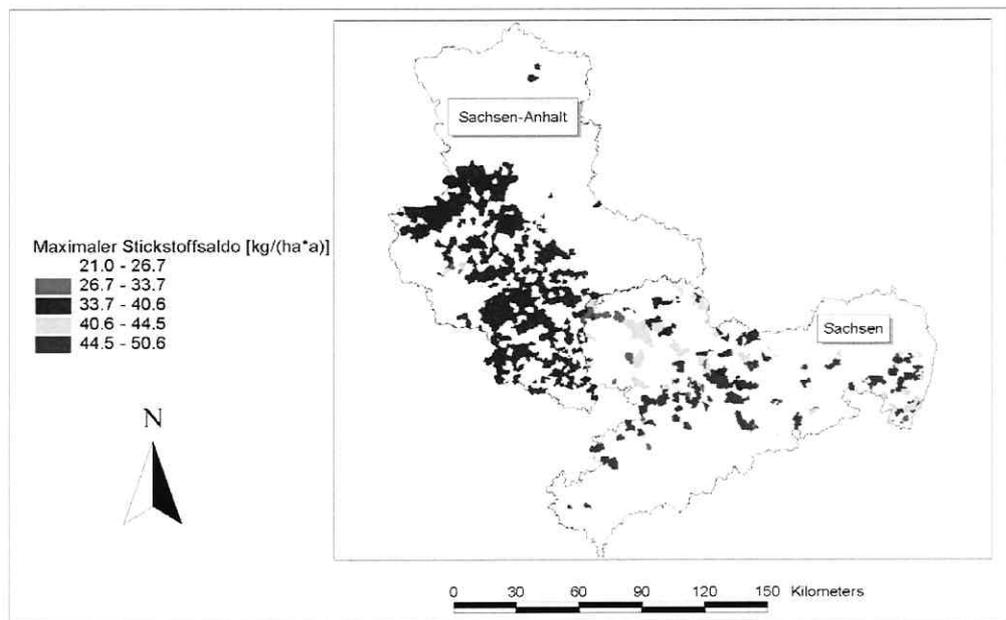


Abb. 35: Maximal tolerierbare Stickstoffsalden zur Begrenzung der jährlichen Stickstoffauswaschung auf höchstens 23 kg pro Hektar landwirtschaftlicher Nutzfläche in den zur Lössregion gehörenden Gemeinden in Sachsen und Sachsen-Anhalt. Quellen: Administrative Gliederung von Sachsen, Nachnutzung und Digitalisierung mit Genehm.-Nr.: DN d 635/92 2/93 des Landesvermessungsamtes Sachsen. Administrative Gliederung von Sachsen-Anhalt, Darstellung auf Grundlage der Topografischen Karte 1:100.000. Mit Genehmigung des Landesamtes für Landesvermessung und Datenverarbeitung Sachsen-Anhalt, Genehm.-Nr.: LVD/G/146/95. BGR (1998). Mit Genehmigung der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover (BGR) vom 05.06.2000. Deutscher Wetterdienst: Jahresmittelwerte für Niederschlag 1961 – 1990. Bearbeitung: Jens Dreyhaupt.

Für das Schwarzerdegebiet als Region intensiver landwirtschaftlicher Nutzung ergibt sich damit zum Erreichen des genannten Ziels der maximalen Auswaschung von 23 kg N/(ha-a) eine Begrenzung des Stickstoffsaldo auf höchstens 40,6 kg N/(ha-a). In einigen Gebieten Sachsens ist dieser Wert mit 50,6 kg N/(ha-a) etwas höher. Alle Bewirtschaftungsformen, deren Stickstoffsalden darüber liegen, würden zu höherer Stickstoffauswaschung führen. Die Einhaltung des Maximalwertes der Auswaschung wäre damit nicht gewährleistet.

6 Schlussbetrachtungen und Ausblick

6.1 Zusammenfassende Bewertung der Ergebnisse

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war die Entwicklung von Metamodellen (effektive Verfahren) zur Bestimmung der Modellzustandsgrößen Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration für meso- und makroskalige Anwendungen des Bodenprozessmodells CANDY. Anstelle der oft aufwendigen Prozesssimulation erlauben Metamodelle eine vereinfachte Berechnung von Systemzustandsgrößen (Zustandsindikatoren) aus leicht verfügbaren Modellgrößen (Antriebsindikatoren, effektive Modellgrößen). Als Konzept wurden in der vorliegenden Arbeit multiple lineare Regressionsfunktionen verwendet (Abschnitt 3.2.4), wie beispielsweise auch in RENGER et al. (1990) und PIEHLER (1990). Der Unterschied zu anderen Ansätzen besteht in der Struktur der Regressoren und Regressanden. Diese beschreiben relative Variationen von Zustandsindikatoren aus den relativen Änderungen ihrer Antriebsindikatoren (Abschnitt 3.2.4.1). Die Regressionskoeffizienten können hierbei als Sensitivitätsmaße interpretiert werden, sie zeigen die Stärke des Einflusses der einzelnen Regressoren an. Weiterhin werden in die Metamodelle zusätzliche Komponenten integriert:

- Fehlermaße res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K} , um den Anteil des Fehlers der Regressionsfunktionen abzuschätzen (Abschnitt 3.2.4.1) sowie
- Fehlerterme ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} , um die Wirkung der Texturheterogenität auf Mikroskala zu charakterisieren (Abschnitt 3.2.4.2).

Da die Fehlermaße und -terme von ihrer Struktur her ebenfalls relative Änderungen beschreiben, kann jedes Metamodell als Darstellung relativer Fehlerkomponenten interpretiert werden. Der Fehler eines Zustandsindikators (d. h. seine relative Änderung) ist somit beschreibbar als Summe der Fehleranteile seiner Einflußgrößen (Antriebsindikatoren, Fehlermaße und -terme).

Wegen ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} sowie res_{GWB} , res_{N_AUS} und res_{NO3_K} sollten bei Anwendung der Metamodelle keine festen Zahlenwerte für Zustandsindikatoren angegeben werden, sondern lediglich Intervalle. Diese beschreiben den Effekt der Fehlerkomponenten auf die Zustandsindikatoren. Bleiben die Fehlereinflüsse dennoch unberücksichtigt und werden mit den Metamodellen ‚exakte‘ Zahlenwerte berechnet, sollte ein entsprechender Hinweis erfolgen (vergleiche Anmerkung 6 in Abschnitt 3.2.4.2).

Die Grundlage zur Entwicklung von Metamodellen für ein Gebiet bildet eine Datenbasis. Diese besteht aus Szenarien und Simulationsergebnissen des Prozessmodells. Für die Ackerflächen eines zu behandelnden Gebietes ist zunächst mit CANDY (FRANKO et al. 1995a, FRANKO et al. 1995b) die Prozesssimulation von Kohlenstoff- und Stickstoffumsatz sowie der Bodentemperatur und des Bodenwassergehaltes auszuführen. Bei der Konstruktion der Szenarien wird die Heterogenität des Gebietes mit einem trifaktoriellen Versuchsplan beschrieben (Abschnitt 3.2.2). Dieser enthält verschiedene Stufen von Modellgrößen, welche die drei Klassen *Boden*, *Klima* und *Landnutzung* der CANDY-Eingangsdaten (Abschnitt 2.4, Abschnitt 2.5) charakterisieren. In der vorliegenden Arbeit wurden hierzu die mittlere Jahresniederschlagssumme, die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität sowie der mittlere jährliche Stickstoffsaldo und die Kohlenstoffproduktionsrate verwendet. Diese Größen beeinflussen im Prozessmodell die

Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration am stärksten (UTHEMANN 1996, siehe auch Abschnitt 2.5, Abschnitt 3.2.2 und Anhang A 8.3.2). Die Auswertung der Datenbasis zur Bestimmung von Antriebsindikatoren erfolgt mittels verschiedener statistischer Verfahren (Abschnitt 3.2.3). Mit Kenntnis aller Antriebsindikatoren können Metamodelle für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration entwickelt werden (Abschnitt 3.2.4.1). Die statistischen Methoden sind in HARTUNG (1993) und HARTUNG & ELPELT (1995) detailliert dargestellt. Durch Modifikationen der in dieser Arbeit angewendeten Methoden können bessere Resultate erzielt werden. So ist für weitergehende Untersuchungen zu prüfen, ob mit nichtlinearen Regressionsfunktionen der Zusammenhang von Zustands- und Antriebsindikatoren genauer beschrieben wird, als mit den hier verwendeten linearen Beziehungen. Auch für die Technik der Sensitivitätsanalyse (Abschnitt 3.2.2) bestehen Möglichkeiten zur Veränderung. Die Wechselwirkung von Parametern verschiedener Horizonte des Profils kann systematisch durch simultane Parametervariation untersucht werden, ebenso die Interaktion von Parametern eines Horizonts.

Die Heterogenität von Klima und Boden eines Gebietes kann durch die Einbeziehung weiterer repräsentativer Klimastationen und Profile besser beschrieben werden. Dies setzt allerdings die Verfügbarkeit entsprechender Daten voraus (siehe Abschnitt 4.1). Es wäre dann (exemplarisch für einige Gebiete) zu untersuchen, welche Verbesserungen der Metamodelle mit dieser Datenbasis erzielt werden. Durch eine Zerlegung des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes in kleinere mesoskalige Teilgebiete hätte die Heterogenität der makroskaligen Region besser beschrieben werden können.

Mit ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} wird die Wirkung der Texturheterogenität für das Bodenprozessmodell CANDY auf die drei Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration charakterisiert. Zur Behandlung der Texturheterogenität wurde für das Prozessmodell ein Profilgenerator als Simulationswerkzeug entwickelt (Abschnitt 3.1). Mit diesem kann für ein homogenes Bodenprofil der CANDY-Datenbank eine Menge von CANDY-Profilen (unabhängige Bodensäulen) erzeugt werden. Diese unterscheiden sich geringfügig in den bodenphysikalischen Parametern und beschreiben somit die Texturheterogenität des behandelten homogenen Profils. Neben dessen Eigenschaften finden im Profilgenerator charakteristische Merkmale des Standortes Berücksichtigung (Abschnitt 3.1.2). Der Zusammenhang von Bodengrößen wird mit Pedotransferfunktionen abgebildet (Abschnitt 3.1.2.2). Zum Quantifizieren eines Fehlerterms ε_{GWB} , ε_{N_AUS} bzw. ε_{NO3_K} ist jeweils eine Anwendung des Profilgenerators erforderlich (Abschnitt 3.2.4.2).

Die Methodik zur Bestimmung der Fehlerterme ist nicht ohne Kritik hinzunehmen. So bleiben die Untersuchungen auf jeweils ein Bodenprofil, eine Fruchtfolge und einen Wetterablauf beschränkt, die Variation von Ton- und Schluffgehalt wird generell mit zwei Masseprozent beschrieben. Durch Simulation weiterer Bodenprofile und Fruchtfolgen können Aussagen zu potentiellen Spannweiten von ε_{GWB} , ε_{N_AUS} und ε_{NO3_K} getroffen werden. Eine systematische Untersuchung verschiedener Variationsbreiten von Ton- und Schluffgehalt kann weitere Erkenntnisse über den Einfluss der Texturheterogenität auf eine Variation der untersuchten Zustandsindikatoren bei der CANDY-Prozesssimulation liefern.

Eine weitere Fehlerquelle sind die Pedotransferfunktionen. Die Resultate der Validierung des Profilgenerators haben gezeigt, dass bezüglich der Anwendbarkeit von Pedotransferfunktionen noch Verbesserungspotential besteht (Abschnitt 3.1.3, Anhang A 8.2). Denkbar ist hier eine Verfeinerung der verwendeten Funktionen oder die Entwicklung neuer Verfahren, was aber umfangreiche in-situ Untersuchungen erfordert. Sinnvoll erscheint auch die weitere Spezifizierung der Gültigkeitsbereiche der Pedotransferfunktionen, was durch Anwendung des Profilgenerators auf weitere Standorte realisiert werden kann.

In der vorliegenden Arbeit erfolgte keine Untersuchung der zeitlichen Variabilität von Kenngrößen von Boden, Klima und Landnutzung (vergleiche Abschnitt 2.5). Mit einer Berücksichtigung der Variabilität, beispielsweise in Form der Trennung der Jahresniederschlagssumme in Teilsommen für Sommer- und Winterhalbjahr, könnten weitere Verfeinerungen der Metamodelle erreicht werden. Allerdings wächst dann auch der Datenbedarf bei Anwendungen der Metamodelle. Dies kann die praktische Nutzbarkeit der Verfahren erschweren, beispielsweise in Gebieten, wie in Kapitel 5 behandelt.

Die exemplarische Entwicklung von Metamodellen erfolgte für die Gebiete Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittelsächsisches Lösshügelland, Mulde-Lösshügelland und Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet (Kapitel 4), welche zur Lössregion des Elbeeinzugsgebietes in Sachsen und Sachsen-Anhalt gehören.

Für die Grundwasserneubildung der vier Gebiete konnten die Jahresniederschlagssumme, die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität und der mittlere jährliche Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption als Antriebsindikatoren identifiziert werden.

Für die Stickstoffauswaschung sind die Modellgrößen mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo, jährliche Kohlenstoffreproduktionsrate und biologische Aktivität (wirksame Mineralisierungszeit) gefunden worden. Die Wirkung von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität auf Stickstoffauswaschung hat sich bei den untersuchten Gebieten als nicht signifikant erwiesen (Anhang A 8.4).

Die Nitratkonzentration ist im Nordsächsischen Platten- und Hügelland, im Mittelsächsischen Lösshügelland und im Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet abhängig von der Jahresniederschlagssumme, der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, dem mittleren jährlichen Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption und dem mittleren jährlichen Stickstoffsaldo. Im Mulde-Lösshügelland hat sich die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität für die Nitratkonzentration als nicht signifikant erwiesen (Tabelle A 8.56).

Anhand der Größe der Beträge der Regressionskoeffizienten kann festgestellt werden, dass die Grundwasserneubildung am stärksten von der Jahresniederschlagssumme beeinflusst wird, während Boden (Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität) und Bewirtschaftung (Bedeckungsgrad) eher untergeordnete Rollen spielen (Tabelle 28). Auffällig ist hier das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet, bei welchem die Sensitivität des Jahresniederschlages mehr als doppelt so groß ist wie in den übrigen drei Gebieten. Auch der Einfluss von Bedeckungsgrad und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ist hier wesentlich größer.

Der Zustandsindikator Stickstoffauswaschung wird am stärksten von Bewirtschaftungsveränderungen, ausgedrückt als relative Änderungen des mittleren jährlichen Stickstoffsaldo, beeinflusst (Tabelle 29). Im Hinblick auf die Verminderung von Stickstoffausträgen sei deshalb an dieser

Stelle auf die besondere Relevanz der Immission hingewiesen, welche im Rahmen dieser Arbeit generell mit 60 kg/(ha-a) angenommen wurde. Dieser Wert muss nach WEIGEL et al. (2000) zumindest für einige Messstellen als realistisch angesehen werden. Bei praktischen Maßnahmen (in den Bereichen Landwirtschaft, Industrie und Verkehr) zur Reduktion der Auswaschung sollte diese Größe als Stickstoffzufuhr in den Boden unbedingt Beachtung finden. Ein weiterer wichtiger Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung ist die wirksame Mineralisierungszeit, welche die Wirkung von Standorteigenschaften (Klima und Boden) auf die mikrobiellen Umsatzprozesse beschreibt. Die Kohlenstoffreproduktionsraten besitzen dagegen nur unwesentlichen Einfluss. Eine signifikante Wirkung von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität auf die Stickstoffauswaschung wurde durch die statistischen Tests nicht bestätigt (Tabellen A 8.42, A 8.49, A 8.56 und A 8.63).

Die Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration sind Jahresniederschlagssumme, Stickstoffsaldo und Bedeckungsgrad (Tabelle 30). In den Gebieten Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittelsächsisches Lösshügelland und Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet ist die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ein weiterer Antriebsindikator. Mit Ausnahme des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes ist die Wirkung von Boden (Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität) und Bedeckungsgrad allerdings sehr gering.

Bei den Wirkungen der Texturheterogenität sind Differenzen zwischen den Gebieten sichtbar. Während in den drei Gebieten der mittleren Mulde die Effekte weniger stark ausgeprägt sind, zeigt sich im Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebiet eine etwas stärkere Reaktion (Tabelle 24).

Die erreichten Bestimmtheitsmaße und Reststreuungen der Regressionsfunktionen (Tabelle 31) zeigen, dass mit den gewählten linearen Ansätzen insgesamt eine gute Abbildung der Zusammenhänge erreicht wurde.

Eine praktische Anwendung der Metamodelle setzt die regionale Verfügbarkeit der ermittelten Antriebsindikatoren voraus, welche auf einfache Weise beispielsweise aus Bodenkarten, Gemeinde- oder Anbaustatistiken ermittelt werden können. Für den Fall der Nichtverfügbarkeit eines Antriebsindikators kann für diesen mit Minimum und Maximum aus der Datenbasis eine Abschätzung seines größtmöglichen Einflusses auf den Zustandsindikator erfolgen (Tabellen 36, 37 und 38). Bei Verwendung dieser Werte im Metamodell wird allerdings das für den Zustandsindikator berechnete Intervall nochmals vergrößert. Weiterhin muss bei Anwendungen der Metamodelle beachtet werden, dass die Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration nie kleiner als Null werden können und dass als primäre Voraussetzung der Auswaschung überhaupt Sickerwasser anfällt. Wie bei allen Regressionsfunktionen ist zu berücksichtigen, dass die Metamodelle nur in den Bereichen ihrer Antriebsindikatoren (Regressoren) verwendet werden, für die sie auch entwickelt wurden (Tabellen 33, 34 und 35). Die Validierung der Metamodelle erfolgte an verschiedenen Datensätzen, wobei sowohl der Vergleich mit Ergebnissen der CANDY-Prozesssimulation (Abschnitt 5.1) als auch mit Resultaten eines anderen Berechnungsverfahrens realisiert wurde (Abschnitte 5.2). Trotz der insgesamt guten Resultate sind die Ergebnisse jedoch nicht immer zufriedenstellend. So werden in den Landkreisen des Parthegebietes die mit dem Prozessmodell simulierten Spannweiten der Zustandsindikatoren mit den Metamodellen zum Teil nicht getroffen (Abbildungen 26 bis 31).

Eine mögliche Ursache kann in der Zahlenbelegung der Antriebsindikatoren der Metamodelle zu finden sein. Treten hier Kombinationen auf, die mit dem Prozessmodell nicht simuliert wurden, kann dies zu abweichenden Minima und Maxima der Zustandsindikatoren führen.

Beispiele für konkrete praktische Anwendungen der Metamodelle werden in den Abschnitten 5.3.1 und 5.3.2 demonstriert. Wegen ihrer leichten Handhabbarkeit können weitere Anwendungen der parametrisierten Metamodelle auf einfache Weise erfolgen.

6.2 Ausblick und Forschungsbedarf

Eine Anwendung des Verfahrens zur Entwicklung von Metamodellen für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration auf weitere Gebiete ist ohne Probleme möglich. Voraussetzungen zur Konstruktion des Versuchsplans ist die Verfügbarkeit einer Bodenkarte der zu behandelnden Region sowie entsprechender Wetterdatensätze einer Referenzklimastation. Ebenso müssen agrarstatistische Daten als Grundlage der Erstellung von Fruchtfolgen vorliegen. Mit den in dieser Arbeit bereitgestellten Methoden können dann aus der Datenbasis Metamodelle zur vereinfachten Bestimmung der drei Zustandsindikatoren hergeleitet werden. Denkbar wäre auch die Entwicklung von Metamodellen für weitere Zustandsindikatoren des Prozessmodells. Zur Realisierung müsste für jeden weiteren Zustandsindikator eine Analyse der bodenphysikalischen Parameter erfolgen, um die für ihn sensitiven Bodenparameter des Prozessmodells herauszufinden. Ausgehend davon ist die Wahl der repräsentativen Profile zur Beschreibung der Standortheterogenität nach neuen Kriterien vorzunehmen. Dieses Problem betrifft auch die Abbildung der Klimaheterogenität. Zur Entwicklung von Metamodellen für weitere Zustandsindikatoren sind Untersuchungen der Wirkungen von Niederschlag, Lufttemperatur und Globalstrahlung unerlässlich. Die Klimaheterogenität ist dann entsprechend der Ergebnisse zu beschreiben. Erweisen sich zwei oder gar alle drei der von CANDY benötigten Klimatelemente als sensitive Größen, muss der Versuchsplan erweitert werden. Er erhält dann, neben Standortheterogenität und Landnutzung, entsprechend der Anzahl der sensitiven Klimatelemente noch maximal drei Dimensionen. Hierdurch kann sich jedoch der Arbeitsaufwand für die Prozesssimulationen erheblich vergrößern.

Als Forschungsbedarf ist weiterhin die Untersuchung des Einflusses der zeitlichen Variabilität von Antriebsindikatoren auf Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration zu sehen. Auch bei der Entwicklung von Metamodellen für weitere Zustandsindikatoren des Prozessmodells könnten mit der Berücksichtigung der zeitlichen Variabilität Verfeinerungen der Verfahren erreicht werden.

Offen bleibt die Frage, welche Güte mit den Metamodellen im Vergleich zur Prozesssimulation erreicht wird. Es liegt in der Entscheidung des Anwenders, ob die Genauigkeit der effektiven Verfahren zur Lösung eines speziellen Problems genügt.

7 Literaturverzeichnis

- ABRAHAM, J. (1997): *Schaffung eines Überwachungssystems für den Stickstoff im Boden unter Praxisbedingungen*. Forschungsbericht Nr. 11. Halle.
- ADDISCOTT, T. M., WHITMORE, P. & POWLSON, D. S. (1991): *Farming, Fertilizers and the Nitrate Problem*. C. A. B. International Wallingford, UK.
- AG BODEN (1994): *Bodenkundliche Kartieranleitung (Kurzbezeichnung KA 4)*. Herausgegeben von der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe und den Geologischen Landesämtern in der Bundesrepublik Deutschland, 4. Auflage. Hannover.
- ATTERBERG, A. (1908): Mitt. Landw. Vers. Stat. 69, 93 Berlin.
- BASTIAN, O. & SCHREIBER, K. F. (1994): *Analyse und ökologische Bewertung der Landschaft*. Fischer – Verlag Jena/ Stuttgart.
- BAUCH, H. (1987): *Intervallmathematik: Theorie und Anwendungen*. BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft Leipzig.
- BAUER, A. (1974): Influence of soil organic matter on bulk density and available water capacity of soils. *North Dakota Farm Res.*, bimonthly. Bull. Fargo 31 (5). S. 44-51.
- BECHER, H. H. (1998): *Variabilität ausgewählter bodenphysikalischer Parameter und ihre Bedeutung für die Modellierung von Stoffflüssen*. Mitteilg. Dtsch. Bodenkundl. Gesellsch. 87, S. 401-404.
- BECKER, A. (1995): *Problems and Progress in Macroscale Hydrological*. In: Feddes, R. A. (Hrsg.) (1995).
- BOSSEL, H. (1994): *Modellbildung und Simulation: Konzepte, Verfahren und Modelle zum Verhalten dynamischer Systeme*. Vieweg Verlag Braunschweig/ Wiesbaden.
- BOUMA, J. (1989): Using soil survey data for quantitative land evaluation. *Advanced Soil Science* 9, S. 177-213.
- BRONSTERT, A., KRYSANOVA, V., SCHRÖDER, A., BECKER, A. & BORK, H.-R. (Hrsg.) (1997): *Modellierung des Wasser und Stofftransports in großen Einzugsgebieten - Zusammenstellung der Beiträge des Workshops am 15. Dezember 1997 in Potsdam*. PIK Report No. 43. Potsdam.

- BROOKS, R. H. & COREY, A. T. (1964): *Hydraulic properties of porous media*. Hydrol. Pap. 3. Colorado State Univ. Fort Collins Colorado.
- BUNDESANSTALT FÜR GEOWISSENSCHAFTEN UND ROHSTOFFE (BGR) (1998): *Bodenübersichtskarte der Bundesrepublik Deutschland 1:1000000, digitale Version (BÜK 1000dig)*. – Hannover (Digitales Archiv FISBo BGR).
- BURNS, I. G. (1974): A model for predicting the redistribution of salts applied to fallow soil after excess rainfall or evaporation. *Journal of Soil Sci.* 25, S. 165-174.
- CAMPBELL, G. S. (1985): *Soil physics with BASIC*. ELSEVIER Amsterdam – Oxford – New York – Tokyo.
- CHANEY, K. (1990): Effect of nitrogen fertilizers rate on soil nitrogen content after harvesting winter wheat. *Journal of Agricultural Science* 114, S. 171-176.
- COOKE, G. W. (1977): *The roles of organic manures and organic matter in managing soils for higher crop yields – a review of the experimental evidence*. Proceed. of the Internat. Seminar on Soil Environment and Fertility Management in intensive Agriculture, Tokyo 1977, S. 53-64.
- COSBY, B. J., HORNBERGER, G. M., CLAPP, R. B. & GINN, T. R. (1984): A statistical exploration of the relationships of soil moisture characteristics to the physical properties of soils. *Water Resour. Res.* 20, S. 682-690.
- DIELS, J. (1994): *A validation procedure accounting for model input uncertainty: methodology and application to the SWATRE model*. Diss., Biologische Wettenschappen, Leuven, Niederlande.
- DIEKKRÜGER, B. (1992): *Standort- und Gebietsmodelle zur Simulation der Wasserbewegung in Agrarökosystemen*. Landschaftsökologie und Umweltforschung, 19, Inst. f. Geogr. und Geoökol., TU Braunschweig.
- DIEKKRÜGER, B., BORMANN, H., RENSCHLER, CH. & RICHTER, O. (1997): *Regionale Vorhersage der Wasserflüsse unter Berücksichtigung der skalenabhängigen Informationsdichte*. In: Bronstert, A. et al. (Hrsg.) (1997).
- DUBSKY, G., HÜLSBERGEN, K.-J. & DIEPENBROCK, W. (1997): *REPRO- Stoff- und Energiebilanzierung landwirtschaftlicher Betriebe*. Workshop der Gesellschaft für Informatik, Osnabrück.
- DYCK, S. & PESCHKE, G. (1995): *Grundlagen der Hydrologie*. Verlag für Bauwesen Berlin.

- FEDERAL ENVIRONMENT AGENCY AUSTRIA (Hrsg.) (1997): *Stoffbilanzierung in der Landwirtschaft. Ein Instrument für den Umweltschutz?*. Tagungsband 20.
- FEDDES, R. A. (Hrsg.) (1995): *Space and Time Scale Variability and Interdependencies in Hydrological Processes*. Cambridge University Press, Cambridge UK.
- FRANKO, U. (1989): *C- und N-Dynamik beim Umsatz organischer Substanzen im Boden. Dissertation B. Akad. Landw.- Wiss. DDR, Berlin.*
- FRANKO, U. (1997): Modellierung des Umsatzes der organischen Bodensubstanz. *Arch. Acker- u. Pflanzenbau u. Bodenk.* 41 (6), S. 527-547.
- FRANKO, U. & OELSCHLÄGEL, B. (1995): Einfluß von Klima und Textur auf biologische Aktivität beim Umsatz der organischen Bodensubstanz. *Arch. Acker- u. Pflanzenbau u. Bodenk.* 39, S. 155-163.
- FRANKO, U., OELSCHLÄGEL, B. & SCHENK, S. (1995a): *Modellierung von Prozessen in Agrarlandschaften zur Untersuchung der Auswirkungen möglicher Klimaveränderungen*. UFZ-Bericht Nr. 3. Leipzig.
- FRANKO, U., OELSCHLÄGEL, B. & SCHENK, S. (1995b): Simulation of temperature-, water- and nitrogen dynamics using the model CANDY. *Ecol. Modell.* 81, S. 213-222.
- FRANKO, U., SCHENK, S., DEBEVC, D., PETERSOHN, P. & SCHRAMM, G. (1997): *Einfluß von Standort und Bewirtschaftung auf den N-Austrag aus Agrarökosystemen*. UFZ-Bericht Nr. 10. Leipzig.
- FRANKO, U. (1998a): *Bestimmung des Feinanteilgehaltes in Abhängigkeit von Ton und Schluffgehalt des Feinbodens*. Mündliche Mitteilung vom 03.07.1998, Halle.
- FRANKO, U. (1998b): *Bestimmung des Versickerungsparameters LAMBDA in Abhängigkeit vom Feinanteilgehalt*. Mündliche Mitteilung vom 03.07.1998, Halle.
- FRANKO, U. & SCHENK, S. (2000): *Einfluß der Bewirtschaftung auf den C-N-Kreislauf im Boden und den N-Austrag in die Umwelt*. UFZ-Bericht Nr. 28. Leipzig.
- FRANKO, U. & SCHENK, S. (2001): *Modeling of carbon dynamics in a rural area of central Germany*. In: Rees, R. M. et al. (2001), S. 60-66.
- FRANKO, U., SCHMIDT, T. & VOLK, M. (2001): *Modellierung des Einflusses von Landnutzungsänderungen auf die Nitratkonzentration im Sickerwasser*. In: Horsch H. et al. (Hrsg.) (2001), S. 165-186.

