

Stofftransport in der ungesättigten Bodenzone auf verschiedenen Skalen

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

von der Fakultät für

Bauingenieur- und Vermessungswesen
der Universität Fridericiana zu Karlsruhe (TH)

genehmigte

DISSERTATION

von

Dipl. Phys. Erwin Zehe

aus Koblenz

Tag der mündlichen Prüfung: 12.07.99

Hauptreferent: em. Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing.E.h. Erich Plate

Korreferent: Prof. Dr. Hannes Flühler

Karlsruhe: 1999

Diese Arbeit erscheint in gleicher Fassung auch als Heft 64
der Mitteilungen des
Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft
der Universität Karlsruhe (TH)

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Stipendiat des Graduiertenkollegs "Ökologische Wasserwirtschaft" am Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft der Universität Karlsruhe (TH). Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing.E.h. Erich J. Plate danke ich sehr herzlich für die Übernahme des Referats, die motivierenden Diskussionen und Anregungen, aber besonders für seine faire, geradezu väterliche Art des Umgangs mit den Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts, die ganz wesentlich zu einem angenehmen und kreativen Arbeitsklima beigetragen hat. Meinem Koreferenten, Herrn Prof. Dr. Hannes Flühler, danke für die ungezwungene und herzliche Art der Zusammenarbeit, die Unterstützung bei der Planung und Durchführung der Feldexperimente und richtungsweisende Anregungen in der Frühphase meiner Dissertation.

Ganz herzlich danke ich allen Kolleginnen und Kollegen, Freunden und Bekannten, die aktiv zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben: Thomas Maurer für die Entwicklung von CATFLOW 1.0, Markus Ackermann für die Zusammenarbeit bei einem gemeinsamen Feldversuch, Udo Lächler für die Hilfe bei der Geländearbeit und seine kreativen Schöpfungen, den Diplomandinnen und Diplomanden Carla Schmidt, Elke Stenger und besonders Rainer Bolduan (Dr. Hasenbein), Dr. Markus Mokry von der LUFA Augustenberg sowie den "Hiwis" Anne Oltmann, Sebastian Sturm und Michael Obermeier für die Unterstützung bei der Aufbereitung und Analyse von mehr als 1000 Bodenproben, Bernd Glüsing und Markus Casper für Hilfe bei der Bildbearbeitung mit ARCINFO, Guido Waldenmeyer, Markus Hilpert und Thomas Maurer für die kritische Durchsicht der schriftlichen Arbeit und die wertvollen Anregungen, Christian Stamm und Jochen Geib für fruchtbare Diskussionen und Hilfe bei der Modelanpassung, Tina Pfeifer für ihre Hilfe bei der Anionenchromatographie, Simone Zimmer, Daniele Reuland und Heike Roesgen für ihre Geduld bei der Rechtschreibkorrektur (die wohl nie abgeschlossen sein wird), Charlotte Kämpf für ihre Anregungen im Bezug auf biotische Stoffumsetzung, Ruth Petters-Raskop für ihre Hilfe bei der Literaturrecherche sowie der Agrevo für mehr als 10 kg Brilliant Blue.

Besonderer Dank gebührt allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft, die durch ihr freundschaftliches Miteinander für eine familiäre Arbeitsatmosphäre gesorgt haben und immer noch sorgen. In diesem Zusammenhang möchte ich Herrn Dr.-Ing. Jürgen Ihringer, Frau Katharina Remmler, Ute Merkel und Frau Ruth Petters-Raskop hervorheben.

Ein ganz großes Dankeschön gilt meiner Freundin Anne Oltmann und meinem Vater Erwin Zehe. Besonders in der Endphase meiner Dissertation haben mir beide geholfen, schwierige Phasen zu überwinden, durch Zuspruch und Rücksicht und durch geduldiges Anhören meiner Monologe über Details meiner Dissertation.

Karlsruhe, im Juli 1999

Erwin Zehe

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Wasser- und Stoffdynamik in der ungesättigten Bodenzone. Der Stoffhaushalt natürlicher Böden wird durch Transport, Abbau und Sorption bestimmt, nichtlineare Prozesse, die auf stark unterschiedlichen Längen- und Zeitmaßstäben ablaufen. Bereits die Beschreibung des Transportprozesses in heterogenen Böden wird durch die Existenz unterschiedlicher Fließregime für Wasser im Boden, dem "langsamen" Versickern mit definierter Feuchtefront und dem "schnellen" präferentiellen Fließen, sehr erschwert. In der vorliegenden Arbeit wird das Modellsystem CATFLOW 1.0 zur Simulation der Wasserdynamik kleiner Einzugsgebiete (Maurer, 1997) zu einem Modellsystem für die Wasser- **und** Stoffdynamik der ungesättigten Bodenzone weiterentwickelt. Zur Modellierung des Stofftransports in heterogenen Böden muß die im Modellsystem implementierten Prozeßbeschreibung den Einfluß präferentieller Fließaktivität auf das Transportgeschehen realistisch erfassen. Um einen geeigneten Prozeßansatz zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität abzuleiten, wird folgender Weg beschritten.

Zunächst werden kleinskalige Transportversuche mit den Tracern Brilliant Blue und Bromid an 11 Standorten des Testgebiets "Weiherbachtal" durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Versuche geben Aufschluß über die Art der präferentiellen Fließaktivität, die in den Lößböden des Weiherbachtals auftritt, und über Größen, die das Auftreten präferentieller Fließereignisse steuern. Das so gewonnene Prozeßverständnis dient im nächsten Schritt dem Aufbau und der Implementierung einer adäquaten Prozeßbeschreibung präferentieller Fließaktivität im erweiterten Modellsystem CATFLOW 2.0. Zur Auswertung der kleinskaligen Transportversuche, wird ein Verfahren vorgestellt, das im Rahmen einer Clusteranalyse Ähnlichkeiten zwischen dem an verschiedenen Standorten beobachteten Infiltrationsprozeß quantifiziert, die Versuchsstandorte in Gruppen ähnlichen Infiltrationsgeschehens einteilt und im Rahmen einer Diskriminanzanalyse diese Ähnlichkeiten durch die Anfangs-Randbedingungen der Transportversuche erklärt. Bei dieser Auswertung der Versuche zeigt sich, daß die großskalige Variabilität des Transportgeschehens und damit das Auftreten präferentieller Fließaktivität größtenteils durch das Zusammenwirken der Vorfeuchte und der lokalen Ausprägung des Makroporensystems verursacht wird. Auf Basis dieser Vorstellung wird beim Aufbau des erweiterten Modellsystems CATFLOW 2.0 ein Ansatz entwickelt, der Wasser- und Stofftransport in präferentiellen Fließwegen und der Bodenmatrix gemeinsam in **einem** effektiven Medium beschreibt. Dieser Ansatz ist direkt aus einfachen Feld- und Labormessungen parametrisierbar.

Die in CATFLOW 2.0 implementierten Prozeßansätze werden im Rahmen einer Langzeitsimulation des von Delbrück (1997) am "IUP-Hang" untersuchten Bromidtransports geprüft. Dabei steht u.a. die Frage im Vordergrund, ob die Genauigkeit der zur Verfügung stehenden Datengrundlage eine Unterscheidung zwischen geeigneten und ungeeigneten Prozeßansätzen bzw. Parametern ermöglicht. Angesichts der Restriktionen eines zweidimensionalen Modellansatzes ist die Übereinstimmung zwischen dem simulierten und beobachteten mittleren Transportgeschehen im Rahmen der Fehler der Datengrundlage gut. Trotzdem läßt die Güte der Daten eine strenge Prüfung der im Modell implementierten Prozeßansätze nicht zu, die Ansätze lassen sich lediglich plausibilisieren.

Abschließend wird ein sinnvolles Einsatzfeld für das weiterentwickelte Modellsystem vorgestellt. Da es im Rahmen der durchgeführten Feldexperimente praktisch unmöglich ist, durch identische Wiederholung Information über die Fortpflanzung von Anfangsfehlern auf das Versuchsergebnis zu erlangen, wird die Wiederholung eines kleinskaligen Transportversuchs mit Hilfe von CATFLOW 2.0 in einer Monte-Carlo-Simulation untersucht. Dabei zeigt sich chaotisches Verhalten. In einem instabilen Bereich der untersuchten Anfangsfeuchten existiert eine sehr empfindliche Abhängigkeit des Verlaufs des simulierten Transportversuche von Details im Anfangszustand, die mit den angewendeten Meßmethoden nicht beobachtbar sind. Die simulierten Wiederholungen des Transportversuchs liefern in diesem Instabilitätsbereich die gesamte Breite des möglichen Transportgeschehens – präferentiellen Transport oder ausschließlich klassischen Transport in der Bodenmatrix – obwohl die Anfangs-Randbedingungen makroskopisch identisch sind.

Die Ergebnisse der vorliegenden Untersuchungen verdeutlichen vor allem, daß die Entwicklung von detaillierten Prozeßmodellen nur in dem Maße einen Fortschritt in der Hydrologie darstellt, wie auch hinreichend genaue Feldmeßmethoden zur Verfügung stehen bzw. entwickelt werden, um diese Modelle detailliert empirisch zu prüfen (Maurer, 1997; Beven, 1998). Ferner werden adäquate Strategien zur Identifizierung von Parametern und zum Vergleich zwischen Messung und Simulation benötigt, die der Unschärfe hydrologischer Daten und deren Einfluß auf die nichtlineare, vielleicht sogar chaotische, Wasser- und Stoffdynamik stärker Rechnung tragen (Gupta et al., 1998).

Die Arbeit schließt mit einem Ausblick auf eine verbesserte Vorgehensweise künftiger Untersuchungen und einem Ausblick auf die Folgen, die eine chaotische Wasser- und Stoffdynamik in heterogenen Böden für die hydrologische Forschung hat.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| 1 Einführung | 1 |
| 1.1 Problemstellung | 4 |
| 1.2 Zielsetzung und Vorgehensweise | 6 |
| 1.3 Aufbau der Arbeit | 8 |
| | |
| 2 Grundlegendes | 11 |
| 2.1 Grundzüge der kontinuierlichen Beschreibung poröser Medien | 11 |
| 2.1.1 Das repräsentative Elementarvolumen und der effektive Parameter..... | 11 |
| 2.1.2 Kontinuierliche, effektive Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik..... | 13 |
| 2.1.3 Prozeßmodelle für präferentielle Wasserbewegung | 16 |
| 2.2 Grenzen der rein kontinuierlichen Beschreibung der Stoffdynamik in heterogenen Böden | 17 |
| 2.2.1 Längenskalen mikrobieller Aktivität im Boden..... | 17 |
| 2.2.2 Der lokale Charakter präferentieller Fließaktivität | 19 |
| 2.3 Die heuristische Planung eines Feldexperiments, eine Notwendigkeit? | 20 |
| 2.3.1 Räumliche Variabilität auf der Ereignisskala – Zufälligkeit oder Ordnung?..... | 21 |
| 2.3.2 Langzeitverhalten auf der saisonalen Skale – Periodizität und anthropogene Einflüsse | 21 |
| 2.4 Zur Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportversuche | 24 |
| 2.4.1 Grundsätzliches..... | 24 |
| 2.4.2 Die Messung von Anfangs-Randwerten nach der "indirekten" Methode..... | 24 |
| 2.4.3 Der Übergang vom klassischen ins präferentielle Fließregime in einem heterogenen Boden..... | 27 |
| | |
| 3 Experimentelle Untersuchungen zu präferentiellem Stofftransport im Weiherbachgebiet: Versuchsgebiet, Materialien und Methoden | 31 |
| 3.1 Versuchsziel und chronologisches Vorgehen | 31 |
| 3.2 Beschreibung des Weiherbach-Einzugsgebiet | 33 |
| 3.2.1 Klima, Geologie und Böden..... | 33 |
| 3.2.2 Das Makroporensystem der anstehenden Böden, ein Ordnungsfaktor? | 34 |
| 3.3 Verwendete Stoffe und Feldmeßmethoden | 35 |
| 3.3.1 Die Tracer und das Herbizid IPU..... | 35 |
| 3.3.2 Material und Feldmeßmethoden | 36 |
| 3.4 Versuchsaufbau und Messung der Anfangs-Randbedingungen | 37 |
| 3.4.1 Vorbereitung der Kleinberegungen der ersten Versuchsphase | 37 |
| 3.4.2 Messung der Anfangs-Randwerte an der Intensivparzelle Mp 97 | 38 |
| 3.4.3 Vorbereitung des Durchbruchsexperiments..... | 39 |

| | |
|--|-----------|
| 3.5 Versuchsdurchführung und Datenaufnahme | 40 |
| 3.5.1 Kleinskalige Transportversuche | 40 |
| 3.5.2 Durchbruchsexperiment am Spechtacker | 42 |
| 3.6 Datenaufbereitung | 42 |
| 3.6.1 Die Wasserproben des Durchbruchsexperiments..... | 42 |
| 3.6.2 Die Bodenproben der Kleinberegnungen | 43 |
| 3.6.3 Messung der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit..... | 44 |
| 3.6.4 Transformation der Farbmuster in Grauwertbilder | 44 |
| 4 Experimentelle Untersuchungen zu präferentiellem Stofftransport im Weiherbachgebiet: Ergebnisse | 47 |
| 4.1 Strukturierte Verteilung der Makroporosität auf der Hangskale | 47 |
| 4.2 Die Anfangs-Randbedingungen des Versuchs an der Intensivmeßparzelle Mp 97 | 50 |
| 4.2.1 Die Bodenfeuchte als Anfangsbedingung | 50 |
| 4.2.2 Die mittleren Tiefen und mittlere Anzahl der Makroporen | 51 |
| 4.2.3 Messung der gesättigten Leitfähigkeit der Bodenmatrix und der Wasserflußrate in Makroporen | 52 |
| 4.3 Durchbruchsexperiment am Spechtacker | 54 |
| 4.3.1 Ergebnisse | 54 |
| 4.3.2 Diskussion | 57 |
| 4.4 Ein kurzer Blick auf die Tracerdaten | 58 |
| 4.4.1 Die Farbtracermuster des Brilliant Blau..... | 58 |
| 4.4.2 Die Massenbilanz der Bromidaten | 58 |
| 4.5 Der kleinskalige Transport von Isoproturon | 60 |
| 4.5.1 Massenbilanz und Retardation der Versuche | 60 |
| 4.5.2 Partikulär gebundener Transport von Isoproturon, ein relevanter Transportprozeß? | 61 |
| 4.6 Zusammenfassende Diskussion | 64 |
| 4.6.1 Praktische Folgerung aus dem Durchbruchsexperiment | 64 |
| 4.6.2 Forschungsbedarf in Hinblick auf Herbizidtransport | 64 |
| 5 Ausgliedern von Flächen ähnlicher Infiltrationsneigung mittels multivariater statistischer Methoden | 67 |
| 5.1 Was bedeutet Regionalisierung im gegenwärtigen Kontext? | 67 |
| 5.1.1 Gesucht sind Flächen ähnlicher Infiltrationsverhaltens..... | 67 |
| 5.1.2 Grundsätzliches Vorgehen | 68 |
| 5.2 Repräsentation der Fließmuster bei der Clusteranalyse | 70 |
| 5.2.1 Zwei unterschiedliche Parametersätze | 70 |
| 5.2.2 Grundsätzliche Unterschiede zwischen den Parametersätzen..... | 73 |
| 5.2.3 Vergleich der Tauglichkeit der Repräsentationsparameter für die Clusteranalyse | 74 |
| 5.3 Test des Verfahrens an der maximalen Stichprobe | 76 |
| 5.3.1 Ergebnis der Farbmustergruppierung | 77 |
| 5.3.2 Der Gruppencentroid als Repräsentant eines Fließmustertypus | 77 |
| 5.4 Konservativer Tracer oder Farbtracer – das ist hier die Frage | 81 |
| 5.4.1 Standorteinteilung in Gruppen ähnlichen Infiltrationsverhaltens | 81 |
| 5.4.2 Identifikation von Einflußgrößen mit Hilfe der Diskriminanzanalyse | 83 |
| 5.4.3 Prognose des Fließmustertypus auf empirischer Basis | 85 |