- FREDE, H.-G. & DABBERT, S. (1998): *Handbuch zum Gewässerschutz in der Landwirtschaft*. Landsberg.
- FREYTAG, H. E. & LÜTTICH, M. (1985): Zum Einfluß der Bodenfeuchte auf die Bodenatmung unter Einbeziehung der Trockenraumdichte. *Arch. Acker- u. Pflanzenbau u. Bodenkd.* 29, S. 485-492.
- GAUL, A. & PFEIFFER, D. (eds.) (1995): *From Data to Knowledge: Theoretical and Practical Aspects of Classification, Data Analysis and Knowledge Organization*. Springer Verlag Berlin.
- GEBEL, M. (2001): Quantifizierung von Stickstoffeinträgen in Flussgebieten auf der Mesoskala mit dem Modell N-Bilanz. *Wasser & Boden*, 10, S. 21-24. Berlin.
- GELLERT, W., KÜSTNER, H., HELWICH, M. & KÄSTNER, H. (1983): *Kleine Enzyklopädie Mathematik*. Bibliographisches Institut Leipzig.
- GLUGLA, G. (1969): Berechnungsverfahren zur Ermittlung des aktuellen Wassergehaltes und Gravitationswasserabflusses im Boden. *A.-Thaer-Archiv* 13, S. 371-376.
- GLUGLA, G. & FÜRTIG, G. (1997): *Dokumentation zur Anwendung des Rechenprogrammes ABIMO*. Bundesanstalt für Gewässerkunde. Berlin.
- GÖBEL, M.-O. (2000): *Einsatzmöglichkeiten eines numerischen Simulationsmodells zur räumlich differenzierenden Beschreibung und Quantifizierung der Bodenwasserbewegung*. Diplomarbeit, Universität Hannover.
- GÖTTLEIN, A. (1995): *Mikroskalige Variabilität von Bodenlösungskonzentrationen und Saugspannungen in einem sauren Waldboden*. *Mitteilg. Dtsch. Bodenkundl. Gesellsch.* 76, S. 25-28.
- HAFERKORN, U. (2000): *Größen des Wasserhaushaltes verschiedener Böden unter landwirtschaftlicher Nutzung im klimatischen Grenzraum des Mitteldeutschen Trockengebietes: Ergebnisse der Lysimeterstation Brandis*. Dissertationsarbeit, Universität Göttingen.
- HARTGE, K. H. & HORN, R. (1991): *Einführung in die Bodenphysik*. Ferdinand Enke - Verlag Stuttgart.
- HARTUNG, J. (1993): *Statistik. Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik*. R. Oldenbourg Verlag GmbH München.

- HARTUNG, J. & ELPELT, B. (1995): *Multivariate Statistik. Lehr- und Handbuch der angewandten Statistik*. R. Oldenbourg Verlag GmbH München.
- HEINRICH, D. & HERGT, M. (1998): *DTV Atlas zur Ökologie*. Dt. Taschenbuch – Verlag München.
- HEINRICH, J., HÜWE, R. & GERSONDE, J. (1995): *Untersuchungen zu den Auswirkungen ordnungspolitischer Maßnahmen zur Entlastung der Agrarmärkte auf die Entwicklung landwirtschaftlicher Unternehmen in den neuen Bundesländern. Vorschlag für die Einteilung des Landes Sachsen-Anhalt in Agrarregionen*. Forschungsauftrag, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Landwirtschaftliche Fakultät. Halle.
- HILLEL, D. (1980): *Fundamentals of Soil Physics*. Acad. Press, New York.
- HILLEL, D. (1998): *Environmental Soil Physics*. Acad. Press, San Diego.
- HIRT, U. (2002): *Berechnungsverfahren und Simulationsergebnisse von Stickstoffausträgen und Grundwasserneubildungsraten des Gebietes der mittleren Mulde*. Schriftliche Mitteilung vom 04.03.2002. Halle.
- HORSCH, H., RING, I. & HERZOG, F. (Hrsg.) (2001): *Nachhaltige Wasserbewirtschaftung und Landnutzung – Methoden und Instrumente der Entscheidungsfindung und Umsetzung*. Metropolis-Verlag Marburg.
- HÜLSBERGEN, K.-J. (1997): *Analyse und Bewertung von Stoff- und Energieflüssen auf betrieblicher Ebene mit dem Computermodell REPRO*. In: Federal Environment Agency Austria (Hrsg.) (1997), S. 13-39.
- HUWE, B. (1992): *Deterministische und stochastische Ansätze zur Modellierung des Stickstoffhaushalts landwirtschaftlich genutzter Flächen auf unterschiedlichem Skalenniveau*. Mitteilungen/ Institut für Wasserbau Universität Stuttgart, Heft 77. Stuttgart.
- HUWE, B., GÖLZ-HUWE, H. & EBERHARDT, J. (1994): *Parameterschätzungen und Modellrechnungen zum Gebietswasserhaushalt kleiner, heterogener Einzugsgebiete mit einfachen Modellkonzepten*. Mitteilg. Dtsch. Bodenkundl. Gesellsch. 74, S. 273-276.
- ISERMANN, K. (1990): *Die Stickstoff- und Phosphoreinträge in die Oberflächengewässer der BRD durch verschiedene Wirtschaftsbereiche unter besonderer Berücksichtigung der N- und P-Bilanz der Landwirtschaft und der Humanernährung*. Schriftenreihe d. Akad. f. Tiergesundheit, Bd.1, S. 258-416.

- ISERMANN, K. & ISERMANN, R. (1995): *Die Anteile des N-Austrages mit dem Sickerwasser aus der landwirtschaftlich genutzten Fläche über die (un)gesättigte Zone in die Oberflächen-gewässer Westeuropas/EU und Deutschlands an der jeweiligen N-Bilanz der Landwirt-schaft (1987/92)*. Bericht über die 5. Gumpensteiner Lysimetertagung „Stofftransport und Stoffbilanz in der ungesättigten Zone“, BAL Gumpenstein 25./26.April 1995. Gumpen-stein.
- JOHANSEN, U. & UTERMANN, J. (1997): *Sensitivitätsanalysen von ordinal skalierten Auswer-tungsmethoden in bodenkundlichen Fachinformationssystemen*. Mitteilg. Dtsch. Boden-kundl. Gesellsch. 85/3, S. 1167-1170.
- KARTSCHALL, T. (1986): *Simulationsmodell der Bodenstickstoffdynamik*. Dissertation A. Akad. Landw.- Wiss. DDR, Berlin.
- KÖRSCHENS, M. (1980): *Die Abhängigkeit der organischen Bodensubstanz von Standortfaktoren und acker- und pflanzenbaulichen Maßnahmen, ihre Beziehungen zu Bodeneigenschaften und Ertrag sowie Ableitung von ersten Bodenfruchtbarkeitskennziffern für den Gehalt des Bodens an organischer Substanz*. Dissertation B, FZB Müncheberg.
- KÖRSCHENS, M. (1990): *Dauerfeldversuche - Übersicht, Entwicklung und Ergebnisse von Feld-versuchen mit mehr als 20 Jahren Versuchsdauer*. Berlin.
- KÖRSCHENS, M. (1998): *Feinbodentextur und Horizontfolge der Löss-Schwarzerde am Ver-suchsstandort Bad Lauchstädt*. Mündliche Mitteilung vom 03.07.1998.
- KÖRSCHENS, M. (Hrsg.) (2000): *IOSDV Internationale organische Stickstoffdauerdüngungsver-suche*. UFZ-Bericht Nr. 15. Leipzig.
- KOITZSCH, R. & GÜNTHER, R. (1990): *Modell zur ganzjährigen Simulation der Verdunstung und der Bodenfeuchte landwirtschaftlicher Nutzflächen mit und ohne Bewuchs*. *Arch. Acker- u. Pflanzenbau u. Bodenk.* 12 (34), S. 803-810.
- KREISCHE, E. & KÖRSCHENS, F. (1996): *Untersuchungen zur Dynamik des Wasserhaushaltes und des Temperaturregimes in Böden des Ökohofes Seeben*. Tagungsband „Langzeitef-fekte des ökologischen Landbaus auf Fauna, Flora und Boden“. Halle.
- KRÖNERT, R. (2000): *Repräsentative Klimastationen im Einzugsgebiet der Mittleren Mulde*. Schriftliche Mitteilung vom 21.11.2000. Halle.

- KRÖNERT, R., FRANKO, U., HAFERKORN, U. & HÜLSBERGEN, K.-J. (2002): *Schlußbericht des Projektes „Gebietswasserhaushalt und Stoffhaushalt in der Lössregion des Elbegebietes als Grundlage für die Durchsetzung einer nachhaltigen Landnutzung“ (BMBF FKZ: 0339586). (in Vorbereitung).*
- KUHN, M. (1998): *Untersuchungen zur Auswirkung der Variabilität von Bodeneigenschaften auf die Wasserflüsse - Feldversuch und Simulation.* Landschaftsökologie und Umweltforschung, 31, Inst. f. Geogr. und Geoökol., TU Braunschweig.
- KUNDLER, P. (1989): *Erhöhung der Bodenfruchtbarkeit.* Deutscher Landwirtschaftsverlag Berlin.
- KUNTZE, H., ROESCHMANN, G. & SCHWERTDFEGER, G. (1994): *Bodenkunde.* Verlag Eugen Ulmer Stuttgart.
- KUTILEK, M. & NIELSEN, D. R. (1994): *Soil Hydrology. Geoecology textbook.* Catena Verlag Cremlingen-Destedt.
- LAROCQUE, M. & BANTON, O. (1994): Determining parameter precision for modeling nitrate leaching: inorganic fertilization in nordic climates. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 58, S. 396-400.
- LANDESAMT FÜR LANDESVERMESSUNG UND DATENVERARBEITUNG SACHSEN-ANHALT (1995): *Administrative Gliederung von Sachsen-Anhalt.*
- LANDESVERMESSUNGSAMT SACHSEN/ INSTITUT FÜR LÄNDERKUNDE (1993): *Administrative Gliederung von Sachsen.*
- LESER, H. (1991): *Landschaftsökologie.* Verlag Eugen Ulmer Stuttgart.
- LIEBEROTH, I. (1982): *Bodenkunde.* Deutscher Landwirtschaftsverlag Berlin.
- LILJEQUIST, G. H. & CEHAK, K. (1984): *Allgemeine Meteorologie.* Vieweg Verlag Braunschweig/ Wiesbaden.
- MANNFELD, K. & RICHTER, H. (1995): *Naturräume in Sachsen.* Forschungen zur deutschen Landeskunde, Band 238. Trier.
- MCCUEN, R. H. (1973): The role of sensitivity analysis in hydrologic modeling. *J. Hydrol. Amsterdam* 18, S. 37-53.

- MCKAY, M. D., BECKMANN, R. J. & CONOEVEER, W. J. (1979): A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics* 2 (21), S. 239-245.
- MERTENS, M. (2001): *Die Anwendung der Fuzzy-Set-Theorie auf die Modellierung von Stickstoffbilanzen im Weißenstädter Becken*. Bayreuther Forum Ökologie 85. Bayreuth.
- MERTENS, M. & HUWE, B. (1999): *Die Verwendung von FUZZY-Zahlen für die Modellierung von N-Bilanzen*. *Mitteilg. Dtsch. Bodenkundl. Gesellsch.* 91/1, S. 219-222.
- NEMES, A., WÖSTEN, J. H. M., LILLY, A. & OUDE VOSHAAR, J. H. (1999): Evaluation of different procedures to interpolate the cumulative particle-size distribution to achieve compatibility of soil databases. *Geoderma*, 90, S. 187-202.
- NEUMAIER, A. (1990): *Interval Methods for Systems of Equations*. Cambridge University Press, Cambridge UK.
- NEUMEISTER, H. (1999): Heterogenität – Grundeigenschaft der räumlichen Differenzierung in der Landschaft. *Petermanns Geogr. Mittlg., Ergänzungsheft* 294, S. 81-106.
- NEUMEISTER, H. & REGBER, R. (2000): Ökosystemabhängige Datengewinnung von Boden-pH-Werten und ihre kartographische Abbildung. *Geoökodynamik*, 21, S. 17-39.
- NIESCHULZ, K. P., RICHTER, O., DIEKKRÜGER, B. & LÜCKE, A. (1995): *A New Approach of Regionalisation by Classifying Hydrological Quantities*. In: Gaul, A. & Pfeiffer, D. (eds.) (1995), S. 262-269.
- NIESCHULZ, K. P. (1997): *Mathematisch-bodenkundliche Regionalisierung des Bodenwasserhaushaltes*. *Landschaftsökologie und Umweltforschung*, 27, Inst. f. Geogr. und Geoökol., TU Braunschweig.
- OELKE, E. (1997): *Sachsen-Anhalt Fakten – Zahlen - Übersichten*. Justus Perthes Verlag Gotha.
- OELSCHLÄGEL, B. (1992): *Zur Anwendung des Wettergenerators bei der Modellierung von Bodenprozessen*. In: *Tagungsbericht zum Symposium Dauerfeldversuche und Nährstoffdynamik*. Leipzig, S. 131-140.
- PACHEPSKY, Y. A., TIMLIN D. & VARALLYAY, G. (1996): Artificial neural networks to estimate soil water retention from easily measurable data. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 60, S. 727-733.

- PIEHLER, H. (1990): *Modellkonzept zur Gefährdungsabschätzung der Trinkwassergewinnung in Wasserschutzgebieten durch Nitrat: eine Fallstudie am Beispiel des Wasserwerks Holdorf*. Dissertationsarbeit, Universität Osnabrück.
- PUCKETT, W. E., DANE, J. H. & HAJEK, B. F. (1985): Physical and mineralogical data to determine soil hydraulic properties. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 49, S. 831-836.
- RAMSBECK-ULLMANN, M. (1999): Gebietsbezogene Modellierung des Wasser- und Stofftransports in der ungesättigten Zone des Parthe – Gebietes. (unveröffentlicht).
- RAWLS, W. J. & BRAKENSIEK, D. L. (1985): *Prediction of Soil Water Properties for Hydrologic Modelling. Proceedings of the symposium watershed management in the eighties*. American Society of Civil Engineers, S. 293-299.
- REES, R. M., BALL, B. C., CAMPBELL, C. D. & WATSON, C. A. (2001): *Sustainable management of Soil Organic Matter*. C. A. B. International, Wallingford UK.
- RENGER, M., KÖNIG, R., SWARTJES, S., WESSOLEK, G., FAHRENHORST, C. & KASCHANIAN, B. (1990): *Modelle zur Ermittlung und Bewertung von Wasserhaushalt, Stoffdynamik und Schadstoffbelastbarkeit in Abhängigkeit von Klima, Bodengemeinschaften und -nutzung*. – Endbericht zum BMFT-Projekt 0374343, Universität Berlin, Inst. f. Ökologie FB Bodenkunde.
- RICHARDS, L. A. (1931): *Capillary conduction of liquids through porous mediums*. *Physics* 1, S. 318-333.
- RICHTER, H. (Hrsg.): *Naturräume der DDR*, Karte 1:1 000 000. Leipzig.
- RICHTER, O., SÖNDGERATH, D. & DIEKKRÜGER, B. (HRSG.) (1996): *Abschlußbericht des Sonderforschungsbereiches 179*. Landschaftsökologie und Umweltforschung, 24, Inst. f. Geogr. und Geoökol., TU Braunschweig.
- RITCHIE, J. T., GODWIN, D. C. & OTTE-NACKE, S. (1986): *CERES-Wheat: A simulation model of wheat growth and development, CERES Modellbeschreibung*. Michigan State Univ., Dep. Crop & Soil Sci..
- ROSCHKE, O. (2001): *Feldbodenkundliche Untersuchungen von Böden ackerbaulich genutzter Flächen bei Torgau. Ergebnisbericht. Endbericht zum Werkvertrag 990709*. Halle.
- RÜHLMANN, J. (1998): *Calculation of particle density of soils based on the mixture relation of organic and mineral soil components*. (unveröffentlicht).

- SACHS, L. (1997): *Angewandte Statistik*. Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York.
- SALZMANN, T. (1993): *Ionenverlagerung in einem Sandboden im Feldmaßstab-Modell und Experiment*. Dissertationsarbeit, TU Braunschweig.
- Schaap, M. G., LEIJ, F. J. & VAN GENUCHTEN, M. T. (1998): Neural network analysis for hierarchical prediction of soil hydraulic properties. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 62 (4), S. 847-855.
- SCHAEFFER, F. & SCHACHTSCHABEL, P. (1992): *Lehrbuch der Bodenkunde*. Ferdinand Enke Verlag Stuttgart.
- SCHENK, S. & FRANKO, U. (2000): *Einfluß der Bewirtschaftung auf den C-N-Kreislauf im Boden und den N-Austrag in die Umwelt*. UFZ-Bericht Nr. 28. Leipzig.
- SCHÖNWIESE, CH.-D. (1994): *Klimatologie*. Verlag Eugen Ulmer Stuttgart.
- SCHMIDT, R. & DIEMANN, R. (1991): *Erläuterungen zur Mittelmaßstäbigen Landwirtschaftlichen Standortkartierung (MMK)*. Müncheberg, Eberswalde.
- SCHULZ, K. & HUWE, B. (1997): Water flow modeling in the unsaturated zone with imprecise parameters using a fuzzy approach. *J. of Hydrol.* 201, S. 211-229.
- SCHULZ, K. (1997): *Modellierung von Unsicherheiten bodenphysikalischer und hydrochemischer Prozesse mit Hilfe der Fuzzy-Set-Theorie – Theorie und Anwendungen*. SHAKER Verlag Aachen.
- SEEGER, J., MEISSNER, R. & FRANKO, U. (2001): *Beschreibung des Wasser- und Stoffhaushaltes im Kleineinzugsgebiet "Schaugraben" auf der Grundlage von Lysimeterdaten und mittels Modellsimulation*. Bericht über die 9. Lysimetertagung "Gebietsbilanzen bei unterschiedlicher Landnutzung", Gumpenstein, 24.-25.04.2001. Bundesanstalt für alpenländische Landwirtschaft, Irdning, S. 229-230.
- SMITH, R. E. & DIEKKRÜGER, B. (1996): Effective soil water characteristics and ensemble soil water profiles in heterogeneous soils. *J. Geoph. Research* 32, S. 1993-2002.
- STOCK A. (1995): *Untersuchungen der räumlichen Variabilität des Stofftransportes in der ungesättigten Bodenzone*. Landschaftsökologie und Umweltforschung, 23, Inst. f. Geogr. und Geoökol., TU Braunschweig.
- SUCKOW, F. (1986): *Ein Modell zur Berechnung der Bodentemperatur unter Brache und unter Pflanzenbestand*. Dissertation A. Akad. Landw. - Wiss., Berlin.

- TAMARI, S., WÖSTEN, J. H. M. & RUIZ-SUAREZ, J. C. (1996): Testing an artificial neural network for predicting soil hydraulic conductivity. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 60, S. 1732-1741.
- THOMAS, M. (1968/69): *Einzugsgebiet der Parthe – Karte der Bodenformen 1:25000*.
- TIETJE, O. (1993): *Räumliche Variabilität bei der Modellierung der Bodenwasserbewegung in der ungesättigten Zone*. Landschaftsökologie und Umweltforschung, 21, Inst. f. Geogr. und Geoökol., TU Braunschweig.
- TIETJE, O. & TAPKENHINRICHS, M. (1993): Evaluation of pedotransferfunctions. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 57 (4), S. 1088-1095.
- TIETJE, O. & HENNIGS, V. (1993): Bewertung von Pedotransferfunktionen zur Schätzung der Wasserspannungskurve. *Z. Pflanzenernähr. Bodenk.* 156, S. 447-455.
- TIETJEN, C. & SAUERLANDT W. (1974): Beziehungen zwischen Humusgehalt und Volumengewicht des Ackerbodens nach Anwendung von Stalldung, Kompost und Stroh. *Landwirtsch. Forsch., Frankfurt/Main, S.-H.* 30/II, S. 131-136.
- UMWELTBUNDESAMT (Hrsg.) (1994): *Stoffliche Belastung der Gewässer durch die Landwirtschaft und Maßnahmen zu ihrer Verringerung*, Bd. 2. Berlin.
- UTERMANN, J., JOHANNSEN, U. & HÖCKESFELD, M. (1997): *Realisationskonzept für die bodenschutzrelevante Datenhaltung auf Bundesebene - Inhaltliche Vorschläge und fachliche Vorstellungen zur Datenerfassung und Auswertung*. Endbericht UBA-F&E-Vorhaben 107 06 001/15. Hannover.
- UTHEMANN, H. (1996): *Möglichkeiten zur Einbeziehung des Simulationsmodells CANDY in betriebliche Entscheidungsprozesse des Düngungsmanagements*. Diplomarbeit (unveröffentlicht), Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg.
- VAN GENUCHTEN, M. T. (1980): A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44, S. 892-898.
- VERECKEN, H., MAES, J., FEYEN, J. & DARIUS, P. (1989): Estimating the soil moisture retention characteristic from texture, bulk density and carbon content. *Soil Sci.* 148, S. 389-403.
- WALDSCHMIDT, U. (1998): *Untersuchungsergebnisse von Bodenparametern für die Bodenform Löss-Schwarzerde des Standortes Bad Lauchstädt* (unveröffentlicht).

- WEIGEL, A., RUSSOW, R. & KÖRSCHENS, M. (2000): Quantification of airborne N-input in long-term field experiments and its validation through measurements using ^{15}N isotope dilution. *Z. Pflanzenernähr. Bodenkd.* 163, S. 261-265.
- WÖSTEN, J. H. M., FINKE, P. A. & JANSEN, M. J. W. (1995): Comparison of class and continuous pedotransfer functions to generate soil hydraulic characteristics. *Geoderma*, 66, S. 227-237.
- YOUNG, F. J., HAMMER, R. D. & LARSEN, D. (1999): Frequency distributions of soil properties on a loess-mantled Missouri watershed. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 63, S. 178-185.
- ZACHARIAS, S. & BOHNE, K. (1997): Replacing the field capacity concept by an internal drainage approach – a method for homogeneous soil profiles. *Sci. of Soil* 2.
- ZIELINSKI, R. (1978): *Erzeugung von Zufallszahlen: Programmierung und Test auf Digitalrechnern*. Fachbuchverlag Leipzig.

8 Anhang

A 8.1	Ergänzungen zu Kapitel 2	129
A 8.2	Validierung des Profilgenerators	134
A 8.3	Ergänzungen zu Kapitel 3	151
A 8.3.1	Ergänzungen zu Abschnitt 3.1	151
A 8.3.2	Ergänzungen zu Abschnitt 3.2	152
A 8.4	Ergänzungen zu Kapitel 4	157
A 8.4.1	Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile	157
A 8.4.2	Kennzahlen der Datenbasen, Tests zur Auswertung und Reduktionstests	159
A 8.4.2.1	Nordsächsisches Platten- und Hügelland	161
A 8.4.2.2	Mittelsächsisches Lösshügelland	169
A 8.4.2.3	Mulde-Lösshügelland	177
A 8.4.2.4	Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet	185
A 8.4.3	Zusammenhang von Stickstoffsaldo und –auswaschung	193
A 8.5	Ergänzungen zu Kapitel 5	195

A 8.1 Ergänzungen zu Kapitel 2

Im Folgenden werden zusätzliche Informationen zum Bodenprozessmodell CANDY gegeben.

Ergänzungen zum *Pflanzenmodul*.

Bei der Modellierung des Pflanzenwachstums sind Pflanzenart und Entwicklungsstadium berücksichtigt. Der Verlauf der Stickstoffaufnahme durch die Pflanze wird als S-förmige Kurve dargestellt, wodurch in der Hauptvegetationszeit nahezu gleichförmige Stickstoffaufnahme realisiert ist:

$$N_{PFL}(t) = 0,5 \cdot \left(1 + \frac{\tanh\left(\frac{2 \cdot t}{Vegdau - 1} \cdot St\right)}{\tanh(St)} \right) \cdot N_{ERT} \quad (8.1)$$

mit

$N_{PFL}(t)$ in Pflanzenbestand aufgenommene Stickstoffmenge zum Zeitpunkt t (in kg N/ha),
 t Zeitpunkt (in d),
 $Vegdau$ pflanzenspezifische Vegetationsdauer (in d),
 St Steilheit der Entzugskurve,
 N_{ERT} Entzugsziel zum Erntezeitpunkt (in kg N/ha).

Die Bestimmung des Parameter St in Abhängigkeit von der Fruchtart ist in FRANKO (1989) beschrieben. Der Entzug wird aus der zum Zeitpunkt t insgesamt durchwurzelten Bodensäule realisiert, die Bestimmung der aktuell erreichten Durchwurzelungstiefe erfolgt durch lineare Interpolation aus der fruchtartspezifischen maximalen Wurzeltiefe. Bis zu deren Erreichen ist die Wurzelentwicklung als gleichförmig verlaufender Prozess dargestellt, danach bleibt die von den Pflanzenwurzeln erfasste Bodenschicht bis zur Ernte konstant. Der Einfluss der Bodenfeuchte auf den Stickstoffentzug wird insofern berücksichtigt, dass beim Erreichen oder Unterschreiten des Permanentwelkepunktes keine Stickstoffaufnahme mehr erfolgt.

Neben dem aktuellen Stickstoffentzug in den einzelnen Rechenschichten und den im Pflanzenbestand enthaltenen Stickstoffs werden an jedem Simulationstag die erreichte Bestandshöhe und der aktuelle Bedeckungsgrad berechnet.

Ergänzungen zu *Abbau und Umsatz der organischen Substanz*.

Der Umsatz der organischen Substanz und die Stickstoffdynamik wird in den obersten drei Rechenschichten (Bearbeitungshorizont) beschrieben. Die Kohlenstoffumsatzprozesse in AOS und SOS des Prozessmodells sind als Kinetiken erster Ordnung implementiert:

$$\frac{dC_{OPS}(z,t)}{dt} = -k_{OPS} \cdot C_{OPS}(z,t) \quad (8.2)$$

$$\frac{dC_{REP}(z,t)}{dt} = \eta \cdot k_{OPS} \cdot C_{OPS}(z,t) \quad (8.3)$$

$$\frac{dC_{AOS}(z,t)}{dt} = \frac{dC_{REP}(z,t)}{dt} - (k_m + k_s) \cdot C_{AOS}(z,t) + k_a \cdot C_{SOS}(z,t) \quad (8.4)$$

$$\frac{dC_{SOS}(z,t)}{dt} = k_s \cdot C_{AOS}(z,t) - k_a \cdot C_{SOS}(z,t) \quad (8.5)$$

mit

z	Bodentiefe (in dm): $z = 1, 2, 3$,
t	Zeitpunkt (in d),
C_{AOS}	Kohlenstoffmengen der AOS-Fraktionen (in kg C/ha),
C_{SOS}	Kohlenstoffmengen der SOS-Fraktionen (in kg C/ha),
C_{OPS}	Kohlenstoffmengen der OPS-Fraktionen (in kg C/ha),
C_{REP}	reproduktionswirksamer Kohlenstoff (in kg C/ha),
η	Synthesekoeffizient (in kg C/(ha·d)),
k_{ops}, k_m, k_a, k_s	Reaktionskoeffizienten (in kg C/(ha·d)).

Die Reaktionskoeffizienten der Umsatzgleichungen sind von Umwelteinflüssen wie Temperatur und Bodenfeuchte abhängig. Die Verringerung der Reaktionsintensität im Vergleich zu optimalen Bedingungen wird durch sogenannte Reduktionsfunktionen ausgedrückt. Bei Bezugnahme auf eine biologische Zeitbasis nehmen diese Reaktionskoeffizienten konstante, für die jeweilige Fraktion charakteristische Werte an, die der Reaktion bei optimalen Umsatzbedingungen entsprechen. Die Reduktionsfunktionen werden dann benutzt, um die Transformation von der Kalenderzeit zur biologischen Zeitbasis durchzuführen. In der Reduktionsfunktion R sind der Einfluss von Bodentemperatur und -feuchte sowie der Durchlüftungsstress auf die Umsatzreaktionen abgebildet:

$$R(z,t) = R(Temp, \Theta, E_L) = r_T(Temp) \cdot r_w(\Theta) \cdot r_L(E_L) \quad (8.6)$$

$$0 \leq R(z,t), r_T(Temp) \leq 1, r_w(\Theta) \leq 1, r_L(E_L) \leq 1$$

mit

t	Zeitpunkt (in d),
z	Bodentiefe (in dm): $z = 1, 2, 3$,
$Temp$	Bodentemperatur (in K),
r_T	Temperatur-Responsefunktion,
Θ	volumetrische Bodenfeuchte,
r_w	Feuchte-Responsefunktion,
E_L	Bodenluftvolumen,
r_L	Durchlüftungs-Responsefunktion.

Der Temperatureinfluss r_T auf die Reaktionskoeffizienten wird nach FRANKO (1989) durch

$$r_T(Temp) = \begin{cases} Q^{(Temp-35)/10} & \text{für } Temp \leq 35 \\ 1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (8.7)$$

beschrieben. Hierbei ist $Temp$ die Bodentemperatur in °C und $Q = 2.1$ die VANT HOFF-Konstante.

Der Einfluss der Bodenfeuchte auf die Umsatzaktivität ist im Modell in zwei Komponenten gegliedert. Eine Komponente beschreibt die stimulierende Wirkung der Bodenfeuchte, die andere den Einfluss der Bodenfeuchte auf die Durchlüftung des Bodens. Der Term zur Beschreibung des Feuchteinflusses r_w wird nach FREYTAG & LÜTTICH (1985) angesetzt:

$$r_w(\Theta) = \begin{cases} 4 \cdot \frac{\Theta}{PV} \cdot \left(1 - \frac{\Theta}{PV}\right) & \text{für } \frac{\Theta}{PV} \leq 0.5 \\ 1 & \text{für } \frac{\Theta}{PV} > 0.5 \end{cases} \quad (8.8)$$

mit

r_w Feuchte-Responsefunktion,
 Θ volumetrische Bodenfeuchte,
 PV Porenvolumen.

Die Abhängigkeit der mikrobiellen Umsatzprozesse von der Aeration des Bodens hat eine Dämpfung der Umsatzaktivität in tieferen Bodenschichten zur Folge. Zur Beschreibung dieses dämpfenden Einflusses (r_L) in Abhängigkeit vom Bodenluftvolumens E_L wurde folgender Ansatz gewählt (FRANKO 1989):

$$r_L = \exp\left(-z \cdot \sqrt{\frac{S_FAT \cdot r_T(T) \cdot r_w(\Theta)}{E_L \cdot (E_L - E_p)}}\right) \quad (8.9)$$

mit

z Bodentiefe (in dm): $z = 1, 2, 3$,
 E_L relatives Luftvolumen,
 r_w Feuchte-Responsefunktion,
 Θ volumetrische Bodenfeuchte,
 S_FAT standortspezifischer Parameter (abhängig vom Feinanteil des Bodens),
 E_p relatives "pocket"-Volumen (Konstante).

Ergänzungen zu *Stickstoffmineralisierung und Immobilisierung*:

Der resultierende Stickstofffluss im Prozessmodell setzt sich aus OPS-Mineralisierung (N_{min}), N-Immobilisierung durch AOS-Synthese (N_{im}) und AOS-Autolyse (N_{aut}) zusammen:

$$\frac{dN}{dt} = N_{min} + N_{im} + N_{aut} \quad (8.10)$$

mit

$$N_{min} = k_{OPS} \cdot \frac{C_{OPS}}{\gamma_{OPS}} \quad (8.11)$$

$$N_{im} = \eta \cdot k_{OPS} \cdot \frac{C_{OPS}}{\gamma_{AOS}} \quad (8.12)$$

$$N_{aut} = k_m \cdot \frac{C_{AOS}}{\gamma_{OPS}} \quad (8.13)$$

wobei

γ_{OPS} C/N-Verhältnis in der OPS,

γ_{AOS} C/N-Verhältnis in der AOS.

Für eine einzelne OPS-Fraktion lässt sich damit die Netto-Mineralisierung (Mineralisierung und Immobilisierung) in den anorganischen Pool beschreiben:

$$N_{min} + N_{im} = \left(1 - \eta \cdot \frac{\gamma_{OPS}}{\gamma_{AOS}}\right) \cdot k_{OPS} \cdot \frac{C_{OPS}}{\gamma_{OPS}} \quad (8.14)$$

Die Richtung der Stickstofftransformation (Immobilisierung oder Mineralisierung) wird durch das Produkt aus Synthesekoeffizienten η und dem C/N-Verhältnis γ der OPS-Fraktion bestimmt, wobei folgende Fälle auftreten können:

$\gamma_{OPS} \eta > \gamma_{AOS}$: Netto-Immobilisierung,

$\gamma_{OPS} \eta = \gamma_{AOS}$: keine Änderung des Mineralstickstoff-Pools,

$\gamma_{OPS} \eta < \gamma_{AOS}$: Netto-Mineralisierung.

Ergänzungen zur *Denitrifizierung*:

Die Reduktionsfunktion der Denitrifizierung berechnet sich in Abhängigkeit von Bodentemperatur und -feuchte nach

$$R_{den}(Temp, \Theta) = r_T(Temp) \cdot r_w^{den}(\Theta) \quad (8.15)$$

mit

$r_T(Temp)$ Temperatur-Responsefunktion,

$r_w^{den}(\Theta)$ Feuchte-Responsefunktion.

Die Temperatur-Responsefunktion $r_T(Temp)$ der Denitrifikation ist mit dem Term der Mineralisierung identisch (Formel (8.7)).

Für den Feuchte-term der Denitrifikation wird der Ansatz

$$r_w^{den}(\Theta) = \begin{cases} \frac{\Theta - \Theta_{krit}}{1,627 \cdot FKAP - 0,0267 \cdot FKAP \cdot PV} & \text{für } \Theta > \Theta_{krit} \\ 0 & \text{für } \Theta \leq \Theta_{krit} \end{cases} \quad (8.16)$$

mit

$$\Theta_{krit} = 0,627 \cdot FKAP - 0,0267 \cdot FKAP \cdot PV$$

Θ volumetrische Bodenfeuchte,

$FKAP$ volumetrische Bodenfeuchte bei Feldkapazität,

PV Porenvolumen

verwendet.

A 8.2 Validierung des Profilgenerators

Um den Profilgenerator zu testen, wurde er auf die in Tabelle 14 (Abschnitt 3.1) genannten Standorte angewendet. Im Folgenden werden einige Ergebnisse dargestellt.

In den Tabellen A 8.1, A 8.4, A 8.7, A 8.10, A 8.13, A 8.16 und A 8.19 sind Daten der Bodenformen der Standorte dargestellt. Die Spaltenbezeichnungen dieser Tabellen haben folgende Bedeutung:

,T': Ton, ,U': Schluff, ,S': Sand, ,FAT': Feinanteilgehalt, ,A': abschlämmbare Teilchen, ,TRD': Trockenrohddichte, ,TSD': Trockensubstanzdichte, ,PV': Porenvolumen, ,CT': Gehalt an organischen Kohlenstoff, ,FKAP': Feldkapazität, ,PWP': Permanentwelkepunkt, ,NFKAP': nutzbare Feldkapazität.

Die Einheiten sind:

- Ton, Schluff, Sand, Feinanteilgehalt und abschlämmbare Teilchen in Masseprozent des Feinbodens;
- Porenvolumen, Feldkapazität, Permanentwelkepunkt und nutzbare Feldkapazität in Volumenprozent;
- Gehalt an organischen Kohlenstoff in Masseprozent bezogen auf den Horizont.

Zur Anwendung des Profilgenerators wurden für die Mittelwerte des Ton- und Schluffgehalts die Zahlen aus den Tabellen A 8.1, A 8.4, A 8.7, A 8.10, A 8.13, A 8.16 und A 8.19 verwendet. Die Kohlenstoffreproduktionsraten wurden mit 9 dt/(ha·a) angenommen.

Soweit möglich wurden alle im Abschnitt 3.1.1 beschriebenen Verfahren angewendet, so dass Unterschiede der Berechnungsverfahren für den inerten Kohlenstoffanteil (Formeln (3.5), (3.6) und (3.7)) sowie für Feldkapazität und Permanentwelkepunkt (Formeln (3.20) bis (3.22), (3.23) und (3.24)) deutlich werden.

In den Tabellen A 8.2, A 8.5, A 8.8, A 8.11, A 8.14, A 8.17 und A 8.19 sind Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators enthalten: Feinanteilgehalt (in Masseprozent des Feinbodens) und Versickerungsparameter LAMBDA (in 1/(mm·d)).

Weitere Resultate stehen in den Tabellen A 8.3, A 8.6, A 8.9, A 8.12, A 8.15, A 8.18 und A 8.21. Für die Horizonte des Profils sind Verfahren zur Bestimmung des inerten Kohlenstoffanteils (Spalte ,Methode CINERT') und der Parameter Feldkapazität und Permanentwelkepunkt (Spalte ,Methode FKAP/PWP') angegeben. Die Bezeichnungen in beiden Spalten sind bezogen auf die Formeln in Abschnitt 3.1.2.2.

Die weiteren Spaltenbezeichnungen haben folgende Bedeutung:

,CINERT': Masseanteil des inerten Kohlenstoffs, ,CORG': Masseanteil des gesamten organischen Kohlenstoffs, ,TRD': Trockenrohddichte, ,TSD': Trockensubstanzdichte, ,FKAP': Feldkapazität, ,PWP': Permanentwelkepunkt.

Die Einheiten sind:

- Masseanteil des inerten und gesamten organischen Kohlenstoffs in Masseprozent des Gesamtbodens;
- Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte in g/cm³;
- Feldkapazität und Permanentwelkepunkt in Volumenprozent.

Das Kürzel ‚k. Aw.‘ steht für ‚keine Anwendbarkeit‘, für den Fall, dass eine Pedotransferfunktion auf einen bestimmten Horizont nicht anwendbar ist (vergleiche hierzu die Gültigkeit der Formeln (3.20) bis (3.24), Abschnitt 3.1.2.2).

a) Standort Bad Lauchstädt:

Inputdaten für Profilgenerator:

mittlere Jahresniederschlagssumme 480 mm/a und mittlere Jahreslufttemperatur 8,8 °C (Quelle: FRANKO et al. (1995a)).

Bodenform ist eine Löss-Schwarzerde, bestehend aus drei Horizonten Ap, Ah-C und C (Quelle: KÖRSCHENS (1998)).

Die bodenphysikalischen Parameters sind Tabelle A 8.1 zu entnehmen. Tabelle A 8.2 zeigt die Ergebnisse für Versickerungsparameter und Feinanteilgehalt der drei Horizonte, in Tabelle A 8.3 stehen die Resultate für die anderen CANDY-Parameter.

Tab. A 8.1: Bodenphysikalische Eigenschaften der Löss-Schwarzerde am Standort Bad Lauchstädt.

Horizont	Bodenphysikalische Eigenschaften											
	T	U	S	FAT	A	TRD	TSD	PV	CT	FKAP	PWP	NFKAP
Ap	23	71	6	28	54	1,35	2,56	47	1,9	31,0	12,6	18,4
Ah-C	25	72	3	28	56	1,35	2,56	47	0	27,0	12,6	14,4
C	11	86	3	28	32	1,35	2,56	47	0	27,0	12,6	14,4

Tab. A 8.2: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Bad Lauchstädt: Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.

Horizont	FAT	LAMBDA
Ap	30,5	0,075
Ah-C	32,5	0,075
C	20,6	0,075

Tab. A 8.3: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Bad Lauchstädt. „k. Aw.“: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Horizont	Methode CINERT	CINERT	CORG	TRD	TSD	Methode FKAP/PWP	FKAP	PWP
Ap	(3.5)	0,90	1,51	1,31	2,39	(3.20)-(3.22)	38,7	18,3
	(3.5)	0,90	1,51	1,31	2,39	(3.23)	38,7	14,0
	(3.5)	0,90	1,51	1,31	2,39	(3.24)	40,3	17,4
	(3.6)	0,85	1,45	1,32	2,40	(3.20)-(3.22)	38,7	18,3
	(3.6)	0,85	1,45	1,32	2,40	(3.23)	38,5	14,0
	(3.6)	0,85	1,45	1,32	2,40	(3.24)	40,0	17,3
	(3.7)	1,53	2,21	1,16	2,27	(3.20)-(3.22)	38,7	18,3
	(3.7)	1,53	2,21	1,16	2,27	(3.23)	40,1	14,1
Ah-C	(3.5)	0,93	0,93	1,39	2,51	(3.20)-(3.22)	40,6	19,7
	(3.5)	0,93	0,93	1,39	2,51	(3.23)	38,8	14,8
	(3.5)	0,93	0,93	1,39	2,51	(3.24)	38,9	17,6
	(3.6)	0,90	0,90	1,40	2,52	(3.20)-(3.22)	40,6	19,7
	(3.6)	0,90	0,90	1,40	2,52	(3.23)	38,7	14,8
	(3.6)	0,90	0,90	1,40	2,52	(3.24)	38,7	17,6
	(3.7)	1,63	1,63	1,24	2,38	(3.20)-(3.22)	40,6	19,7
	(3.7)	1,63	1,63	1,24	2,38	(3.23)	40,2	14,9
C		0,00	0,00	1,70	2,69	(3.20)-(3.22)	27,3	9,4
		0,00	0,00	1,70	2,69	(3.23)	37,3	9,0
		0,00	0,00	1,70	2,68	(3.24)	k. Aw.	k. Aw.

b) Standort Brandis:

Der Profilgenerator wurde auf zwei der seit 1980 in der Lysimeterstation Brandis bewirtschafteten Bodentypen angewendet. Zum einem auf eine erodierte Braunerde, die aus den drei Horizonten Ap, C1 und C2 besteht, zum anderen auf einen Braunerde-Pseudogley, der durch fünf Horizonte charakterisiert werden kann. Als Inputdaten des Profilgenerator wurden eine mittlere Jahresniederschlagssumme von 605 mm und eine mittlere Jahreslufttemperatur 9,3 °C verwendet (Quelle: RAMSBECK-ULLMANN (1999)). Die bodenphysikalischen Parameter (Tabellen A 8.4 und A 8.7) sind HAFERKORN (2000) entnommen.

b1) Erodierte Braunerde:

Tab. A 8.4: Bodenphysikalische Eigenschaften des Bodentyps erodierte Braunerde am Standort Brandis.

Horizont	Bodenphysikalische Eigenschaften											
	T	U	S	FAT	A	TRD	TSD	PV	CT	FKAP	PWP	NFKAP
Ap	8	30	62	14	25	1,56	2,60	40	2,1	25,6	8,8	16,8
C1	2	2	96	3	4	1,69	2,64	36	0	8,1	2,2	5,9
C2	4	3	93	5	6	1,57	2,62	40,1	0	17,2	3,9	13,2

Tabelle A 8.5 zeigt die Ergebnisse für Versickerungsparameter und Feinanteilgehalt, Tabelle A 8.6 enthält weitere Resultate.

Tab. A 8.5: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Bodentyp erodierte Braunerde des Standortes Brandis. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.

Horizont	FAT	LAMBDA
Ap	12,0	0,330
C1	3,3	1,070
C2	5,3	0,830

Tab. A 8.6: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Bodentyp erodierte Braunerde des Standortes Brandis. „k. Aw.“: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Horizont	Methode CINERT	CINERT	CORG	TRD	TSD	Methode FKAP/PWP	FKAP	PWP
Ap	(3.5)	0,50	0,80	1,51	2,50	(3.20)-(3.22)	24,0	7,2
	(3.5)	0,50	0,80	1,51	2,50	(3.23)	21,5	7,1
	(3.5)	0,50	0,80	1,51	2,50	(3.24)	27,0	6,9
	(3.6)	0,41	0,71	1,53	2,51	(3.20)-(3.22)	24,0	7,2
	(3.6)	0,41	0,71	1,53	2,51	(3.23)	21,4	7,1
	(3.6)	0,41	0,71	1,53	2,51	(3.24)	26,7	6,7
	(3.7)	0,60	0,90	1,48	2,48	(3.20)-(3.22)	24,0	7,2
	(3.7)	0,60	0,90	1,48	2,48	(3.23)	21,8	7,1
C1	(3.5)	0,15	0,15	1,69	2,62	(3.20)-(3.22)	6,8	2,7
	(3.5)	0,15	0,15	1,69	2,62	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.5)	0,15	0,15	1,69	2,62	(3.24)	14,8	2,7
	(3.6)	0,07	0,07	1,71	2,64	(3.20)-(3.22)	6,8	2,7
	(3.6)	0,07	0,07	1,71	2,64	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.6)	0,07	0,07	1,71	2,64	(3.24)	14,8	2,6
	(3.7)	0,17	0,17	1,68	2,62	(3.20)-(3.22)	6,8	2,7
	(3.7)	0,17	0,17	1,68	2,62	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
C2		0,00	0,00	1,73	2,67	(3.20)-(3.22)	8,5	4,2
		0,00	0,00	1,73	2,67	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		0,00	0,00	1,73	2,67	(3.24)	16,9	3,5

b2) Braunerde-Pseudogley:

Tab. A 8.7: Bodenphysikalische Eigenschaften des Bodentyps Braunerde-Pseudogley am Standort Brandis.

Horizont	Bodenphysikalische Eigenschaften											
	T	U	S	FAT	A	TRD	TSD	PV	CT	FKAP	PWP	NFKAP
Ap	10	46	44	18	31	1,68	2,58	35	2,2	34,3	12,7	21,6
BvEg	10	49	41	19	34	1,58	2,63	40	0,9	26,9	8,8	18,1
Bg1	25	22	53	30	36	1,83	2,65	31	0,2	26,9	14,9	12,0
Bg2	25	32	43	32	40	1,87	2,63	29	0	28,1	15,5	12,6
C	1	5	94	2	3	1,68	2,63	36	0	12,2	2,7	9,5

Tabelle A 8.8 zeigt die Ergebnisse für Versickerungsparameter und Feinanteilgehalt der Horizonte, Tabelle A 8.9 enthält die Resultate der anderen Parameter.

Tab. A 8.8: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Bodentyp Braunerde-Pseudogley des Standortes Brandis. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.

Horizont	FAT	LAMBDA
Ap	15,5	0,191
BvEg	15,8	0,181
Bg1	27,3	0,075
Bg2	28,3	0,075
C	2,7	1,157

Tab. A 8.9: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Bodentyp Braunerde-Pseudogley des Standortes Brandis. ,k. Aw. ': Anwendung der Pedotransferfunktion ist nicht möglich.

Horizont	Methode CINERT	CINERT	CORG	TRD	TSD	Methode FKAP/PWP	FKAP	PWP
Ap	(3.5)	0,58	0,96	1,47	2,47	(3.20)-(3.22)	27,1	8,6
	(3.5)	0,58	0,96	1,47	2,47	(3.23)	26,9	7,9
	(3.5)	0,58	0,96	1,47	2,47	(3.24)	30,4	8,5
	(3.6)	0,52	0,89	1,48	2,48	(3.20)-(3.22)	27,1	8,6
	(3.6)	0,52	0,89	1,48	2,48	(3.23)	26,8	7,9
	(3.6)	0,52	0,89	1,48	2,48	(3.24)	30,1	8,5
	(3.7)	0,40	1,20	1,41	2,43	(3.20)-(3.22)	27,1	8,6
	(3.7)	0,40	1,20	1,41	2,43	(3.23)	27,3	8,0
BvEg	(3.5)	0,58	0,58	1,52	2,55	(3.20)-(3.22)	28,7	8,6
	(3.5)	0,58	0,58	1,52	2,55	(3.23)	27,7	7,9
	(3.5)	0,58	0,58	1,52	2,55	(3.24)	29,4	8,0
	(3.6)	0,57	0,57	1,53	2,55	(3.20)-(3.22)	28,7	8,6
	(3.6)	0,57	0,57	1,53	2,55	(3.23)	27,7	7,9
	(3.6)	0,57	0,57	1,53	2,55	(3.24)	29,3	8,0
	(3.7)	0,80	0,80	1,47	2,5	(3.20)-(3.22)	28,7	8,6
	(3.7)	0,80	0,80	1,47	2,5	(3.23)	28,1	8,0
Bg1		0,00	0,00	1,67	2,73	(3.20)-(3.22)	29,7	19,7
		0,00	0,00	1,67	2,73	(3.23)	24,2	13,0
		0,00	0,00	1,67	2,73	(3.24)	29,8	14,9
Bg2		0,00	0,00	1,67	2,73	(3.20)-(3.22)	31,8	19,7
		0,00	0,00	1,67	2,73	(3.23)	26,5	13,1
		0,00	0,00	1,67	2,73	(3.24)	30,3	15,3
C		0,00	0,00	1,74	2,66	(3.20)-(3.22)	5,6	2,0
		0,00	0,00	1,74	2,66	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		0,00	0,00	1,74	2,66	(3.24)	14,9	2,0

c) Standort Magdeburg:

Die Anwendung des Profilgenerators erfolgte auf ein in Klein-Wanzleben angelegtes Profil. Klein-Wanzleben liegt ca. 20 km von Magdeburg entfernt. Zur Charakteristik von Jahreslufttemperatur und -niederschlag wurden daher die Werte dieser Klimastation verwendet: 486 mm/a und 9,0 °C (Quelle: DWD).

Bodenform ist eine Schwarzerde aus Löss über Lehm. Die bodenphysikalischen Parameter der vier Horizonte Ap, Ah, C und IIC sind Tabelle A 8.10 zu entnehmen (Quelle: KREISCHE & KÖRSCHENS (1996)).

Tab. A 8.10: Bodenphysikalische Eigenschaften der Schwarzerde aus Löss über Lehm am Standort Magdeburg.

Horizont	Bodenphysikalische Eigenschaften											
	T	U	S	FAT	A	TRD	TSD	PV	CT	FKAP	PWP	NFKAP
Ap	21	77	2	29	50	1,37	2,60	47,4	2,1	23,5	16,3	7,2
Ah	22	78	0	27	53	1,31	2,57	49,1	1,7	34,1	16,5	17,6
C	14	85	1	19	45	1,53	2,67	42,9	0,2	30,9	19,7	11,2
IIC	26	27	47	30	38	1,82	2,62	30,7	0,1	20,6	14,8	5,8

Die konkreten Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators sind den Tabellen A 8.11 und A 8.12 zu entnehmen.

Tab. A 8.11: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Magdeburg. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.

Horizont	FAT	LAMBDA
Ap	29,2	0,075
Ah	30,3	0,075
C	23,4	0,075
IIC	28,8	0,075

Tab. A 8.12: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf Schwarzerde aus Löss über Lehm des Standortes Magdeburg. ,k. Aw.‘: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Horizont	Methode CINERT	CINERT	CORG	TRD	TSD	Methode FKAP/PWP	FKAP	PWP
Ap	(3.5)	0,87	1,45	1,33	2,40	(3.20)-(3.22)	37,0	16,8
	(3.5)	0,87	1,45	1,33	2,40	(3.23)	39,6	13,4
	(3.5)	0,87	1,45	1,33	2,40	(3.24)	40,1	16,2
	(3.6)	0,81	1,38	1,34	2,41	(3.20)-(3.22)	37,0	16,8
	(3.6)	0,81	1,38	1,34	2,41	(3.23)	39,4	13,4
	(3.6)	0,81	1,38	1,34	2,41	(3.24)	39,7	16,1
	(3.7)	1,45	2,10	1,19	2,28	(3.20)-(3.22)	37,0	16,8
	(3.7)	1,45	2,10	1,19	2,28	(3.23)	41,1	13,6
Ah	(3.5)	0,88	0,88	1,41	2,51	(3.20)-(3.22)	38,6	17,5
	(3.5)	0,88	0,88	1,41	2,51	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.5)	0,88	0,88	1,41	2,51	(3.24)	38,4	15,8
	(3.6)	0,87	0,87	1,42	2,52	(3.20)-(3.22)	38,6	17,5
	(3.6)	0,87	0,87	1,42	2,52	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.6)	0,87	0,87	1,42	2,52	(3.24)	38,2	15,8
	(3.7)	1,51	1,51	1,27	2,39	(3.20)-(3.22)	38,6	17,5
	(3.7)	1,51	1,51	1,27	2,39	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
C		0,00	0,00	1,69	2,70	(3.20)-(3.22)	34,4	11,6
		0,00	0,00	1,69	2,70	(3.23)	37,4	10,4
		0,00	0,00	1,69	2,70	(3.24)	30,8	10,1
IIc		0,00	0,00	1,66	2,73	(3.20)-(3.22)	30,7	20,5
		0,00	0,00	1,66	2,73	(3.23)	30,3	15,7
		0,00	0,00	1,66	2,73	(3.24)	25,7	13,4

d) Standort Noitzsch:

Die mittleren Jahreswerte der Klimatelemente Lufttemperatur und Niederschlag des Versuchstandortes Noitzsch sind 558 mm und 8,7 °C (KÖRSCHENS 1990).

Die Bodenart ist Sand, Bodenform eine Sand-Rosterde. Die Daten zum Bearbeitungshorizont (Ap) sind KÖRSCHENS (1990) entnommen, die Angaben zu den Horizonten Bsv und C stammen aus KUNDLER (1989) (Bodenform Sand-Rosterde). In Tabelle A 8.13 sind die bodenphysikalischen Parameter angegeben, die Tabellen A 8.14 und A 8.15 enthalten Ergebnisse des Profilgenerators.

Tab. A 8.13: Bodenphysikalische Eigenschaften der Sand-Rosterde am Standort Noitzsch.

Horizont	Bodenphysikalische Eigenschaften											
	T	U	S	FAT	A	TRD	TSD	PV	CT	FKAP	PWP	NFKAP
Ap	4,1	28	68	7,2	18	1,53	2,59	41	0,9	33,8	4,8	29
Bsv	3	12	85	5,3	7	1,60	2,62	39	0	11	2	9
C	3	6	91	4,7	4	1,60	2,62	39	0	7	1	6

Tab. A 8.14: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Noitzsch. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.

Horizont	FAT	LAMBDA
Ap	7,9	0,590
Bsv	5,3	0,833
C	4,7	0,900

Tab. A 8.15: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf Sand-Rosterde des Standortes Noitzsch. ‚k. Aw.‘: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Horizont	Methode CINERT	CINERT	CORG	TRD	TSD	Methode FKAP/PWP	FKAP	PWP
Ap	(3.5)	0,29	0,57	1,59	2,54	(3.20)-(3.22)	18,9	4,2
	(3.5)	0,29	0,57	1,59	2,54	(3.23)	19,5	5,4
	(3.5)	0,29	0,57	1,59	2,54	(3.24)	23,7	4,4
	(3.6)	0,31	0,59	1,58	2,53	(3.20)-(3.22)	18,9	4,2
	(3.6)	0,31	0,59	1,58	2,53	(3.23)	19,5	5,4
	(3.6)	0,31	0,59	1,58	2,53	(3.24)	23,8	4,4
	(3.7)	0,40	0,69	1,55	2,51	(3.20)-(3.22)	18,9	4,2
	(3.7)	0,40	0,69	1,55	2,51	(3.23)	19,7	5,4
Bsv	(3.5)	0,22	0,22	1,66	2,61	(3.20)-(3.22)	9,4	3,5
	(3.5)	0,22	0,22	1,66	2,61	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.5)	0,22	0,22	1,66	2,61	(3.24)	18,7	3,3
	(3.6)	0,12	0,12	1,69	2,63	(3.20)-(3.22)	9,4	3,5
	(3.6)	0,12	0,12	1,69	2,63	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.6)	0,12	0,12	1,69	2,63	(3.24)	18,6	3,2
	(3.7)	0,27	0,27	1,64	2,6	(3.20)-(3.22)	9,4	3,5
	(3.7)	0,27	0,27	1,64	2,6	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
C		0,00	0,00	1,73	2,66	(3.20)-(3.22)	6,8	3,5
		0,00	0,00	1,73	2,66	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		0,00	0,00	1,73	2,66	(3.24)	16,9	3

e) Standort Thyrow:

Die mittleren Jahreswerte der Klimaelemente Lufttemperatur und Niederschlag des Versuchstandortes Thyrow sind 520 mm und 8,6 °C (KÖRSCHENS 1990). Die Bodenart ist Sand, Bodenform eine Tieflehm-Fahlerde. Die Daten zum Bearbeitungshorizont sind KÖRSCHENS (1990) entnommen, die Angaben zu den Horizonten Bv, Et, Bt und C stammen aus KUNDLER (1989) (Bodenform Sandtieflehm-Fahlerde). In Tabelle A 8.16 stehen Angaben zu den bodenphysikalischen Parametern, die Tabellen A 8.17 und A 8.18 enthalten Ergebnisse des Profilgenerators.

Tab. A 8.16: Bodenphysikalische Eigenschaften der Tieflehm-Fahlerde am Standort Thyrow.

Horizont	Bodenphysikalische Eigenschaften											
	T	U	S	FAT	A	TRD	TSD	PV	CT	FKAP	PWP	NFKAP
Ap	2,7	14,2	83	4,9	7,3	1,43	2,62	45	0,5	14	1,2	12,8
Bv	4	20	76	7	13	1,65	2,62	37	0	13	3	10
Et	4	22	74	7	14	1,66	2,63	37	0	14	3	11
Bt	18	25	57	21	28	1,75	2,65	34	0	25	15	10
C	7	11	82	9	10	1,80	2,65	32	0	22	10	12

Tab. A 8.17: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Thyrow. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.

Horizont	FAT	LAMBDA
Ap	5,5	0,812
Bv	7,1	0,657
Et	7,3	0,640
Bt	21,0	0,075
C	9,0	0,507

Tab. A 8.18: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf Tieflehm-Fahlerde des Standortes Thyrow. „k. Aw.“: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Horizont	Methode CINERT	CINERT	CORG	TRD	TSD	Methode FKAP/PWP	FKAP	PWP
Ap	(3.5)	0,22	0,49	1,62	2,55	(3.20)-(3.22)	10,2	3,5
	(3.5)	0,22	0,49	1,62	2,55	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.5)	0,22	0,49	1,62	2,55	(3.24)	20,1	3,7
	(3.6)	0,13	0,40	1,65	2,57	(3.20)-(3.22)	10,2	3,5
	(3.6)	0,13	0,40	1,65	2,57	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.6)	0,13	0,40	1,65	2,57	(3.24)	19,9	3,6
	(3.7)	0,27	0,55	1,60	2,54	(3.20)-(3.22)	10,2	3,5
	(3.7)	0,27	0,55	1,60	2,54	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.7)	0,27	0,55	1,60	2,54	(3.24)	20,2	3,8
Bv	(3.5)	0,28	0,28	1,63	2,60	(3.20)-(3.22)	17,9	4,2
	(3.5)	0,28	0,28	1,63	2,60	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.5)	0,28	0,28	1,63	2,60	(3.24)	21,4	3,9
	(3.6)	0,22	0,22	1,65	2,61	(3.20)-(3.22)	17,9	4,2
	(3.6)	0,22	0,22	1,65	2,61	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.6)	0,22	0,22	1,65	2,61	(3.24)	21,2	3,9
	(3.7)	0,36	0,36	1,61	2,58	(3.20)-(3.22)	17,9	4,2
	(3.7)	0,36	0,36	1,61	2,58	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.7)	0,36	0,36	1,61	2,58	(3.24)	21,5	4,0
Et		0,00	0,00	1,73	2,67	(3.20)-(3.22)	18,7	4,2
		0,00	0,00	1,73	2,67	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		0,00	0,00	1,73	2,67	(3.24)	20,9	3,6
Bt		0,00	0,00	1,68	2,71	(3.20)-(3.22)	34,9	14,6
		0,00	0,00	1,68	2,71	(3.23)	22,4	10,7
		0,00	0,00	1,68	2,71	(3.24)	27,5	11,1
C		0,00	0,00	1,72	2,68	(3.20)-(3.22)	18,7	6,4
		0,00	0,00	1,72	2,68	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		0,00	0,00	1,72	2,68	(3.24)	20,9	5,0

f) Standort Torgau:

Die mittleren Jahreswerte der Klimaelemente Lufttemperatur und Niederschlag der Klimastation Torgau betragen 567 mm und 9,0 °C (FRANKO et al. 2001). In Tabelle A 8.19 stehen Untersuchungsergebnisse eines 1999 ausgehobenen Profils (ROSCHE 2001), Bodenform ist eine Auenlehm-(Norm-) Vega, bestehend aus drei Horizonten Ap, aM und aGo-M. Die Resultate des Profilgenerators sind in den Tabellen A 8.20 und A 8.21 enthalten.

Tab. A 8.19: Bodenphysikalische Eigenschaften der Auenlehm-(Norm-) Vega am Standort Torgau.

Horizont	Bodenphysikalische Eigenschaften											
	T	U	S	FAT	A	TRD	TSD	PV	CT(*)	FKAP	PWP	NFKAP
Ap	30	62	8	42	65	1,35	2,61	48		40,3	14,9	25,4
AM	22	74	4	38	68	1,40	2,66	47		38,6	16,1	22,5
aGo-M	19	59	22	26	43	1,47	2,66	45		34,5	12,9	21,6

(*) CT- Gehalt wurde nicht ermittelt.

Tab. A 8.20: Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf den Standort Torgau. Parameter Feinanteilgehalt (FAT) und Versickerungsparameter LAMBDA.