| | |
|---|------------|
| 5.5 Ausgliedern von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens: Bewertung und Ausblick | 87 |
| 5.5.1 Vorstellung des Konzepts..... | 87 |
| 5.5.2 Methodische Kritik | 89 |
| 5.5.3 Konzeptionelle Kritik..... | 89 |
| 5.5.4 Größerskalige Ordnung kleinskaliger Fließmuster..... | 91 |
| | |
| 6 Aufbau des erweiterten Modellsystems: Prozeßansätze, Numerik und "preprocessing" | 93 |
| 6.1 Zielsetzung auf verschiedenen Skalen | 93 |
| 6.1.1 Langzeitsimulation der Tracertransports auf der Hangskale..... | 93 |
| 6.1.2 Numerische Untersuchung der Reproduzierbarkeit von Transportversuchen..... | 94 |
| 6.1.3 Anforderungen an das erweiterte Modellsystem und das "preprocessing" | 94 |
| 6.2 Prozeßansätze zur Modellierung der Stoffdynamik | 95 |
| 6.2.1 Abbau, Sorption und Transport in der Bodenmatrix..... | 95 |
| 6.2.2 Effektive Beschreibung von Makroporensystem und Makroporenfluß..... | 97 |
| 6.3 Numerische Lösungsverfahren | 101 |
| 6.3.1 Lösung der Transportgleichung mit dem Random-Walk-Verfahren..... | 101 |
| 6.3.2 Die Random-Walk-Schrittgleichung in krummlinigen Koordinaten..... | 103 |
| 6.3.3 Räumliche und zeitliche Interpolation des verallgemeinerten Geschwindigkeitsfelds..... | 104 |
| 6.3.4 Interpolation der Stoffkonzentration im krummlinigen Gitter | 106 |
| 6.3.5 Die Berechnung der Abstandsgeschwindigkeit im Bereich hydraulisch aktiver Makroporen..... | 107 |
| 6.4 Das erweiterte Gebietsmodell CATFLOW 2.0 | 108 |
| 6.5 Simulation der Anfangs-Randbedingungen | 110 |
| 6.5.1 Simulation heterogener Randbedingungen: das Feld der gesättigten Gesamtleitfähigkeit k_s^B | 110 |
| 6.5.2 Simulation unscharfer Anfangsbedingungen mit dem "turning-band"-Algorithmus..... | 111 |
| | |
| 7 Simulation der Wasser- und Stoffdynamik auf der Hang- und der Kleinskala | 115 |
| 7.1 Vorbereitung der Simulation auf der Hangskale | 115 |
| 7.1.1 Vergleichsstrategie für Messung und Simulation | 116 |
| 7.1.2 Die Anfangs-Randbedingungen der Langzeitsimulation | 117 |
| 7.1.3 Modellanpassung | 119 |
| 7.2 Simulation auf der Hangskale: Ergebnisse und Diskussion | 124 |
| 7.2.1 Vergleich des mittleren Transportgeschehen..... | 124 |
| 7.2.2 Diskussion des mittleren Transportgeschehens | 128 |
| 7.2.3 Vergleich der Peakbreiten und ausgewählter Bromidprofile | 133 |
| 7.2.4 Zusammenschau und Bewertung der Hangsimulation..... | 135 |
| 7.3 Vorbereitung der Untersuchung der Reproduzierbarkeit kleinskaliger, nicht ergodischer Berechnungsversuche | 136 |
| 7.3.1 Vorstudie an einem einfachen System..... | 137 |
| 7.3.2 Vorgehensweise bei der Monte-Carlo-Simulation | 139 |
| 7.3.3 Simulationsvarianten und Diskretisierung des Berechnungsgebiets | 140 |
| 7.4 Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation kleinskaliger Berechnungsversuche | 142 |
| 7.4.1 Wiederholte Berechnung der Parzelle Mp 97 | 142 |
| 7.4.2 Wiederholte Berechnung der Parzelle B | 146 |

| | |
|--|------------|
| 7.4.3 Vergleich zwischen Simulation und Messung | 150 |
| 7.4.4 Der Instabilitätsbereich möglicher Anfangszustände | 152 |
| 7.5 Die Reproduzierbarkeit eines kleinskaligen Transportexperiments: Diskussion und Deutung der Ergebnisse | 156 |
| 7.5.1 Voraussetzungen für die Gültigkeit der Untersuchungsergebnisse für reale Böden..... | 156 |
| 7.5.2 Der instabile Bereich schlechter Vorhersagbarkeit | 157 |
| 7.5.3 Die Folgen einer quasichaotischen Dynamik des kleinskaligen Transportprozesses in heterogenen Böden..... | 159 |
| 8 Zusammenführung und Ausblick | 161 |
| 8.1 Zusammenfassung erzielten Ergebnisse | 161 |
| 8.2 Kritik und mögliche Verbesserung der angewandten Methoden und Ansätze | 163 |
| 8.2.1 Ausgliederung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens | 163 |
| 8.2.2 Prozeßbeschreibung im Modellsystem CATFLOW 2.0..... | 163 |
| 8.3 Bewertung der gewonnenen Ergebnisse | 165 |
| 8.3.1 Folgerungen für Forschung und Praxis aus den Ergebnissen zum Herbizidtransport..... | 165 |
| 8.3.2 Variabilität von Infiltration und Stofftransport auf der Hangskale | 165 |
| 8.3.3 Langzeitsimulation des Stoffhaushalts auf der Hangskale..... | 167 |
| 8.3.4 Die Reproduzierbarkeit von Transportexperimenten auf der Kleinskale..... | 168 |
| 8.4 Verbesserte Vorgehensweise bei künftigen Untersuchungen | 169 |
| 8.4.1 Kombination von Monte-Carlo-Simulation und Experiment zur Generierung einer repräsentativen Fließmuster-Stichprobe | 169 |
| 8.4.2 Zweieinhalbdimensionale, "genestete" Simulation von Szenarien | 171 |
| 8.4.3 Mögliche Verbesserung von Meßmethoden..... | 172 |
| 8.5 Der Boden – ein chaotisches System? | 172 |
| Literaturverzeichnis | 175 |
| Symbolverzeichnis | 185 |
| Abbildungsverzeichnis | 191 |
| Tabellenverzeichnis | 195 |
| Anhang | 197 |
| A1 Ergänzende Grundlagen | 197 |
| A 1.1 Einige Grundbegriffe der multivariaten Parameterschätzung | 197 |
| A 1.2 Grundidee und Methoden der Clusteranalyse | 199 |
| A 1.2.1 Hierarchische Methoden der Clusteranalyse | 199 |
| A 1.2.2 Partitionierende Methoden der Clusteranalyse | 199 |
| A 1.2.3 Kriterien für die Güte einer Gruppeneinteilung..... | 200 |
| A 1.3 Grundlagen und Idee der Diskriminanzanalyse | 201 |
| A 1.3.1 Gütekriterien, Trennschärfen von Parametern und Schätzung der Fehlerrate | 202 |
| A 1.3.2 Lineare Diskriminanzanalyse nach Fisher | 203 |

| | |
|--|-----|
| A2 Ergänzungen zu Kapitel 3 | 206 |
| A 2.1 Das Herbizid Isoproturon | 206 |
| A3 Ergänzungen zu Kapitel 4 | 206 |
| A 3.1 Farbmuster und Bromidmuster aller Standorte..... | 206 |
| A4 Ergänzungen zu Kapitel 5 | 209 |
| A 4.1 Vergleich der Parametersätze zur Fließmusterrepräsentation | 209 |
| A 4.2 Farb- und Bromidmuster nach Gruppen geordnet..... | 210 |
| A5 Ergänzungen zu Kapitel 7 | 213 |
| A 5.1 Ergänzungen zur Langzeitsimulation..... | 213 |
| A 5.2 Ergänzungen zur Monte-Carlo-Simulation..... | 218 |
| A 5.2.1 Ergänzende Abbildungen zur Beregnung der Parzelle Mp 97 | 218 |
| A 5.2.2 Ergänzende Abbildungen zur Beregnung der Parzelle B..... | 222 |

1 Einführung

Fortschritt in den Naturwissenschaften, insbesondere in der Physik, ist oft ein iterativer Prozeß, in dem sich Theorie und Experiment wechselseitig befruchten. Dies gilt besonders für den un stetigen Erkenntnisgewinn in Form sogenannter Bereichserweiterungen, die zweite wesentliche Art in der sich wissenschaftlicher Fortschritt¹ vollzieht (Klemes, 1983, Weizsäcker, 1988). Bereichserweiterungen in den Naturwissenschaften geschehen auf zwei Arten, theoretisch oder phänomenologisch. Theoretische Bereichserweiterungen entstehen etwa

- durch die Formulierung eines theoretischen Überbaus zur Erklärung unterschiedlicher Phänomene anhand eines gemeinsamen, tieferen Kausalzusammenhangs. Eine neue Theorie entsteht. Man denke an die Formulierung des Gravitationsgesetzes durch Newton.
- durch die Einführung neuer Konzepte, die neue Phänomene richtig beschreiben und den konsistenten Anschluß an eine bestehende Theorie ermöglichen. Eine erweiterte Theorie mit erweitertem Gültigkeitsbereich entsteht. Beispiele sind die Formulierung der speziellen Relativitätstheorie durch Einstein oder die Kopenhagener Deutung der Quantenmechanik durch Bohr und Heisenberg.
- durch den Transfer etablierter Methoden auf eine "formal ähnliche" Klasse von Phänomenen. Ein theoretischer Überbau für bislang empirisch motivierte Verfahren entsteht. Die Übertragung der Theorie linearer Systeme auf den 1932 von Sherman eingeführten "unit hydrograph" durch Dooge (1959) ist ein glänzendes Beispiel für solch eine Transferleistung in der Hydrologie.

Chronologisch geht die phänomenologische Bereichserweiterung der theoretischen voraus. Durch die Beobachtung von Phänomenen, die nicht mit bestehenden Konzepten erklärbar sind oder sogar im krassen Widerspruch dazu stehen, macht sie eine theoretische Bereichserweiterung notwendig. So hat beispielsweise das Experiment von Michelson und Morley um 1900, in dem die Relativgeschwindigkeit der Erde im Lichtäther nicht nachgewiesen wurde, die physikalische Welt in eine existentielle Krise gestürzt und letztlich zur Formulierung der speziellen Relativitätstheorie geführt. Auch der Formulierung und Deutung der Quantenmechanik ging die unerklärliche Beobachtung der Emission von Energiepaketen (Quanten) in der Strahlung schwarzer Körper durch Planck oder die schon lange bekannte, jedoch keineswegs verstandene Beobachtung diskreter Atomspektren voraus. Der sprunghafte Erkenntnisgewinn bei der experimentellen Bereichserweiterung liegt im Erkennen der Gültigkeitsgren-

¹ Die andere Form ist die stetige Weiterentwicklung empirisch bestätigter Theorien durch Anwendung etablierter Prozeßmodelle auf neue Fälle, d.h. neue Anfangs-Randbedingungen.

zen etablierter Konzepte. Dadurch liefert das Experiment Impulse für eine erweiterte Theorie, diese ermöglicht ein tieferes, umfassenderes Systemverständnis und dieses ermöglicht wiederum die Entwicklung neuer experimenteller Methoden und Konzepte, um dann eventuell wieder an die nächste Gültigkeitsgrenze zu stoßen.

Von diesem iterativen Voranschreiten ist natürlich auch die Entwicklung der Hydrologie geprägt. Spätestens seit der Intensivierung der Landwirtschaft finden physikalisch basierte Methoden verstärkt Anwendung bei der Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik landwirtschaftlich genutzter Einzugsgebiete². Die ambivalenten Folgen des technischen Fortschritts in der Landwirtschaft sind hinlänglich bekannt. Zum einen werden die Effizienz der Anbaumethoden und damit die Erträge gesteigert. Andererseits stellen Oberflächenbearbeitung, Flurbereinigung sowie der Einsatz von Pestiziden und Nährsalzen eine potentielle Gefahr für Wildpflanzen, Fauna, Wasser und Boden in landwirtschaftlich genutzten Gebieten dar. Die Entwicklung landwirtschaftlicher Strategien, die einerseits wirtschaftlich und andererseits nachhaltig sind, setzt ein detailliertes Verständnis des Wasser- und Stoffhaushalts landwirtschaftlich genutzter Einzugsgebiete voraus (Plate, 1994; Plate 1992b). Aufgrund dieser Einsicht entstanden Ende der achtziger Jahre mehrere multidisziplinäre Projekte, um durch die Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik im Boden auf der Basis bewährter bodenphysikalischer Ansätze einen Beitrag zur Entwicklung nachhaltiger landwirtschaftlicher Strategien zu leisten:

- SFB 179 "Wasser- und Stoffkreisläufe in Agrarökosystemen" in Braunschweig (Richter et al., 1996)
- SFB 183 "Umweltgerechte Nutzung von Agrarlandschaften" in Hohenheim (Zeddies et al., 1995)
- "Prognosemodell für die Gewässerbelastung durch Stofftransport aus einem kleinen ländlichen Einzugsgebiet - Weiherbachprojekt" in Karlsruhe (Plate, 1992c)

Vor diesem Hintergrund besteht ein wesentliches Ziel der vorliegenden Arbeit darin, das von Maurer (1997) im Rahmen des Weiherbachprojekts³ entwickelte, physikalisch basierte Modellsystem CATFLOW 1.0 zur Simulation der Wasserdynamik kleiner Einzugsgebiete zu einem gekoppelten Modell für Wasser- **und** Stoffdynamik zu erweitern und durch numerische Untersuchungen mit dem erweiterten Modellsystem auf der Klein- und der Hangskale einen Beitrag zum Verständnis der Wasser- und Stoffdynamik in natürlichen Böden zu liefern (Plate, 1988; Plate 1994). Das erweiterte Modellsystem für Wasser- und Stoffdynamik wird als CATFLOW 2.0 bezeichnet.

² Physikalisch basiert bedeutet, daß die Prozeßansätze und Gleichungen, die zur Beschreibung der Systemdynamik verwendet werden, letztlich fundamentale Erhaltungsgrößen wie Masse, Energie oder Impuls bilanzieren.

³ Im Testgebiet wurden über mehr als acht Jahre u.a. die meteorologischen Randflüsse, die Geologie, die hydraulischen Eigenschaften der anstehenden Böden, aber auch die Dynamik konservativer und nichtkonservativer Stoffe untersucht (Mokry, 1992; Merz, 1996; Schäfer, 1996; Gerlinger, 1997; Delbrück 1997; Kolle, 1996; Schmidt, 1996; Bolduan 1998; Schierholz et al., 1997).

Allerdings erlebt in jüngerer Zeit der Optimismus, mit dem physikalische Ansätze zur Beschreibung des Wasser- und Stoffhaushalts natürlicher Systeme eingesetzt werden, eine Zäsur. Beispielsweise gab es, angesichts der oft immensen Unschärfe hydrologischer Daten, bei der Jahrestagung der Europäischen Geophysikalischen Gesellschaft im Jahr 1998 eine ganze "session" zur Vorhersagbarkeit und Prüfbarkeit von Prozessen und Prozeßansätzen mittels hydrologischer Modelle (Gupta, 1998; Reddi 1994). Eine wesentliche Ursache für die Unschärfe von hydrologischen Meßdaten ist die enorme Heterogenität natürlicher Systeme sowie die Nichtlinearität der hydrologischen Prozesse. Auch Maurer betont (1997), daß das Modellsystem CATFLOW 1.0 zwar prinzipiell eine räumlich und zeitlich hoch auflösende Beschreibung der Bodenwasserdynamik an einem Hang zuläßt, aber, aufgrund der enormen Heterogenität natürlicher Böden und der Beschränkungen der verwendeten Meßmethoden, weder eine Parametrisierung des Modells in entsprechender Auflösung noch eine strenge Prüfung der im Modell verwendeten Prozeßansätze möglich ist. Maurer (1997) und Merz (1996) kommen beide im Rahmen ihrer Untersuchungen zum Schluß, daß eine erfolgreiche Modellierung der Wasserdynamik an einem Hang nur dann gelingen kann, wenn das Modell die kleinskalige Variabilität der Infiltration hinreichend gut beschreibt. Um geeignete Prozeßansätze zu identifizieren, die dies leisten können, werden Daten hoher Güte und raum-zeitlicher Auflösung benötigt.

Die Beschreibung des Stoffhaushalts natürlicher Böden birgt die gleichen Schwierigkeiten, jedoch in verschärfter Form. Neben der Variabilität der Infiltration und damit des Stofftransports im Boden spielen noch der mikrobieller Abbau von Stoffen oder deren Wechselwirkung mit der Bodenmatrix eine große Rolle. Selbst wenn man sich auf konservative Tracer⁴ beschränkt, ist noch kein umfassendes Prozeßmodell bekannt, daß deren Transport in natürlichen Böden in guter Übereinstimmung mit den Beobachtungen beschreibt (Stamm, 1997; Zurmühl, 1994; Roth et al. 1996; Blöschl, 1996). Der klassische, kontinuierliche Prozeßansatz besteht aus der Richardsgleichung und der Konvektions-Dispersions-Gleichung (siehe Abschnitt 2.2.2), fußt auf dem Konzept des effektiven Parameters, welches wiederum auf der Vorstellung des repräsentativen Einheitsvolumens (REV) basiert (Bear, 1972; Dagan, 1989). Dieser Prozeßansatz hat sich zwar im Labormaßstab bewährt, führt jedoch in natürlichen Böden oftmals zu unbefriedigenden Vorhersagen des Transportgeschehens (Matheron & de Marsily, 1980; Simmons, 1982; Jury et al. 1986; Dagan, 1989; Smith & Schwartz; 1980 a und b; Roth et al. 1996).

Die Hauptschwierigkeiten bei der Beschreibung des Transports konservativer Tracer bilden die Heterogenität und zum Teil auch Anisotropie natürlicher Böden, beide Eigenschaften führen zu einer enormen Variabilität der Infiltration und damit des konvektiven Stofftransports. Um den Transport konservativer Stoffe in heterogenen Böden realistisch zu erfassen, muß der Ansatz zur Beschreibung des Transportprozesses im erweiterten Modellsystem

⁴ Das sind Stoffe, die weder abgebaut werden noch mit der Bodenmatrix Wechselwirkung zeigen

CATFLOW 2.0 den Einfluß der kleinskaligen Infiltrationsvariabilität hinreichend genau beschreiben. Um solch einen Ansatz auf Basis eines detaillierten Prozeßverständnisses zu entwickeln, wurden in der vorliegenden Arbeit kleinskalige Transportversuche im Untersuchungsgebiet Weiherbach durchgeführt. Eine zentrale Rolle bei diesen Untersuchungen spielt der noch zu erklärende Prozeß "präferentielles Fließen" sowie die Begriffe "Reproduzierbarkeit der Messung", "Meßunschärfe" und "Nichtlinearität".

1.1 Problemstellung

Die physikalisch basierte Beschreibung von Prozessen mit Hilfe von Differentialgleichungen reduziert die Prognose der Systemdynamik auf die Lösung einer Anfangs-Randwertaufgabe (Honerkamp & Römer, 1986). Die Messung liefert die (fehlerhaften) Anfangs-Randwerte, beispielsweise in Form von Materialgrößen, und macht aus der Aufgabe ein wohldefiniertes, reales Problem. Daher ist die Durchführung von Tracerexperimenten für die Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik in einem Boden essentiell. Sie geben Aufschluß über den effektiven Transportprozeß (Jury & Roth, 1990), liefern Schätzwerte für Transportparameter und erlauben die empirische Prüfung von Prozeßansätzen. Zur dieser empirischen Prüfung, oft auch Validierung genannt, gehört die Evaluierung der Genauigkeit der zugrunde liegenden ersuche, denn experimentelle Ergebnisse sind aufgrund der Fortpflanzung von Meßfehlern stets nur von begrenzter Genauigkeit. Im Labor ermittelt man diese Schärfe durch identische Wiederholung. Diese sogenannte Reproduzierbarkeit der Messung unter identischen Anfangs-Randbedingungen liefert eine prinzipielle Grenze für die Prüfbarkeit von Prozeßansätzen und die Genauigkeit von Modellprognosen.

Ein natürlicher Boden ist ein belebtes, rückgekoppeltes, nichtlineares System. Vereinfachende Annahmen wie statistische Homogenität, Stationarität und Anisotropie, die die Untersuchung einfacher⁵ Systeme sehr erleichtern, sind für natürliche Böden nicht erfüllt. Im folgenden sind einige Tatsachen näher ausgeführt, die sowohl die experimentelle Untersuchung als auch die Modellierung des Stofftransports in natürlichen Böden erschweren.

- Viele Feld-Meßverfahren arbeiten nicht zerstörungsfrei, daher ist die identische Wiederholung der Messung meist nicht möglich. Auch können die Anfangs-Randbedingungen zu einem Transportexperiment nicht auf der eigentlichen Versuchsfläche bestimmt werden, da sie sonst zerstört würde. Daher ist die Prüfung der experimentellen Genauigkeit von Felduntersuchung und damit auch die Validierung von Prozeßansätzen mit Hilfe von Feldmessungen ein nicht triviales Problem.
- Darüber hinaus sind die Meßvolumina der verwendeten Apparaturen meist wesentlich kleiner als die repräsentativen Elementarvolumina (Abschnitt 2.1.1) der beobachteten Größen (Blöschl, 1996). Diese "Punktmessungen" sagen somit relativ wenig über die repräsentativen Werte der Größen im interessierenden Volumen aus. Daher ist die Information,

⁵ Einfache Systeme im Sinne von unbelebten Systemen.

die die Messung über eine Größe im Feld liefert, mit erheblichen Unschärfen behaftet. Mit Begriffen der statistischen Mechanik ausgedrückt, erfaßt die Messung bestenfalls den Makrozustand des Systems Boden in Form der räumlichen Statistik der untersuchten Zustandsgrößen (Honerkamp & Römer, 1986). Die exakten Werte dieser Zustandsgrößen an einem Punkt einer Versuchsparzelle können daraus nicht abgeleitet, sondern nur mit Hilfe einer Interpolation geschätzt werden. Daher passen viele Mikrozustände als konkrete Realisierungen zu der ermittelten, makroskopischen Statistik der Zustandsgröße, der Makrozustand ist entartet.

- Das Zusammenspiel aus nichtlinearer Dynamik und Heterogenität führt dazu, daß makroskopisch unterschiedlicher Fließregime für Wasser im Boden existieren. Dem geschichteten Versickern in Form einer Infiltrationsfront als langsamem Vorgang steht der schnelle, präferentiellen Fließprozeß gegenüber (Beven & Germann, 1981; Flury et al., 1994a, Flury et al., 1995a; Flury, 1996; Ritsema et al., 1998). Präferentielles Fließen bezeichnet die Wasserbewegung in bevorzugten Fließwegen, im Falle von Wurmgängen oder Schrumpfungsrissen, spricht man von Makroporenfluß. Die charakteristischen Geschwindigkeiten, die bei Wasserfluß in Makroporen auftreten, können durchaus um 2-3 Größenordnungen über den typischen Werten in der Bodenmatrix liegen (Germann, 1990).

Neben dem Nährstoffhaushalt⁶ landwirtschaftlich genutzter Böden interessiert vor allem der Verbleib von Pflanzenschutzmitteln, da diese wegen ihrer zum Teil großen Toxizität eine ernste Gefahr für Organismen und Grundwasser darstellen. Bodenherbizide werden nur zu bestimmten Terminen im Frühjahr oder Herbst nach relativ strengen Richtlinien ausgebracht. Ihr weiterer Verbleib wird durch Prozesse bestimmt, die auf unterschiedlichen charakteristischen Raum- und Zeitmaßstäben (Raum - Zeitskalen) ablaufen (Bärlund, 1997):

- Zum einen durch die Infiltration. Dabei stellt der Transport in präferentiellen Fließwegen den Haupteintragspfad für Herbizide in den Unterboden dar (Flury et al., 1995a; Flury, 1996; Stamm, 1997; Schmidt, 1996; Jury, et al. 1986b). Die typische Transportdistanz ist dabei von der Größenordnung mehrerer Dezimeter bis zu mehreren Metern, die typische Zeitskala 1 h bis 1 d.
- Zum anderen von der Immobilisierung der Herbizide durch Sorption an der Festphase der Bodenmatrix bzw. im organischen "coating" der Makroporenwandung sowie durch mikrobiellen Abbau (Zurmühl, 1994; Kinzelbach, 1992). Die mikrobielle Aktivität im Boden ändert sich innerhalb des obersten Meters um mehr als eine Größenordnung (Bolduan; 1998). Daher liegt die mittlere Lebensdauer oder Halbwertszeit eines Herbizids im Unterboden ca. um eine Größenordnung (z.B. 100 - 200 Tage für Isoproturon) über den entsprechenden Werten im Pflughorizont (10 - 20 Tage für Isoproturon). Somit stellen Herbizide, die nur ca. 1 m in den Unterboden transportiert werden, bedeutend länger eine Gefahr für oberflächennahes Grundwasser dar (Flury, 1996; Schierholz et al., 1997; Schmidt, 1996; Bolduan, 1998).

⁶ Nitrat und Phosphat

Um nützliche Aussagen für die landwirtschaftliche Praxis zu liefern, müssen Modelle für die Wasser- und Stoffdynamik in der ungesättigten Bodenzone zumindest für den Hangmaßstab⁷ eine realistische Bilanz liefern, welcher Mengenanteil eines applizierten Herbizids im Oberboden relativ schnell abgebaut wird und welcher Anteil tiefer in den Unterboden gelangt. Dies kann nur auf Basis einer Prozeßbeschreibung gelingen, die präferentiellen Stofftransport auf dem Hangmaßstab hinreichend genau erfaßt. Für die Formulierung eines geeigneten Prozeßansatzes ist es essentiell zu wissen, welche Art präferentieller Fließen in den Böden des Weiherbachgebiets auftritt – Makroporenfluß oder sogenanntes Fingering – und welche Größen das Auftreten präferentieller Fließereignisse steuern. Zwar erbrachte Delbrück (1997) in einem Tracerexperiment auf der Hangskale Hinweise auf präferentielle Fließaktivität im Weiherbachgebiet, doch eine konsequente Untersuchung dieses Phänomens gab es zu diesem Zeitpunkt nicht.

1.2 Zielsetzung und Vorgehensweise

Aus den oben genannten Gründen zerfällt die vorliegende Arbeit in einen theoretischen und einen experimentellen Teil. Ziel des experimentellen Teils ist aufzuklären, welche Art präferentieller Fließen in den Böden des Weiherbachgebiets auftritt und welche Größen das Auftreten dieses Phänomens steuern. Dazu dienen kleinskalige Transportversuche mit verschiedenen Tracern, die an 10 Standorten im Weiherbachgebiet durchgeführt wurden. Vorbild für die angesprochenen Experimente bilden Untersuchungen von Flury et al. (1995a; 1994a). Die Ergebnisse solcher Transportversuche sind hauptsächlich die Konzentrationsverteilungen der Tracer im Boden der jeweiligen Beregnungsparzelle, sogenannte Fließmuster. Auf Basis des gewonnenen, detaillierten Prozeßverständnisses wurde der für die Modellerweiterung benötigte Ansatz zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität entwickelt⁸. Zusätzlich wurde der Transport des Herbizids Isoproturon (IPU) auf der Klein- und der Schlagskale untersucht, um die Wichtigkeit des präferentiellen Stofftransports im Stoffhaushalt des Weiherbachgebiets exemplarisch zu belegen.

Ziel des theoretischen Teils der vorliegenden Arbeit ist die Erweiterung des Modells CATFLOW 1.0 (Maurer, 1997) zu einem Modellsystem zur Simulation der Wasser- **und** Stoffdynamik in der ungesättigten Bodenzone erweitert. Zentral ist dabei die Entwicklung einer einfachen Prozeßbeschreibung präferentieller Fließaktivität auf der Hang- und der Kleinskale, deren Parameter sich **direkt** aus Feldmessungen ableiten lassen. Natürlich müssen das erweiterte Modell und die implementierten Ansätze auf ihre praktische Anwendbarkeit

⁷ im folgenden wird von der Hangskale gesprochen

⁸ Um exemplarisch Daten zur Parametrisierung dieses Prozeßansatzes zu liefern, wurden im Rahmen des Transportversuchs an der sogenannten Intensivmeßparzelle "Mp 97" besonders aufwendige Messungen der zugehörigen Anfangs-Randwerte durchgeführt.

geprüft werden. Dazu steht das großskalige Transportexperiment von Delbrück (1997) zur Verfügung, in dessen Rahmen der Transport von Bromid an einem gesamten Hang (dem sogenannten IUP-Hang) über mehr als 2 Jahre beobachtet wurde. Aufgrund der bereits ange-deuteten Schwierigkeiten, die durch die Ungenauigkeit hydrologischer Daten bei der Prozeß-identifikation bereitet werden, spielt die Frage, ob die Genauigkeit der Daten eine Prozeß-identifikation zuläßt, eine wichtige Rolle.

Schließlich wird das erweiterte Modellsystem CATFLOW 2.0 eingesetzt, um die Reproduzierbarkeit der durchgeführten kleinskaligen Transportversuche beispielhaft im Rahmen einer Monte-Carlo-Simulation zu untersuchen. Sämtliche Transportexperimente wurden nur einmal realisiert, daher fehlt die Information über deren experimentelle Genauigkeit. In Anbe-tracht der nichtlinearen Systemdynamik und der enormen Unschärfe gemessener Anfangs-Randbedingungen ist die Frage nach der Reproduzierbarkeit der durchgeführten Versuche keineswegs rein akademischer Natur. In linearen Systemen erzeugen kleine Eingangs-unschärfen bekanntlich kleine Unschärfen im Prozeßverlauf, eine identische Wiederholung von Versuchen führt im wesentlichen immer auf das gleiche Ergebnis. Einige nichtlineare Systeme zeigen hingegen chaotisches Verhalten. Im Zustandsraum dieser Systeme existieren beispielsweise sogenannte Instabilitätsbereiche, in denen die identische Wiederholung eines Versuchs aufgrund der Unschärfe der Anfangs-Randbedingungen zu einer immensen Streuung der Versuchsergebnisse⁹ führt (Schuster, 1994; Lorenz, 1963). Die numerische Untersuchung der Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportexperimente soll daher klären, ob die klein-skalige Wasser- und Stoffdynamik in dem hochgradig nichtlinearen System Boden zu chaoti-schem Verhalten neigen könnte oder anders formuliert, ob die Fortpflanzung des Anfangs-fehlers empfindlich vom Systemzustand abhängt.

Die Eingangs angesprochene iterative Entwicklung der Hydrologie spiegelt sich klar in den Zielen des experimentellen und des theoretischen Teils sowie im unten beschriebenen Aufbau der vorliegenden Arbeit wider. Zunächst wird mittels experimentell gewonnenem Prozeß-verständnis ein Prozeßmodell für Wasser- und Stoffdynamik entwickelt, geprüft und benutzt, um fehlende Information über die Güte der zu Grunde liegenden Versuche zu liefern und eventuell zu Verbesserungen von Meßkonzepten beizutragen.

⁹ Ein klassisches Beispiel ist die Raleigh-Bernard-Zelle. Mathematisch gesprochen existieren beschränkte Ge-biete im Phasenraum dieser Systeme, in denen die Trajektorien anfänglich benachbarter Punkte exponentiell separiert werden (Schuster, 1994).

1.3 Aufbau der Arbeit

Entsprechend der vorangegangenen Ausführungen ist die logische Aufbau der vorliegenden Arbeit wie folgt: Nach den Grundlagen in Kapitel 2 wird zunächst der experimentelle Teil in den Kapiteln 3 - 5 präsentiert und diskutiert. Die Erweiterung des Modells CATFLOW 1.0 wird im zweiten Teil der Arbeit in Kapitel 6 besprochen. Zu Beginn des Kapitels 7 erfolgt die Präsentation der Langzeitsimulation des Bromidtransports am IUP-Hang, abschließend wird die Untersuchung zur Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportversuche diskutiert.

In Kapitel 2 wird zunächst der klassische Kontinuumsansatz zur Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik in porösen Medien auf der Basis sogenannter effektiver Parameter sowie ein gängiger Ansatz zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität vorgestellt. Dann wird die begrenzte Anwendbarkeit dieser Ansätze zur Beschreibung des Stoffhaushalts natürlicher Böden an zwei Beispielen diskutiert. Es folgt eine detaillierte Betrachtung zur Skalenabhängigkeit der Infiltration und den daraus resultierenden Schwierigkeiten für die Planung und Durchführung der Feldexperimente. Abschließend werden die Gedanken zur Reproduzierbarkeit von Transportversuchen im nichtlinearen System Boden vertieft, und eine indirekte Strategie zur Messung der Anfangs-Randbedingungen des Transportexperiments an der Intensivmeßparzelle Mp 97 vorgestellt. Dieser Versuch ist von zentraler Wichtigkeit.

Der experimentelle Teil der Arbeit beginnt in Kapitel 3 mit den Versuchszielen und der chronologischen Abfolge der Experimente. Danach werden landschaftliche Besonderheiten des Versuchsgebiets "Weiherbach" vorgestellt, die möglicherweise die Variabilität der Infiltration auf der Hangskale stark prägen. Weiterhin werden die verwendeten Materialien und Methoden, die Versuchsvorbereitung und -Durchführung sowie die Datenaufbereitung beschrieben. Aufgrund der zentralen Rolle der Berechnung der Intensivparzelle Mp 97 wird die Strategie zur Messung der zugehörigen Anfangs-Randwerte gesondert diskutiert.

Da die räumliche Verteilung der Makroporosität an einem typischen Lößhang des Weiherbachgebiets potentiell einen ordnenden Einfluß auf die Variabilität der Infiltration auf der Hangskale hat, wird diese zu Beginn des Kapitels 4 diskutiert. Die nachfolgend präsentierten Meßergebnisse der Anfangsbodenfeuchte und der Randbedingungen des Transportversuchs an der Intensivmeßparzelle Mp 97 sind zum einen wichtig für die Parametrisierung des in Kapitel 6 vorgestellten Ansatzes zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität. Zum anderen bilden diese Ergebnisse die Datengrundlage zur Simulation unscharfer Anfangszustände im Rahmen der Untersuchung der Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportversuche in Kapitel 7. Am Schluß des 4. Kapitels werden Ergebnisse zum Herbizidtransport auf der Klein- und der Schlagskale vorgestellt, um die Schlüsselrolle des präferentiellen Transports im Stoffhaushalt heterogener Böden zu unterstreichen.

Um herauszufinden, welche Größen das Auftreten präferentieller Fließaktivität begünstigen, wird in Kapitel 5 ein Verfahren entwickelt, das die Ähnlichkeit zwischen Fließmustern mit Hilfe einer Clusteranalyse quantifiziert und diese Ähnlichkeit als Funktion der Anfangs-Randbedingungen der Transportexperimente wie Bodenfeuchte oder Beregnungsintensität im Rahmen einer Diskriminanzanalyse erklärt. Mit Hilfe dieses Verfahrens ist es zumindest im Prinzip möglich, einen Hang auf Basis der gewonnenen Fließmuster in Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens einzuteilen. Die damit erzielten Ergebnisse belegen die Hypothese, daß das Auftreten präferentieller Fließaktivität durch das Zusammenspiel zwischen Vorfeuchte und Makroporensystem gesteuert wird und liefern somit die Grundidee für den Ansatz zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität.

Der modellorientierte Teil der vorliegenden Arbeit beginnt in Kapitel 6. Dort werden zunächst die Ziele der Modellierung auf der Hang- und der Kleinskale spezifiziert und die daraus erwachsenden Anforderungen an das erweiterte Modellsystem CATFLOW 2.0 erläutert. Danach werden die Prozeßansätze zur gemeinsamen Beschreibung des Transports in der Bodenmatrix und in präferentiellen Fließwegen in einem sogenannten **effektiven** Medium vorgestellt. Die Daten zur Parametrisierung dieses effektiven Mediums leiten sich, wie bereits angesprochen, aus den in Kapitel 4 präsentierten Meßergebnissen der Randbedingungen des Transportversuchs am Standort Mp 97 ab. Danach wird ein Algorithmus zur Lösung der vorgestellten Transportgleichung auf Basis des Random-Walk-Verfahrens entwickelt (Thompson & Gelhar, 1990; Kinzelbach & Uffink, 1991; Kinzelbach, 1992; La Bolle et al., 1996) und das erweiterte Modellsystem vorgestellt. Abschließend wird der sogenannte "turning-band"-Algorithmus (Bras & Rodriguez-Iturbe 1985; Brooker, 1985) zur Generierung statistischer Bodenfeuchtefelder diskutiert. Solche Felder werden als unscharfe Anfangszustände für die numerische Untersuchung der Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportversuche benutzt.