Horizont	FAT	LAMBDA
Ap	36,2	0,075
aM	29,9	0,075
aGo-M	25,4	0,075

Tab. A 8.21: Weitere Ergebnisse der Anwendung des Profilgenerators auf Auenlehm-(Norm-) Vega des Standortes Torgau. ,k. Aw.‘: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Horizont	Methode CINERT	CINERT	CORG	TRD	TSD	Methode FKAP/PWP	FKAP	PWP
Ap	(3.5)	0,98	1,71	1,26	2,37	(3.20)-(3.22)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.5)	0,98	1,71	1,26	2,37	(3.23)	38,5	16,3
	(3.5)	0,98	1,71	1,26	2,37	(3.24)	42,4	21,7
	(3.6)	0,97	1,70	1,26	2,37	(3.20)-(3.22)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.6)	0,97	1,70	1,26	2,37	(3.23)	38,4	16,3
	(3.6)	0,97	1,70	1,26	2,37	(3.24)	42,4	21,7
	(3.7)	1,85	2,70	1,07	2,21	(3.20)-(3.22)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.7)	1,85	2,70	1,07	2,21	(3.23)	40,4	16,4
aM	(3.5)	0,88	0,88	1,41	2,51	(3.20)-(3.22)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.5)	0,88	0,88	1,41	2,51	(3.23)	38,7	13,7
	(3.5)	0,88	0,88	1,41	2,51	(3.24)	37,9	15,8
	(3.6)	0,99	0,99	1,38	2,49	(3.20)-(3.22)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.6)	0,99	0,99	1,38	2,49	(3.23)	38,9	13,7
	(3.6)	0,99	0,99	1,38	2,49	(3.24)	38,5	16,0
	(3.7)	1,49	1,49	1,27	2,39	(3.20)-(3.22)	k. Aw.	k. Aw.
	(3.7)	1,49	1,49	1,27	2,39	(3.23)	39,9	13,8
aGo-M		0,00	0,00	1,68	2,71	(3.20)-(3.22)	33,4	15,3
		0,00	0,00	1,68	2,71	(3.23)	31,8	11,5
		0,00	0,00	1,68	2,71	(3.24)	30,1	12,6

Um die Resultate des Profilgenerators einzuschätzen, werden in den folgenden Tabellen Übersichten über relative Fehler gegeben. Tabelle 8.22 zeigt für den Feinanteilgehalt die relativen Abweichungen der berechneten Werte von den Messwerten.

Tab. A 8.22: relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten des Feinanteilgehaltes (Spalte „FAT“) für die Horizonte der getesteten Bodenformen.

Standort/ Bodenform oder Bodentyp	Horizont	FAT
Bad Lauchstädt/ Löss-Schwarzerde	Ap	8,5
	Ah-C	15,7
	C	-26,7
Brandis/ Erodierter Braunerde	Ap	-14,3
	C1	10,0
	C2	6,0
Brandis/ Braunerde-Pseudogley	Ap	-13,9
	BvEg	-16,8
	Bg1	-9,0
	Bg2	-11,6
	C	35,0
Magdeburg/ Schwarzerde aus Löss über Lehm	Ap	0,7
	Ah	12,2
	C	23,2
	lIC	-4,0
Noitzsch/ Sand-Rosterde	Ap	9,7
	Bsv	0,0
	C	0,0
Thyrow/ Tieflehm-Fahlerde	Ap	12,2
	Bv	1,4
	Et	4,3
	Bt	0,0
	C	0,0
Torgau/ Auenlehm- (Norm-) Vega	Ap	-13,3
	aM	-22,2
	aGo-M	-3,9

Die relativen Abweichungen sind zum Teil stark (maximal 35 Prozent bei C-Horizont des Braunerde-Pseudogley), was auf die teilweise sehr kleinen Werte des Feinanteils zurückzuführen ist: geringe Abweichungen verursachen hier große relative Fehler.

In Tabelle A 8.23 stehen relative Abweichungen von Trockenrohichte und Trockensubstanzdichte der obersten beiden Horizonte der getesteten Bodenformen. Es wird unterschieden zwischen den drei Berechnungsverfahren für den inerten Kohlenstoff (Formeln (3.5), (3.6) und (3.7), Abschnitt 3.1.2.2).

Tab. A 8.23: Relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Trockenrohddichte (Spalte ,TRD') und Trockensubstanzdichte (Spalte ,TSD') bei Anwendung verschiedener Verfahren zur Bestimmung des Anteils vom inerten Kohlenstoff (Spalte ,Meth. CINERT'). Die Spaltenbezeichnungen ,(3.5)', ,(3.6)' und ,(3.7)' sind bezogen auf die analog bezeichneten Formeln in Abschnitt 3.1.2.

Standort/ Bodenform oder Bodentyp	TRD			TSD		
	Meth.	CINERT		Meth.	CINERT	
	(3.5)	(3.6)	(3.7)	(3.5)	(3.6)	(3.7)
Bearbeitungshorizont						
Bad Lauchstädt/ Löss-Schwarzerde	3,0	2,2	14,1	6,6	6,3	11,3
Brandis/ Erosierte Braunerde	3,2	1,9	5,1	3,9	3,5	4,6
Brandis/ Braunerde-Pseudogley	12,5	11,9	16,1	4,4	4,1	6,0
Magdeburg/ Schwarzerde aus Löss über Lehm	2,6	1,9	12,9	7,5	7,1	12,1
Noitzsch/ Sand-Rosterde	-3,9	-3,3	-1,3	1,9	2,3	3,1
Thyrow/ Tieflehm-Fahlerde	-13,3	-15,4	-11,9	2,7	1,9	3,1
Torgau/ Auenlehm- (Norm-) Vega	6,7	6,7	20,7	-0,7	1,4	9,3
Zweiter Horizont						
Bad Lauchstädt/ Löss-Schwarzerde	-3,0	-3,7	8,1	2,0	1,6	7,0
Brandis/ Erosierte Braunerde	0,0	-1,2	0,6	0,8	0,0	0,8
Brandis/ Braunerde-Pseudogley	3,8	3,2	7,0	3,2	3,2	5,1
Magdeburg/ Schwarzerde aus Löss über Lehm	-7,8	-8,6	2,9	2,3	2,0	7,0
Noitzsch/ Sand-Rosterde	-3,7	-5,6	-2,5	0,4	-0,4	0,8
Thyrow/ Tieflehm-Fahlerde	1,2	0,0	2,4	0,8	0,4	1,5
Torgau/ Auenlehm- (Norm-) Vega	9,2	9,2	15,3	5,6	6,4	10,2

Die Zahlen zeigen, dass eine Berechnung der Modellparameter für die oberen beiden Horizonte nach den Formeln (3.5) und (3.6) die beste Genauigkeit liefert, lediglich bei sehr sandige Böden (Standorte Noitzsch und Thyrow) kann Formel (3.7) bessere Ergebnisse liefern.

Für tiefere Horizonte wird angenommen, dass kein organischer Kohlenstoff existiert, womit auch keine unterschiedlichen Rechenverfahren für Trockenrohddichte und Trockensubstanzdichte angewendet werden können (Abschnitt 3.1.2.2). Einen Überblick über die relativen Fehler dieser Horizonte zeigt Tabelle A 8.24. Vor allem die Werte der Trockenrohddichte weisen größere Abweichungen auf.

Tab. A 8.24: relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Trockenrohdichte (Spalte ‚TRD‘) und Trockensubstanzdichte (Spalte ‚TSD‘) für die tieferen Horizonte der getesteten Bodenformen.

Standort/ Bodenform oder Bodentyp	Horizont	TRD	TSD
Bad Lauchstädt/ Löss-Schwarzerde	C	-25,9	-5,1
Brandis/ Erodierte Braunerde	C2	-10,2	-1,9
Brandis/ Braunerde-Pseudogley	Bg1	8,7	-2,9
	Bg2	10,7	-3,7
	C	-3,6	-1,3
Magdeburg/ Schwarzerde aus Löss über Lehm	C	-10,8	-1,1
	IIC	8,7	-4,1
Noitzsch/ Sandrosterde	C	-8,1	-1,5
Thyrow/ Tieflehm-Fahlerde	Et	-4,2	-1,5
	Bt	4,0	-2,3
	C	4,4	-1,1
Torgau/ Auenlehm- (Norm-) Vega	aGo-M	-14,3	-1,9
Noitzsch/ Sandrosterde	C	-8,1	-1,5
Thyrow/ Tieflehm-Fahlerde	Et	-4,2	-1,5
	Bt	4,0	-2,3
	C	4,4	-1,1
Torgau/ Auenlehm- (Norm-) Vega	aGo-M	-14,3	-1,9

Tabelle A 8.25 zeigt für den Bearbeitungshorizont der getesteten Bodenformen die relativen Fehler zwischen berechneten und gemessenen Werten der Modellparameter Feldkapazität und Permanentwelkepunkt. Unterschieden werden zunächst die Berechnungsverfahren (Spalte ‚Methode FKAP/ PWP‘ als Bezugnahme zu den Formeln (3.20) – (3.22), (3.23) und (3.24) in Abschnitt 3.1.2). Da in die Formeln (3.23) und (3.24) der organische Kohlenstoff einbezogen ist, wird weiterhin zwischen den drei Bestimmungsmethoden des inerten Kohlenstoff unterschieden (Spalten ‚(3.5)‘, ‚(3.6)‘ und ‚(3.7)‘ als Bezugnahme zu den Formeln (3.5), (3.6) und (3.7) in Abschnitt 3.1.2). Die Differenzen sind gering, was jeweils durch Vergleich der entsprechenden Zahlen zum Ausdruck kommt.

Tabelle A 8.26 zeigt die entsprechenden Ergebnisse für den zweiten Horizont.

Tab. A 8.25: Bearbeitungshorizont: relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Feldkapazität (Spalte ‚FKAP‘) und Permanentwelkepunkt (Spalte ‚PWP‘) bei Anwendung verschiedener Verfahren zur Bestimmung des Anteils vom inerten Kohlenstoff (Spalte ‚Meth. CINERT‘). Die Spaltenbezeichnungen ‚(3.5)‘, ‚(3.6)‘ und ‚(3.7)‘ sind bezogen auf die analog bezeichneten Formeln in Abschnitt 3.1.2. Die Spalte ‚Methode FKAP/ PWP‘ enthält die Formelbezeichnungen aus Abschnitt 3.1.2 zur Berechnung der Modellparameter (Formeln (3.20) - 3.22), (3.23) und (3.24)). ‚k. Aw.‘: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Standort/ Bodenform oder -typ	Methode FKAP/ PWP	FKAP			PWP		
		Meth. CINERT			Meth. CINERT		
		(3.5)	(3.6)	(3.7)	(3.5)	(3.6)	(3.7)
Bad Lauchstädt/ Löss-Schwarzerde	(3.20) - (3.22)	-24,8	-24,8	-24,8	-45,2	-45,2	-45,2
	(3.23)	-24,8	-24,2	-29,4	-11,1	-11,1	-12,1
	(3.24)	-30,0	-29,0	-40,6	-38,1	-37,3	-46,8
Brandis/ Erodierter Braunerde	(3.20) - (3.22)	6,3	6,3	6,3	18,2	18,2	18,2
	(3.23)	16,0	16,4	14,8	19,3	19,3	19,3
	(3.24)	-5,5	-4,3	-7,0	21,6	23,9	20,5
Brandis/ Braunerde-Pseudogley	(3.20) - (3.22)	21,0	21,0	21,0	32,3	32,3	32,3
	(3.23)	21,6	21,9	20,4	37,8	37,8	37,0
	(3.24)	11,4	12,2	8,7	33,1	33,1	30,7
Magdeburg/ Schwarzerde aus Löss über Lehm	(3.20) - (3.22)	-57,4	-57,4	-57,4	-3,1	-3,1	-3,1
	(3.23)	-68,5	-67,7	-74,9	17,8	17,8	16,6
	(3.24)	-70,6	-68,9	-84,3	0,6	1,2	-5,5
Noitzsch/ Sand-Rosterde	(3.20) - (3.22)	44,1	44,1	44,1	12,5	12,5	12,5
	(3.23)	42,3	42,3	41,7	-12,5	-12,5	-12,5
	(3.24)	29,9	29,6	28,7	8,3	8,3	4,2
Thyrow/ Tieflehm-Fahlerde	(3.20) - (3.22)	27,1	27,1	27,1	-191,7	-191,7	-191,7
	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.
	(3.24)	-43,6	-42,1	-44,3	-208,3	-200,0	-216,7
Torgau/ Auenlehm- (Norm-) Vega	(3.20) - (3.22)	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.
	(3.23)	4,3	4,6	-0,4	-9,5	-9,5	-10,2
	(3.24)	-5,3	-5,3	-15,8	-45,8	-45,8	-56,5

Tab. A 8.26: Zweiter Horizont: relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Feldkapazität (Spalte ‚FKAP‘) und Permanentwelkepunkt (Spalte ‚PWP‘), bei Anwendung verschiedener Verfahren zur Bestimmung des Anteils vom inerten Kohlenstoff (Spalte ‚Meth. CINERT‘). Die Spaltenbezeichnungen ‚(3.5)‘, ‚(3.6)‘ und ‚(3.7)‘ sind bezogen auf die analog bezeichneten Formeln in Abschnitt 3.1.2. Die Spalte ‚Methode FKAP/ PWP‘ enthält die Formelbezeichnungen aus Abschnitt 3.1.2 zur Berechnung der Modellparameter (Formeln (3.20) - 3.22), (3.23) und (3.24)). ‚k. Aw.‘: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Standort/ Bodenform oder -typ	Methode FKAP/ PWP	FKAP			PWP		
		Meth. CINERT			Meth. CINERT		
		(3.5)	(3.6)	(3.7)	(3.5)	(3.6)	(3.7)
Bad Lauchstädt/ Löss-Schwarzerde	(3.20) - (3.22)	-50,4	-50,4	-50,4	-56,3	-56,3	-56,3
	(3.23)	-43,7	-43,3	-48,9	-17,5	-17,5	-18,3
	(3.24)	-44,1	-43,3	-56,3	-39,7	-39,7	-48,4
Brandis/ Erosierte Braunerde	(3.20) - (3.22)	16,0	16,0	16,0	-22,7	-22,7	-22,7
	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.
	(3.24)	-82,7	-82,7	-82,7	-22,7	-18,2	-22,7
Brandis/ Braunerde-Pseudogley	(3.20) - (3.22)	-6,7	-6,7	-6,7	2,3	2,3	2,3
	(3.23)	-3,0	-3,0	-4,5	10,2	10,2	9,1
	(3.24)	-9,3	-8,9	-12,6	9,1	9,1	5,7
Magdeburg/ Schwarzerde aus Löss über Lehm	(3.20) - (3.22)	-13,2	-13,2	-13,2	-6,1	-6,1	-6,1
	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.
	(3.24)	-12,6	-12,0	-21,7	4,2	4,2	-1,8
Noitzsch/ Sand-Rosterde	(3.20) - (3.22)	14,5	14,5	14,5	-75,0	-75,0	-75,0
	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.
	(3.24)	-70,0	-69,1	-70,9	-65,0	-60,0	-70,0
Thyrow/ Tieflehm-Fahlerde	(3.20) - (3.22)	-37,7	-37,7	-37,7	-40,0	-40,0	-40,0
	(3.23)	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.
	(3.24)	-64,6	-63,1	-65,4	-30,0	-30,0	-33,3
Torgau/ Auenlehm- (Norm-) Vega	(3.20) - (3.22)	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.	k. Aw.
	(3.23)	-0,3	-0,8	-3,4	15,2	15,2	14,5
	(3.24)	1,8	0,3	-6,0	2,2	0,9	-4,0

Die Modellparameter Feldkapazität und Permanentwelkepunkt der Horizonte Ap und Ah-C (Standort Bad Lauchstädt) werden mit allen Pedotransferfunktionen stark überschätzt. Die zum Teil sehr starken Abweichungen bei der Berechnung des Permanentwelkepunktes für den Standort Thyrow sind auf dessen sehr kleine Werte zurückzuführen.

Ähnliches ist auch in den tieferen Horizonten festzustellen. Da im Profilgenerator von der Annahme ausgegangen wird, dass kein organischer Kohlenstoff mehr vorkommt, wird bei der Berechnung relativer Modellfehler von Feldkapazität bzw. Permanentwelkepunkt (Tabelle A 8.27) nur noch zwischen den drei Verfahren (Formeln (3.20) - (3.22), (3.23) und (3.24)) unterschieden.

Tab. A 8.27: Tiefere Horizonte: relative Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten von Feldkapazität (Spalte ‚FKAP‘) und Permanentwelkepunkt (Spalte ‚PWP‘). Die Spalte ‚Methode FKAP/PWP‘ enthält die Formelbezeichnungen aus Abschnitt 3.1.2 zur Berechnung der Modellparameter (Formeln (3.20) - (3.22), (3.23) und (3.24)). ‚k. Aw.‘: Anwendung der Pedotransferfunktion auf Horizont ist nicht möglich.

Standort/ Bodenform oder Bodentyp	Horizont	Methode FKAP/ PWP	FKAP	PWP
Bad Lauchstädt/ Löss-Schwarzerde	C	(3.20) - (3.22)	-1,1	25,4
		(3.23)	-38,1	28,6
		(3.24)	k. Aw.	k. Aw.
Brandis/ Erodierte Braunerde	C2	(3.20) - (3.22)	50,6	-7,7
		(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		(3.24)	1,7	10,3
Brandis/ Braunerde-Pseudogley	Bg1	(3.20) - (3.22)	-10,4	-32,2
		(3.23)	10,0	12,8
		(3.24)	-10,8	0,0
	Bg2	(3.20) - (3.22)	-13,2	-27,1
		(3.23)	5,7	15,5
		(3.24)	-7,8	1,3
	C	(3.20) - (3.22)	54,1	25,9
		(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		(3.24)	-22,1	25,9
Magdeburg/ Schwarzerde aus Löss über Lehm	C	(3.20) - (3.22)	-11,3	41,1
		(3.23)	-21,0	47,2
		(3.24)	0,3	48,7
	IIc	(3.20) - (3.22)	-49,0	-38,5
		(3.23)	-47,1	-6,1
		(3.24)	-24,8	9,5
Noitzsch/ Sand-Rosterde	C	(3.20) - (3.22)	2,9	-250,0
		(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		(3.24)	-141,4	-200,0
Thyrow/ Tieflehm-Fahlerde	Et	(3.20) - (3.22)	-33,6	-40,0
		(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		(3.24)	-49,3	-20,0
	Bt	(3.20) - (3.22)	-39,6	2,7
		(3.23)	10,4	28,7
		(3.24)	-10,0	26,0
	C	(3.20) - (3.22)	15,0	36,0
		(3.23)	k. Aw.	k. Aw.
		(3.24)	5,0	50,0
Torgau/ Auenlehm- (Norm-) Vega	aGo-M	(3.20) - (3.22)	3,3	-18,2
		(3.23)	7,9	11,2
		(3.24)	12,8	2,7

A 8.3 Ergänzungen zu Kapitel 3

A 8.3.1 Ergänzungen zu Abschnitt 3.1

Bestimmung der Brooks–Corey-Parameter Ψ_b , Θ_r , Θ_s , λ in Formel (3.23):

$$\begin{aligned} \Psi_b = \exp & \left(5,3396738 + 0,1845038 \cdot T - 2,48394546 \cdot PV - 0,00213853 \cdot T^2 \right. \\ & - 0,04356349 \cdot S \cdot PV - 0,61745089 \cdot T \cdot PV + 0,00143598 \cdot S^2 \cdot PV^2 \\ & - 0,00855375 \cdot T^2 \cdot PV^2 - 0,00001282 \cdot S^2 \cdot T + 0,00895359 \cdot T^2 \cdot PV \\ & \left. - 0,00072472 \cdot S^2 \cdot PV + 0,0000054 \cdot T^2 \cdot S + 0,5002806 \cdot PV^2 \cdot T \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Theta_r = & -0,0182482 + 0,00087269 \cdot S + 0,00513488 \cdot T + 0,02939286 \cdot PV - 0,00015395 \cdot T^2 \\ & - 0,0010827 \cdot S \cdot PV - 0,00018233 \cdot T^2 \cdot PV^2 + 0,00030703 \cdot T^2 \cdot PV \\ & - 0,0023584 \cdot PV^2 \cdot T, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Theta_s = & 0,01162 - 0,001473 \cdot S - 0,002236 \cdot T + 0,98402 \cdot PV \\ & + 0,0000987 \cdot T^2 + 0,003616 \cdot S \cdot PV - 0,010859 \cdot T \cdot PV \\ & - 0,000096 \cdot T^2 \cdot PV - 0,002437 \cdot PV^2 \cdot S + 0,0115395 \cdot PV^2 \cdot T, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \lambda = \exp & \left(-0,7842831 + 0,0177544 \cdot S - 1,062498 \cdot PV - 0,00005304 \cdot S^2 \right. \\ & - 0,00273493 \cdot T^2 + 1,11134946 \cdot PV^2 \\ & - 0,03088295 \cdot S \cdot PV + 0,00026587 \cdot S^2 \cdot PV^2 - 0,00610522 \cdot T^2 \cdot PV^2 \\ & \left. - 0,00000235 \cdot S^2 \cdot T + 0,00798746 \cdot T^2 \cdot PV - 0,00674491 \cdot PV^2 \cdot T \right), \end{aligned}$$

mit

T Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),

U Schluffgehalt (in Masseprozent des Feinbodens),

PV Porenvolumen (als Relativzahl), $PV = 1 - TRD/TSD$,

S Sandgehalt (in Masseprozent des Feinbodens), $S = 100 - T - U + 0,0666 \cdot U$,

(S ist bezogen auf die Kornfraktion von 50 bis 2000 μm).

Bestimmung von Θ_r , Θ_s , α , N_A in Formel (3.24):

$$\alpha = \exp \left(-2,486 + 0,025 \cdot S - 0,351 \cdot CORG_{\%} - 2,617 \cdot TRD - 0,023 \cdot T \right),$$

$$N_A = \exp \left(0,053 - 0,009 \cdot S - 0,013 \cdot T + 0,00015 \cdot S^2 \right),$$

$$\Theta_r = 0,015 + 0,005 \cdot T + 0,014 \cdot CORG_{\%},$$

$$\Theta_s = 0,81 - 0,283 \cdot TRD + 0,001 \cdot T,$$

mit

T Tongehalt (in Masseprozent des Feinbodens),

S Sandgehalt (in Masseprozent des Feinbodens), $S = 100 - T - U + 0,0666 \cdot U$,

$CORG_{\%}$ prozentualer Masseanteil des organischen Kohlenstoffs,

TRD Trockenrohdichte (in g/cm^3),

(S ist bezogen auf die Kornfraktion von 50 bis 2000 μm).

A 8.3.2 Ergänzungen zu Abschnitt 3.2

Im Folgenden sind Tabellen dargestellt, welche die Informationen des Kapitel 3.2 (Entwicklung von Metamodellen) ergänzen.

Zur Analyse der Klassen Klima und Boden der CANDY-Inputdaten wurde eine Sensitivitätsstudie durchgeführt. Untersucht wurden die relativen Variationen der Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung und Stickstoffauswaschung (Jahresmittelwerte) bei sukzessiver Änderung der einzelnen Bodenparameter der Horizonte. Die Parameter wurden jeweils separat variiert: zuerst um 10 Prozent erhöht, anschließend um 10 Prozent verringert, bezogen auf ihren Parameterwert in der CANDY-Datenbank. Simultane Parametervariationen wurden nicht betrachtet.

Die Studie wurde für zwei Fruchtfolgen und vier Bodenformen durchgeführt (siehe Abschnitt 3.2.2). Die Ergebnisse sind in den Tabellen A 8.28 bis 8.35 zusammengefasst.

In den Tabellen werden für die bodenphysikalischen Parameter folgende Abkürzungen verwendet: FKAP: Feldkapazität, PWP: Permanentwelkepunkt, TRD: Trockenrohdichte, TSD: Trockensubstanzdichte, FAT: Feinanteilgehalt, LAMBDA: Versickerungsparameter nach GLUGLA (1969).

Die Spaltenbezeichnungen der Tabellen haben folgende Bedeutung:

„S_Param+“: Sensibilitätsindex nach LAROCQUE & BANTON (1994) bei Parametererhöhung um 10 Prozent, „S_Param-“ Sensibilitätsindex nach LAROCQUE & BANTON (1994) bei Parameterverringern um 10 Prozent.

Bezeichnungen der Bodenhorizonte: nach MMK.

Tab. A 8.28: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Sand-Braunerde bei Simulation der Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung.

Horizont	Parameter	Grundwasserneubildung		Stickstoffauswaschung	
		S_Param+	S_Param-	S_Param+	S_Param-
Ap	FKAP	-0,27	-0,30	-0,90	-0,80
	PWP	0,07	0,05	0,52	0,43
	TRD	0,00	0,00	-0,04	-0,06
	TSD	0,00	0,00	0,05	0,05
	FAT	0,00	0,00	0,03	0,02
	LAMBDA	0,02	0,03	0,01	0,01
Bv	FKAP	-0,13	-0,15	-0,01	-0,01
	PWP	0,03	0,03	0,00	0,00
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,00	0,00	0,00
C	FKAP	-0,14	-0,18	-0,23	-0,25
	PWP	0,04	0,04	-0,33	-0,30
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,00	0,00	0,00

Tab. A 8.29: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Löss-Schwarzerde bei Simulation der Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung.

Horizont	Parameter	Grundwasserneubildung		Stickstoffauswaschung	
		S_Param+	S_Param-	S_Param+	S_Param-
Ap	FKAP	-0,43	-0,51	-0,80	-0,50
	PWP	0,17	0,15	0,71	0,65
	TRD	0,00	0,00	-0,08	-0,06
	TSD	0,00	0,01	0,05	0,07
	FAT	0,00	0,00	-0,03	-0,02
	LAMBDA	0,06	0,05	0,00	0,02
Ah-C	FKAP	-0,40	-0,74	-0,02	-0,01
	PWP	0,27	0,18	-0,01	0,00
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,01	0,02	0,01	0,01
C	FKAP	-0,06	-0,12	-0,01	-0,02
	PWP	0,02	0,02	-0,02	-0,03
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,00	0,00	0,00

Tab. A 8.30: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Staugley-Parabraunerde aus Sandlöss bei Simulation der Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung.

Horizont	Parameter	Grundwasserneubildung		Stickstoffauswaschung	
		S_Param+	S_Param-	S_Param+	S_Param-
Ap	FKAP	-0,46	-0,49	-1,31	-1,45
	PWP	0,11	0,08	0,19	0,24
	TRD	0,00	0,01	-0,23	-0,19
	TSD	0,00	0,00	0,21	0,16
	FAT	0,00	0,00	-0,06	-0,05
	LAMBDA	0,07	0,08	0,08	0,06
SwAl	FKAP	-0,21	-0,19	-0,60	-0,71
	PWP	0,03	0,02	-0,07	-0,10
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,02	0,03	0,01	0,00
SdBt	FKAP	-0,35	-0,61	-2,10	-1,21
	PWP	0,26	0,17	-1,20	-0,94
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,04	0,03	0,00	0,00
IIC	FKAP	-0,10	-0,14	-0,89	-1,03
	PWP	0,03	0,01	-1,10	-1,32
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,01	0,00	0,00	0,00

Tab. A 8.31: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Parabraunerde-Haftnässestaugley aus Decklöss bei Simulation der Fruchtfolge des integrierten Landbaus ohne Tierhaltung.

Horizont	Parameter	Grundwasserneubildung		Stickstoffauswaschung	
		S_Param+	S_Param-	S_Param+	S_Param-
Ap	FKAP	-0,90	-0,79	-2,13	-1,85
	PWP	0,27	0,39	0,16	0,27
	TRD	0,00	0,00	-0,17	-0,11
	TSD	0,00	0,00	0,22	0,15
	FAT	0,00	0,00	-0,05	-0,06
	LAMBDA	0,05	0,07	0,06	0,08
AISg	FKAP	-0,42	-0,31	-0,50	-0,72
	PWP	0,09	0,13	-0,23	-0,34
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,01	0,00	0,01	0,00
BtSg	FKAP	-0,63	-0,69	-0,67	-0,79
	PWP	0,33	0,45	-0,12	-0,19
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,00	0,00	0,00
IIC	FKAP	-0,31	-0,34	-1,02	-0,81
	PWP	0,01	0,05	-0,56	-0,39
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,01	0,00	0,00	0,00

Tab. A 8.32: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Sand-Braunerde bei Simulation der Fruchtfolge des ökologischen Landbaus mit Tierbesatz von 1,4 Großvieheinheiten je ha landw. Nutzfläche.

Horizont	Parameter	Grundwasserneubildung		Stickstoffauswaschung	
		S_Param+	S_Param-	S_Param+	S_Param-
Ap	FKAP	-0,27	-0,28	-0,31	-0,22
	PWP	0,04	0,06	0,16	0,13
	TRD	0,00	0,00	-0,09	-0,04
	TSD	0,00	0,00	0,08	0,04
	FAT	0,00	0,00	0,04	0,07
	LAMBDA	0,03	0,03	0,02	0,03
Bv	FKAP	-0,16	-0,18	-0,16	-0,19
	PWP	0,04	0,04	-0,04	-0,04
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,00	0,00	0,00
C	FKAP	-0,29	-0,23	-0,65	-0,67
	PWP	0,08	0,03	-0,40	-0,39
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,00	0,00	0,00

Tab. A 8.33: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Löss-Schwarzerde bei Simulation der Fruchtfolge des ökologischen Landbaus mit Tierbesatz von 1,4 Großvieheinheiten je ha landw. Nutzfläche.

Horizont	Parameter	Grundwasserneubildung		Stickstoffauswaschung	
		S_Param+	S_Param-	S_Param+	S_Param-
Ap	FKAP	-0,49	-0,66	-0,66	-0,52
	PWP	0,21	0,20	0,57	0,42
	TRD	0,00	0,00	-0,08	-0,05
	TSD	0,00	0,01	0,11	0,09
	FAT	0,00	0,00	-0,03	-0,02
	LAMBDA	0,06	0,05	0,00	0,02
Ah-C	FKAP	-0,36	-0,56	-0,23	-0,27
	PWP	0,30	0,20	-0,08	-0,09
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,01	0,02	-0,02	0,00
C	FKAP	-0,23	-0,17	0,01	0,02
	PWP	0,02	0,02	-0,02	-0,03
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,00	0,00	0,00

Tab. A 8.34: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Staugley-Parabraunerde aus Sandlöss bei Simulation der Fruchtfolge des ökologischen Landbaus mit Tierb. von 1,4 Großvieheinheiten je ha landw. Nutzfläche.