Zu Beginn des Kapitels 7 werden die gewählten Prozeßansätze, wie oben erläutert, in einer unabhängigen Langzeitsimulation des von Delbrück (1997) experimentell untersuchten Bromidtransports auf der Hangskale geprüft. Dabei ist die Frage, ob eine strenge Prüfung der Prozeßansätze im Rahmen der Genauigkeit der Datengrundlage möglich ist und daher das Modell zur Prozeßaufklärung genutzt werden kann, sehr wichtig. Abschließend wird ein sinnvolles Einsatzfeld für das erweiterte Modellsystem aufgezeigt. Die Monte-Carlo-Simulation eines kleinskaligen Transportversuchs liefert zum einen die fehlende Information über die Reproduzierbarkeit solcher Experimente, die direkt im Feld nur sehr schwer zu erlangen ist. Zum zweiten zeigt sie, ob die Wasser- und Stoffdynamik in dem hochgradig nichtlinearen System Boden zu chaotischem Verhalten neigt. Des weiteren zeigen diese Untersuchung, welche Information über die Anfangs-Randbedingungen eines Transportversuchs ein verbessertes Meßverfahren liefern müssen, um deren Genauigkeit zu erhöhen.

In Kapitel 8 werden die experimentellen und theoretischen Ergebnisse und das iterative Vorgehen der vorliegenden Arbeit zusammenfassend diskutiert und bewertet. Die in Abbildung 1.1 dargestellte Lesehilfe soll das Verständnis des vorgestellten iterativen Aufbaus der

vorliegenden Arbeit erleichtern, indem die Vernetzung zwischen dem experimentellen und dem modellorientierten Teil aufgezeigt wird. Das Verständnis des in Kapitel 6 vorgestellten Modellaufbaus und der in Kapitel 7 präsentierten Simulation des Bromidtransports auf der Hangskale setzt neben den Grundlagen aus Kapitel 2, die Beschreibung der landschaftlichen Besonderheiten des Meßgebiets aus Kapitel 3 sowie die Abschnitte 4.1 und 4.2 aus Kapitel 4 voraus.

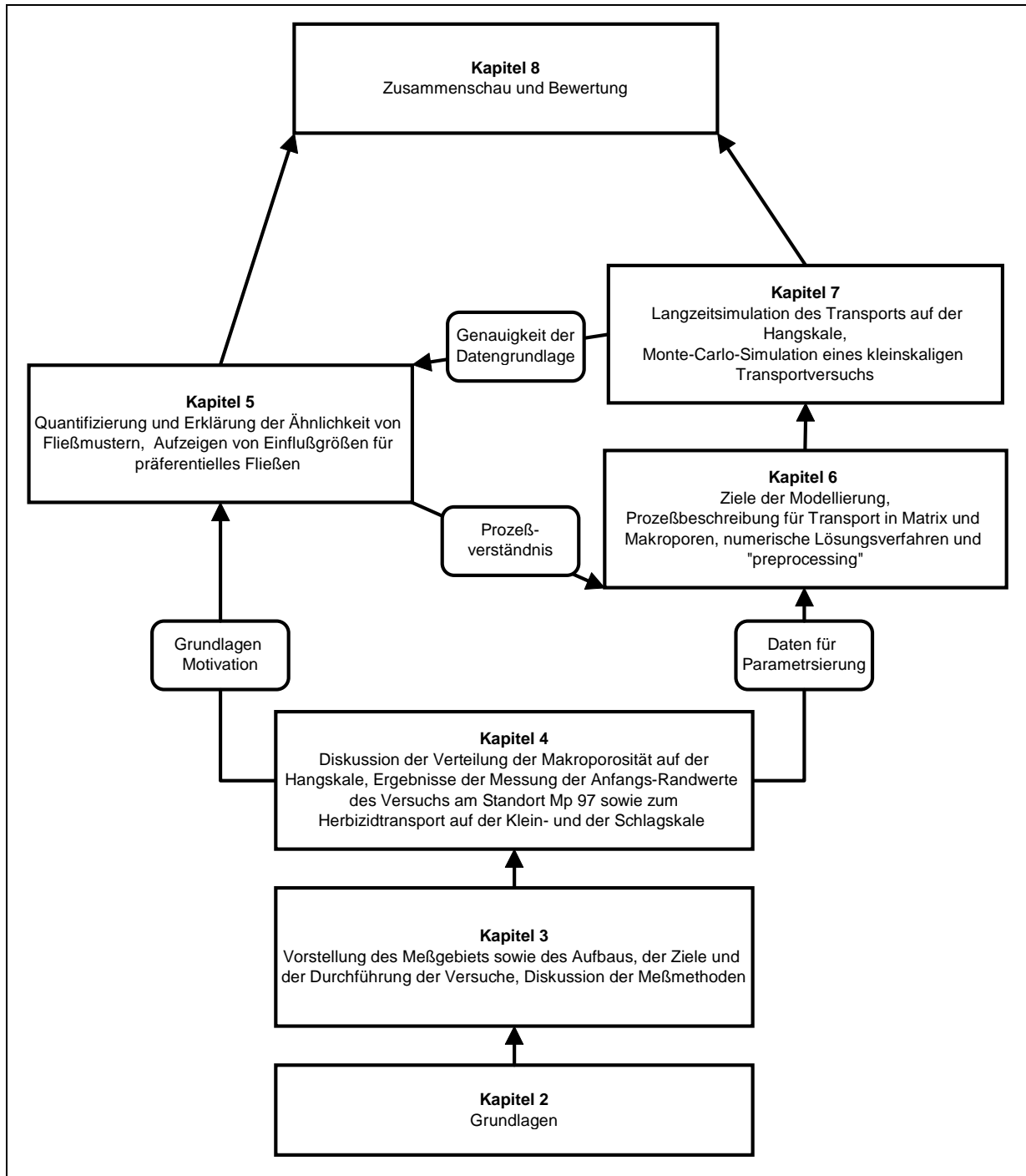


Abb. 1.1: Lesehilfe zum Verständnis der iterativen Vorgehensweise der vorliegenden Untersuchung

2 Grundlegendes

Im vorliegenden Kapitel wird zunächst die klassische, kontinuierliche Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik in porösen Medien auf der Basis von sogenannten effektiven Parametern und ein gängiger Ansatz zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität vorgestellt. Danach wird die begrenzte Gültigkeit dieser Ansätze zur Beschreibung des Stoffhaushalts heterogener Böden an zwei Beispielen deutlich gemacht. Weiterhin werden die Skalenabhängigkeit der Infiltration und die daraus resultierenden Probleme für die Planung und Durchführung der angestrebten Feldexperimente diskutiert. Abschließend werden die Gedanken zur Reproduzierbarkeit von Transportversuchen im nichtlinearen System Boden vertieft und eine indirekte Strategie zur Messung der Anfangs-Randbedingungen des Transportexperiments am Intensivstandort Mp 97 vorgestellt.

Bei der Untersuchung natürlicher Systeme spielen oft Dinge eine Rolle, die man, aus mangelnder Erfahrung oder weil sie andere Fachgebiete betreffen, nicht für wichtig hält. Im vorliegenden Fall sind das die Habitatpräferenzen anezischer, d.h. tief grabender Regenwürmer. Daher ist die Durchführung einer experimentellen Untersuchung in einem Kleineinzugsgebiet im Idealfall ein heuristischer, interdisziplinärer Vorgang, wo bereits in der Planungsphase schon ein Gutteil des Prozeßverständnisses vorliegt. Von diesem heuristischen Ansatz ist auch das vorliegende Kapitel geprägt. Die Abschnitte 2.2 und 2.3 nehmen zum Teil Einsichten vorweg, die später in der Ergebnispräsentation untermauert werden.

2.1 Grundzüge der kontinuierlichen Beschreibung poröser Medien

2.1.1 Das repräsentative Elementarvolumen und der effektive Parameter

Der in der Abschnitt 1.1 erwähnte klassische Prozeßansatz zur Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik mit Hilfe der Richards- und der Konvektions-Dispersions-Gleichung basiert auf dem Kontinuumskonzept. Die Vorteile, die aus der effektiven Beschreibung eines porösen Mediums als Kontinuum erwachsen, lassen sich sehr einfach an der Messung seiner Lage-

rungsdichte erläutern. Sei $m(\mathbf{x},l)$ die Masse in einem Würfel der Kantenlänge l am Ort \mathbf{x} , so ergibt sich die Dichte ρ des Mediums (Roth, 1995) wie folgt:

$$\rho(\mathbf{x},l) = \frac{m(\mathbf{x},l)}{l^3} \quad (2.1)$$

Für Meßwürfel mit einer Kantenlänge, die viel kleiner ist als die charakteristische Länge der Heterogenitäten des Matrixgerüsts, zeigt die Dichte eine unstetige Abhängigkeit¹⁰ vom Ort \mathbf{x} . Ebenso führt eine Vergrößerung des Meßvolumens durch den Einschluß luftgefüllter Hohlräume zu sprunghaften Änderungen der Meßergebnisse. Dieses Verhalten entspricht nicht den Erwartungen an einen repräsentativen Meßwert.

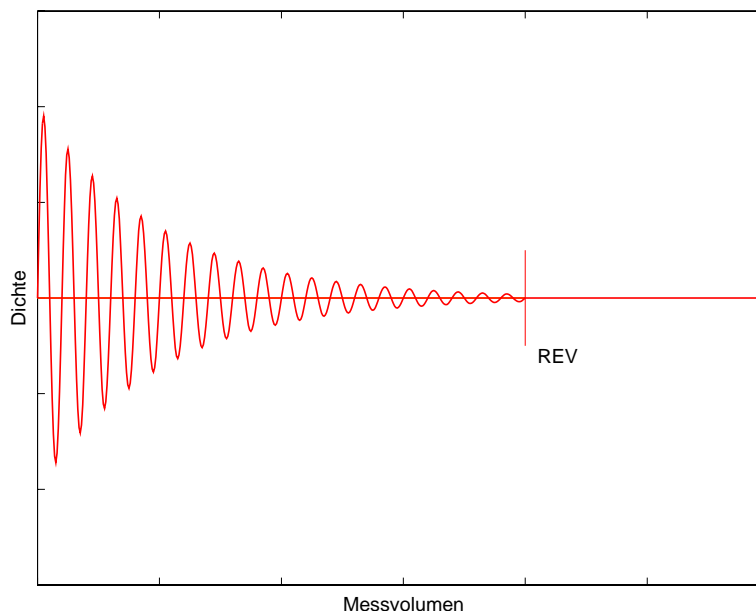


Abb. 2.1: Idealisierter Verlauf der Meßwerte der Lagerungsdichte in Abhängigkeit vom Meßvolumen

Werden durch sukzessives Vergrößern des Meßvolumens mehr Poren und Festsubstanz in den Meßprozeß integriert, so verringert sich die Orts- und Volumenabhängigkeit der Dichte. Überschreitet das Meßvolumen V_m das repräsentative Elementarvolumen V_0 , so verschwindet diese Abhängigkeit im Idealfall vollständig (Bear, 1972). Die auf Basis des REV definierte Lagerungsdichte erfüllt die Erwartungen an einen Parameter, sie ist repräsentativ und die Dichtemessung ist wiederholbar. In einem homogenen kontinuierlichen Medium ist die Lagerungsdichte konstant, in einem heterogenen Medium zeigt sie eine glatte Ortsabhängigkeit. Im Rahmen der kontinuierlichen Beschreibung poröser Medien wird die Existenz eines REV für alle relevanten Zustandsgrößen und Parameter postuliert und das Medium abstrakt als die Überlagerung der entsprechenden, kontinuierlichen Felder aufgefaßt.

¹⁰ Je nachdem, ob in der Festsubstanz oder der Pore gemessen wird.

Die Lagerungsdichte ρ_1 ist ein gutes Beispiel für einen effektiven Parameter. Aus der Aggregation zweier mikroskopischer Parameter, nämlich der wahren Dichte der Festsubstanz und dem REV V_0 , entsteht ein makroskopischer Parameter, der Information über mikroskopische Strukturen repräsentativ mittelt und das System auf der Makroskala homogen beschreibt (Blöschl & Sivapalan, 1995). Bei diesem "upscaling" geht jedoch wesentliche Information über die Mikrostruktur verloren. Die alleinige Kenntnis der Lagerungsdichte ermöglicht keinen Schluß auf die wahre Dichte des Feststoffes oder auf die Größe des REV des untersuchten Mediums. Insofern stellt das REV die **kleinste, explizit** auflösbare Einheit in einem Kontinuum dar. Prozesse oder Strukturen innerhalb des REV können höchstens parametrisch als "subgrid-Variabilität" berücksichtigt werden (Roth, 1995; Blöschl, 1996).

2.1.2 Kontinuierliche, effektive Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik

Das klassische Prozeßmodell zur kontinuierlichen Beschreibung der makroskopischen Wasser- und Stoffdynamik basiert auf der Richardsgleichung und der Konvektions-Dispersions-Gleichung (CD-Gleichung), partiellen Differentialgleichungen parabolisch elliptischen Typs. Die Richardsgleichung beschreibt in der vorliegenden Potentialform die zeitliche Änderung der Energiedichte – also des Matrixpotentials ψ – des Bodenwassers als diffusiven Prozeß (Germann, 1990). Die CD-Gleichung bilanziert die Stoffmasse $m = \rho_s C_s + \theta C_w$ in einem Kontrollvolumen als Summe aus der Divergenz der konvektiven Stoffflußdichte $\mathbf{q}C_w$, dem subskaligen Massenaustausch mit dem umgebenden Wasser, dem Austausch mit der festen Phase und dem Verlust durch Abbau s_a .

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \nabla \left(\underbrace{D_w(\psi) \nabla(\psi + z)}_{\mathbf{q}} \right) \\ \frac{\partial(\rho_s C_s + \theta C_w)}{\partial t} &= -\nabla(\mathbf{q}C_w) + \nabla(D_e \nabla C_w) + s_a \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Richardsgleichung} \\ \text{CD - Gleichung} \end{array} \quad (2.2)$$

- mit
- D_w = Diffusivität des Wassers im Boden [m²/s]
 - C_w = volumenspezifische Konzentration in der Wasserphase [kg/m³]
 - C_s = massenspezifische Konzentration in der Festphase [kg/kg]
 - ρ_s = Lagerungsdichte [kg/m³]
 - ψ = Matrixpotential [m]
 - θ = volumetrischer Wassergehalt [-]
 - D_e = effektiver Dispersionskoeffizient [m²/s]
 - \mathbf{q} = Wasserflußdichte [m/s]
 - z = Z-Koordinate bezogen auf das Nullniveau der potentiellen Energie [m]
 - s_a = Senkenterm zur Beschreibung des Abbaus [kg/m³s]

Im Gleichgewicht wird das Verhältnis der Konzentrationen in der Fest- und der Flüssigphase durch eine Isotherme der Form $C_s = K(C_w)C_w$ beschrieben (Zurmühl, 1994), wobei der Verteilungskoeffizient K durchaus eine komplizierte Funktion von C_w sein kann. Der ein-

fachste Fall ist der sogenannte stationäre Transport: die Divergenz der Wasserflußdichte $\nabla \mathbf{q}$ verschwindet, d.h. Matrixpotential und Wassergehalt sind lokal konstant. In diesem Fall reduziert sich Gleichung (2.2) für einen konservativen Stoff mit linearer, spontaner Gleichgewichtssorption auf folgende Form:

$$R \frac{\partial(C_w)}{\partial t} = -v_a \nabla(C_w) + \nabla^2(DC_w) \quad (2.3)$$

$$R = 1 + \frac{\rho_s K_d}{\theta}$$

mit $K_d =$ lineare Adsorptionskonstante [m^3/kg]

Der Transport eines linear sorbierenden Stoffes ist also nur um den Retardationsfaktor $R \geq 1$ gegen den Transport eines konservativen Tracers verzögert.

Die effektiven Parameter in Gleichung (2.2) sind die Diffusivität für Wasser im Boden und der effektive Dispersionskoeffizient D_e zur Beschreibung des subskaligen Austauschprozesses. Der subskalige Austauschterm in der CD-Gleichung basiert ebenfalls auf einer Diffusionsanalogie. Generell beschreibt ein Diffusionsprozeß den Grenzfall guter Durchmischung und basiert auf der Zerlegung des Transportprozesses in eine (infinite) Summe statistisch unabhängiger Teilschritte nach hinreichend großer Transportdistanz. Gleichung (2.2) gilt daher nur unter der Prämisse, daß sowohl die transportierten Stoffmoleküle das gesamte Geschwindigkeitsfeld mehrmals durchlaufen haben als auch das transportierende "Wasserpaket" sämtliche Potentialgradienten mehrmals "gespürt" hat (Smith & Schwartz, 1980a; Bear, 1972; Roth, 1995; Germann, 1990).

Abbildung 2.2 verdeutlicht diese asymptotische Gültigkeit des Diffusionsansatzes an den drei dargestellten Transportregimen der Taylordispersion in einer zylindrischen Kapillare mit Radius r . Auf der Mikroskala ($t \ll t_m$) ist die Transportzeit t viel kleiner als die transversale Mischungszeit $t_m = r^2/D_{\text{mol}}$, die Trajektorien der Teilchen verlaufen im wesentlichen noch gradlinig. Auf der Mesoskala ($t = t_m$) haben alle Teilchen im Mittel das Geschwindigkeitsfeld einmal durchlaufen, der Verlauf einzelner Trajektorien hängt noch stark vom Startpunkt des jeweiligen Teilchens ab. Zur Beschreibung des Ensembles müßte die Dynamik aller Teilchen explizit modelliert werden. Auf der Makroskala ($t \gg t_m$) haben alle Teilchen das gesamte Geschwindigkeitsfeld mehrmals erfahren, der Transportprozeß kann als Summe statistisch unabhängiger Teilschritte approximiert werden. Die Dynamik des Ensembles kann effektiv als Überlagerung aus Konvektion und Fickscher Dispersion beschrieben werden.

Da die Größe dieser "asymptotischen Transportdistanz" oder Lagrangeschen Längenskale in heterogenen Böden durchaus die vertikale Ausdehnung der ungesättigten Bodenzone übertreffen kann (Germann, 1990), sind die Voraussetzungen für die Anwendung des "klassischen" Prozeßmodells (2.2) innerhalb der ungesättigten Zone in diesen Fällen

strenggenommen gar nicht zu erfüllen. Selbst wenn man von diesen Extremfällen absieht, ist die maximale Transportdistanz, die bei Tracerexperimenten in heterogenen Böden auftritt, meist nur wenige Meter. Die laterale Durchmischung im Boden ist meist so langsam, daß der Transport und damit die Konzentrationsverteilung des untersuchten Stoffes nach diesen Distanzen noch zu stark von der räumlichen Struktur des Geschwindigkeitsfeldes beeinflusst ist, um schon effektiv als CD-Prozeß beschrieben werden zu können (Matheron & de Marsily, 1980; Beven & Germann, 1981; Simmons, 1982; Jury et al., 1986a; Smith & Schwartz, 1980a; Roth et al., 1996). Diese Situation entspricht den in Abbildung 2.2 b dargestellten mesokaligen Verhältnissen der Taylordispersion. Um zu einer realistischen Beschreibung des Konzentrationsfeldes im Boden zu kommen, muß die räumliche Struktur des Geschwindigkeitsfeldes explizit berücksichtigt werden.

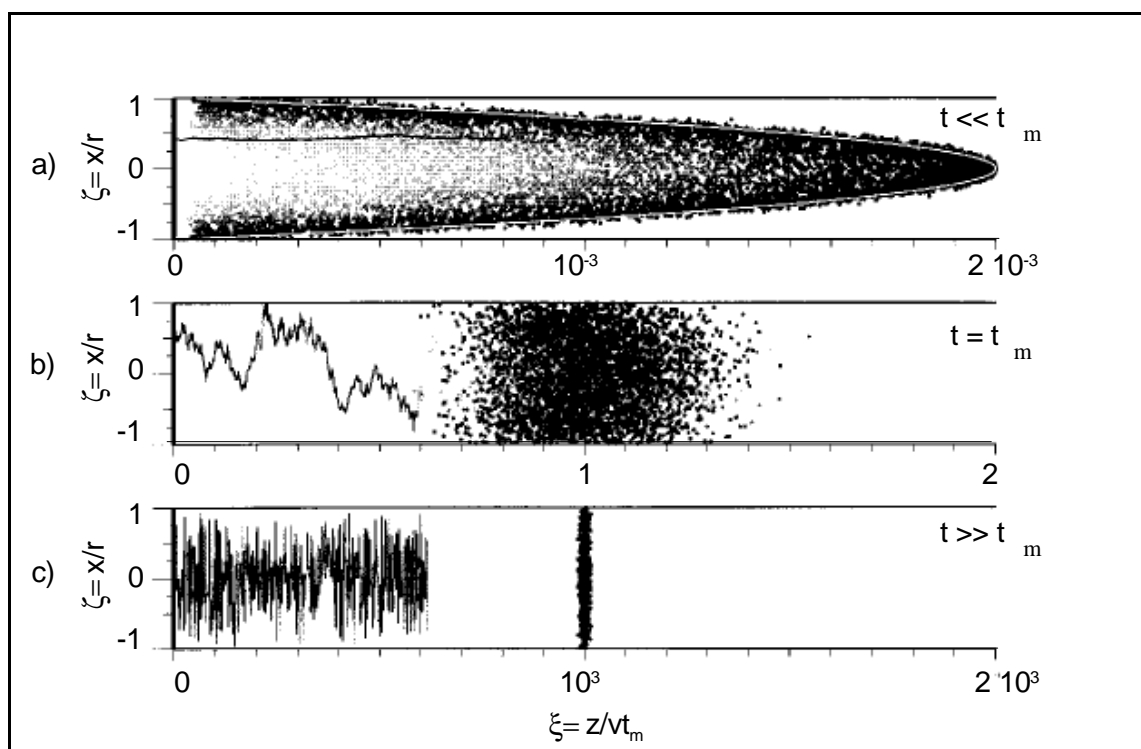


Abb. 2.2: Drei Transportregime der Taylordispersion; die durchgezogene Linie schematisiert die Trajektorie eines Teilchens, die Punkte stellen das Ensemble dar (aus Roth, 1995, verändert)

Aufgrund der Unzulänglichkeiten des CD-Modells entwickelten Anfang der achtziger Jahre Simmons (1982) und Jury (1982) basierend auf einer Transferfunktion einen integralen Ansatz zur effektiven Beschreibung des Stofftransports im Feld. Der Systeminput in Form des Massenflusses Q_{in} eines Stoffes am oberen Rand einer Bodensäule wird mit Hilfe einer Transferfunktion g in den Systemoutput, den Massenfluß Q_{out} an deren unterem Rand, transformiert. Diese Transferfunktion g ist die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte der Lebensdauer von Stoffmolekülen, die zur Zeit t_{in} in die Bodensäule eingetreten sind (Jury et al., 1986a; Jury & Roth, 1990):

$$Q_{\text{out}}(t) = \int_0^t Q_{\text{in}}(\tau_{\text{in}}) g(t - \tau_{\text{in}} | \tau_{\text{in}}) d\tau_{\text{in}} \quad (2.4)$$

Im Spezialfall des stationären Transports eines konservativen Tracers wird die Transferfunktion nicht mehr durch den Eingabezeitpunkt konditioniert und reduziert sich auf den in Gleichung (2.5) dargestellten ursprünglichen Ansatz von Jury (1982). Die Wahrscheinlichkeitsdichte $f(t, z_L)$ beschreibt die Verteilung der Transportzeiten für den Durchbruch eines Stoffmoleküls in die Tiefe z_L , sie wird auch als Transportzeit-pdf (**p**robability **d**ensity **f**unction) bezeichnet. Sie entspricht der Antwort des Systems auf einen Dirac-Puls, also der klassischen Systemfunktion oder Greens-Funktion eines linearen Operators (Hohnerkamp & Römer, 1986) und ist zumindest im Prinzip experimentell bestimmbar (White et al., 1986; Jury & Roth, 1990). Das Modell der stochastischen Konvektion (SC) mit lognormaler Transportzeit-pdf, beschreibt den nicht durchmischten Grenzfall.

$$C_{\text{out}}^f(t) = \int_0^\infty C_{\text{in}}^f(\tau) f(t - \tau, z_L) d\tau \quad (2.5)$$

mit C_{out}^f = flußgemittelte Konzentration am unteren Rand

C_{in}^f = flußgemittelte Konzentration am oberen Rand

Untersucht man Stofftransport in ungesättigten Feldböden, so bewegt sich die Dynamik zwischen den beiden oben genannten Grenzfällen. Intuitiv erwartet man gute Durchmischung (CD-Regime) für große Transportdistanzen und wenig Durchmischung (SC-Regime) bei kleinen Transportdistanzen. Welches der beiden Modelle den effektiven Transportprozeß besser beschreibt, läßt sich anhand der zeitlichen Entwicklung der Varianz der Transportzeiten beurteilen. Beim konvektiv-dispersiven Prozeß wächst die Varianz linear, bei der stochastischen Konvektion mit dem Quadrat der Transportdistanz (Jury & Roth, 1990).

2.1.3 Prozeßmodelle für präferentielle Wasserbewegung

Es existieren zumindest zwei Typen präferentieller Wasserbewegung. Zum einen ist der Fluß in Makroporen aufgrund der Heterogenität des Porenraumes in stark strukturierten Böden zu nennen. Zum anderen existiert das sogenannte "fingering", d.h. die Instabilität einer Infiltrationsfront in wenig strukturierten Böden, die wasserabstoßende Substanzen enthalten (Ritsema et al., 1998). Zur Beschreibung der Infiltration in einem makroporösen Boden werden zwei gängige Modelltypen herangezogen. Modelle des ersten Typs beschreiben die Flußrate in einer Makropore oder in einem Makroporensystem (Beven & Germann, 1981; Beven & Germann, 1985; Hoogmoed et al., 1980; Edwards et al., 1979). Modelle des zweiten Typs beschreiben die Infiltration aus dem Makroporensystem in die Bodenmatrix, nachdem die Makroporen mit Wasser gefüllt sind (Beven & Clarke, 1986; van Genuchten et al., 1984).

Ein viel diskutierter Bikontinuumsansatz (Merz, 1996; Bronstert; 1994; Maurer 1997) zur Beschreibung der Flußdichte in einem System von Makroporen ist das Modell der kinematischen Welle von Beven und Germann (1981). Angelehnt an die Gleichung von Hagen-Poiseuille zur Beschreibung der stationären laminaren Wasserflußdichte q in einer unendlichen Kapillare vom Radius r wird die gesamte Flußdichte q_{mak} in einem System von Makroporen wie in Gleichung (2.6) dargestellt als Potenzgesetz beschrieben. Die Kombination mit der Kontinuitätsgleichung führt auf eine Wellengleichung mit c als Phasengeschwindigkeit. Als hyperbolische Differentialgleichung beschreibt Gleichung (2.6) keinen Ausgleichsprozeß wie die Richardsgleichung, sondern den Transport von Wasserpaketeten entlang charakteristischer Linien.

$$\begin{aligned}
 q_{\text{mak}} &= b w^a \\
 \frac{\partial q_{\text{mak}}}{\partial t} &= c \frac{\partial q_{\text{mak}}}{\partial z} \\
 c &= a b \left(\frac{1}{a}\right) \left(1 - \frac{1}{a}\right) q_{\text{mak}}
 \end{aligned}
 \tag{2.6}$$

mit w = volumetrischer Wassergehalt des Makroporensystems [-]
 b = maximal mögliche Flußdichte [m/s]
 a = empirischer Parameter [-]

2.2 Grenzen der rein kontinuierlichen Beschreibung der Stoffdynamik in heterogenen Böden

2.2.1 Längenskalen mikrobieller Aktivität im Boden

In der Einleitung wurde bereits angedeutet, daß sich die mikrobielle Aktivität im Boden innerhalb des obersten Meters stark ändert. Der Abbau verschiedener Herbizide in den Böden des Testgebiets wurde im Rahmen des Weiherbachprojekts eingehend untersucht (Schierholz et al., 1997). Des weiteren hat Bolduan 1998 im Rahmen seiner Diplomarbeit ermittelt, auf welcher Zeitskala das Herbizid Isoproturon (IPU) abgebaut wird, falls es durch präferentiellen Transport in Wurmgingen in den Unterboden gelangt ist. Das Versuchsprogramm bestand aus einem Feldexperiment und mikrobiologischen Begleituntersuchungen im Labor. Unter anderem wurde die mikrobielle Aktivität¹¹ im organischen "coating" von Makroporen mit entsprechenden Werten in der Matrix des Ober- und Unterbodens verglichen. Tabelle 2.1 stellt diese Werte sowie die Halbwertszeiten des IPU-Abbaus in den drei Bereichen des Bodens gegen-

¹¹ Die Dehydrogenaseaktivität ist ein Summenparameter zur Beschreibung der Stoffwechselaktivität von Bakterien (Mokry, mündliche Mitteilung, 1997).

über. Wie erwartet geht der IPU-Abbau im Unterboden wesentlich langsamer von statten als im Oberboden. Hingegen wird IPU in Makroporen selbst in einer Tiefe von 1 m noch ähnlich schnell abgebaut wie in der Oberbodenmatrix. Bolduan (1998) führt den erhöhten Abbau und die erhöhte mikrobielle Aktivität in Makroporen durch das erhöhte Nährstoffangebot im organischen "coating", die bessere Belüftung und die konstanten Temperatur- und Feuchtebedingungen im Unterboden zurück. Allerdings ist dieser mikrobielle Einfluß des Wurmgangs auf den IPU-Abbau in der umgebenden Bodenmatrix bereits nach wenigen cm nicht mehr festzustellen.

Tabelle 2.1: Halbwertszeiten des Isoproturonabbaus sowie die Dehydrogenaseaktivität in verschiedenen Bereichen eines Kolluviums des Weiherbachtals; die Halbwertszeiten für die Bodenmatrix stammen von Schierholz et al. (1997), die Halbwertszeit für den Abbau in Makroporen sowie die Dehydrogenaseaktivitäten von Bolduan (1998).

| Bereich | Halbwertszeit [d] | Aktivität [mg INF/g Boden] |
|--------------------------------|----------------------|-------------------------------|
| Oberbodenmatrix (0 - 0.3 m) | 10 - 30 | 0.15 |
| Unterbodenmatrix (> 1 m) | > 100 | 0.005 |
| Makroporen (ca. 1 m Tiefe) | 15 | 0.04 |

Die präsentierten Ergebnisse zeigen, daß die charakteristischen Längen, auf denen sich die mikrobielle Aktivität und damit die Zeitskala des IPU-Abbaus vertikal und horizontal im Boden ändern, wesentlich kleiner sind als die laterale und vertikale Ausdehnung der repräsentativen Elementarvolumina hydraulischer Größen in einem makroporösen Boden (Beven & Germann, 1981; Beven & Germann; 1982). Selbst wenn es gelänge, eine effektive, hydraulische Gesamtleitfähigkeit für **beide Porensysteme** in makroporösen Böden zu definieren und zu **messen**, wäre die Elementarzelle eines Modells auf Basis dieses Parameters, wie in Abbildung 2.3 skizziert, viel größer als die mikrobiellen Längenskalen im Boden.

Einfach gesprochen, wäre mit der Aussage "das Herbizid befindet sich irgendwo in Zelle 1 bzw. Zelle 2" bereits die Genauigkeitsgrenze dieses Modells erreicht. Die subskalige Information, ob sich das Herbizid im Oberboden, Unterboden oder in einer Makropore der Zelle befindet und wie schnell es daher abgebaut wird, könnte das Modell nicht liefern. Diese Information ist jedoch essentiell, beispielsweise wenn die Gefährdung des Grundwassers abgeschätzt werden soll. Neben den typischen Längenskalen mikrobieller Aktivität führt auch, wie der nächste Abschnitt zeigt, der "lokale" Charakter präferentieller Fließaktivität an die Grenzen der rein kontinuierlichen Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik in heterogenen Böden.

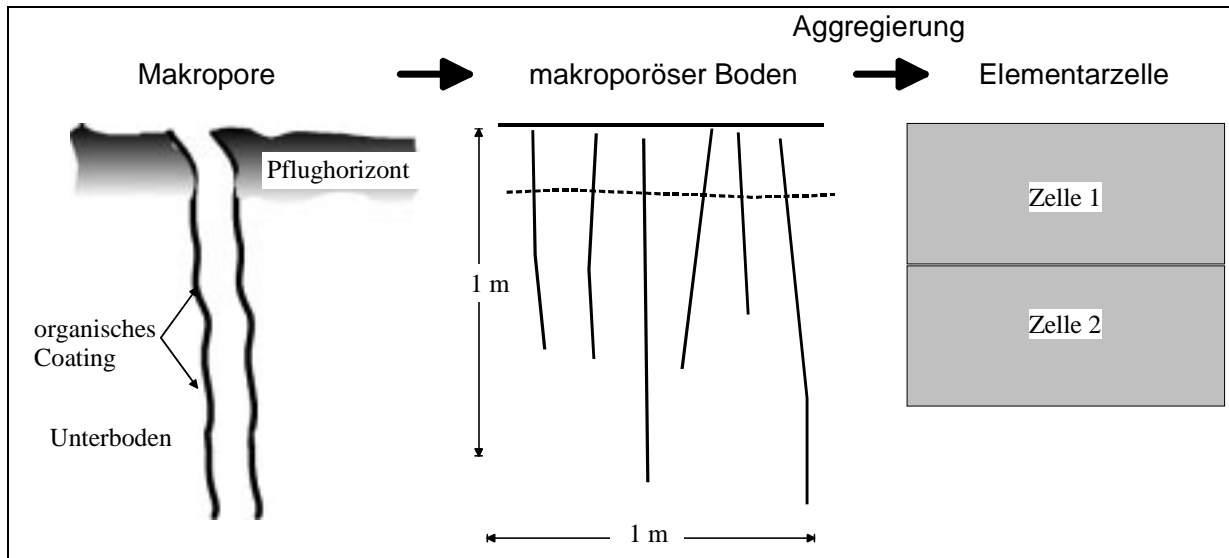


Abb. 2.3: Elementarzelle eines kontinuierlichen Modells in einem makroporösen Boden, Bereiche hoher mikrobieller Aktivität sind im linken Bild dunkel markiert

2.2.2 Der lokale Charakter präferentieller Fließaktivität

Zur Charakterisierung der Wasserbewegung in einem porösen Medium dienen die Filtergeschwindigkeit q und die Abstandsgeschwindigkeit v_a (Childs, 1969; Jury, et al., 1991). Wird ein poröses Medium im Rahmen eines Infiltrationsversuchs auf einer Fläche A mit Wasser überstaut, so ergibt sich die Filtergeschwindigkeit q aus der zeitlichen Änderung der Überstauhöhe H . Sie entspricht, bezogen auf die Einheitsfläche, der mittleren Wasserflußdichte im Medium. Die eigentliche Wasserbewegung findet jedoch nur in den Poren statt, d.h. der wahre Transportquerschnitt entspricht der (Flächen-) Porosität θ_s des Mediums. Für isotrope Medien ergibt sich daher die mittlere Abstandsgeschwindigkeit v_a in den Poren als Quotient aus der Filtergeschwindigkeit q und der Porosität θ_s .

$$q = \frac{\Delta H A}{\Delta t A} = \frac{Q}{A} \quad (2.7)$$

$$v_a = \frac{q}{\theta_s}$$

Präferentielles Fließen ist ein lokaler Prozeß, der meist nur in wenigen Makroporen stattfindet (Beven & Germann, 1982). Der wahre Transportquerschnitt beträgt daher nur wenige cm^2 . In einem kontinuierlichen Modell, das die Wasserbewegung in Bodenmatrix und präferentiellen Fließwegen effektiv in einer Domäne beschreibt, ist der Transportquerschnitt hingegen per definitionem der gesamte Makro- und Mikroporenraum in einem Modellelement. Im Falle präferentieller Fließaktivität werden die lokalen Abstandsgeschwindigkeiten daher die Transportdistanzen durch solche Modelle und systematisch unterschätzt (Stamm, 1997).