Horizont	Parameter	Grundwasserneubildung		Stickstoffauswaschung	
		S_Param+	S_Param-	S_Param+	S_Param-
Ap	FKAP	-0,52	-0,60	-0,79	-0,98
	PWP	0,08	0,09	0,21	0,30
	TRD	0,00	0,01	-0,15	-0,10
	TSD	0,00	0,00	0,16	0,11
	FAT	0,00	0,00	-0,09	-0,11
	LAMBDA	0,07	0,08	0,03	0,04
SwAl	FKAP	-0,17	-0,16	-0,43	-0,49
	PWP	0,03	0,02	-0,04	-0,05
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,01	0,01	0,00	0,01
SdBt	FKAP	-0,31	-0,55	-1,30	-0,92
	PWP	0,20	0,16	-0,53	-0,45
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,03	0,01	0,00	0,00
IIC	FKAP	-0,11	-0,12	-0,76	-0,84
	PWP	0,02	0,04	-1,01	-1,05
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,01	0,00	0,00	0,00

Tab. A 8.35: Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse für Parabraunerde-Haftnässestaugley aus Decklöss bei Simulation der Fruchtfolge des ökologischen Landbaus mit Tierbesatz von 1,4 Großvieheinheiten je ha landw. Nutzfläche.

Horizont	Parameter	Grundwasserneubildung		Stickstoffauswaschung	
		S_Param+	S_Param-	S_Param+	S_Param-
Ap	FKAP	-0,88	-0,71	-1,05	-1,20
	PWP	0,29	0,37	0,13	0,23
	TRD	0,00	0,00	-0,12	-0,07
	TSD	0,00	0,00	0,17	0,10
	FAT	0,00	0,00	0,06	0,05
	LAMBDA	0,06	0,05	0,07	0,07
AlSg	FKAP	-0,33	-0,29	-0,45	-0,67
	PWP	0,11	0,17	-0,21	-0,27
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,02	0,00	0,01
BtSg	FKAP	-0,55	-0,54	-0,52	-0,62
	PWP	0,31	0,41	-0,11	-0,17
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,00	0,00	0,00	0,00
IIC	FKAP	-0,35	-0,37	-0,67	-0,56
	PWP	0,04	0,06	-0,36	-0,19
	TRD	0,00	0,00	0,00	0,00
	TSD	0,00	0,00	0,00	0,00
	FAT	0,00	0,00	0,00	0,00
	LAMBDA	0,01	0,00	0,00	0,00

Die Tabellen A 8.28 bis A 8.35 zeigen, dass für die Grundwasserneubildung die bodenphysikalischen Parameter Feldkapazität und Permanentwelkepunkt die größte Sensitivität besitzen. Dieselbe Aussage trifft auch auf die Stickstoffauswaschung zu, wobei jedoch zu beachten ist, dass neben Feldkapazität und Permanentwelkepunkt auch die Parameter Trockenrohdichte und Trockensubstanzdichte des Bearbeitungshorizontes großen Einfluss haben können. Beispiele sind die Bodenformen Staugley-Parabraunerde aus Sandlöss und Parabraunerde-Haftnässe-Staugley aus Decklöss, siehe Tabellen A 8.30, A 8.31 auch A 8.34 und A 8.35.

Als Resultat dieser Studie wurden die CANDY-Parameter Feldkapazität und Permanentwelkepunkt der Horizonte gekoppelt als bodenphysikalische Eigenschaft „Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität“.

Diese zusätzliche Kenngröße der Bodenformen ist Grundlage für die Auswahl repräsentativer Bodenprofile zur Erstellung der Datenbasis der Gebiete.

A 8.4 Ergänzungen zu Kapitel 4

A 8.4.1 Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile

Im Folgenden sind Tabellen dargestellt, welche die Informationen des Kapitel 4 (Exemplarische Entwicklung von Metamodellen) ergänzen.

In den Tabellen A 8.36 bis A 8.39 sind wichtige bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile der vier behandelten Gebiete Nordsächsisches Platten- und Hügelland, Mittelsächsisches Lösshügelland, Mulde-Lösshügelland und Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet angegeben.

Die Spaltenbezeichnungen der Tabellen haben folgende Bedeutung:

„Bodenform“: Bezeichnung der Bodenform nach MMK, „Horizont“: Horizontbezeichnungen, „T“: Ton, „U“: Schluff, „S“: Sand, „FAT“: Feinanteilgehalt, „TRD“: Trockenrohdichte, „TSD“: Trockensubstanzdichte, „PV“: Porenvolumen, „FKAP“: Feldkapazität, „PWP“: Permanentwelkepunkt, „NFKAP“: nutzbare Feldkapazität.

Die Einheiten sind:

- Ton, Schluff, Sand, Feinanteilgehalt und abschlämmbare Teilchen in Masseprozent des Feinbodens;
- Porenvolumen, Feldkapazität, Permanentwelkepunkt und nutzbare Feldkapazität in Volumenprozent.

Tab. A 8.36: Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes.

Bodenform	Horizont	Bodenphysikalische Eigenschaften									
		T	U	S	FAT	TRD	TSD	PV	FKAP	PWP	NFKAP
sehr flacher Gley aus Sand	Ap	6	12	82	8	1,44	2,57	44	20	7	13
	Go	3	6	91	4	1,64	2,65	38	8	2	6
sehr tiefe Parabraunerde aus Salm über Geröll	Ap	8	26	66	12	1,62	2,63	39	24	7	17
	Al	8	26	66	12	1,63	2,64	38	24	7	17
	Bt	11	25	64	14	1,65	2,65	38	26	13	13
	C	8	28	64	16	1,74	2,65	34	6	3	3
Parabraunerde aus Decksandlöss	Ap	15	48	37	21	1,58	2,61	40	28	11	17
	Al	15	49	36	21	1,63	2,66	39	26	11	15
	Bt	17	44	39	24	1,66	2,65	37	27	12	15
	C	2	5	93	3	1,61	2,62	39	7	1	6
Parabraunerde-Staugley aus Sandlöss über Lehm	Ap	12	49	39	20	1,57	2,57	39	29	11	18
	Sw	15	50	35	22	1,63	2,59	37	25	11	14
	Sd	17	35	48	23	1,74	2,59	33	25	13	12
	C	19	27	54	25	1,78	2,65	33	25	14	11
Braunerde aus Decksandlöss	Ap	10	54	36	13	1,55	2,63	41	29	10	19
	Bv	7	44	49	10	1,58	2,63	40	27	9	18
	C	4	10	86	5	1,60	2,62	39	14	2	12
Braunerde aus Sandlöss über Lehm	Ap	10	54	36	13	1,55	2,63	41	29	10	19
	Bv	7	44	49	10	1,58	2,63	40	27	9	18
	C	14	31	55	21	1,80	2,65	32	24	11	13

Tab. A 8.37: Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile des Mittelsächsischen Lösshügellandes.

Bodenform	Hori- Zont	Bodenphysikalische Eigenschaften									
		T	U	S	FAT	TRD	TSD	PV	FKAP	PWP	NFKAP
mittlere Vega aus Auenlehm	Ap	13	67	20	20	1,48	2,63	44	23	12	11
	AM	11	66	23	18	1,65	2,65	38	23	14	9
	AG	12	66	22	19	1,58	2,65	40	22	14	8
Braunerde aus Decksalm	Ap	8	26	66	12	1,61	2,6	38	23	6	17
	Bv	9	21	70	11	1,64	2,62	38	17	5	12
	C	2	8	90	4	1,58	2,63	40	10	3	7
tiefer Parabraun- erde-Staugley aus Löss	Ap	17	75	8	24	1,44	2,59	44	30	11	19
	AlSw	18	71	11	25	1,51	2,61	42	32	11	21
	BtSd	22	69	9	30	1,56	2,61	40	32	18	14
	Sd	19	71	10	27	1,59	2,63	40	31	16	15
Pseudogley aus Löss	Ap	17	75	8	24	1,43	2,58	45	29	11	18
	Sw	18	71	11	25	1,52	2,59	41	31	11	20
	Sd	22	69	9	30	1,60	2,61	39	31	19	12
Staugley-Para- braunerde aus Löss	Ap	18	74	8	25	1,46	2,62	44	32	12	20
	SwAl	18	72	10	25	1,49	2,66	44	33	12	21
	SdBt	23	70	7	31	1,53	2,64	42	34	18	16
	C	17	72	11	24	1,57	2,63	40	30	13	17
Parabraunerde aus Löss	Ap	18	74	8	25	1,47	2,63	44	33	12	21
	Al	18	72	10	25	1,48	2,64	44	34	12	22
	Bt	23	70	7	31	1,46	2,65	45	35	17	18
	C	20	76	4	27	1,51	2,65	43	32	12	20

Tab. A 8.38: Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile des Mulde-Lösshügellandes.

Bodenform	Hori- zont	Bodenphysikalische Eigenschaften									
		T	U	S	FAT	TRD	TSD	PV	FKAP	PWP	NFKAP
sehr flache Gley- Vega aus Auenlehm	Ap	21	62	17	27	1,41	2,63	46	28	13	15
	aM	21	63	16	27	1,54	2,66	42	29	15	14
mittlere Vega aus Auenlehm	Ap	13	67	20	20	1,48	2,63	44	23	12	11
	aM	11	66	23	18	1,65	2,65	38	23	14	9
sehr tiefer Braunerde- Staugley aus Berglöss über tiefem Geröll	aG	12	66	22	19	1,58	2,65	40	22	14	8
	Ap	21	50	29	29	1,43	2,59	45	33	14	19
	BvSw	19	52	29	28	1,46	2,60	44	34	16	18
	BvSd	23	56	21	29	1,58	2,62	40	32	14	18
Staugley-Para- braunerde aus Decklöss	C	20	56	24	25	1,66	2,63	37	7	3	4
	Ap	18	74	8	25	1,46	2,62	44	32	12	20
	SwAl	18	73	9	25	1,50	2,63	43	33	12	21
	SdBt	22	66	12	29	1,57	2,64	41	33	16	17
Staugley-Para- braunerde aus Löss	IIC	11	44	45	16	1,67	2,63	37	17	7	10
	Ap	18	74	8	25	1,46	2,62	44	32	12	20
	SwAl	18	72	10	25	1,49	2,66	44	33	12	21
	SdBt	23	70	7	31	1,53	2,64	42	34	18	16
Parabraunerde aus Löss	C	17	72	11	24	1,57	2,63	40	30	13	17
	Ap	18	74	8	25	1,47	2,63	44	33	12	21
	Al	18	72	10	25	1,48	2,64	44	34	12	22
	Bt	23	70	7	31	1,46	2,65	45	35	17	18
C	20	76	4	27	1,51	2,65	43	32	12	20	

Tab. A 8.39: Bodenphysikalische Eigenschaften der repräsentativen Profile des Sachsen-Anhaltinischen Schwarz-erdegebietes.

Bodenform	Hori- zont	Bodenphysikalische Eigenschaften									
		T	U	S	FAT	TRD	TSD	PV	FKAP	PWP	NFKAP
Staugley aus Löss über Bergton	Ap	22	72	6	28	1,35	2,56	47	35	12	23
	Ah	23	72	5	28	1,40	2,60	46	33	12	21
	C	37	50	13	40	1,50	2,63	43	40	26	14
Decklöss- Schwarzerde	Ap	20	78	2	28	1,35	2,56	47	35	12	23
	Ah	20	76	4	28	1,40	2,60	46	33	12	21
	C1	3	20	77	6	1,60	2,63	39	14	6	8
	C2	3	11	86	5	1,65	2,63	37	10	5	5
Löss-Rendzina	Ap	15	70	15	23	1,40	2,60	46	27	11	16
	Ah	15	66	19	22	1,50	2,63	43	27	11	16
	C	15	69	16	23	1,80	2,65	32	26	13	13
Löss-Schwarzerde	Ap	22	72	6	28	1,35	2,56	47	35	12	23
	Ah1	23	72	5	28	1,40	2,60	46	33	12	21
	Ah2	22	60	18	26	1,40	2,60	46	33	12	21
	CC	14	78	8	22	1,50	2,62	43	30	10	20
	C	15	69	16	23	1,80	2,65	32	26	13	13
Lössstieflehm- Schwarzerde	Ap	20	78	2	28	1,35	2,56	47	35	12	23
	Ah	21	76	3	28	1,40	2,60	46	33	12	21
	CC	16	72	12	24	1,55	2,63	41	29	12	17
	C	15	69	16	23	1,80	2,65	32	26	13	13
Löss- Braunschwarzerde	Ap	22	72	6	28	1,35	2,56	47	35	12	23
	Ah1	23	72	5	28	1,40	2,60	46	33	12	21
	Ah2	22	60	18	26	1,40	2,60	46	33	12	21
	Bv	22	67	11	28	1,55	2,60	40	33	14	19
	C	14	78	8	22	1,50	2,62	43	30	10	20

A 8.4.2 Kennzahlen der Datenbasen, Tests zur Auswertung und Reduktionstests

In Ergänzung des Abschnittes 4.3 sind im Folgenden einige statistische Kennzahlen der Datenbasen (Tabellen A 8.41, A 8.48, A 8.55 und A 8.62) sowie Ergebnisse der in Abschnitt 3.2 beschriebenen Tests für die vier behandelten Gebiete dargestellt. Sämtliche Tests sind zum Niveau $\gamma = 0,05$ durchgeführt.

Die Testergebnisse zur Auswertung der Datenbasis (Abschnitt 3.2.3) sind folgendermaßen dargestellt. Zur Realisierung der Schritte 1 und 2 (Prüfung der Signifikanz von Klima- und Standortheterogenität für Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration mit Kruskal-Wallis-Tests) sind in den Tabellen A 8.42, A 8.49, A 8.56 und A 8.63 entsprechende Testgrößen H berechnet (siehe HARTUNG (1993), Kapitel XI) und Vergleichsgrößen (Quantile der χ^2 -Verteilung) angegeben.

Zur Darstellung der Ergebnisse des Schrittes 3 (Prüfung des Einflusses von Größen der Standortwirkung) ist zunächst mit Streudiagrammen für die vier Gebiete die wirksame Mineralisierungszeit als potentieller Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung festgestellt worden. In den Tabellen A 8.43, A 8.50, A 8.57 und A 8.64 sind Prüfergebnisse der

Fruchtfolgen dieser Gebiete angegeben: die Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten und die daraus berechneten Werte der K-Statistik (siehe HARTUNG (1993), Kapitel IX).

Für die Grundwasserneubildung und die Nitratkonzentration bestanden keine Abhängigkeit mit einer Größe der Standortwirkung.

Weiterhin sind die Ergebnisse von Schritt 4 (Test von Modellgrößen der Landnutzung) angegeben. Mittels Streudiagrammen wurden in den vier Gebieten für die Zustandsindikatoren folgende Antriebsindikatoren gefunden:

- Grundwasserneubildung: mittlerer jährlicher Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption (Tabellen A 8.44, A 8.51, A 8.58 und A 8.65),
- Stickstoffauswaschung: mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo und jährliche Kohlenstoffreproduktionsrate (Tabellen A 8.45, A 8.52, A 8.59 und A 8.66),
- Nitratkonzentration: mittlerer jährlicher Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption und mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo (Tabellen A 8.46, A 8.53, A 8.60 und A 8.67).

In den Tabellen sind dazu als Resultate für die jeweils 18 Faktorstufenkombinationen von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität die Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten und die Werte der K-Statistik angegeben (vergleiche HARTUNG (1993), Kapitel IX).

Im Anschluss an die Auswertung der Datenbasis wurden die Regressionsansätze geprüft. Hierzu werden für jedes der vier Gebiete Ergebnisse der Reduktionstests (siehe HARTUNG (1993), Kapitel X) angegeben. Die verwendeten Bezeichnungen sind in Anlehnung an die Literaturquelle gewählt worden:

- SSR_{Z_I} bezeichnet das Produkt aus Varianz der beobachteten Werte und Bestimmtheitsmaß der Regressionsfunktion, welche alle ermittelten Antriebsindikatoren als Regressoren enthält; Z_I bezeichnet einen der drei Zustandsindikatoren Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung oder Nitratkonzentration,
- $SSR_{\%A_I}$ bezeichnet das Produkt aus Varianz der beobachteten Werte und Bestimmtheitsmaß der Regressionsfunktion, welche den Antriebsindikator A_I nicht mehr enthält; A_I bezeichnet einen Antriebsindikator,
- q ist Anzahl der reduzierten Regressoren,
- s^2 ist Summe der Quadrate der Residuen geteilt durch die Anzahl der Freiheitsgrade.

Aus den genannten Größen wird für jeden reduzierten Regressionansatz eine Testgröße TG_{RED} bestimmt:

$$TG_{RED} = \frac{SSR_{Z_I} - SSR_{\%A_I}}{s^2 \cdot q};$$

welche mit dem entsprechenden Quantil der F-Verteilung $F_{1,anz-k_r-1;1-\gamma}$ verglichen wird, mit anz als Anzahl der Elemente, k_r als Anzahl der Regressoren und dem Signifikanzniveau $\gamma = 0,05$ (siehe oben). Abschließend erfolgen Histogrammdarstellungen der normierten Residuen der Regressionsfunktionen (siehe HARTUNG (1993), Kapitel X).

A 8.4.2.1 Nordsächsisches Platten- und Hügelland

Zum Erstellen der Datenbasis ist für die 48 Fruchtfolgen in den 18 Faktorstufenkombinationen von Standort- und Klimaheterogenität (Tabelle A 8.40) die CANDY-Prozesssimulation durchgeführt worden.

Tab. A 8.40: Erstellung der Datenbasis des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes: Faktorstufenkombinationen (FSK) von Standort- und Klimaheterogenität. NIED: Jahresniederschlagssumme des Datensatzes vom Referenzwetterablauf, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität der repräsentativen Profile.

FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm	FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm	FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm
1	538	57	7	598	57	13	658	57
2	538	111	8	598	111	14	658	111
3	538	180	9	598	180	15	658	180
4	538	246	10	598	246	16	658	246
5	538	279	11	598	279	17	658	279
6	538	293	12	598	293	18	658	293

Insgesamt waren 864 Simulationsobjekte zu rechnen und auszuwerten. Tabelle A 8.41 zeigt statistische Kennziffern einiger Modellgrößen der Datenbasis.

Tab. A 8.41: Nordsächsisches Platten- und Hügelland: statistische Kennzahlen der Modellgrößen Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK in mm), Jahresniederschlagssumme (NIED in mm), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ in d/a), Bedeckungsgrad (BG in d/a), Kohlenstoffproduktionsrate (CREP in dt/(ha·a)), Stickstoffsaldo (N_SALDO in kg/(ha·a)), Grundwasserneubildung (GWB in mm/a), Stickstoffauswaschung (NAUS in kg/(ha·a)), Nitratkonzentration im Sickerwasser (NO₃_KONZ in mg/l); St_abw: Standardabweichung in der jeweiligen Einheit der Modellgröße.

Größe	Minimum	Maximum	Spannweite	Mittelwert	Median	St_abw
NFK	57	293	236	194	213	87
NIED	538	658	120	598	598	49
WMZ	16	49	34	27	25	9
BG	90	180	90	132	124	25
CREP	7	22	16	15	16	3
N_SALDO	22	149	127	68	62	29
GWB	44	273	230	143	141	50
N_AUS	1	125	124	41	37	26
NO ₃ _KONZ	7	741	734	135	109	100

Auswertung der Datenbasis:

Schritte 1 und 2: Durchführung von sechs Kruskal-Wallis-Tests zur Untersuchung der Mittelwerte von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration (Tabelle A 8.42) für die drei Stufen 538, 598 und 658 mm der Jahresniederschlagssumme sowie für die 6 Stufen 57, 111, 180, 246, 279 und 293 mm der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität.

Schritt 3: Untersuchung der Fruchtfolgen für die 18 Faktorstufenkombinationen: Berechnung von Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten, der Kendallschen K-Statistik und Prüfgrößen für jede Fruchtfolge (Tabelle A 8.43).

Schritt 4: Berechnung der Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten, Kendallschen K-Statistik und Prüfgrößen für Modellgrößen der Landnutzung (Tabellen A 8.44, A 8.45 und A 8.46).

Tab. A 8.42: Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland.

Schritte 1 und 2 zur Prüfung der Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität für Grundwasserneubildung (GWB), Stickstoffauswaschung (N_AUS) und Nitratkonzentration (NO3_K): Ergebnisse der sechs Kruskal-Wallis-Tests. FG: Anzahl der Freiheitsgrade. Testergebnis „+“: Faktor ist signifikant, Testergebnis „-“: Faktor ist nicht signifikant.

Faktor	Zustands-Indikator	Testgröße H	FG	Quantil der χ^2 -Verteilung	Testergebnis
Jahresniederschlagssumme	GWB	425,12	2	5,99	+
	N_AUS	1,67	2	5,99	-
	NO3_K	65,3	2	5,99	+
Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	GWB	347,67	5	11,07	+
	N_AUS	104,71	5	11,07	+
	NO3_K	21,06	5	11,07	+

Tab. A 8.43: Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland.

Schritt 3: Test der wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung. Ergebnisse der 48 Fruchtfolgen. „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, Testergebnis „+“: WMZ ist für Fruchtfolge signifikant, Testergebnis „-“: WMZ ist für Fruchtfolge nicht signifikant.

Fruchtfolge	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	Testergebnis	Fruchtfolge	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	Testergebnis
1	0,92	141	5,34	+	25	0,59	91	3,45	+
2	0,90	137	5,19	+	26	0,50	77	2,92	+
3	0,92	141	5,34	+	27	0,52	79	2,99	+
4	0,88	135	5,11	+	28	0,54	83	3,14	+
5	0,83	127	4,81	+	29	0,50	77	2,92	+
6	0,78	119	4,51	+	30	0,66	101	3,83	+
7	0,87	133	5,04	+	31	0,48	73	2,77	+
8	0,59	91	3,45	+	32	0,83	127	4,81	+
9	0,92	141	5,34	+	33	0,84	129	4,89	+
10	0,65	99	3,75	+	34	0,91	139	5,27	+
11	0,91	139	5,27	+	35	0,71	109	4,13	+
12	0,82	125	4,73	+	36	0,56	85	3,22	+
13	0,92	141	5,34	+	37	0,54	83	3,14	+
14	0,91	139	5,27	+	38	0,56	85	3,22	+
15	0,62	95	3,60	+	39	0,54	83	3,14	+
16	0,54	83	3,14	+	40	0,58	89	3,37	+
17	0,58	89	3,37	+	41	0,61	93	3,52	+
18	0,46	71	2,69	+	42	0,49	75	2,84	+
19	0,54	83	3,14	+	43	0,66	101	3,83	+
20	0,45	69	2,61	+	44	0,73	111	4,20	+
21	0,59	91	3,45	+	45	0,92	141	5,34	+
22	0,84	129	4,89	+	46	0,57	87	3,30	+
23	0,83	127	4,81	+	47	0,92	141	5,34	+
24	0,67	103	3,90	+	48	0,61	93	3,52	+

Der kritische Wert $u_{1-\gamma/2}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Da die Testgröße für alle 48 Fruchtfolgen diesen Wert überschreitet, ist die Abhängigkeit von Stickstoffauswaschung und wirksamer Mineralisierungszeit bestätigt, d. h. die Modellgröße ist Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung.

Tab. A 8.44: Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland.

Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: BG ist signifikant, Testergebnis „-“: BG ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE
1	BG	-0,86	-968	-8,60	+	10	BG	-0,66	-743	-6,60	+
2	BG	-0,78	-885	-7,87	+	11	BG	-0,65	-735	-6,53	+
3	BG	-0,66	-749	-6,65	+	12	BG	-0,64	-723	-6,42	+
4	BG	-0,61	-692	-6,15	+	13	BG	-0,84	-952	-8,46	+
5	BG	-0,60	-682	-6,06	+	14	BG	-0,78	-883	-7,85	+
6	BG	-0,60	-674	-5,99	+	15	BG	-0,69	-777	-6,90	+
7	BG	-0,85	-954	-8,48	+	16	BG	-0,67	-759	-6,74	+
8	BG	-0,79	-887	-7,89	+	17	BG	-0,66	-745	-6,62	+
9	BG	-0,69	-773	-6,87	+	18	BG	-0,65	-739	-6,56	+

Da bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der Betrag der Testgröße größer als der Wert der kritischen Größe ist, wurde der Bedeckungsgrad als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung bestätigt.

Tab. A 8.45: Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland.

Schritt 4: Test von Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: CREP bzw. N_SALDO ist signifikant, Testergebnis „-“: CREP bzw. N_SALDO ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE
1	CREP	-0,23	-264	-2,35	+	10	CREP	-0,43	-481	-4,28	+
	N_SALDO	0,95	1068	9,49	+		N_SALDO	0,93	1054	9,37	+
2	CREP	-0,18	-203	-1,80	-	11	CREP	-0,16	-180	-1,60	-
	N_SALDO	0,96	1080	9,60	+		N_SALDO	0,95	1072	9,53	+
3	CREP	-0,38	-431	-3,83	+	12	CREP	-0,42	-477	-4,24	+
	N_SALDO	0,96	1078	9,58	+		N_SALDO	0,95	1070	9,51	+
4	CREP	-0,42	-477	-4,24	+	13	CREP	-0,18	-207	-1,84	-
	N_SALDO	0,94	1062	9,44	+		N_SALDO	0,96	1083	9,63	+
5	CREP	-0,41	-465	-4,14	+	14	CREP	-0,29	-323	-2,87	+
	N_SALDO	0,97	1090	9,69	+		N_SALDO	0,95	1072	9,53	+
6	CREP	-0,42	-479	-4,26	+	15	CREP	-0,31	-351	-3,12	+
	N_SALDO	0,95	1074	9,55	+		N_SALDO	0,94	1058	9,40	+
7	CREP	-0,20	-228	-2,03	+	16	CREP	-0,43	-487	-4,33	+
	N_SALDO	0,96	1078	9,58	+		N_SALDO	0,94	1058	9,40	+
8	CREP	-0,30	-339	-3,01	+	17	CREP	-0,39	-445	-3,96	+
	N_SALDO	0,96	1078	9,58	+		N_SALDO	0,95	1074	9,55	+
9	CREP	-0,34	-389	-3,46	+	18	CREP	-0,44	-495	-4,40	+
	N_SALDO	0,95	1066	9,47	+		N_SALDO	0,95	1070	9,51	+

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Für die 18 Faktorstufenkombinationen wurden folgende Ergebnisse erzielt. Bei Untersuchung der Kohlenstoffreproduktionsrate CREP wurde der kritische Wert bei 15 Faktorstufenkombinationen durch den Betrag der Testgröße überschritten und bei drei Faktorstufenkombinationen unterschritten. Für die Mehrzahl der Faktorstufenkombinationen ist somit die Abhängigkeit mit der Stickstoffauswaschung nachgewiesen. Für den Stickstoffsaldo ist bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der kritische Wert kleiner als der Betrag der Testgröße. Der Stickstoffsaldo ist somit bei allen Faktorstufenkombinationen Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung.

Tab. A 8.46: Auswertung der Datenbasis für das Nordsächsische Platten- und Hügelland.

Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, Prüfgr. K^* : Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: BG bzw. N_SALDO ist signifikant, Testergebnis „-“: BG bzw. N_SALDO ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K^*	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K^*	TE
1	BG	-0,09	-102	-0,90	-	10	BG	-0,38	-433	-3,85	+
	N_SALDO	0,88	994	8,83	+		N_SALDO	0,92	1034	9,19	+
2	BG	-0,27	-300	-2,67	+	11	BG	-0,32	-361	-3,21	+
	N_SALDO	0,91	1024	9,10	+		N_SALDO	0,88	996	8,85	+
3	BG	-0,29	-323	-2,87	+	12	BG	-0,38	-429	-3,81	+
	N_SALDO	0,87	982	8,73	+		N_SALDO	0,93	1046	9,30	+
4	BG	-0,38	-427	-3,80	+	13	BG	-0,12	-134	-1,19	-
	N_SALDO	0,90	1020	9,07	+		N_SALDO	0,90	1018	9,05	+
5	BG	-0,32	-363	-3,22	+	14	BG	-0,22	-244	-2,17	+
	N_SALDO	0,89	1000	8,89	+		N_SALDO	0,91	1022	9,08	+
6	BG	-0,37	-413	-3,67	+	15	BG	-0,22	-250	-2,22	+
	N_SALDO	0,90	1016	9,03	+		N_SALDO	0,87	982	8,73	+
7	BG	-0,13	-144	-1,28	-	16	BG	-0,39	-443	-3,94	+
	N_SALDO	0,89	1006	8,94	+		N_SALDO	0,92	1042	9,26	+
8	BG	-0,24	-270	-2,40	+	17	BG	-0,31	-349	-3,10	+
	N_SALDO	0,91	1022	9,08	+		N_SALDO	0,90	1018	9,05	+
9	BG	-0,25	-278	-2,47	+	18	BG	-0,40	-447	-3,97	+
	N_SALDO	0,86	968	8,60	+		N_SALDO	0,93	1054	9,37	+

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Bei Untersuchung des Bedeckungsgrades BG wurde der kritische Wert bei 15 Faktorstufenkombinationen durch den Betrag der Testgröße überschritten und bei drei Faktorstufenkombinationen unterschritten. Für die Mehrzahl der Faktorstufenkombinationen ist somit die Abhängigkeit mit der Nitratkonzentration nachgewiesen. Für den Stickstoffsaldo ist bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der kritische Wert kleiner als der Betrag der Testgröße. Der Stickstoffsaldo ist somit bei allen Faktorstufenkombinationen Antriebsindikator der Nitratkonzentration.

Als Ergebnis der Auswertung der Datenbasis kann für das Nordsächsische Platten- und Hügelland festgestellt werden:

- für Grundwasserneubildung (GWB) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) und Bedeckungsgrad (BG) Antriebsindikatoren, GWB lässt sich als Regressionsfunktion f_{NP_1} schreiben: $GWB = f_{NP_1}(NIED, NFK, BG)$,
- für Stickstoffauswaschung (N_AUS) sind Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ), Stickstoffsaldo (N_SALDO) und Kohlenstoffproduktionsrate (CREP) Antriebsindikatoren, N_AUS lässt sich als Regressionsfunktion f_{NP_2} schreiben: $N_AUS = f_{NP_2}(NFK, WMZ, N_SALDO, CREP)$,
- für Nitratkonzentration (NO3_K) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) Antriebsindikatoren, NO3_K lässt sich als Regressionsfunktion f_{NP_3} schreiben: $NO3_K = f_{NP_3}(NIED, NFK, BG, N_SALDO)$.