Im vorliegenden und letzten Abschnitt sollte deutlich werden, daß die unterschiedlichen charakteristischen Längen der Prozesse "Abbau", "Sorptions" und Transport in heterogenen Böden die deterministische, rein kontinuierliche Beschreibung des Stoffhaushalts auf der Kleinskala fast unmöglich machen. Insbesondere die deterministische Modellierung des Abbaus von Herbiziden verlangt eine räumliche Detailliertheit, die ein kontinuierliches Modell nicht liefern kann. Es handelt sich um ein klassisches Skalenproblem im Kleinen. Generell erschwert die Skalenabhängigkeit von Prozessen (Blöschl, 1996; Plate 1992a) nicht nur die Modellierung hydrologischer Prozesse, sondern auch die experimentelle Untersuchung hydrologischer Prozesse. Auch bei der Planung der im Rahmen der vorliegenden Untersuchung durchgeführten Transportversuche hat diese Skalenabhängigkeit zu Problemen geführt, daher lohnt sich ein Blick ins Detail.

2.3 Die heuristische Planung eines Feldexperiment, eine Notwendigkeit?

Dieser Abschnitt geht am Beispiel des landwirtschaftlich genutzten Lößstandorts Weiherbach auf die Notwendigkeit einer iterativen, heuristischen Vorgehensweise bei der Planung von Feldexperimenten ein und begründet diese Forderung mit einer detaillierten Skalenbetrachtung. Laut Seyfried und Wilcox (1996) existieren auf unterschiedlichen Raum-Zeitskalen jeweils andere Schlüsselparameter, deren räumliche Verteilung die Variabilität des gleichen Prozesses auf der jeweiligen Skala maßgeblich prägen. Darüber hinaus stößt man bei der Untersuchung des gleichen Prozesses auf unterschiedlichen Raumskalen zum Teil auf verschiedene Qualitäten räumlicher Variabilität, Zufälligkeit oder Ordnung. Die Untersuchung dieser unterschiedlichen Qualitäten räumlicher Variabilität erfordert unterschiedliche Methoden (Blöschl & Sivapalan, 1995; Dooge, 1986; Klemes, 1983). Die folgende Betrachtung dieser Problematik für die experimentelle Untersuchung präferentiellen Stofftransports in einer Lößlandschaft anhand zweier möglicher Fragestellungen:

1. Welcher Art ist die präferentielle Fließaktivität in den Böden des Weiherbachgebiets und welche Größen steuern den Übergang vom klassischen ins präferentielle Regime und begünstigen das Eintreten schneller Transportereignisse?
2. Wie kann das Risiko einer Belastung des Weiherbachs durch präferentiellen Stofftransport langfristig minimiert werden?

Die Interessenlage, nach Klemes (1983) der "scale of interest", ist bei beiden Fragen unterschiedlich. Die erste Frage zielt auf den Gewinn grundlegender Erkenntnisse und untersucht präferentielle Fließaktivität auf der sogenannten Ereignisskala, mit einer charakteristischen Zeit zwischen einer Stunde und einem Tag. Die zweite Frage hat hingegen die **Wirkung** präferentieller Fließphänomene im Sinn, sie zielt auf die saisonale Skala mit einer charakteristischen Zeit von ca. einem Jahr (Blöschl, 1996). Der wesentliche Prozeß für die Untersuchung der ersten Frage ist die Infiltration (Roth et al., 1996). Bei der zweiten Frage gewinnen andere

Prozesse wie die Sorption und der mikrobielle Abbau von Pestiziden, aber auch die jahreszeitliche Niederschlagsverteilung, der jahreszeitliche Verlauf der Aktivität von Makro- und Mikrofauna sowie der Applikationstermin von Pflanzenschutzmitteln und die Oberflächenbearbeitung vor der Applikation an Bedeutung. Das Zusammenspiel der letztgenannten Faktoren, vor allem aber die Oberflächenbearbeitung vor der Applikation, bestimmt maßgeblich die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten präferentiellen Herbizidtransports (Flury, 1996; Beven & Germann; 1982).

2.3.1 Räumliche Variabilität auf der Ereignisskala – Zufälligkeit oder Ordnung?

Welche Art räumlicher Variabilität ist auf den verschiedenen Raumskalen zu erwarten? Auf der Ereignisskala bestimmen ereignisabhängige Größen wie Vorgeuchte, Niederschlagsintensität und -dauer, aber auch geomorphologische Randbedingungen wie Bodentyp und Makroporosität den Verlauf des Infiltrationsprozesses (Flury et al., 1995a; Flury 1996; Beven & Germann, 1981; Beven & Germann, 1982; Schmidt, 1996). Auf der Kleinskala¹² herrscht Zufälligkeit, denn durch die bereits angedeuteten ungenauen Meßmethoden sind dem Beobachter bestenfalls die statistischen Momente der Bodenfeuchte, der hydraulischen Leitfähigkeit sowie der Makroporosität bekannt, nicht jedoch deren exakte Werte an einem Punkt (siehe auch Abschnitt 2.4.2). Ob es im Rahmen eines Transportexperiments zu einem präferentiellen Fließereignis kommt und wo es in der Parzelle gegebenenfalls stattfindet, hängt sicherlich sehr empfindlich vom Zusammenwirken der drei genannten Größen ab. Die Ausprägung des Makroporensystems spielt dabei vermutlich eine Schlüsselrolle.

Auf der Hangskala des Weiherbachgebiets fand Delbrück (1997) im Rahmen eines Tracerelements Hinweise auf Ordnung im Transportgeschehen. So waren z.B. "Vorläuferpeaks" des Tracers am Fuß des Versuchshangs systematisch tiefer in den Boden vorgedrungen als an Hangmitte und Hangtop. Delbrück erklärt dies durch eine höhere Anzahl hydraulisch aktiver Makroporen. Untersuchungen von Schmaland (1996) bestätigen in der Tat eine systematisch erhöhte Makroporosität in den Kolluvien des Weiherbachgebiets. Erzeugen die typischen Erosionscatenen der Lößhänge (Abbildung 2.4), mit Pararendzinen oder gekappten Parabraunerden an Hangtop oder Hangmitte und Kolluvien am Hangfuß, eine räumliche Ordnung der Infiltrationsvariabilität? Diese Frage wird im Rahmen von Kapitel 4 und 5 aufgegriffen.

2.3.2 Langzeitverhalten auf der saisonalen Skala – Periodizität und anthropogene Einflüsse

Auf der saisonalen Skala sind Parameter wie die Makroporosität oder die hydraulische Leitfähigkeit nicht mehr konstant. Die Bodenbearbeitung, saisonale Schwankungen der Witterung und der Aktivität der Bodenfauna verändern langfristig die Randbedingungen für Transport und Abbau von Pestiziden im Boden (Schierholz et al, 1997; Bärlund, 1997).

¹² Die charakteristische Länge dieser Skala liegt zwischen 1 - 10 m (Blöschl, 1996).

Besonders wichtig ist die Aktivität tief grabender Regenwurmarten als maßgeblichen Bildnern biogener Makroporen in den Böden des Weiherbachgebiets. Sie reicht vom Frühjahr bis zum späten Herbst, in Frostperioden und Trockenphasen fallen die Würmer in Trocken- oder Winterstarre. Durch das Pflügen im Frühjahr oder Herbst wird die Verbindung der Wurmgänge zur Erdoberfläche zerstört. Unterhalb des Pflughorizonts hingegen überdauern die Gänge oft mehrere Jahre (Beven & Germann, 1982; Ehrmann, 1996). Zur Nahrungsaufnahme legen die Würmer im Laufe des Frühjahrs neue Gänge im Pflughorizont an (Bolduan, 1998; Schmidt, 1996). Somit erreicht die Zahl der Wurmgänge, die kontinuierlich bis zur Erdoberfläche reichen, im niederschlagsreichen Herbst ihr Maximum. Das Zusammenspiel von Bodenbearbeitung, Wurmaktivität und Witterung führt also letzten Endes zu einer saisonalen Periodizität in der Anfälligkeit des Bodens für präferentielle Fließaktivität.

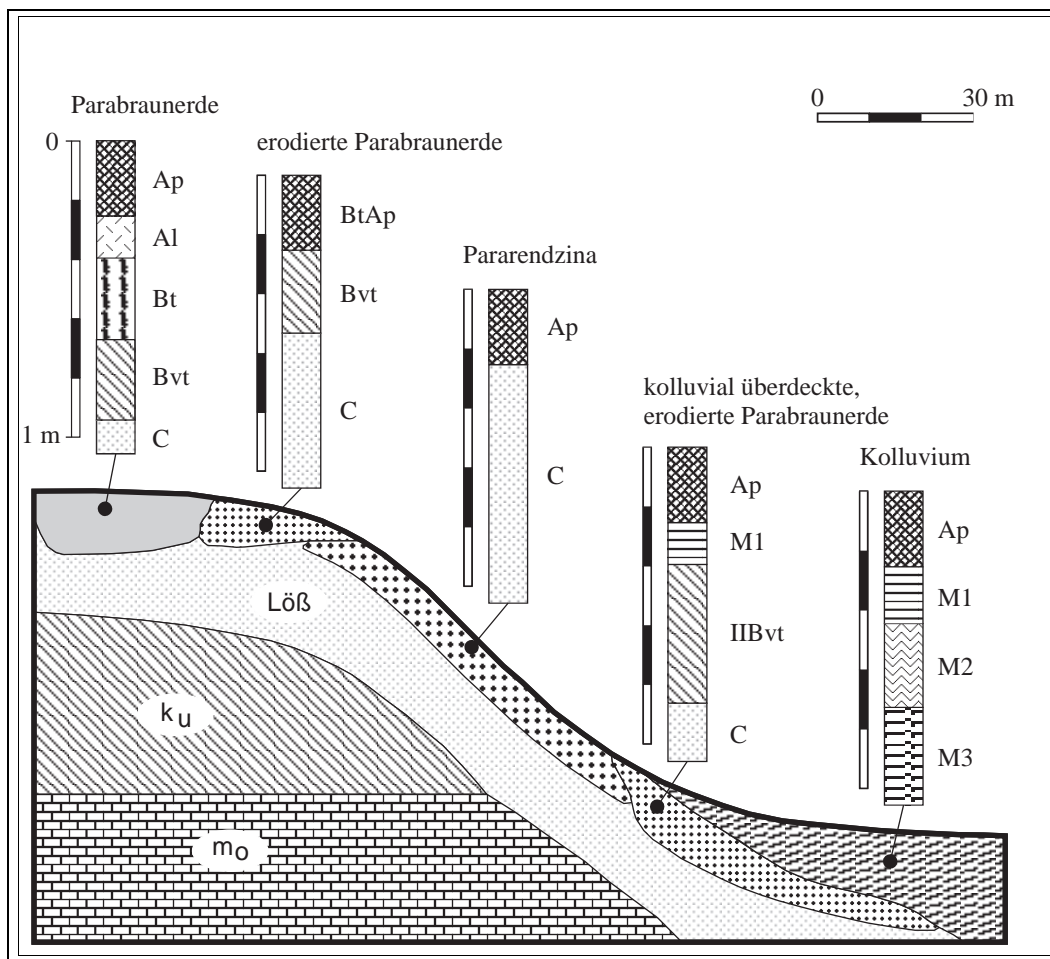


Abb. 2.4: Typische Bodentypenverteilung an einem Lößhang im Kraichgau (aus Gerlinger, 1997)

Vor allem anthropogene Einflüsse wie ein verändertes Nahrungsangebot durch eine Landnutzungsänderung oder ein veränderter Spritzmitteleinsatz wirken sich nachhaltig auf die Wurmpopulation aus (Ehrmann, 1996; Schmaland, 1996). Somit besteht eine langfristige Rückkopplung zwischen normalen landwirtschaftlichen Aktivitäten und den hydraulischen

Eigenschaften der Böden¹³. In Anbetracht dieser Komplexität scheint die Benennung eines einzelnen Schlüsselparameters oder Prozesses unangemessen.

Das oben Gesagte zeigt, daß natürliche Systeme eine immens verwobene Komplexität mit vielen Rückkopplungen zwischen den belebten und den unbelebten Bestandteilen bergen. Die bestechende Vorgehensweise¹⁴ der Physik, wo basierend auf einem theoretischen Fundament eine Arbeitshypothese formuliert und im Laufe des Experiments geprüft wird, gelingt im vorliegenden Fall nicht. Dazu enthält das System zu viele Komponenten, die sich einer formalen Beschreibung entziehen, wie im vorliegenden Fall den Regenwurm. Die Planung und Durchführung der in Kapitel 3 vorgestellten Experimente war daher iterativ. Die meisten Hypothesen wurden erst entwickelt, nachdem das System bereits experimentell angeschaut worden war. Insofern sind in diesem Abschnitt Einsichten verarbeitet, die sich strenggenommen erst aus der Diskussion der experimentellen Untersuchung ergeben. Diese Einsichten sind jedoch grundlegend, um zu verstehen, wie schwierig sich letztlich der Gewinn aussagekräftiger, experimenteller Daten in natürlichen Systemen gestaltet. Daher ist dieser heuristische Vorgriff gerechtfertigt. Tabelle 2.2 faßt die Gedanken zur Skalenabhängigkeit der am Stoffhaushalt eines ländlichen Einzugsgebiets beteiligten Prozesse und Größen zusammen.

Tabelle 2.2: Dominiierende Prozesse und Schlüsselgrößen des Stoffhaushalts auf verschiedenen Raum- Zeitskalen

| Zeitskale | Ereignisskale | | saisonale Skale | |
|--|--|--|--|---|
| dominierender Prozeß: | Infiltration | | anthropogene Einflüsse | |
| Raumskale: | Kleinskale (1- 10 m) | Hangskale (100 - 1000 m) | Kleinskale (1- 10 m) | Hangskale (100 - 1000 m) |
| Parameter und Art der Variabilität | Makroporen (zufällig) Bodenfeuchte (zufällig) Niederschlag (homogen) | Bodentypen (Ordnung) Landnutzung Niederschlag (homogen?) | Wurmtätigkeit (Periodizität) Witterung (Periodizität) Oberflächenbearbeitung | Landnutzung Witterung (Periodizität) Wurmtätigkeit (Periodizität) Oberflächenbearbeitung |
| Schlüsselparameter und Art der Variabilität | ⇓ Makroporenverteilung (zufällige Variabilität) | ⇓ Bodentypenverteilung (Ordnung) | ⇓ Wurmtätigkeit und Witterung (Periodizität) | ⇓ Landnutzung, Bodenbearbeitung (?) |

¹³ Diese Rückkopplung reicht über die Wurmgänge bis in mehrere Meter Tiefe.

¹⁴ Dieses ist oft auch in der Physik eine Idealisierung des tatsächlichen Vorgehens.

2.4 Zur Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportversuche

Wie in Abschnitt 1.3. bereits angedeutet wurde, soll mit dem erweiterten Modellsystem CATFLOW 2.0 im Rahmen einer Monte-Carlo-Simulation die Reproduzierbarkeit der in Kapitel 3 vorgestellten Transportexperimente unter identischen Anfangs-Randbedingungen geprüft werden. Die notwendigen Daten liefert der Versuch an der Intensivmeßparzelle Mp 97. Im folgenden wird nach einer grundsätzlichen Betrachtung die Strategie zur Messung zugehörigen Anfangs-Randbedingungen erläutert.

2.4.1 Grundsätzliches

Es wurde bereits betont, daß Messungen aufgrund von Fehlern stets nur mit endlicher Genauigkeit reproduzierbar sind. Da eine Variation der Anfangs-Randwerte innerhalb der zugehörigen Fehlerbereiche eine Variation der Lösung eines Anfangs-Randwertproblems verursacht, läßt sich die Dynamik eines Systems nur im Rahmen dieser, durch die Unschärfen der Anfangs-Randbedingungen verursachten, Variation prognostizieren. Dies ist nichts anderes als die altbekannte Fehlerfortpflanzung. Da die im Rahmen dieser Untersuchung verwendeten Meß- und Beprobungstechniken nicht zerstörungsfrei arbeiten, war eine identische Wiederholung und somit eine direkte Ermittlung der Reproduzierbarkeit der kleinskaligen Transportversuche nicht möglich.

Um auch mit einer einzelnen Realisierung des Experiments zu repräsentativen Meßergebnissen zu gelangen, stützt man sich in vielen Fällen auf die Ergodentheorie (Dagan, 1989). Das Integrationsgebiet des Experiments wird räumlich oder zeitlich so weit ausgedehnt, daß hinreichend viele **unabhängige** Realisationen des Prozesses in die räumliche oder zeitliche Statistik des Meßergebnisses einfließen. Die Ensemblestatistik kann dann durch die räumliche oder zeitliche Statistik der Meßwerte approximiert werden. Die Wahl eines ergodischen Meßvolumens im Rahmen der Planung von Transportexperimenten setzt jedoch Kenntnis der Größenordnung der lateralen Korrelationslängen¹⁵ des Infiltrationsprozesses in den untersuchten heterogenen Böden voraus. Diese Kenntnis lag in der Planungsphase noch nicht vor. Daher wurde in der vorliegenden Untersuchung die Genauigkeit der durchgeführten Transportversuche im Rahmen einer Monte-Carlo-Simulation ermittelt.