Die genannten Antriebsindikatoren sind somit Regressoren in drei Regressionsansätzen, welche die relative Änderung der Zustandsindikatoren aus den relativen Änderungen ihrer Antriebsindikatoren beschreiben. Mit Reduktionstests wird für jede Regressionsfunktion die Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren geprüft.

Ergebnisse der Reduktionstests:

Zur Prüfung der Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren wurden Reduktionstests durchgeführt. Die Vergleichsgröße, das entsprechende Quantil der F-Verteilung, ist für alle Tests $F_{1,\infty;0,95} = 3,841$. Die Bedeutung der Symbole in den Formeln ist Abschnitt 4.3 und der Einführung in Abschnitt 8.4.2 zu entnehmen. Im Folgenden sind einige Resultate dargestellt.

Grundwasserneubildung:

Für die Regressionsfunktion f_{NP_1} ist $SSR_{GWB} = 99,50$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung des Bedeckungsgrades BG wird ein Maß $SSR_{\%BG} = 93,62$ erreicht, so dass für die Prüfgröße gilt:

$$\frac{SSR_{GWB} - SSR_{\%BG}}{s^2 \cdot q} = \frac{99,50 - 93,62}{0,282 \cdot 1} = 20,8$$

mit s^2 und q wie oben definiert. Da $20,8 > 3,841$ ist der Bedeckungsgrad ein notwendiger Regressor. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) ist $SSR_{\%NFK} = 56,57$, die Testgröße TG_{RED} hat den Wert 152,2, was die Notwendigkeit des Regressors bestätigt. Ein um die Jahresniederschlagssumme reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%NIED} = 48,81$ eine Testgröße von 180,0, welche auch größer als $F_{1,\infty;0,95}$ ist. Es ist somit die Notwendigkeit aller drei Antriebsindikatoren in der Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung bestätigt.

Stickstoffauswaschung:

Für den Regressionsansatz f_{NP_2} ist $SSR_{N_AUS} = 351$ und $s^2 = 0,411$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ist $SSR_{\%NFK} = 350,6$. Für die Testgröße gilt

$$\frac{SSR_{N_AUS} - SSR_{\%NFK}}{s^2 \cdot q} = \frac{351,0 - 350,6}{0,411 \cdot 1} = 0,97.$$

Sie ist somit kleiner als die Vergleichsgröße, was die Redundanz der NFK anzeigt. Auf analoge Weise ist die Regressionsfunktion f_{NP_2} durch schrittweise Reduktion der Regressoren wirksame Mineralisierungszeit (WMZ), Stickstoffsaldo (N_SALDO) und Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) untersucht worden. Die Notwendigkeit der drei Regressoren wurde durch diese Tests bestätigt, so dass nun ein verändertes Regressionsmodell der Stickstoffauswaschung $N_AUS = f_{NP_2_1}$ (WMZ, N_SALDO, CREP) angesetzt werden kann, was ohne den Regressor Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität auskommt.

Auf diese neue Funktion sind erneut Reduktionstests anzuwenden. Es ist für $f_{NP_2_1}$ $SSR_{N_AUS} = 321,7$ und $s^2 = 0,241$, als Vergleichsgröße ist wieder das Quantil der F-Verteilung $F_{1,860;0,95} \approx F_{1,\infty;0,95} = 3,841$ zu verwenden. Bei Reduktion der WMZ ergibt sich $SSR_{\%WMZ} = 295,7$ und für die Testgröße 107,9, welche damit größer als $F_{1,\infty;0,95}$ ist. Die WMZ ist somit notwendiger Antriebsindikator. Die Reduktion von CREP liefert mit $SSR_{\%CREP} = 312,0$ eine Testgröße von 40,2, was die Notwendigkeit der Kohlenstoffreproduktionsrate anzeigt. Eine Reduktion des Ansatzes um den Stickstoffsaldo führt zu $SSR_{\%N_SALDO} = 35,72$ und $TG_{RED} = 1184,4$, womit die Notwendigkeit dieses Regressors nachgewiesen ist. Die Reduktionstests haben somit ergeben, dass die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität im gewählten Regressionsansatz ein redundanter Regressor ist. Es genügt, in die Regressionsfunktion die drei Regressoren wirksame Mineralisierungszeit, Stickstoffsaldo und Kohlenstoffreproduktionsrate aufzunehmen.

Nitratkonzentration:

Für den Regressionsansatz f_{NP_3} ist $SSR_{NO3_K} = 65,56$ und $s^2 = 0,089$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung des Bedeckungsgrades BG werden $SSR_{\%BG} = 63$ und die Prüfgröße 28,4 erreicht. Da $28,4 > 3,841$ ist der Bedeckungsgrad ein notwendiger Regressor. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) ist $SSR_{\%NFK} = 60,7$, die Testgröße TG_{RED} hat den Wert 54,4, was die Notwendigkeit des Regressors bestätigt. Ein um die Jahresniederschlagssumme reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%NIED} = 53,8$ eine Testgröße von 132,1, welche auch größer als $F_{1,\infty;0,95}$ ist. Ein um den Stickstoffsaldo (N_SALDO) reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%N_SALDO} = 16,1$ eine Testgröße TG_{RED} von 49,4. Es ist somit die Notwendigkeit aller vier Antriebsindikatoren in der Regressionsfunktion für Nitratkonzentration bestätigt.

Residualanalyse:

Histogrammdarstellungen der standardisierten Residuen für die Regressionsfunktionen der Zustandsindikatoren (vergleiche Abschnitt 4.3) erfolgen in den Abbildungen A 8.1, A 8.2 und A 8.3.

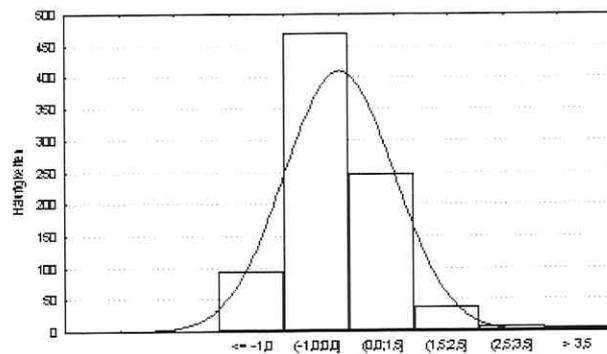


Abb. A 8.1: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung des Nord-sächsischen Platten- und Hügellandes).

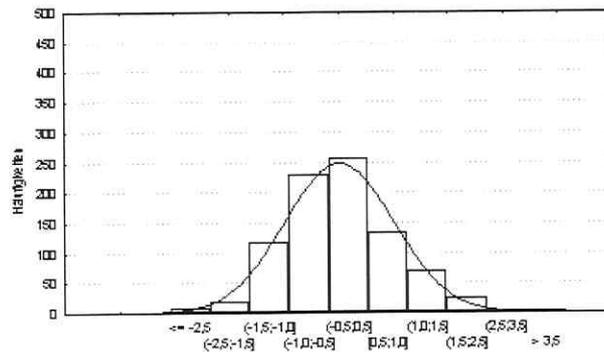


Abb. A 8.2: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Nord-sächsischen Platten- und Hügellandes).

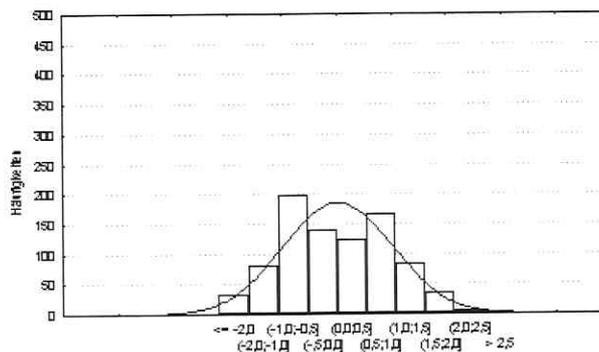


Abb. A 8.3: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Nitratkonzentration des Nordsächsi-schen Platten- und Hügellandes).

A 8.4.2.2 Mittelsächsisches Lösshügelland

Zum Erstellen der Datenbasis ist für die 28 Fruchtfolgen in den 18 Faktorstufenkombinationen von Standort- und Klimaheterogenität (Tabelle A 8.47) die CANDY-Prozesssimulation durchgeführt worden.

Tab. A 8.47: Erstellung der Datenbasis des Mittelsächsischen Lösshügellandes: Faktorstufenkombinationen (FSK) von Standort- und Klimaheterogenität. NIED: Jahresniederschlagssumme des Datensatzes vom Referenzwetterablauf, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität der repräsentativen Profile.

FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm	FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm	FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm
1	587	94	7	652	94	13	717	94
2	587	180	8	652	180	14	717	180
3	587	196	9	652	196	15	717	196
4	587	282	10	652	282	16	717	282
5	587	354	11	652	354	17	717	354
6	587	401	12	652	401	18	717	401

Insgesamt waren 504 Simulationsobjekte zu rechnen und auszuwerten. Tabelle A 8.48 zeigt statistische Kennziffern einiger Modellgrößen der Datenbasis.

Tab. A 8.48: Mittelsächsisches Lösshügelland: statistische Kennzahlen der Modellgrößen Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK in mm), Jahresniederschlagssumme (NIED in mm), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ in d/a), Bedeckungsgrad (BG in d/a), Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP in dt/(ha-a)), Stickstoffsaldo (N_SALDO in kg/(ha-a)), Grundwasserneubildung (GWB in mm/a), Stickstoffauswaschung (NAUS in kg/(ha-a)), Nitratkonzentration im Sickerwasser (NO₃_KONZ in mg/l), St_abw: Standardabweichung in der jeweiligen Einheit der Modellgröße.

Größe	Minimum	Maximum	Spannweite	Mittelwert	Median	St_abw
NFK	94	401	307	251	239	106
NIED	587	717	130	652	652	48
WMZ	9	41	32	26	26	8
BG	90	180	90	128	123	27
CREP	6	19	13	14	16	4
N_SALDO	21	121	100	64	57	28
GWB	59	365	306	183	179	59
N_AUS	1	90	89	36	31	25
NO ₃ _KONZ	5	521	516	94	75	78

Auswertung der Datenbasis:

Schritte 1 und 2: Durchführung von sechs Kruskal-Wallis-Tests zur Untersuchung der Mittelwerte von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration (Tabelle A 8.49) für die drei Stufen 587, 652 und 717 mm der Jahresniederschlagssumme sowie für die 6 Stufen 94, 180, 196, 282, 354 und 401 mm der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität.

Schritt 3: Untersuchung der Fruchtfolgen für die 18 Faktorstufenkombinationen: Berechnung von Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten, der Kendallschen K-Statistik und Prüfgrößen für jede Fruchtfolge (Tabelle A 8.50).

Schritt 4: Berechnung der Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten, Kendallschen K-Statistik und Prüfgrößen für Modellgrößen der Landnutzung (Tabellen A 8.51, A 8.52 und A 8.53).

Tab. A 8.49: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland.

Schritte 1 und 2 zur Prüfung der Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität für Grundwasserneubildung (GWB), Stickstoffauswaschung (N_AUS) und Nitratkonzentration (NO3_K): Ergebnisse der sechs Kruskal-Wallis-Tests. FG: Anzahl der Freiheitsgrade. Testergebnis „+“: Faktor ist signifikant, Testergebnis „-“: Faktor ist nicht signifikant.

Faktor	Zustands-Indikator	Testgröße H	FG	Quantil der χ^2 -Verteilung	Testergebnis
Jahresniederschlagssumme	GWB	227,27	2	5,99	+
	N_AUS	0,6	2	5,99	-
	NO3_K	17,76	2	5,99	+
Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	GWB	100,87	5	11,07	+
	N_AUS	38	5	11,07	+
	NO3_K	17	5	11,07	+

Für Grundwasserneubildung und Nitratkonzentration wurde die Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität bestätigt. Bei der Stickstoffauswaschung ist zum Niveau 0,05 lediglich die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität signifikant. Wie auch beim Nordsächsischen Platten- und Hügelland ist hier die Jahresniederschlagssumme kein Antriebsindikator.

Tab. A 8.50: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland.

Schritt 3: Test der wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung. Ergebnisse der 28 Fruchtfolgen. „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, Testergebnis „,+“: WMZ ist für Fruchtfolge signifikant, Testergebnis „,-“: WMZ ist für Fruchtfolge nicht signifikant.

Fruchtfolge	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K [*]	Testergebnis	Fruchtfolge	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K [*]	Testergebnis
1	0,63	97	3,67	+	15	0,08	13	0,49	-
2	0,67	103	3,90	+	16	0,14	21	0,80	-
3	0,54	83	3,14	+	17	0,48	73	2,77	+
4	0,67	103	3,90	+	18	0,50	77	2,92	+
5	0,71	109	4,13	+	19	0,75	115	4,36	+
6	0,63	97	3,67	+	20	0,25	39	1,48	-
7	0,59	91	3,45	+	21	0,66	101	3,83	+
8	0,73	111	4,20	+	22	0,42	65	2,46	+
9	0,71	109	4,13	+	23	0,05	7	0,27	-
10	0,63	97	3,67	+	24	0,36	55	2,08	+
11	0,78	119	4,51	+	25	0,07	11	0,42	-
12	0,59	91	3,45	+	26	0,35	53	2,01	+
13	0,63	97	3,67	+	27	0,35	53	2,01	+
14	0,59	91	3,45	+	28	0,32	49	1,86	-

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Die Testgröße überschreitet bei 22 der 28 Fruchtfolgen diesen Wert, bei 6 Fruchtfolgen hingegen nicht. Insgesamt ist damit im Mittelsächsischen Lösshügelland für die Mehrzahl der Fruchtfolgen die Abhängigkeit von Stickstoffauswaschung und wirksamer Mineralisierungszeit bestätigt, d. h. die Modellgröße ist Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung.

Tab. A 8.51: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland.

Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „,+“: BG ist signifikant, Testergebnis „,-“: BG ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K [*]	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K [*]	TE
1	BG	-0,61	-232	-4,58	+	10	BG	-0,56	-213	-4,21	+
2	BG	-0,54	-206	-4,06	+	11	BG	-0,51	-194	-3,82	+
3	BG	-0,55	-208	-4,10	+	12	BG	-0,51	-192	-3,78	+
4	BG	-0,50	-190	-3,74	+	13	BG	-0,62	-234	-4,62	+
5	BG	-0,50	-190	-3,74	+	14	BG	-0,55	-210	-4,14	+
6	BG	-0,51	-192	-3,78	+	15	BG	-0,55	-210	-4,14	+
7	BG	-0,61	-230	-4,54	+	16	BG	-0,52	-198	-3,90	+
8	BG	-0,55	-208	-4,10	+	17	BG	-0,52	-196	-3,86	+
9	BG	-0,56	-212	-4,18	+	18	BG	-0,52	-196	-3,86	+

Da bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der Betrag der Testgröße größer als der Wert der kritischen Größe ist, wurde der Bedeckungsgrad als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung bestätigt.

Tab. A 8.52: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland.

Schritt 4: Test von Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: CREP bzw. N_SALDO ist signifikant, Testergebnis „-“: CREP bzw. N_SALDO ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE
1	CREP	-0,30	-113	-2,22	+	10	CREP	-0,19	-72	-1,42	-
	N_SALDO	0,96	362	7,15	+		N_SALDO	0,96	362	7,15	+
2	CREP	-0,24	-92	-1,83	-	11	CREP	-0,29	-111	-2,18	+
	N_SALDO	0,95	360	7,11	+		N_SALDO	0,95	360	7,11	+
3	CREP	-0,34	-127	-2,50	+	12	CREP	-0,30	-113	-2,22	+
	N_SALDO	0,95	358	7,07	+		N_SALDO	0,92	346	6,84	+
4	CREP	-0,21	-79	-1,57	-	13	CREP	-0,28	-105	-2,07	+
	N_SALDO	0,96	362	7,15	+		N_SALDO	0,94	356	7,03	+
5	CREP	-0,33	-125	-2,46	+	14	CREP	-0,18	-66	-1,31	-
	N_SALDO	0,92	348	6,88	+		N_SALDO	0,92	346	6,84	+
6	CREP	-0,24	-91	-1,79	-	15	CREP	-0,29	-109	-2,15	+
	N_SALDO	0,91	344	6,80	+		N_SALDO	0,94	354	6,99	+
7	CREP	-0,29	-111	-2,18	+	16	CREP	-0,32	-123	-2,42	+
	N_SALDO	0,95	360	7,11	+		N_SALDO	0,96	362	7,15	+
8	CREP	-0,20	-76	-1,51	-	17	CREP	-0,29	-109	-2,15	+
	N_SALDO	0,93	352	6,95	+		N_SALDO	0,92	348	6,88	+
9	CREP	-0,31	-117	-2,30	+	18	CREP	-0,28	-107	-2,11	+
	N_SALDO	0,94	356	7,03	+		N_SALDO	0,92	346	6,84	+

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Bei Untersuchung der Kohlenstoffreproduktionsrate CREP war der Betrag der Testgröße bei 12 Faktorstufenkombinationen größer als der kritischen Wert und bei 6 Faktorstufenkombinationen kleiner. Für die Mehrzahl der Faktorstufenkombinationen ist somit die Abhängigkeit von Kohlenstoffreproduktionsrate und Stickstoffauswaschung nachgewiesen. Für den Stickstoffsaldo ist bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der kritische Wert kleiner als der Betrag der Testgröße, der Stickstoffsaldo ist somit bei allen Faktorstufenkombinationen Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung.

Tab. A 8.53: Auswertung der Datenbasis für das Mittelsächsische Lösshügelland.

Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, Prüfgr. K^{*}: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: BG bzw. N_SALDO ist signifikant, Testergebnis „-“: BG bzw. N_SALDO ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K [*]	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K [*]	TE
1	BG	-0,29	-111	-2,19	+	10	BG	-0,31	-119	-2,34	+
	N_SALDO	0,91	344	6,80	+		N_SALDO	0,87	328	6,48	+
2	BG	-0,21	-81	-1,59	-	11	BG	-0,36	-135	-2,67	+
	N_SALDO	0,80	302	5,97	+		N_SALDO	0,86	324	6,40	+
3	BG	-0,33	-123	-2,43	+	12	BG	-0,37	-141	-2,79	+
	N_SALDO	0,86	326	6,44	+		N_SALDO	0,84	318	6,28	+
4	BG	-0,33	-125	-2,47	+	13	BG	-0,26	-99	-1,95	-
	N_SALDO	0,86	324	6,40	+		N_SALDO	0,88	334	6,60	+
5	BG	-0,34	-129	-2,55	+	14	BG	-0,15	-58	-1,16	-
	N_SALDO	0,83	312	6,16	+		N_SALDO	0,75	284	5,61	+
6	BG	-0,36	-135	-2,67	+	15	BG	-0,32	-121	-2,39	+
	N_SALDO	0,83	312	6,16	+		N_SALDO	0,89	338	6,68	+
7	BG	-0,27	-103	-2,03	+	16	BG	-0,38	-143	-2,83	+
	N_SALDO	0,91	344	6,80	+		N_SALDO	0,94	354	6,99	+
8	BG	-0,18	-69	-1,35	-	17	BG	-0,37	-141	-2,79	+
	N_SALDO	0,78	294	5,81	+		N_SALDO	0,87	328	6,48	+
9	BG	-0,33	-125	-2,47	+	18	BG	-0,38	-143	-2,83	+
	N_SALDO	0,88	332	6,56	+		N_SALDO	0,86	326	6,44	+

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Bei Untersuchung des Bedeckungsgrades BG wurde der kritische Wert bei 15 Faktorstufenkombinationen durch den Betrag der Testgröße überschritten und bei drei Faktorstufenkombinationen unterschritten. Für die Mehrzahl der Faktorstufenkombinationen ist somit die Abhängigkeit mit der Nitratkonzentration nachgewiesen. Für den Stickstoffsaldo ist bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der kritische Wert kleiner als der Betrag der Testgröße. Der Stickstoffsaldo ist somit bei allen Faktorstufenkombinationen Antriebsindikator der Nitratkonzentration.

Als Ergebnis der Auswertung der Datenbasis kann für das Mittelsächsische Lösshügelland festgestellt werden:

- für die Grundwasserneubildung (GWB) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) und Bedeckungsgrad (BG) Antriebsindikatoren, GWB lässt sich als Regressionsfunktion $f_{MH,1}$ schreiben: $GWB = f_{MH,1}(NIED, NFK, BG)$,
- für Stickstoffauswaschung (N_AUS) sind Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ), Stickstoffsaldo (N_SALDO) und Kohlenstoffproduktionsrate (CREP) Antriebsindikatoren, N_AUS lässt sich als Regressionsfunktion $f_{MH,2}$ schreiben: $N_AUS = f_{MH,2}(NFK, WMZ, N_SALDO, CREP)$,
- für Nitratkonzentration (NO3_K) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) Antriebsindikatoren, NO3_K lässt sich als Regressionsfunktion $f_{MH,3}$ schreiben:

$\text{NO3_K} = f_{\text{MH}_3}(\text{NIED}, \text{NFK}, \text{BG}, \text{N_SALDO})$.

Die gefundenen Antriebsindikatoren sind somit Regressoren in drei Regressionsansätzen, welche die relative Änderung der Zustandsindikatoren aus den relativen Änderungen ihrer Antriebsindikatoren beschreiben. Mit Reduktionstests wird für jede Regressionsfunktion die Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren geprüft.

Ergebnisse der Reduktionstests:

Zur Prüfung der Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren wurden Reduktionstests durchgeführt. Die Vergleichsgröße, das entsprechende Quantil der F-Verteilung, ist für alle Tests $F_{1,\infty;0,95} = 3,841$. Die Bedeutung der Symbole in den Formeln ist Abschnitt 4.3 und der Einführung in Abschnitt 8.4.2 zu entnehmen. Im Folgenden sind einige Resultate dargestellt.

Grundwasserneubildung:

Für den Regressionsansatz f_{MH_1} ist $SSR_{\text{GWB}} = 35,06$, der Wert für s^2 beträgt 0,431. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung des Bedeckungsgrades BG wird $SSR_{\%BG} = 31,08$ erreicht, so dass für die Prüfgröße gilt:

$$TG_{\text{RED}} = \frac{SSR_{\text{GWB}} - SSR_{\%BG}}{s^2 \cdot q} = \frac{35,06 - 31,08}{0,431 \cdot 1} = 9,2$$

mit s^2 und q wie oben definiert. Da $9,2 > 3,841$ ist der Bedeckungsgrad ein notwendiger Regressor. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) ist $SSR_{\%NFK} = 26,27$. Der Wert der Testgröße beträgt 20,4, was die Notwendigkeit des Regressors bestätigt. Ein um die Jahresniederschlagssumme reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%NIED} = 12,82$ eine Testgröße von 51,6, welche auch größer als $F_{1,\infty;0,95}$ ist. Es ist somit die Notwendigkeit aller drei Antriebsindikatoren in der Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung bestätigt.

Stickstoffauswaschung:

Für den Regressionsansatz f_{MH_2} , welcher Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, wirksame Mineralisierungszeit, Stickstoffsaldo und Kohlenstoffreproduktionsrate als Regressoren enthält, ist $SSR_{\text{N_AUS}} = 247,7$ und $s^2 = 0,503$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ist $SSR_{\%NFK} = 247,47$. Der Wert der Testgröße ist damit 0,457, was die Redundanz der NFK in diesem Regressionsansatz anzeigt. Auf analoge Weise ist die Regressionsfunktion f_{MH_2} durch schrittweise Reduktion der Regressoren wirksame Mineralisierungszeit (WMZ), Stickstoffsaldo (N_SALDO) und Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) untersucht worden. Die Notwendigkeit der drei Regressoren wurde durch diese Tests bestätigt, so dass nun ein verändertes Regressionsmodell der Stickstoffauswaschung $\text{N_AUS} = f_{\text{MH}_2_1}(\text{WMZ}, \text{N_SALDO}, \text{CREP})$ angesetzt werden kann, was ohne den Regressor Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität auskommt.

Auf diese neue Funktion sind weitere Reduktionstests anzuwenden. Es ist für $f_{MH_2_1}$ $SSR_{N_AUS} = 239,11$ und $s^2 = 0,297$. Bei Reduktion der WMZ ergibt sich $SSR_{\%WMZ} = 219,6$ und für die Testgröße 65,7, die damit größer als $F_{1,\infty;0,95}$ ist. Die WMZ ist somit notwendiger Antriebsindikator. Die Reduktion von CREP liefert mit $SSR_{\%CREP} = 231,8$ eine Testgröße von 24,6, was die Notwendigkeit der Kohlenstoffreproduktionsrate anzeigt. Eine Reduktion des Ansatzes um den Stickstoffsaldo ergibt $SSR_{\%N_SALDO} = 26,73$ und $TG_{RED} = 715,1$, womit die Notwendigkeit dieses Regressors nachgewiesen ist. Es genügt somit, in die Regressionsfunktion der Stickstoffauswaschung die drei Regressoren wirksame Mineralisierungszeit, Stickstoffsaldo und Kohlenstoffreproduktionsrate aufzunehmen.

Nitratkonzentration:

Für den Regressionsansatz f_{MH_3} ist $SSR_{NO3_K} = 293,5$ und $s^2 = 0,688$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung des Bedeckungsgrades BG werden $SSR_{\%BG} = 285,5$ und die Prüfgröße 11,5 erreicht. Da diese größer als 3,841 ist, ist der Bedeckungsgrad ein notwendiger Regressor. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) ist $SSR_{\%NFK} = 290,4$, die Testgröße TG_{RED} hat den Wert 4,50, was die Notwendigkeit des Regressors bestätigt. Ein um die Jahresniederschlagssumme reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%NIED} = 264,0$ eine Testgröße von 42,9, welche auch größer als $F_{1,\infty;0,95}$ ist. Ein um den Stickstoffsaldo (N_SALDO) reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%N_SALDO} = 361,7$ eine Testgröße $TG_{RED} = 44,62$. Es ist somit die Notwendigkeit aller vier Antriebsindikatoren in der Regressionsfunktion für Nitratkonzentration bestätigt.

Residualanalyse:

Histogrammdarstellungen der standardisierten Residuen für die drei Regressionsfunktionen der Zustandsindikatoren (vergleiche Abschnitt 4.3) erfolgen in den Abbildungen A 8.4, A 8.5 und A 8.6.

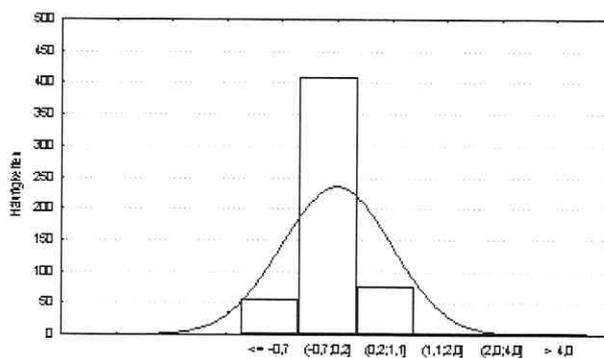


Abb. A 8.4: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung des Mittelsächsischen Lösshügellandes).

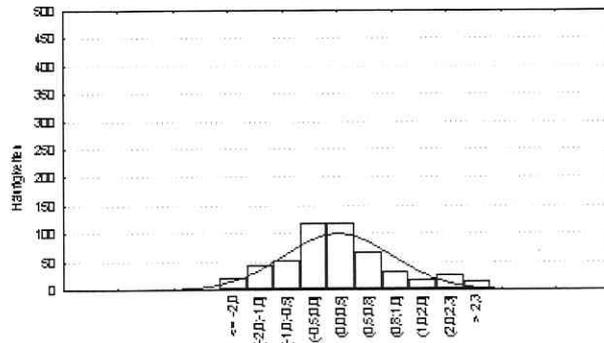


Abb. A 8.5: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Mittelsächsischen Lösshügellandes).

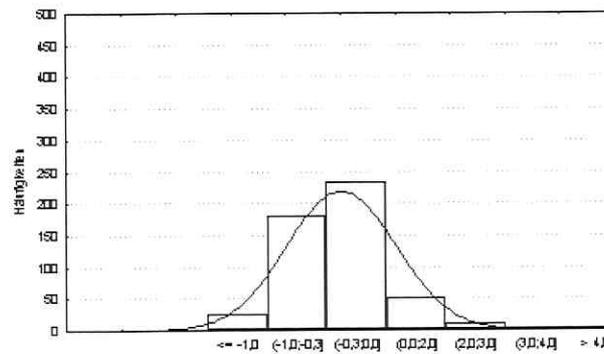


Abb. A 8.6: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Nitratkonzentration des Mittelsächsischen Lösshügellandes).

A 8.4.2.3 Mulde-Lösshügelland

Zum Erstellen der Datenbasis ist für die 48 Fruchtfolgen in den 18 Faktorstufenkombinationen von Standort- und Klimaheterogenität (Tabelle A 8.54) die CANDY-Prozesssimulation durchgeführt worden.

Tab. A 8.54: Erstellung der Datenbasis des Mulde-Lösshügellandes: Faktorstufenkombinationen (FSK) von Standort- und Klimaheterogenität. NIED: Jahresniederschlagssumme des Datensatzes vom Referenzwetterablauf, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität der repräsentativen Profile.

FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm	FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm	FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm
1	636	87	7	707	87	13	778	87
2	636	94	8	707	94	14	778	94
3	636	175	9	707	175	15	778	175
4	636	255	10	707	255	16	778	255
5	636	354	11	707	354	17	778	354
6	636	401	12	707	401	18	778	401

Insgesamt waren 864 Simulationsobjekte zu rechnen und auszuwerten. Tabelle A 8.55 zeigt statistische Kennziffern einiger Modellgrößen der Datenbasis.

Tab. A 8.55: Mulde-Lösshügelland: statistische Kennzahlen der Modellgrößen Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK in mm), Jahresniederschlagssumme (NIED in mm), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ in d/a), Bedeckungsgrad (BG in d/a), Kohlenstoffproduktionsrate (CREP in dt/(ha-a)), Stickstoffsaldo (N_SALDO in kg/(ha-a)), Grundwasserneubildung (GWB in mm/a), Stickstoffauswaschung (NAUS in kg/(ha-a)), Nitratkonzentration im Sickerwasser (NO3_KONZ in mg/l), St_abw: Standardabweichung in der jeweiligen Einheit der Modellgröße.