2.4.2 Die Messung von Anfangs-Randwerten nach der "indirekten" Methode

Für diese Monte-Carlo-Simulation sollten die Anfangs-Randwerte des Transportversuchs an der Intensivmeßparzelle Mp 97 mit den zu Verfügung stehenden Mitteln so genau wie möglich ermittelt werden. Der vorliegende Abschnitt erläutert die angewandte Strategie und be-

leuchtet Form und Güte der gewonnenen Information. Das Bodenfeuchtefeld $\theta(x, y)$ im oberen Bodenhorizont der Parzelle Mp 97 vor Versuchsbeginn wird im folgenden als Anfangszustand des Experiments angesprochen. Das hydraulische Leitfähigkeitsfeld $k(x, y)$ und die Ausprägung der Makroporen im anstehenden Boden stellen die zu ermittelnden Randbedingungen des Transportversuchs dar. Das Zusammenspiel dieser drei Größen steuert maßgeblich, ob, wann und wo es im Boden der Parzelle zu präferentiellem Fließen kommt. Die Bodenfeuchte θ , die hydraulische Leitfähigkeit und die Makroporosität sind prinzipiell einer direkten Messung zugänglich. Allerdings liefern Messungen mit TDR-Sonden bzw. Stechzylindern aufgrund ihres kleinen Integrationsvolumens kein repräsentatives Bild der entsprechenden räumlichen Felder im Boden der Versuchsparzelle (Blöschl, 1996), so daß viele dieser Punktmessungen benötigt werden.

Daher wurde bei der Messung der Anfangs-Randwerte des Transportexperiments am Standort Mp 97 indirekt vorgegangen, Abbildung 2.5 illustriert die Meßstrategie schematisch. Die Bodenfeuchtemessung erfolgte auf zwei Testparzellen mit 4 m² Grundfläche an jeweils 25 Punkten mit 5 Meßwiederholungen.

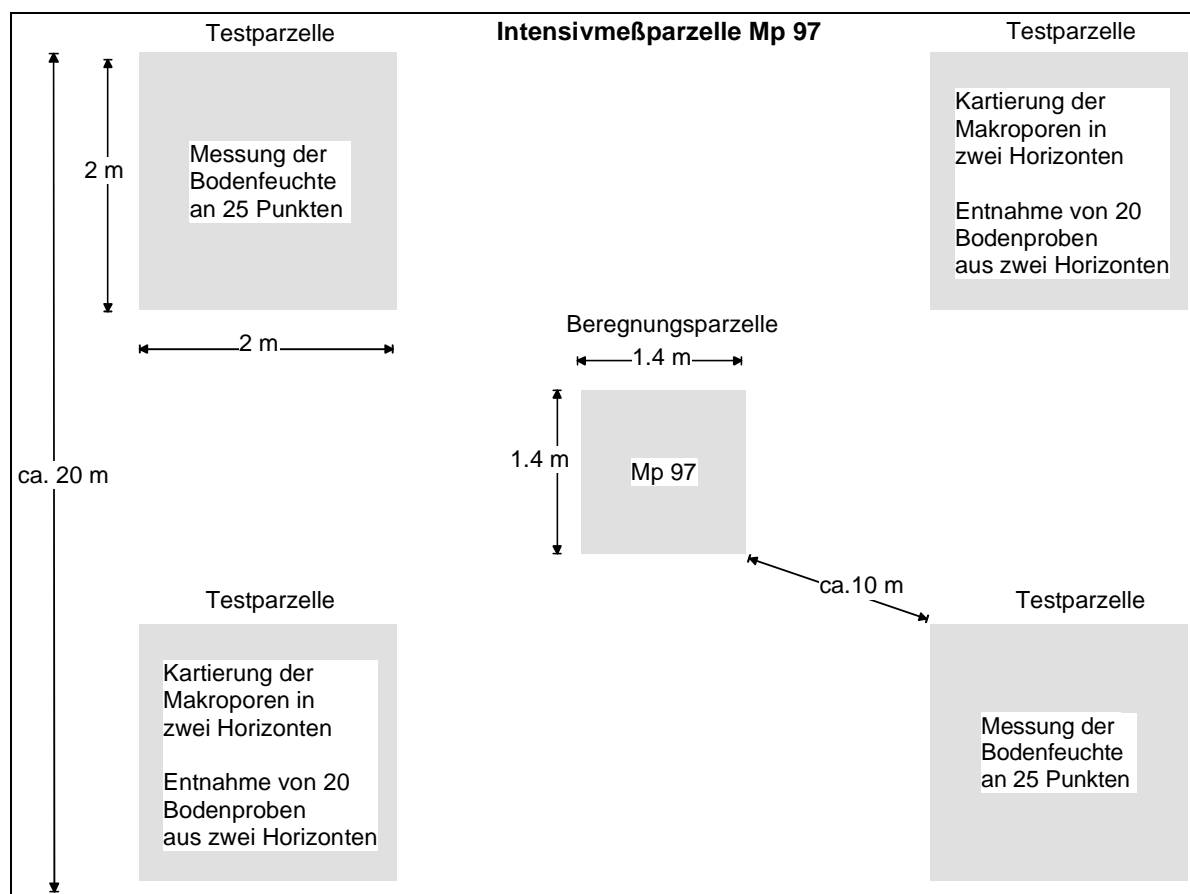


Abb. 2.5: Schematische Darstellung der indirekten Methode zur Messung eines repräsentativen Makrozustands in Form statistischer Momente in der Draufsicht

¹⁵ Nur wenn sich der Meßbereich viel weiter ausdehnt als diese Korrelationslängen, fließen wirklich **unabhängige** Realisierungen in den räumliche Statistik ein.

Die Entfernung der Testflächen zur Beregnungsparzelle beträgt ca. 10 m. Die Kartierung der Makroporen sowie die Entnahme 20 ungestörter 100 cm³-Bodenproben aus zwei Horizonten erfolgte auf zwei weiteren Testflächen gleicher Größe. Ziel dieser Strategie ist, zumindest die räumliche Statistik der drei Größen repräsentativ für die Beregnungsparzelle zu ermitteln. Stimmen die räumlichen Mittelwerte und die Standardabweichungen der gemessenen Größen der jeweiligen Testflächen im Rahmen der Meßfehler überein, so liefert das ein Indiz, daß dies gelungen sein könnte. Im Falle einer Übereinstimmung der Momente wird daher postuliert, daß die räumlichen Momente, die auf den Testparzellen gemessen wurden, auch die Statistik des Bodenfeuchtefelds, des hydraulischen Leitfähigkeitsfeldes und der Makroporen im Boden der Versuchsfläche repräsentieren. Trotz des Meßaufwands birgt diese Methode noch immer deutliche Unschärfen:

- Die Messungen liefern keine Information über die räumliche Struktur des Bodenfeuchte- und des Leitfähigkeitsfelds im Boden der jeweiligen Testfläche, denn dazu müßten die Abstände der jeweiligen Meßpunkte zueinander bekannt sein.
- Die Messungen der Feuchte und gesättigten Leitfähigkeiten muß auf verschiedenen Flächen stattfinden, da sonst künstliche Makroporen durch die TDR-Messung entstehen. Daher liegt ebenfalls keine Information über die räumliche Kreuzkorrelation beider Felder im Boden der Testflächen vor. Damit kann auch keine Aussage über die Kreuzkorrelation von Feuchte und gesättigter Leitfähigkeit im Boden der Versuchsfläche abgeleitet werden.

Welcher der beiden in Abbildung 2.6 dargestellten hypothetischen Anfangs-Randbedingungen zu Beginn des Versuchs in der Parzelle möglicherweise geherrscht haben könnte, ist aus der Messung also nicht ableitbar. Die Abbildung zeigt zwei Realisierungen eines Bodenfeuchtefelds mit gleichem Mittelwert und gleicher Standardabweichung.

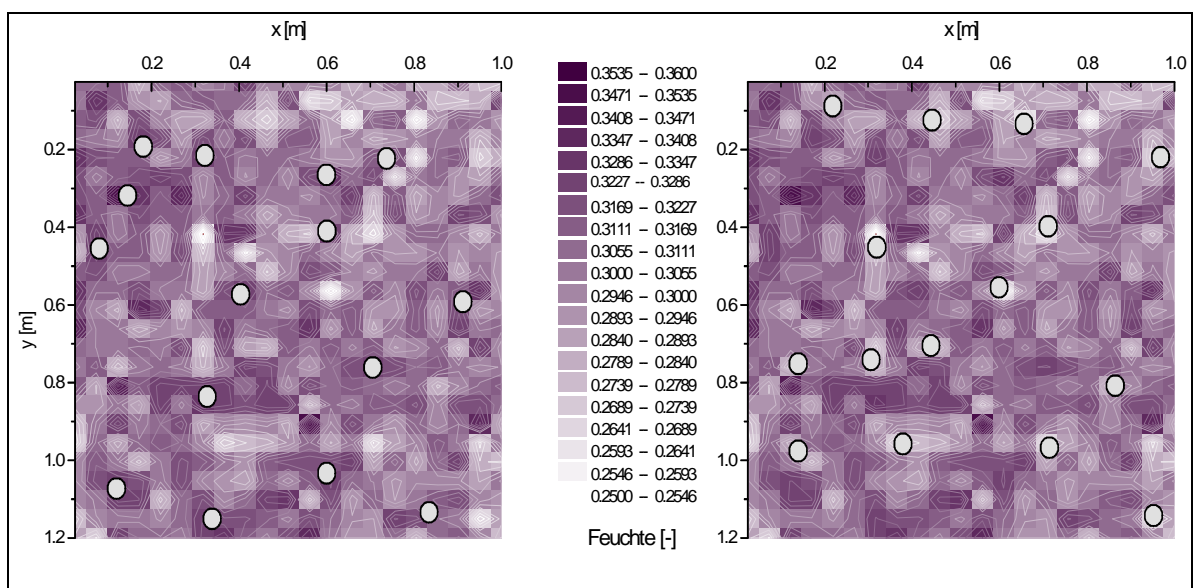


Abb. 2.6: Mikroskopische Unterschiede zweier makroskopisch gleicher Anfangs-Randbedingungen in der Draufsicht, die Lage der Makroporen auf dem Horizontalprofil ist durch die Kreise dargestellt

Im linken, kritischen Zustand ist die Bodenfeuchte in der Umgebung der als Kreise angedeuteten Makroporen systematisch erhöht. Es gibt so etwas wie eine "positive Kreuzkorrelation" zwischen Orten hoher Vorfeuchte und präferentiellen Fließwegen im Parzellenboden. Im rechten, unkritischen Zustand ist die Umgebung der Makroporen hingegen systematisch trockener als die mittlere Feuchte von 28 %. Es liegt eine negative Kreuzkorrelation zwischen Orten hoher Feuchte und präferentiellen Fließwegen vor. Beide Zustände sind nur **mikroskopisch** verschieden. Mit der vorgestellten Meßmethoden sind sie nicht unterscheidbar, d.h. sie sind **makroskopisch** gleich. In diesem Zusammenhang wird die in der Einleitung angesprochene Analogie zum Begriff des entarteten Makrozustands der statistischen Mechanik klar. Die vorliegende Messung erfaßt nur den **Makrozustand** der Anfangs-Randbedingungen in der Parzelle in Form statistischer Momente der drei Größen. Für jede dieser Größen existiert jedoch eine Fülle unbekannter Mikrozustände, die alle die beobachteten, makroskopischen statistischen Parameter liefern könnten.

2.4.3 Der Übergang vom klassischen ins präferentielle Fließregime in einem heterogenen Boden

In der Einführung wurde die Frage aufgeworfen, ob die Wasser- und Stoffdynamik in einem heterogenen Boden beim Übergang vom klassischen ins präferentielle Fließregime chaotisches Verhalten zeigen könnte. Das lokale Zusammenspiel von Prozessen und beteiligten Größen bei der Entstehung und beim Ablauf präferentieller Fließaktivität ist komplex und noch immer Gegenstand aktueller Forschung (Beven & Germann, 1982; Ritsema, 1998; Flüher, mündliche Mitteilung, 1998). Im einfachen Fall hoher Vorfeuchte kommt es durch Sättigung der umgebenden Bodenmatrix zu lokalem Überstau im Bereich der Makroporen und daher zum Einsetzen präferentieller Fließaktivität. Doch auch bei extrem trockenem Oberboden kann es infolge der schlechten Benetzbarkeit zu Überstau und zum Einsickern von Wasser in die Makroporen kommen. Besonders in diesem Fall wird das Fortschreiten des Wasserfilms in der Pore vermutlich durch Effekte beeinflusst, die auch bei der Erstbenetzung eines porösen Mediums eine Rolle spielen (Joanny & Gennes, 1986; Schlechter et al., 1991). Abbildung 2.7 illustriert die beiden Fälle schematisch.

In beiden genannten Fällen spielt die Vorfeuchte der unmittelbaren Umgebung der präferentiellen Fließwege eine Schlüsselrolle für das Entstehen präferentieller Fließaktivität. Wie die Ausführungen des letzten Abschnitts gezeigt haben, ist die Messung der Anfangs-Randwerte gerade bezüglich dieser Schlüsselinformation sehr ungenau. Ein Anfangszustand, d.h. ein Anfangsfeuchtefeld mit festem Mittelwert und fester Standardabweichung in einem heterogenen Boden, wäre dann instabil, wenn der makroskopische Verlauf des Infiltrationsprozesses massiv von der unbekanntem, mikroskopischen Ausprägung der Bodenfeuchte in der unmittelbaren Umgebung präferentieller Fließwege abhinge. Beispielsweise würde sich in diesem Instabilitätsbereich ein kritischer Mikrozustand mit systematisch hoher Vorfeuchte der Matrix in Umgebung der präferentiellen Fließwege (wie im linken Teil der Abbildung 2.7 dargestellt) bereits zu präferentiellem Fließen verstärken, hingegen würde ein unkritischer Mikrozustand

mit niedriger Vorfeuchte der Matrix in Umgebung der präferentiellen Fließwege noch zu klassischem Versickern führen.

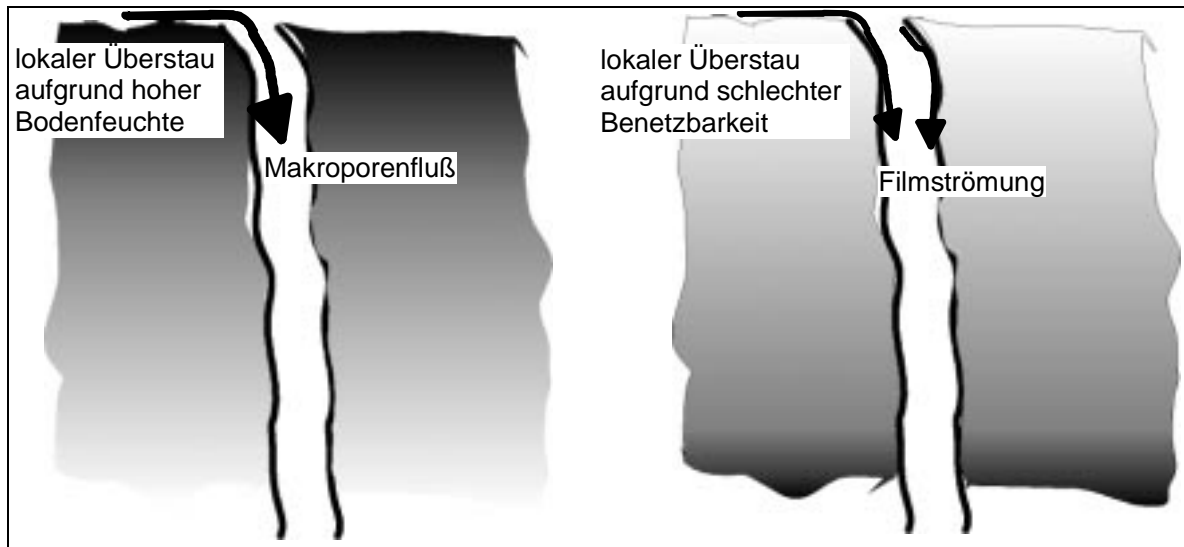


Abb. 2.7: Potentielle Einflußgrößen beim Entstehen und beim Ablauf präferentieller Fließaktivität im "feuchten Fall" (linkes Bild) und im "trockenen Fall", feuchte Bereiche sind dunkel, trockene Bereiche sind hell schattiert

Eine Wiederholung eines Transportexperiments unter makroskopisch – d.h. für die Messung – identischen Anfangs-Randbedingungen in diesem Instabilitätsbereich würde qualitativ unterschiedliche Ergebnisse liefern: präferentielle Fließmuster oder klassische Infiltrationsfronten. Die Reproduzierbarkeit und damit Vorhersagbarkeit solcher Experimente wäre in diesem Bereich der Anfangszustände immanent schlechter als im restlichen Zustandsraum. Wie groß die Variation der Ergebnisse bei der soeben beschriebenen Wiederholung eines Transportversuchs im instabilen Feuchtebereich sein könnte, zeigen die in Abbildung 2.8 dargestellten Fließmuster.