Größe	Minimum	Maximum	Spannweite	Mittelwert	Median	St_abw
NFK	87	401	314	228	215	121
NIED	636	778	142	707	707	49
WMZ	9	38	29	21	15	10
BG	81	173	92	121	114	26
CREP	6	22	16	15	16	4
N_SALDO	24	141	118	68	59	28
GWB	95	348	253	216	213	56
N_AUS	2	108	106	35	27	25
NO3_KONZ	8	325	317	74	56	55

Auswertung der Datenbasis:

Schritte 1 und 2: Durchführung von sechs Kruskal-Wallis-Tests zur Untersuchung der Mittelwerte von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration (Tabelle A 8.56) für die drei Stufen 636, 707 und 778 mm der Jahresniederschlagssumme sowie für die 6 Stufen 87, 94, 175, 255, 354 und 401 mm der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität.

Schritt 3: Untersuchung der Fruchtfolgen für die 18 Faktorstufenkombinationen: Berechnung Kendallscher Rangkorrelationskoeffizienten, der Kendallschen K-Statistik und Prüfgrößen für jede Fruchtfolge (Tabelle A 8.57).

Schritt 4: Berechnung von Kendallschen Rangkorrelationskoeffizienten, Kendallscher K-Statistik und Prüfgrößen für Modellgrößen der Landnutzung (Tab. A 8.58, A 8.59 und A 8.60).

Tab. A 8.56: Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland.

Schritte 1 und 2 zur Prüfung der Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität für Grundwasserneubildung (GWB), Stickstoffauswaschung (N_AUS) und Nitratkonzentration (NO3_K): Ergebnisse der sechs Kruskal-Wallis-Tests. FG: Anzahl der Freiheitsgrade. Testergebnis „+“: Faktor ist signifikant, Testergebnis „-“: Faktor ist nicht signifikant.

Faktor	Zustands-Indikator	Testgröße H	FG	Quantil der χ^2 -Verteilung	Testergebnis
Jahresniederschlagssumme	GWB	676,06	2	5,99	+
	N_AUS	4,98	2	5,99	-
	NO3_K	34,39	2	5,99	+
Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	GWB	93,1	5	11,07	+
	N_AUS	24,45	5	11,07	+
	NO3_K	10,34	5	11,07	-

Für die Grundwasserneubildung wurde die Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität bestätigt. Bei der Stickstoffauswaschung ist nur die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität signifikant. Für die Nitratkonzentration ist nur die Jahresniederschlagssumme Antriebsindikator.

Tab. A 8.57: Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland.

Schritt 3: Test der wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung. Ergebnisse der 48 Fruchtfolgen. „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, Testergebnis „+“: WMZ ist für Fruchtfolge signifikant, Testergebnis „-“: WMZ ist für Fruchtfolge nicht signifikant.

Fruchtfolge	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	Testergebnis	Fruchtfolge	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	Testergebnis
1	0,76	117	4,43	+	25	0,18	27	1,02	-
2	0,65	99	3,75	+	26	0,19	29	1,10	-
3	0,63	97	3,67	+	27	0,01	1	0,04	-
4	0,86	131	4,96	+	28	0,06	9	0,34	-
5	0,84	129	4,89	+	29	0,24	37	1,40	-
6	0,23	35	1,33	-	30	0,40	61	2,31	+
7	0,90	137	5,19	+	31	-0,36	-55	-2,08	+
8	0,22	33	1,25	-	32	0,80	123	4,66	+
9	0,07	11	0,42	-	33	0,41	63	2,39	+
10	0,42	65	2,46	+	34	-0,01	-1	-0,04	-
11	-0,35	-53	-2,01	+	35	-0,10	-15	-0,57	-
12	0,11	17	0,64	-	36	0,27	41	1,55	-
13	-0,31	-47	-1,78	-	37	0,35	53	2,01	+
14	0,86	131	4,96	+	38	-0,06	-9	-0,34	-
15	0,27	41	1,55	-	39	0,84	129	4,89	+
16	0,73	111	4,20	+	40	0,52	79	2,99	+
17	0,84	129	4,89	+	41	0,44	67	2,54	+
18	0,62	95	3,60	+	42	0,53	81	3,07	+
19	0,23	35	1,33	-	43	0,86	131	4,96	+
20	-0,11	-17	-0,64	-	44	0,32	49	1,86	-
21	0,75	115	4,36	+	45	0,82	125	4,73	+
22	0,87	133	5,04	+	46	0,45	69	2,61	+
23	0,83	127	4,81	+	47	0,88	135	5,11	+
24	0,65	99	3,75	+	48	0,58	89	3,37	+

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Die Testgröße überschreitet bei 30 der 48 Fruchtfolgen diesen Wert, bei 18 Fruchtfolgen hingegen nicht. Insgesamt ist damit für das Mulde-Lösshügelland bei der Mehrzahl der Fruchtfolgen die Abhängigkeit von Stickstoffauswaschung und wirksamer Mineralisierungszeit bestätigt, d. h die Modellgröße ist Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung.

Tab. A 8.58: Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland.

Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K*“: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: BG ist signifikant, Testergebnis „-“: BG ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K*	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K*	TE
1	BG	-0,77	-868	-7,72	+	10	BG	-0,74	-838	-7,45	+
2	BG	-0,78	-879	-7,81	+	11	BG	-0,73	-824	-7,33	+
3	BG	-0,74	-834	-7,42	+	12	BG	-0,75	-846	-7,52	+
4	BG	-0,74	-834	-7,42	+	13	BG	-0,76	-856	-7,61	+
5	BG	-0,73	-820	-7,29	+	14	BG	-0,76	-856	-7,61	+
6	BG	-0,67	-752	-6,68	+	15	BG	-0,73	-828	-7,36	+
7	BG	-0,76	-854	-7,59	+	16	BG	-0,75	-844	-7,50	+
8	BG	-0,77	-866	-7,70	+	17	BG	-0,73	-826	-7,34	+
9	BG	-0,75	-842	-7,49	+	18	BG	-0,73	-828	-7,36	+

Da bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der Betrag der Testgröße größer als der Wert der kritischen Größe ist, wurde der Bedeckungsgrad als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung bestätigt.

Tab. A 8.59: Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland.

Schritt 4: Test von Kohlenstoffproduktionsrate (CREP) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K*“: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: CREP bzw. N_SALDO ist signifikant, Testergebnis „-“: CREP bzw. N_SALDO ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K*	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K*	TE
1	CREP	-0,27	-304	-2,70	+	10	CREP	-0,36	-409	-3,63	+
	N_SALDO	0,96	1078	9,58	+		N_SALDO	0,93	1052	9,35	+
2	CREP	-0,26	-298	-2,65	+	11	CREP	-0,16	-183	-1,63	-
	N_SALDO	0,96	1086	9,65	+		N_SALDO	0,93	1052	9,35	+
3	CREP	-0,21	-233	-2,07	+	12	CREP	-0,14	-162	-1,44	-
	N_SALDO	0,95	1066	9,47	+		N_SALDO	0,93	1046	9,30	+
4	CREP	-0,29	-326	-2,90	+	13	CREP	-0,16	-183	-1,63	-
	N_SALDO	0,94	1058	9,40	+		N_SALDO	0,95	1066	9,47	+
5	CREP	-0,14	-157	-1,39	-	14	CREP	-0,33	-374	-3,33	+
	N_SALDO	0,94	1058	9,40	+		N_SALDO	0,95	1074	9,55	+
6	CREP	-0,21	-237	-2,11	+	15	CREP	-0,10	-117	-1,04	-
	N_SALDO	0,92	1042	9,26	+		N_SALDO	0,90	1018	9,05	+
7	CREP	-0,17	-191	-1,70	-	16	CREP	-0,13	-143	-1,27	-
	N_SALDO	0,96	1078	9,58	+		N_SALDO	0,94	1064	9,46	+
8	CREP	-0,15	-171	-1,52	-	17	CREP	-0,25	-286	-2,54	+
	N_SALDO	0,96	1080	9,60	+		N_SALDO	0,91	1030	9,15	+
9	CREP	-0,23	-262	-2,33	+	18	CREP	-0,24	-268	-2,38	+
	N_SALDO	0,93	1048	9,31	+		N_SALDO	0,90	1016	9,03	+

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung zum Niveau von 0,05 beträgt 1,96. Bei Untersuchung der Kohlenstoffreproduktionsrate CREP wurde der kritische Wert bei 11 Faktorstufenkombinationen durch den Betrag der Testgröße überschritten und bei 7 Faktorstufenkombinationen unterschritten. Für die Mehrzahl der untersuchten Faktorstufenkombinationen ist somit die Abhängigkeit von Kohlenstoffreproduktionsrate und Stickstoffauswaschung nachgewiesen.

Für den Stickstoffsaldo ist bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der kritische Wert kleiner als der Betrag der Testgröße, der Stickstoffsaldo ist somit bei allen Faktorstufenkombinationen Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung.

Tab. A 8.60: Auswertung der Datenbasis für das Mulde-Lösshügelland.

Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, Prüfgr. K^* : Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: BG bzw. N_SALDO ist signifikant, Testergebnis „-“: BG bzw. N_SALDO ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K^*	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K^*	TE
1	BG	-0,34	-127	-2,51	+	10	BG	-0,31	-116	-2,29	+
	N_SALDO	0,93	353	6,96	+		N_SALDO	0,91	342	6,77	+
2	BG	-0,33	-125	-2,47	+	11	BG	-0,34	-130	-2,56	+
	N_SALDO	0,94	357	7,04	+		N_SALDO	0,93	350	6,91	+
3	BG	-0,30	-112	-2,21	+	12	BG	-0,33	-126	-2,48	+
	N_SALDO	0,90	341	6,74	+		N_SALDO	0,92	349	6,90	+
4	BG	-0,33	-124	-2,45	+	13	BG	-0,31	-115	-2,28	+
	N_SALDO	0,91	342	6,77	+		N_SALDO	0,93	351	6,94	+
5	BG	-0,36	-137	-2,71	+	14	BG	-0,29	-109	-2,15	+
	N_SALDO	0,94	354	6,99	+		N_SALDO	0,94	357	7,04	+
6	BG	-0,36	-134	-2,65	+	15	BG	-0,23	-88	-1,75	-
	N_SALDO	0,91	343	6,78	+		N_SALDO	0,88	334	6,59	+
7	BG	-0,33	-124	-2,45	+	16	BG	-0,26	-99	-1,95	-
	N_SALDO	0,94	354	6,99	+		N_SALDO	0,91	342	6,77	+
8	BG	-0,31	-117	-2,32	+	17	BG	-0,32	-121	-2,39	+
	N_SALDO	0,94	355	7,00	+		N_SALDO	0,92	349	6,89	+
9	BG	-0,26	-99	-1,95	-	18	BG	-0,29	-111	-2,20	+
	N_SALDO	0,89	338	6,67	+		N_SALDO	0,90	341	6,74	+

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Bei Untersuchung des Bedeckungsgrades BG wurde der kritische Wert bei 15 Faktorstufenkombinationen durch den Betrag der Testgröße überschritten und bei drei Faktorstufenkombinationen unterschritten. Für die Mehrzahl der Faktorstufenkombinationen ist somit die Abhängigkeit mit der Nitratkonzentration nachgewiesen. Für den Stickstoffsaldo ist bei allen 18 Faktorstufenkombinationen der kritische Wert kleiner als der Betrag der Testgröße. Der Stickstoffsaldo ist somit bei allen Faktorstufenkombinationen Antriebsindikator der Nitratkonzentration.

Als Ergebnis der Auswertung der Datenbasis kann für das Mittelsächsische Lösshügelland festgestellt werden:

- für Grundwasserneubildung (GWB) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) und Bedeckungsgrad (BG) Antriebsindikatoren, GWB

lässt sich als Regressionsfunktion f_{ML_1} schreiben: $GWB = f_{ML_1}(NIED, NFK, BG)$,

- für Stickstoffauswaschung (N_AUS) sind Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ), Stickstoffsaldo (N_SALDO) und Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) Antriebsindikatoren, N_AUS lässt sich als Regressionsfunktion f_{ML_2} schreiben: $N_AUS = f_{ML_2}(NFK, WMZ, N_SALDO, CREP)$.
- für Nitratkonzentration ($NO3_K$) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) Antriebsindikatoren, $NO3_K$ lässt sich als Regressionsfunktion f_{ML_3} schreiben: $NO3_K = f_{ML_3}(NIED, BG, N_SALDO)$.

Die gefundenen Antriebsindikatoren sind die Regressoren in drei Regressionsansätzen, welche die relative Änderung der Zustandsindikatoren aus den relativen Änderungen ihrer Antriebsindikatoren beschreiben. Mit Reduktionstests wird für jede Regressionsfunktion die Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren geprüft.

Ergebnisse der Reduktionstests:

Zur Prüfung der Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren wurden Reduktionstests durchgeführt. Die Vergleichsgröße, das entsprechende Quantil der F-Verteilung, ist für alle Tests $F_{1,860;0,95} \approx F_{1,\infty;0,95} = 3,841$. Die Bedeutung der Symbole in den Formeln ist Abschnitt 4.3 und der Einführung in Abschnitt 8.4.2 zu entnehmen. Im Folgenden sind einige Resultate dargestellt.

Grundwasserneubildung:

Für das Regressionsmodell f_{ML_1} ist $SSR_{GWB} = 54,1$ der Wert für s^2 beträgt 0,247. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung des Bedeckungsgrades BG wird $SSR_{\%BG} = 48,9$ erreicht, so dass für die Prüfgröße gilt $TG_{RED} = 21,1$. Das reduzierte Modell ohne Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität erreicht $SSR_{\%NFK} = 49$ und $TG_{RED} = 20,7$. Für die Regressionsfunktion ohne Berücksichtigung des Jahresniederschlages wird $SSR_{\%NIED} = 10,3$ und $TG_{RED} = 177,4$. Da alle drei Werte für TG_{RED} kleiner als $F_{1,860;0,95} \approx F_{1,\infty;0,95} = 3,841$ sind, ist die Notwendigkeit der drei Regressoren als Antriebsindikatoren der Grundwasserneubildung für das Mulde-Lösshügelland bestätigt.

Stickstoffauswaschung:

Für die Regressionsfunktion f_{ML_2} , welche Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, wirksame Mineralisierungszeit, Stickstoffsaldo und Kohlenstoffreproduktionsrate als Regressoren enthält, ist $SSR_{N_AUS} = 435,2$ und $s^2 = 0,510$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ist $SSR_{\%NFK} = 434,50$, die Testgröße ist $TG_{RED} = 1,35$, was die Redundanz der NFK in diesem Regressionsansatz anzeigt. Auf analoge Weise ist die Regressionsfunktion f_{ML_2} durch schrittweise Reduktion der Regressoren wirksame Mineralisierungszeit, Stickstoffsaldo und Kohlenstoffreproduktionsrate untersucht worden. Die Notwendigkeit der drei Regressoren wurde durch diese Tests bestätigt, so dass nun ein verändertes Regressionsmodell der Stickstoffauswaschung $N_AUS = f_{ML_2,1}(WMZ, N_SALDO, CREP)$ angesetzt werden kann, was ohne den Regressor Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität auskommt.

Auf diese neue Funktion sind weitere Reduktionstests anzuwenden, es ist $SSR_{N_AUS} = 430,84$ und $s^2 = 0,267$. Bei Reduktion der WMZ ergibt sich $SSR_{\%WMZ} = 400,7$ und für die Testgröße 112,9,

was die WMZ als notwendigen Regressor ausweist. Die Reduktion von CREP liefert mit $SSR_{\%CREP} = 413,6$ eine Testgröße von 64,6. Die Notwendigkeit der Kohlenstoffreproduktionsrate als Regressor ist somit gezeigt. Die Signifikanz des Stickstoffsaldo in der Regressionsfunktion wird angezeigt durch $SSR_{\%N_SALDO} = 39,17$ und $TG_{RED} = 1467,0$. Es genügt somit, in die Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Mulde-Lösshügellandes die drei Regressoren wirksame Mineralisierungszeit, Stickstoffsaldo und Kohlenstoffreproduktionsrate aufzunehmen.

Nitratkonzentration:

Für den Regressionsansatz f_{ML_3} ist $SSR_{NO3_K} = 438,4$ und $s^2 = 0,560$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung des Bedeckungsgrades BG werden $SSR_{\%BG} = 403,3$ und die Prüfgröße $TG_{RED} = 62,6$ erreicht. Da diese größer als 3,841 ist, ist der Bedeckungsgrad ein notwendiger Regressor. Ein um die Jahresniederschlagssumme reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%NIED} = 384,1$ eine Testgröße von 92,6, welche auch größer als $F_{1,\infty;0,95}$ ist. Ein um den Stickstoffsaldo reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%N_SALDO} = 86,4$ eine Testgröße $TG_{RED} = 628,5$. Es ist somit die Notwendigkeit der drei Antriebsindikatoren in der Regressionsfunktion f_{ML_3} bestätigt.

Residualanalyse:

Histogrammdarstellungen der standardisierten Residuen für die Regressionsfunktionen der Zustandsindikatoren (vergleiche Abschnitt 4.3) erfolgen in den Abbildungen A 8.7, A 8.8 und A 8.9.

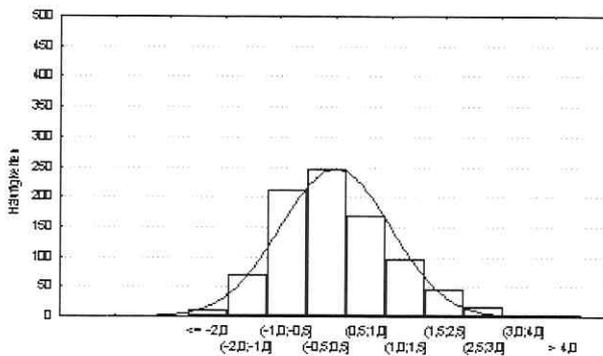


Abb. A 8.7: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung des Mulde-Lösshügellandes).

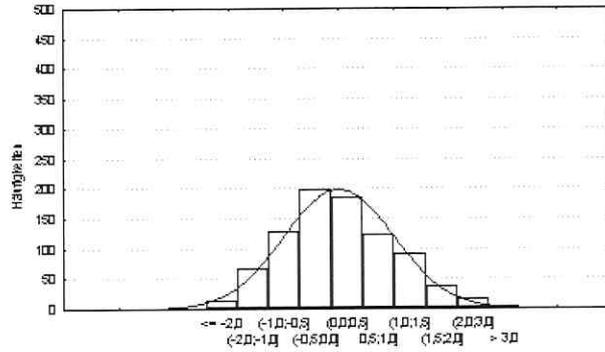


Abb. A 8.8: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Mulde-Lösshügellandes).

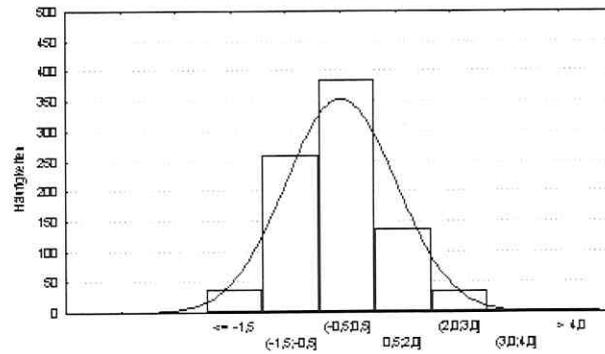


Abb. A 8.9: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Nitratkonzentration des Mulde-Lösshügellandes).

A 8.4.2.4 Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet

Zum Erstellen der Datenbasis ist für die 31 Fruchtfolgen in den 18 Faktorstufenkombinationen von Standort- und Klimaheterogenität (Tabelle A 8.61) die CANDY-Prozesssimulation durchgeführt worden.

Tab. A 8.61: Erstellung der Datenbasis des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes: Faktorstufenkombinationen (FSK) von Standort- und Klimaheterogenität. NIED: Jahresniederschlagssumme des Datensatzes vom Referenzwetterablauf, NFK: Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität der repräsentativen Profile.

FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm	FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm	FSK Nr.	NIED [mm/a]	NFK mm
1	437	181	7	486	181	13	535	181
2	437	241	8	486	241	14	535	241
3	437	293	9	486	293	15	535	293
4	437	340	10	486	340	16	535	340
5	437	380	11	486	380	17	535	380
6	437	412	12	486	412	18	535	412

Insgesamt waren 558 Simulationsobjekte zu rechnen und auszuwerten. Tabelle A 8.62 zeigt statistische Kennziffern einiger Modellgrößen der Datenbasis.

Tab. A 8.62: Sachsen-Anhaltinisches Schwarzerdegebiet: statistische Kennzahlen der Modellgrößen Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK in mm), Jahresniederschlagssumme (NIED in mm), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ in d/a), Bedeckungsgrad (BG in d/a), Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP in dt/(ha-a)), Stickstoffsaldo (N_SALDO in kg/(ha-a)), Grundwasserneubildung (GWB in mm/a), Stickstoffauswaschung (NAUS in kg/(ha-a)), Nitratkonzentration im Sickerwasser (NO3_KONZ in mg/l), St_abw: Standardabweichung in der jeweiligen Einheit der Modellgröße.

Größe	Minimum	Maximum	Spannweite	Mittelwert	Median	St_abw
NFK	181	412	231	308	317	83
NIED	437	535	98	486	486	40
WMZ	23	40	17	31	28	6
BG	88	174	87	115	111	19
CREP	7	19	13	14	16	4
N_SALDO	21	141	120	62	56	32
GWB	0	110	110	37	32	25
N_AUS	0	102	102	28	20	24
NO3_KONZ	0	1586	1586	792	305	1744

Auswertung der Datenbasis:

Schritte 1 und 2: Durchführung von sechs Kruskal-Wallis-Tests zur Untersuchung der Mittelwerte von Grundwasserneubildung, Stickstoffauswaschung und Nitratkonzentration (Tabelle A 8.63) für die drei Stufen 437, 486 und 535 mm der Jahresniederschlagssumme sowie für die 6 Stufen 181, 241, 293, 340, 380 und 412 mm der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität.

Schritt 3: Untersuchung der Fruchtfolgen für die 18 Faktorstufenkombinationen: Berechnung Kendallscher Rangkorrelationskoeffizienten, der Kendallschen K-Statistik und Prüfgrößen für jede Fruchtfolge (Tabelle A 8.64).

Schritt 4: Berechnung Kendallscher Rangkorrelationskoeffizienten, der Kendallschen K-Statistik und Prüfgrößen für Modellgrößen der Landnutzung (Tabellen A 8.65, A 8.66 und A 8.67).

Tab. A 8.63: Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet.

Schritte 1 und 2 zur Prüfung der Signifikanz von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität für Grundwasserneubildung (GWB), Stickstoffauswaschung (N_AUS) und Nitratkonzentration (NO3_K): Ergebnisse der sechs Kruskal-Wallis-Tests. FG: Anzahl der Freiheitsgrade. Testergebnis „+“: Faktor ist signifikant, Testergebnis „-“: Faktor ist nicht signifikant.

Faktor	Zustands-Indikator	Test-größe H	FG	Quantil der χ^2 -Verteilung	Test-ergebnis
Jahresniederschlagssumme	GWB	320,11	2	5,99	+
	N_AUS	6,29	2	5,99	+
	NO3_K	114,99	2	5,99	+
Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität	GWB	166,58	5	11,07	+
	N_AUS	11,55	5	11,07	+
	NO3_K	68,71	5	11,07	+

Die Signifikanz der von Jahresniederschlagssumme und Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ist für alle drei Zustandsindikatoren bestätigt worden.

Tab. A 8.64: Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet.

Schritt 3: Test der wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) als Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung. Ergebnisse der 28 Fruchtfolgen. „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, Testergebnis „+“: WMZ ist für Fruchtfolge signifikant, Testergebnis „-“: WMZ ist für Fruchtfolge nicht signifikant.

Frucht-folge	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüf-gr. K	Test-ergebnis	Frucht-folge	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüf-gr. K	Test-ergebnis
1	0,35	54	2,03	+	17	0,34	52	1,97	+
2	0,34	52	1,97	+	18	0,36	55	2,09	+
3	0,41	63	2,38	+	19	0,33	50	1,91	-
4	0,36	55	2,08	+	20	0,43	66	2,49	+
5	0,32	49	1,86	-	21	0,33	50	1,91	-
6	0,38	58	2,18	+	22	0,42	64	2,42	+
7	0,35	54	2,05	+	23	0,33	51	1,92	-
8	0,40	61	2,31	+	24	0,21	32	1,22	-
9	0,30	46	1,74	-	25	0,36	55	2,09	+
10	0,37	57	2,16	+	26	0,36	55	2,09	+
11	0,34	52	1,97	+	27	0,32	49	1,86	-
12	0,38	58	2,21	+	28	0,39	60	2,26	+
13	0,33	51	1,94	-	29	0,34	53	1,99	+
14	0,22	33	1,26	-	30	0,42	65	2,46	+
15	0,38	58	2,20	+	31	0,43	66	2,50	+
16	0,34	52	1,98	+					

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Die Testgröße überschreitet bei 22 der 31 Fruchtfolgen diesen Wert, womit die Abhängigkeit von wirksamer Mineralisierungszeit und Stickstoffauswaschung bei der Mehrzahl der Fruchtfolgen des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes bestätigt ist.

Tab. A 8.65: Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet.

Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). ‚Kend. KK‘: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, ‚Prüfgr. K‘: Prüfgröße des Tests, ‚TE‘: Testergebnis. Testergebnis ‚+‘: BG ist signifikant, Testergebnis ‚-‘: BG ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE
1	BG	-0,66	-308	-5,24	+	10	BG	-0,68	-316	-5,36	+
2	BG	-0,71	-332	-5,64	+	11	BG	-0,73	-338	-5,75	+
3	BG	-0,71	-328	-5,58	+	12	BG	-0,73	-338	-5,75	+
4	BG	-0,70	-324	-5,50	+	13	BG	-0,68	-318	-5,40	+
5	BG	-0,69	-320	-5,43	+	14	BG	-0,71	-330	-5,61	+
6	BG	-0,69	-320	-5,43	+	15	BG	-0,70	-326	-5,54	+
7	BG	-0,68	-316	-5,36	+	16	BG	-0,69	-322	-5,47	+
8	BG	-0,71	-332	-5,64	+	17	BG	-0,71	-332	-5,64	+
9	BG	-0,71	-332	-5,64	+	18	BG	-0,71	-332	-5,64	+

Da für alle 18 Faktorstufenkombinationen der Betrag der Testgröße größer als der Wert der kritischen Größe ist, wurde der Bedeckungsgrad als Antriebsindikator der Grundwasserneubildung bestätigt.

Tab. A 8.66: Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet.

Schritt 4: Test von Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Stickstoffauswaschung. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendallsche Rangkorrelationskoeffizienten, „Prüfgr. K“: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: CREP bzw. N_SALDO ist signifikant, Testergebnis „-“: CREP bzw. N_SALDO ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K	TE
1	CREP	0,35	164	2,78	+	10	CREP	0,35	162	2,75	+
	N_SALDO	0,94	439	7,46	+		N_SALDO	0,96	445	7,56	+
2	CREP	0,37	174	2,95	+	11	CREP	0,34	160	2,71	+
	N_SALDO	0,95	443	7,53	+		N_SALDO	0,94	439	7,46	+
3	CREP	0,34	160	2,71	+	12	CREP	0,34	160	2,71	+
	N_SALDO	0,96	445	7,56	+		N_SALDO	0,94	437	7,43	+
4	CREP	0,34	160	2,71	+	13	CREP	0,32	147	2,51	+
	N_SALDO	0,92	427	7,26	+		N_SALDO	0,94	437	7,43	+
5	CREP	0,33	153	2,61	+	14	CREP	0,36	168	2,85	+
	N_SALDO	0,86	399	6,78	+		N_SALDO	0,96	447	7,60	+
6	CREP	0,31	143	2,44	+	15	CREP	0,32	147	2,51	+
	N_SALDO	0,81	377	6,40	+		N_SALDO	0,95	441	7,49	+
7	CREP	0,31	145	2,47	+	16	CREP	0,33	156	2,64	+
	N_SALDO	0,95	441	7,49	+		N_SALDO	0,94	439	7,46	+
8	CREP	0,36	168	2,85	+	17	CREP	0,36	166	2,81	+
	N_SALDO	0,95	441	7,49	+		N_SALDO	0,95	443	7,53	+
9	CREP	0,34	160	2,71	+	18	CREP	0,35	164	2,78	+
	N_SALDO	0,96	445	7,56	+		N_SALDO	0,96	445	7,56	+

Bei allen 18 Faktorstufenkombinationen ist sowohl bei der Kohlenstoffreproduktionsrate als auch beim Stickstoffsaldo der Betrag der Testgröße größer als der kritische Wert von 1,96. Beide Modellgrößen sind somit Antriebsindikator der Stickstoffauswaschung.

Tab. A 8.67: Auswertung der Datenbasis für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet.

Schritt 4: Test von Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) als Antriebsindikatoren der Nitratkonzentration. Ergebnisse aller Fruchtfolgen für jede der 18 Faktorstufenkombination (FSK). „Kend. KK“: Kendall'sche Rangkorrelationskoeffizienten, Prüfgr. K^{*}: Prüfgröße des Tests, „TE“: Testergebnis. Testergebnis „+“: BG bzw. N_SALDO ist signifikant, Testergebnis „-“: BG bzw. N_SALDO ist nicht signifikant.

FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K [*]	TE	FSK Nr.	Modellgröße	Kend. KK	Kend. K-St.	Prüfgr. K [*]	TE
1	BG	0,35	162	2,75	+	10	BG	0,37	172	2,92	+
	N_SALDO	0,81	377	6,40	+		N_SALDO	0,82	383	6,51	+
2	BG	0,40	188	3,19	+	11	BG	0,38	178	3,02	+
	N_SALDO	0,83	385	6,54	+		N_SALDO	0,75	349	5,93	+
3	BG	0,40	188	3,19	+	12	BG	0,37	174	2,95	+
	N_SALDO	0,72	333	5,65	+		N_SALDO	0,73	339	5,76	+
4	BG	0,34	158	2,68	+	13	BG	0,35	162	2,75	+
	N_SALDO	0,66	309	5,25	+		N_SALDO	0,86	399	6,78	+
5	BG	0,42	196	3,33	+	14	BG	0,41	192	3,26	+
	N_SALDO	0,65	301	5,11	+		N_SALDO	0,87	403	6,85	+
6	BG	0,43	202	3,43	+	15	BG	0,40	186	3,15	+
	N_SALDO	0,66	307	5,21	+		N_SALDO	0,81	375	6,37	+
7	BG	0,36	166	2,81	+	16	BG	0,38	178	3,02	+
	N_SALDO	0,84	393	6,68	+		N_SALDO	0,84	393	6,68	+
8	BG	0,41	192	3,26	+	17	BG	0,39	184	3,12	+
	N_SALDO	0,84	389	6,61	+		N_SALDO	0,84	389	6,61	+
9	BG	0,36	168	2,85	+	18	BG	0,39	182	3,09	+
	N_SALDO	0,78	361	6,13	+		N_SALDO	0,83	387	6,57	+

Der kritische Wert $u_{0,975}$ der $N(0, 1)$ -Verteilung beträgt 1,96. Dieser wurde sowohl bei der Untersuchung des Bedeckungsgrades als auch des Stickstoffsaldo bei allen 18 Faktorstufenkombinationen durch den Betrag der Testgröße überschritten. Bedeckungsgrad und Stickstoffsaldo sind somit Antriebsindikator der Nitratkonzentration im Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebiet. Als Ergebnis der Auswertung der Datenbasis kann für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet festgestellt werden:

- für Grundwasserneubildung (GWB) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK) und Bedeckungsgrad (BG) Antriebsindikatoren, GWB lässt sich als Regressionsfunktion f_{SCHW_1} schreiben: $GWB = f_{SCHW_1}(NIED, NFK, BG)$,
- für Stickstoffauswaschung (N_AUS) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), wirksame Mineralisierungszeit (WMZ), Stickstoffsaldo (N_SALDO) und Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP) Antriebsindikatoren, N_AUS lässt sich als Regressionsfunktion f_{SCHW_2} schreiben:
 $N_AUS = f_{SCHW_2}(NIED, NFK, WMZ, N_SALDO, CREP)$,
- für Nitratkonzentration (NO₃_K) sind Jahresniederschlagssumme (NIED), Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität (NFK), Bedeckungsgrad (BG) und Stickstoffsaldo (N_SALDO) Antriebsindikatoren, NO₃_K lässt sich als Regressionsfunktion f_{SCHW_3} schreiben:
 $NO3_K = f_{SCHW_3}(NIED, NFK, BG, N_SALDO)$.

Die gefundenen Antriebsindikatoren sind die Regressoren in drei Regressionsansätzen, welche die relative Änderung der Zustandsindikatoren aus den relativen Änderungen ihrer Antriebsindikatoren beschreiben. Mit Reduktionstests wird für jede Regressionsfunktion die Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren geprüft.

Ergebnisse der Reduktionstests:

Zur Prüfung der Notwendigkeit aller Antriebsindikatoren wurden Reduktionstests durchgeführt. Die Vergleichsgröße, das entsprechende Quantil der F-Verteilung, ist für alle Tests $F_{1,\infty;0,95} = 3,841$. Die Bedeutung der Symbole in den Formeln ist Abschnitt 4.3 und der Einführung in Abschnitt 8.4.2 zu entnehmen. Im Folgenden sind einige Resultate dargestellt.

Grundwasserneubildung:

Für den Regressionsansatz f_{SCHW_1} ist $SSR_{GWB} = 229,64$ der Wert für s^2 beträgt 0,500. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung des Bedeckungsgrades BG wird $SSR_{\%BG} = 209,9$ erreicht, so dass für die Prüfgröße gilt $TG_{RED} = 39,5$. Das reduzierte Modell ohne Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität erreicht $SSR_{\%NFK} = 165,8$ und $TG_{RED} = 127,6$. Für die Regressionsfunktion ohne Berücksichtigung des Jahresniederschlages wird $SSR_{\%NIED} = 83,8$ und $TG_{RED} = 291,6$. Da alle drei Werte für TG_{RED} kleiner als $F_{1,554;0,95} \approx F_{1,\infty;0,95} = 3,841$ sind, ist die Notwendigkeit der drei Regressoren als Antriebsindikatoren der Grundwasserneubildung für das Sachsen-Anhaltinische Schwarzerdegebiet bestätigt.

Stickstoffauswaschung:

Für den Regressionsansatz f_{SCHW_2} , welcher Jahresniederschlagssumme, Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität, wirksame Mineralisierungszeit, Stickstoffsaldo und Kohlenstoffreproduktionsrate als Regressoren enthält, ist $SSR_{N_AUS} = 386,96$ und $s^2 = 0,732$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Jahresniederschlagssumme ist $SSR_{\%NFK} = 385,35$ und $TG_{RED} = 2,20$. Da dieser Wert kleiner als 3,841 ist, wird die Redundanz dieses Antriebsindikators angezeigt. Für das um die Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität reduzierte Modell ist $SSR_{\%NFK} = 384,94$, die Testgröße ist $TG_{RED} = 2,75$ was auf die Redundanz der NFK im Regressionsansatz f_{SCHW_2} anzeigt. Auf analoge Weise ist die Regressionsfunktion f_{SCHW_2} durch schrittweise Reduktion der Regressoren wirksame Mineralisierungszeit, Stickstoffsaldo und Kohlenstoffreproduktionsrate untersucht worden. Die Testergebnisse haben die Notwendigkeit dieser drei Regressoren bestätigt, so dass nun ein verändertes Regressionsmodell der Stickstoffauswaschung untersucht werden muss: $N_AUS = f_{SCHW_2_1}(WMZ, N_SALDO, CREP)$.

Auf diesen veränderten Ansatz, welcher Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität und Jahresniederschlagssumme nicht mehr enthält, sind erneut Reduktionstests anzuwenden. Für $f_{SCHW_2_1}$ ist $SSR_{N_AUS} = 380,86$ und $s^2 = 0,457$. Bei Reduktion der WMZ ergibt sich $SSR_{\%WMZ} = 348,5$ und für die Testgröße 70,8. Die Reduktion von CREP liefert mit $SSR_{\%CREP} = 356,6$ eine Testgröße von 53,1. Mit diesen Ergebnissen ist die Notwendigkeit der Regressoren Kohlenstoffreproduktionsrate und wirksame Mineralisierungszeit gezeigt. Eine Reduktion des Ansatzes um den Stickstoffsaldo würde zu $SSR_{\%N_SALDO} = 56,7$ und $TG_{RED} = 709,2$ führen, womit die Notwendigkeit dieses Regressors nachgewiesen ist.

Für den Regressionsansatz f_{SCHW_3} der Nitratkonzentration ist $SSR_{NO_3,K} = 973,7$ und $s^2 = 4,870$. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung des Bedeckungsgrades BG werden $SSR_{\%BG} = 911,5$ und die Prüfgröße 12,8 erreicht. Da diese größer als 3,841 ist, ist der Bedeckungsgrad ein notwendiger Regressor. Bei einem reduzierten Modell ohne Berücksichtigung der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität NFK ist $SSR_{\%NFK} = 787,1$, die Testgröße TG_{RED} hat den Wert 38,4, was die Notwendigkeit des Regressors bestätigt. Ein um die Jahresniederschlagssumme reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%NIED} = 668,1$ eine Testgröße von 62,8, welche auch größer als $F_{1,\infty;0,95}$ ist. Ein um den Stickstoffsaldo (N_SALDO) reduziertes Modell erreicht mit $SSR_{\%N_SALDO} = 503,1$ eine Testgröße $TG_{RED} = 96,7$. Die Notwendigkeit aller vier Antriebsindikatoren in der Regressionsfunktion für Nitratkonzentration ist hiermit gezeigt.

Residualanalyse:

Histogrammdarstellungen der standardisierten Residuen für die Regressionsfunktionen der drei Zustandsindikatoren (vergleiche Abschnitt 4.3) erfolgen in den Abbildungen A 8.10, A 8.11 und A 8.12.

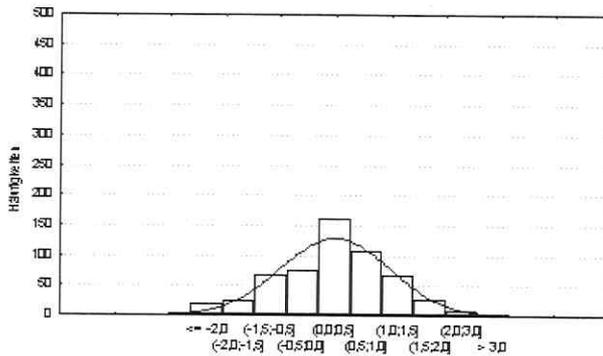


Abb. A 8.10: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Grundwasserneubildung des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes).

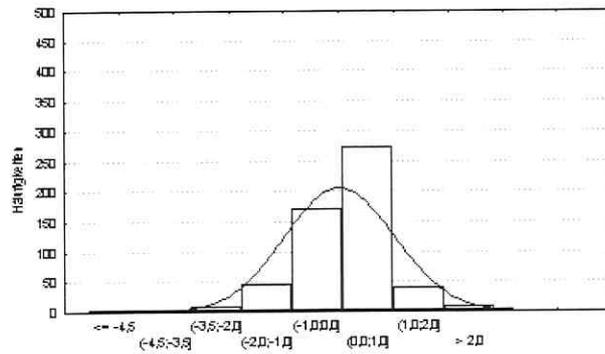


Abb. A 8.11: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Stickstoffauswaschung des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes).

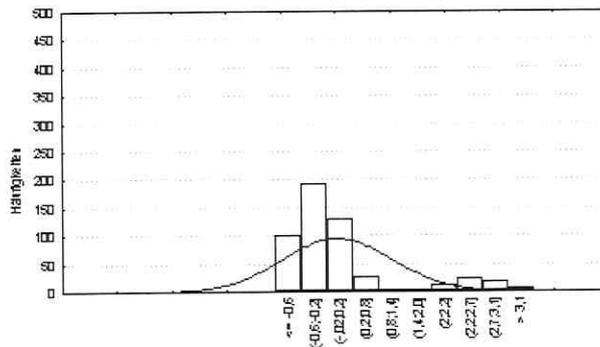


Abb. A 8.12: Verteilung der standardisierten Residuen (Regressionsfunktion für Nitratkonzentration des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes).

A 8.4.3 Zusammenhang von Stickstoffsaldo und -auswaschung

Im Folgenden wird für die CANDY-Prozesssimulationen der vier Gebiete der Zusammenhang von mittlerem jährlichen Stickstoffsaldo und mittlerer jährlicher Stickstoffauswaschung dargestellt. Zwischen beiden Größen besteht eine starke lineare Abhängigkeit.

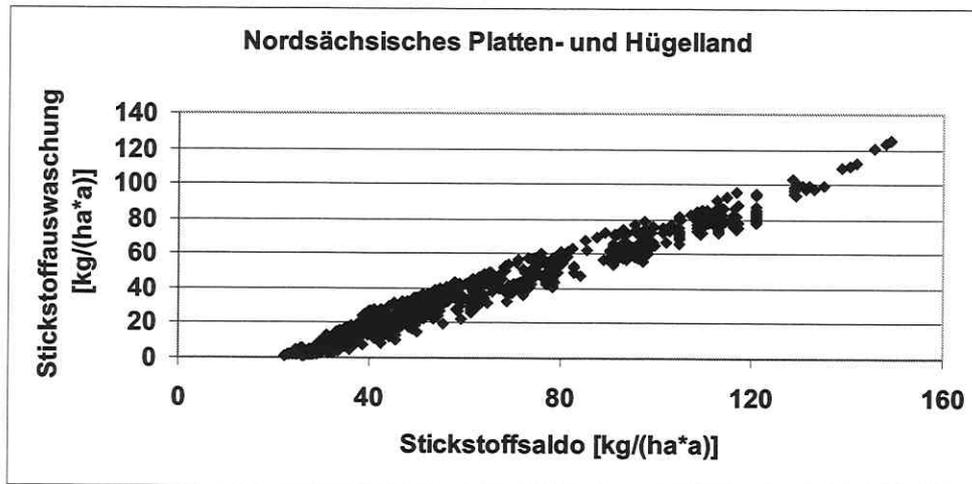


Abb. A 8.13: Zusammenhang von Stickstoffauswaschung und Stickstoffsaldo bei den CANDY-Prozesssimulationen des Nordsächsischen Platten- und Hügellandes.

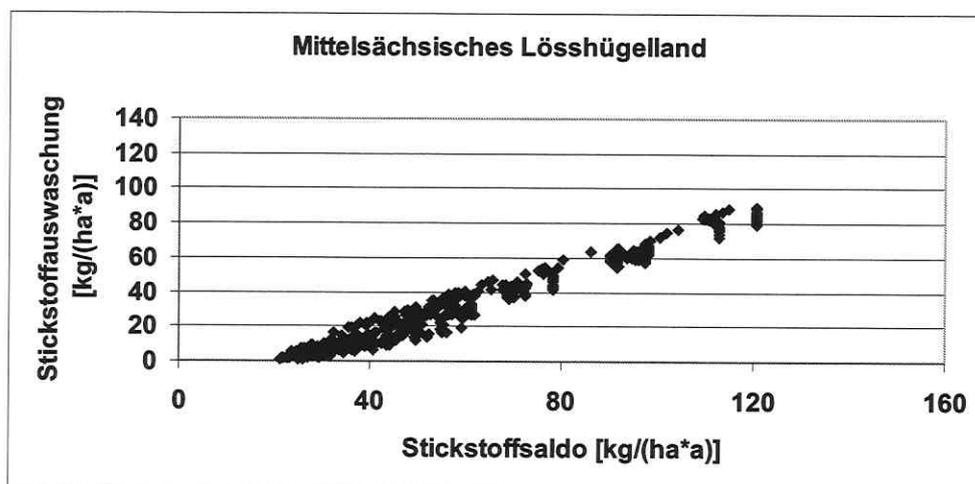


Abb. A 8.14: Zusammenhang von Stickstoffauswaschung und Stickstoffsaldo bei den CANDY-Prozesssimulationen des Mittelsächsischen Lösshügellandes.

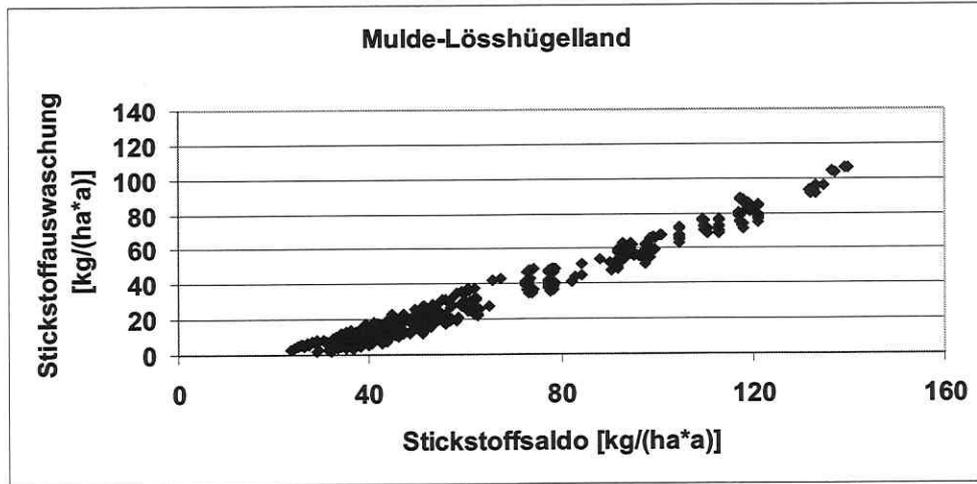


Abb. A 8.15: Zusammenhang von Stickstoffauswaschung und Stickstoffsaldo bei den CANDY-Prozesssimulationen des Mulde-Lösshügellandes.

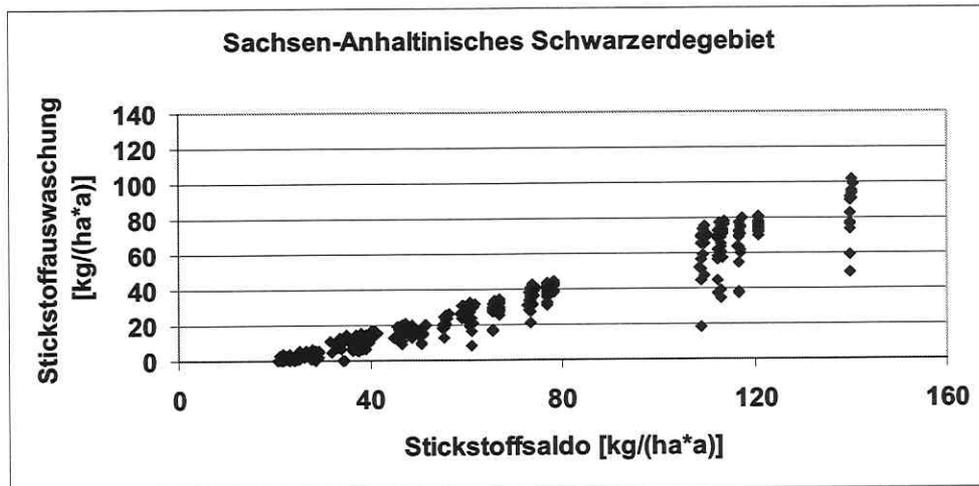


Abb. A 8.16: Zusammenhang von Stickstoffauswaschung und Stickstoffsaldo bei den CANDY-Prozesssimulationen des Sachsen-Anhaltinischen Schwarzerdegebietes.

A 8.5 Ergänzungen zu Kapitel 5

Die Tabellen A 8.68 bis 8.70 sind bezogen auf Abschnitt 5.1 (Validierung von Metamodellen am Einzugsgebiet der Parthe).

Tab. A 8.68: Variationsbreiten und Mittelwerte der Jahresniederschläge (NIED) der Landkreise des Parthegebietes (West Sachsen).

Landkreis	NIED [mm/a]		
	Minimum	Maximum	Mittelwert
Eilenburg	569	605	593
Delitzsch	569	587	586
Leipziger Land	545	605	586
Leipzig	526	605	573
Wurzen	587	605	597
Grimma	587	684	612
Borna	587	641	600
Geithain	623	641	632

Tab. A 8.69: Minimum (Min.), Maximum (Max.) und Mittelwerte (MW) der Profilsommen der nutzbaren Feldkapazität (NFK) und wirksamen Mineralisierungszeit (WMZ) der Landkreise des Parthegebietes (West Sachsen).

Landkreis	NFK [mm]			WMZ [d/a]		
	Min.	Max.	MW	Min.	Max.	MW
Eilenburg	135	371	253	12	42	22
Delitzsch	148	336	240	12	37	22
Leipzig Land	135	377	233	12	43	23
Leipzig	135	371	222	12	42	22
Wurzen	148	377	245	11	40	25
Grimma	135	377	239	10	43	25
Borna	135	377	247	11	41	27
Geithain	135	371	247	10	44	27

Tab. A 8.70: Minimum (Min.), Maximum (Max.) und Mittelwerte (MW) von Kenngrößen der Landnutzung: mittlerer jährlicher Stickstoffsaldo (N_SALDO), Kohlenstoffreproduktionsrate (CREP), mittlerer jährlicher Bedeckungsgrad (BG) für die Landkreise des Parthegebietes (West Sachsen).

Landkreis	BG [d/a]			CREP [dt/ha*a]			N_SALDO [kg/ha*a]		
	Min.	Max.	MW	Min.	Max.	MW	Min.	Max.	MW
Eilenburg	147	187	160	6,5	8,7	8,2	30	137	76
Delitzsch	114	162	144	7,5	9,6	8,3	65	112	84
Leipzig Land	126	179	153	8,2	11,3	9,2	41	140	85
Leipzig	141	184	158	8,2	11,0	9,1	41	155	86
Wurzen	136	155	146	8,4	10,1	9,0	24	126	70
Grimma	127	162	146	8,2	9,8	9,1	38	186	89
Borna	136	201	164	8,2	11,1	9,7	43	177	89
Geithain	128	182	157	7,2	11,1	8,5	43	179	148

Glossar

Im Folgenden werden wichtige in dieser Arbeit verwendete Begriffe kurz erklärt.

abschlümmbare Teilchen:

Teilchen mit Äquivalentdurchmesser $< 20 \mu\text{m}$ (entspricht der Ton-, Feinschluff- und Mittelschlufffraktion).

Antriebsindikator:

→ Modelleingangsgröße, die eine sensitive Wirkung auf → Zustandsindikatoren besitzt.

Ausgabegröße:

→ Zustandsgröße, welche für den Modellzweck relevant ist.

Synonyme Bezeichnungen für Ausgabegrößen sind Modellausgabegrößen, Modellausgabedaten, Modellausgabeparameter.

Bedeckungsgrad bezüglich Interzeption:

Anzahl der Tage eines Jahres, in denen ein voll interzeptionsfähiger Pflanzenbestand existiert.

Die Zeiten der Jugend- und Abreifephase werden dabei anteilig angerechnet. Einfluss auf den Bedeckungsgrad haben Aussaat- und Erntetermine sowie der Ablauf des Wetters während des Pflanzenwachstums. Eine vereinfachte praktische Bestimmung des Bedeckungsgrades kann aus den Terminen für Aussaat, Bestandsschluss und Ernte erfolgen. Die Einheit des Bedeckungsgrades ist d/a.

effektives Verfahren:

→ Metamodell.

Feldkapazität:

Wassermenge, die ein Boden maximal gegen die Schwerkraft zurückhalten kann.

Die Einheit der Feldkapazität ist Volumenprozent.

Feinanteilgehalt:

Teilchen mit Äquivalentdurchmesser $< 6,3 \mu\text{m}$ (entspricht der Ton- und Feinschlufffraktion).

Grundwasserneubildung:

Sickerwassermenge aus der ungesättigten Zone des Bodens.

Heterogenität:

Bezeichnung für räumliche Schwankungen von Klima-, Boden- und Landnutzungskenngrößen.

Indikator:

→ Modelleingangsgröße oder → Ausgabegröße, deren Quantität Einschätzungen von Systemzustand oder -verhalten ermöglicht.

Unterschieden werden → Antriebsindikatoren und → Zustandsindikatoren.

Klimaheterogenität:

Bezeichnung für → Heterogenität der Niederschläge in einem zu untersuchenden Gebiet.

Kohlenstoffreproduktionsrate:

Maß für die Bewirtschaftungsintensität.

Die Kohlenstoffreproduktionsrate wird errechnet aus dem Anfall organischer Dünger, dem Anbauverhältnis und dem durchschnittlichen Ertrag. Die Einheit der Kohlenstoffreproduktionsrate ist dt C/(ha·a).

Makroskala:

räumliche Größenordnung mit einer Länge von 50 km bis 1000 km bzw. einer Fläche von 2.500 km² bis 1.000.000 km².

Mesoskala:

räumliche Größenordnung mit einer Länge von 200 Meter bis 50 Kilometer bzw. einer Fläche von vier ha bis 2.500 km².

Mikroskala:

räumliche Größenordnung mit einer Länge von einem Meter bis 200 Meter bzw. einer Fläche von einem m² bis 40.000 m².

Metamodell:

vereinfachtes Berechnungsverfahren.

Metamodelle erlauben die Berechnung von → Zustandsindikatoren auf Basis von → Antriebsindikatoren. Synonyme Bezeichnungen für Metamodell sind effektives Verfahren und vereinfachtes Verfahren.

Modellausgabedaten:

→ Ausgabegröße.

Modellausgabegröße:

→ Ausgabegröße.

Modellausgabeparameter:

→ Ausgabegröße.

Modelleingangsdaten:

→ Modelleingangsgröße.

Modelleingangsparameter:

→ Modelleingangsgröße.

Modelleingangsgröße:

Element eines Systems, welches auf das System einwirkt, aber von diesem nicht beeinflusst und verändert werden kann.

Synonyme Bezeichnungen für Modelleingangsgrößen sind Modelleingangsdaten, Modelleingangsparameter und Vorgabegrößen.

Modellzustandsgröße:

→ Zustandsgröße.

Modellzustandsparameter:

→ Zustandsgröße.

Nitratkonzentration:

Konzentration des Nitratstickstoffs im Sickerwasser.

Permanentwelkepunkt:

Grenzwert des Bodenwassergehaltes, bei dessen Erreichen landwirtschaftliche Nutzpflanzen in der Regel irreversibel zu welken beginnen.

Die Einheit des Permanentwelkepunktes ist Volumenprozent.

Präprozessing:

Aufbereitung von → Modelleingangsgrößen als Simulationsvorbereitung.

Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität:

Summe aus den Differenzen von Feldkapazität und Permanentwelkepunkt aller Bodenhorizonte eines Bodenprofils.

Die Einheit der Profilsomme der nutzbaren Feldkapazität ist mm.

Standortheterogenität:

Bezeichnung für das Auftreten von Bodenformen mit unterschiedlichen bodenphysikalischen Eigenschaften in einem zu untersuchenden Gebiet.

Stickstoffauswaschung:

Nitratstickstofffracht aus der ungesättigten Zone des Bodens.

Stickstoffsaldo:

Summe der Stickstoffzufuhr durch mineralische und organische Düngung, Immission und symbiotische Stickstofffixierung abzüglich des Stickstoffgehaltes der Ernteprodukte.

Die Einheit des Stickstoffsaldo ist kg N/(ha·a). Die Immission wird in der vorliegenden Arbeit mit 60 kg N/(ha·a) angenommen.

Textur:

Bezeichnung für Korngrößenzusammensetzung.

Texturheterogenität:

Bezeichnung für die Schwankung der Korngrößenzusammensetzung auf der Mikroskala.

Trockenrohichte:

Masse der Festsubstanz bezogen auf das Gesamtbodenvolumen.

Die Einheit der Trockenrohichte ist g/cm³.

Trockensubstanzdichte:

Dichte der Festsubstanz.

Die Einheit der Trockensubstanzdichte ist g/cm³.

Variabilität:

Bezeichnung für zeitliche Schwankungen von Klima-, Boden- und Landnutzungskenngrößen.

vereinfachtes Verfahren:

→ Metamodell.

Vorgabegröße:

→ Modelleingangsgröße.

wirksame Mineralisierungszeit:

Maß für die biologische Aktivität eines Standortes.

Die Geschwindigkeit der Kohlenstoff- und Stickstoffumsatzreaktionen sind von verschiedenen Umwelteinflüssen abhängig. Das Bodenprozessmodell CANDY berücksichtigt den Einfluss von Bodentemperatur, -feuchte und -belüftung in Verbindung mit der → Textur. Die Verringerung der Reaktionsintensität im Vergleich zu optimalen Laborbedingungen wird durch Reduktionsfunktionen ausgedrückt. Im Bodenprozessmodell CANDY wird mit Hilfe der Reduktionsfunktionen eine biologische Zeitbasis bestimmt-

die wirksame Mineralisierungszeit. Durch Addition der Tageswerte der wirksamen Mineralisierungszeit zu Jahressummen und Bildung eines langjährigen Mittels erhält man einen standort- und bewirtschaftungstypischen Wert der wirksamen Mineralisierungszeit. Die wirksame Mineralisierungszeit gibt an, wie viele Tage eines Jahres unter optimalen Bedingungen erforderlich wären, um bei einem gegebenen Standort die gleiche Umsatzleistung wie im Freiland zu erzielen. Da die wirksame Mineralisierungszeit von Boden- und Klimaeigenschaften beeinflusst wird, kann sie als Modellgröße der Standortwirkung betrachtet werden. Die Einheit der wirksamen Mineralisierungszeit ist d/a.

Zustandsgröße:

Speichergröße, die den gegenwärtigen Zustand eines Systems charakterisiert. Zustandsgrößen müssen zum Simulationsbeginn mit Startwerten belegt sein. Synonyme Bezeichnungen für Zustandsgrößen sind Modellzustandsgrößen und Modellparameter.

Zustandsindikator.

→ Zustandsgröße, welche für eine zu untersuchende Fragestellung relevant ist.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Dank sagen, die mich in den letzten Jahren unterstützt und somit in irgend einer Form zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Es ist kaum möglich, an dieser Stelle die Namen aller Personen anzugeben. Stellvertretend möchte ich einige von ihnen nennen.

Ganz besonders bin ich Herrn Prof. Dr. Bernd Huwe zu Dank verpflichtet, für die Übernahme des Referates, die freundliche Unterstützung und die wertvollen Hinweise.

Die vorliegende Arbeit wurde am Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH in der Sektion Bodenforschung angefertigt, wo ich in der Arbeitsgruppe Modellierung und Regionalisierung von 1998 bis 2001 als Doktorand tätig war. Zuerst möchte ich mich bei meinem Betreuer, Herrn Dr. Uwe Franko, für die Überlassung dieses Themas sowie die intensive Zusammenarbeit und Unterstützung bedanken. Seine Anregungen haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Auch den anderen Mitarbeitern, die mich jederzeit technisch, wissenschaftlich und menschlich unterstützt haben, bin ich zu großem Dank verpflichtet, ebenso den Mitarbeitern der Sektion.

Weiterhin gilt mein Dank

- den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe von Herrn Dr. Kurt-Jürgen Hülsbergen, Institut für Acker- und Pflanzenbau der Landwirtschaftlichen Fakultät, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg,
- den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. sc. Rudolf Krönert, Sektion Angewandte Landschaftsökologie des Umweltforschungszentrums Leipzig,
- Frau Dr. Ulrike Haferkorn, Staatliche Umweltbetriebsgesellschaft, Lysimeterstation Brandis,
- Dr. Martina Puhlmann, Sandra Fuchs, Christoph Albrecht, Randy Koch, Dr. Martin Schlather, Thomas Schmidt und Benny Selle für das Korrekturlesen,
- dem Bundesministerium für Bildung und Forschung für die Finanzierung des Projektes (FKZ: 0339586),
- meinen Eltern, die mir durch ihre Unterstützung diesen Lebensweg ermöglicht haben.

Außerdem möchte ich mich bei meiner Familie und meinem Freundeskreis bedanken. Ohne deren Unterstützung wäre die Anfertigung dieser Arbeit nicht möglich gewesen.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Ferner erkläre ich, dass ich anderweitig mit oder ohne Erfolg nicht versucht habe, diese Dissertation einzureichen. Ich habe keine gleichartige Doktorprüfung an einer anderen Hochschule endgültig nicht bestanden.

Bayreuth, 11. 06. 2002

Jens Dreyhaupt