Abb. 2.8: Gegenüberstellung eines präferentiellen und eines klassischen Fließmusters

Das oben beschriebene Verhalten erinnert an die Dynamik nichtlinearer chaotischer Systeme, in deren Phasenraum ein "seltsamer" Attraktor existiert (Schuster, 1994). Der Weg eines solchen Systems ins Chaos führt über mehrere stabile dynamische Regime¹⁶ in einen Bereich des Phasenraumes, in dem Trajektorien, die durch anfänglich benachbarte Punkte gehen, exponentiell separiert werden. Kleine Unterschiede in den Anfangs-Randbedingungen werden in diesem Phasenraumbereich so drastisch verstärkt, daß die Ergebnisse identischer Versuchswiederholungen das gesamte Phasenraumvolumen dieses seltsamen Attraktors ausfüllen. Insofern gibt es eine Fülle sehr unterschiedlicher Wirkungen zu einer meßtechnisch identischen Ursache: eine "chaotische" Reaktion des Systems auf immer den gleichen Input. Klassische Beispiele für solche Systeme sind die Raleigh-Bernard-Zelle oder die Zirkulation eines Fluids in einer rotierenden Pfanne unter dem Einfluß eines "meridionalen" Temperaturgradienten (Schuster, 1994, Lorenz 1963). Allen chaotischen Systemen gemein ist die nichtlineare Dynamik. Ein nichtlineares System ist aber erst dann chaotisch, wenn eine Störung der Anfangs-Randbedingungen, die wesentlich kleiner ist als die Genauigkeit typischer Messungen, bereits zu einer drastischen Änderung im Prozeßablauf führen kann. Die Begriffe "Chaos" und "Meßgenauigkeit" sind untrennbar miteinander verknüpft.

Die Frage nach der Reproduzierbarkeit der in Kapitel 3 vorgestellten kleinskaligen Transportexperimente ist in Anbetracht des eben Gesagten keineswegs trivial. Auf der experimentellen Ebene bezieht sich diese Frage einfach auf die Genauigkeit der im Rahmen dieser Untersuchung erhobenen Daten. Auf einer viel grundsätzlicheren Ebene zielt sie jedoch auf die Frage, ob es in dem nichtlinearen System Boden zu einer chaotischen Dynamik des Transportgeschehens kommen kann. Kapitel 7 untersucht diese Frage mit numerischen Methoden.

¹⁶ In jedem dieser Regime dominiert eine andere, stabile Form makroskopischer Dynamik.

3 Experimentelle Untersuchungen zu präferentiellem Stofftransport im Weiherbachgebiet: Versuchsgebiet, Materialien und Methoden

Das vorliegende Kapitel beginnt mit der Beschreibung der Versuchsziele und der chronologischen Abfolge der Experimente. Danach werden landschaftliche Besonderheiten des Versuchsgebiets "Weiherbach" vorgestellt, die möglicherweise die Variabilität der Infiltration auf der Hangskale stark prägen. Weiterhin werden die verwendeten Materialien und Methoden, die Versuchsvorbereitung und Versuchsdurchführung sowie die Datenaufbereitung im Labor beschrieben. Aufgrund der zentralen Rolle der Beregnung der Intensivparzelle Mp 97 wird die Strategie zur Messung der zugehörigen Anfangs-Randwerte gesondert diskutiert.

3.1 Versuchsziel und chronologisches Vorgehen

Wie bereits in der Einleitung angesprochen wurde, ist das Hauptziel der experimentellen Untersuchungen die ursächliche Aufklärung, welche Art präferentieller Fließaktivität in den Böden des Weiherbachgebiets auftritt und welche Größen dieses Auftreten maßgeblich steuern. Ein taugliches Mittel zur Untersuchung präferentieller Fließaktivität im Boden sind Transportexperimente mit dem Farbtracer Brilliant Blue und dem konservativem Tracer Bromid auf der "Meterskale" (Flury et al., 1995a; Flury et al., 1994b). Daher wurden in der ersten Untersuchungsphase von Mai bis Juli 1996 elf solcher Transportexperimente an 10 unterschiedlichen Standorten des Weiherbachgebiets durchgeführt. Aus noch genannten Gründen wurde Parzelle Mp 3 (Abbildung 3.1) zweimal beregnet.

Die Vorauswertung dieser Versuche hatte in einer zweiten Phase intensive Untersuchungen in der Aue am "Spechtacker" im Jahr 1997 zur Folge. Im April wurde in Zusammenarbeit mit Ackermann (1998) auf einer dränierten Versuchsfläche von ca. 900 m² der Durchbruch der beiden oben genannten Tracer und des Herbizids Isoproturon (IPU) in den Weiherbach untersucht. Im November 1997 erfolgte der Versuch an der Intensivmeßparzelle Mp 97, in dessen Rahmen die in Abschnitt 2.4.2 besprochene Messung der Anfangs-Randwerte statt fand. Im Rahmen der Versuche an den Standorten Mp 3, Mp 23 und Mp 97 wurde zusätzlich zum Tracertransport noch der kleinskalige Transport des Herbizids Isoproturon untersucht.

Ergänzend hat Bolduan (1998) im Rahmen seiner Diplomarbeit ermittelt, auf welcher Zeitskala Isoproturon abgebaut wird, das auf präferentiellen Wegen in den Unterboden gelangt ist. Zu diesem Zweck wurden ein Feldexperiment am Standort Mp 25 und begleitende Laboruntersuchungen durchgeführt. Wesentliche Ergebnisse dieser Untersuchung wurden bereits in Tabelle 2.1 in Abschnitt 2.2.1 vorgestellt. Abbildung 3.1 zeigt die Verteilung der 11 ca. 2 m² großen Beregnungspartellen, das Versuchsfeld am "Spechtacker" sowie den Versuchshang des Instituts für Umweltphysik (IUP) der Universität Heidelberg.

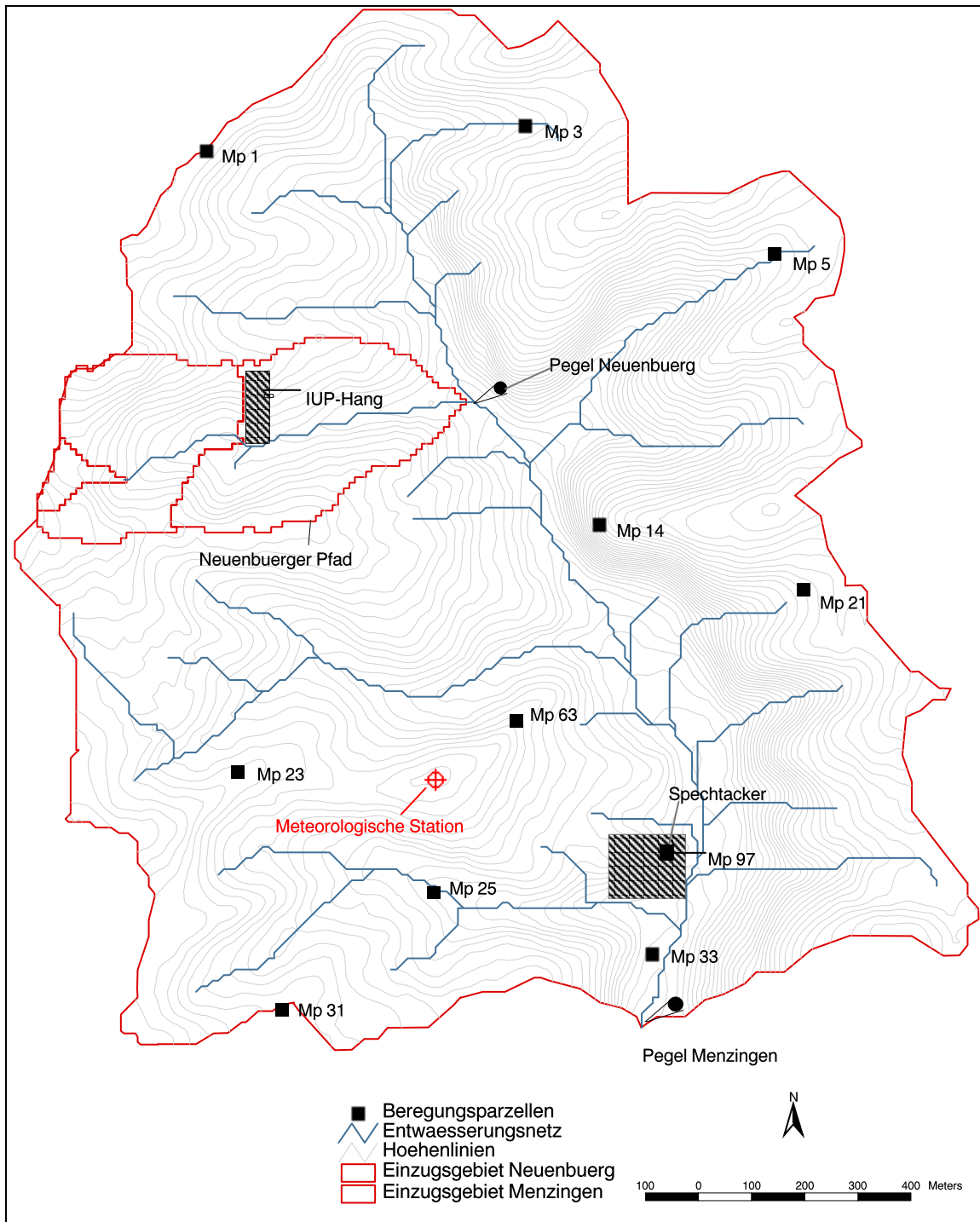


Abb. 3.1: Nördliches Einzugsgebiet des Weiherbachs mit den Standorten der durchgeführten Versuche und des IUP-Hangs

Die kleinskaligen Transportversuche der ersten Phase wurden alle in unmittelbarer Nähe eines Bodenfeuchtemeßpunkts durchgeführt, die Bezeichnung der Versuchsparzellen enthält die Nummer des jeweiligen Meßpunkts. Die kleinskaligen Transportversuche an den 11 markierten Standorten werden im folgenden als Kleinberegnungen angesprochen.

3.2 Beschreibung des Weiherbach-Einzugsgebiets

3.2.1 Klima, Geologie und Böden

Das Einzugsgebiet des Weiherbachs, kurz Weiherbachgebiet, ist eine semihumide Lößlandschaft im Kraichgauer Hügelland ca. 30 km nördlich von Karlsruhe. Der Jahresniederschlag liegt bei 750-800 mm/a, die durchschnittliche Temperatur bei 8.5° C. In den Jahren 1990 - 1995 betrug die mittlere Niederschlagsintensität im Durchschnitt 2.94 ± 0.43 mm/h, die maximale Niederschlagsintensität 38 ± 20 mm/h (Kolle, 1995). Im Jahresgang zeigen sich zwei Hauptniederschlagsperioden in Frühjahr und Herbst sowie trockene Phasen in Sommer und Winter. Die Geologie des Weiherbachgebiets ist durch sehr mächtige Lößschichten im westlichen Teil und ausstreichenden Keuper in den steilen Bereichen des östlichen Teils geprägt.

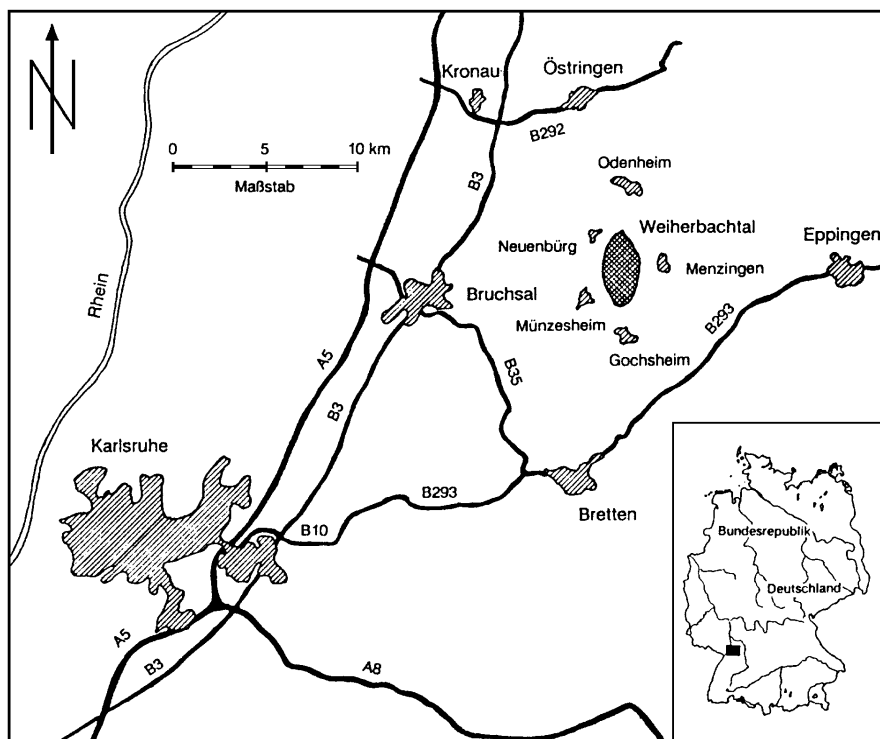


Abb. 3.2: Die Lage des Kraichgaus und des Weiherbachtals in Deutschland (aus Bohleber, 1992).

Wie in Abschnitt 2.3.1 angedeutet, führt Abspülung an den Lößhängen zur Ausbildung typischer Erosionscatenen. An Hangtop und Hangmitte finden sich Pararendzinen oder gekappte Parabraunerden, am Hangfuß Kolluvien (Abbildung 2.4 in Abschnitt 2.3.1). Die Kolluvien sind durch einen erhöhten Ton- und Nährstoffgehalt sowie durch relativ geringe zeitliche Temperatur- und Feuchteschwankungen ausgezeichnet.

3.2.2 Das Makroporensystem der anstehenden Böden, ein Ordnungsfaktor?

In Abschnitt 2.3.1 wurde bereits angesprochen, daß die räumliche Verteilung der Makroporen einen möglichen Ordnungsfaktor im Infiltrationsgeschehen darstellt, insofern lohnt sich ein Blick ins Detail. Die oben genannten Eigenschaften der Kolluvien führen zu günstigen Lebensbedingungen für die anezische (tief grabende) Regenwurmart *Lumbricus terrestris*, vor allem in den Kolluvien der Bachauen (Bolduan, 1998; Ehrmann, 1996). Da in den bindigen Böden des Weiherbachgebiets Rißbildung keine Rolle spielt, sind anezische Regenwürmer die wesentlichen Bildner von präferentiellen Fließwegen (Schmaland, 1996; Bolduan, 1998). Ein Wurmgang entspricht in guter Näherung einer zylindrischen Kapillare weitgehend vertikaler Ausrichtung (Ehrmann, 1995; Beck, mündliche Mitteilung, 1998). Dadurch ergibt sich eine sehr einfache Geometrie des Makroporensystems mit Auszeichnung der **vertikalen** Fließrichtung. Schmaland (1996) hat im Jahr 1996 die Zahl der Regenwurmgänge auf jeweils zwei Zählflächen der Grundfläche 0.25 m² an 10 Standorten des Weiherbachgebiets ermittelt und fand in der Tat eine systematische Erhöhung der Makroporosität in Kolluvien. Allerdings stimmen die Zählstandorte nur zum Teil mit den Standorten der Beregnungsversuche in Abbildung 3.1 überein. Abbildung 3.3 stellt exemplarisch die Zahl der Makroporen in einer Pararendzina am Hangtop des Weiherbergs und in einem Kolluvium im Bereich der Bachaue gegenüber.

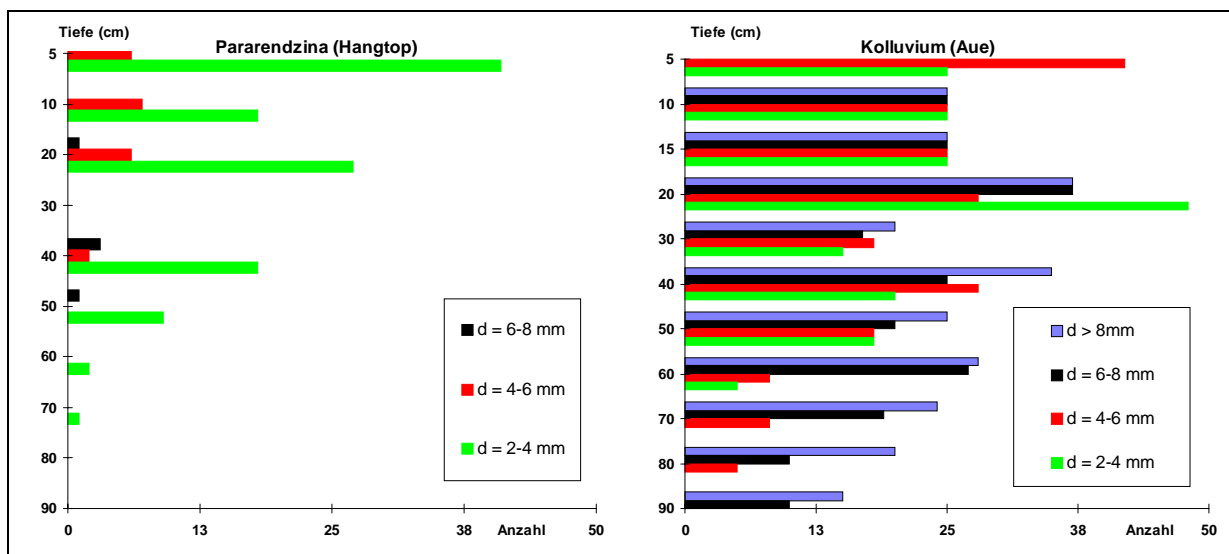


Abb. 3.3: Anzahl und Tiefe der Wurmgänge in einem Kolluvium und einer Pararendzina eingeteilt in 4 Durchmesserklassen (2 - 4, 4 - 6, 6 - 8 und > 8 mm).

Zu Beginn des Kapitels 4 wird diese räumliche "Ordnung" in der Verteilung der Makroporosität auf der Hangskale teilweise quantifiziert.

3.3 Verwendete Stoffe und Feldmeßmethoden

3.3.1 Die Tracer und das Herbizid IPU

Der Lebensmittelfarbstoff **Brilliant Blue FCF (BB)**, Handelsname Vitasyn Blau AE 85, wurde bereits in mehreren Untersuchungen zur optischen Markierung präferentieller Fließwege verwendet (Flury et al., 1994a; Flury et al., 1995a; Schmidt, 1996; Stenger 1998). Angaben zur akuten Toxizität finden sich bei Bolduan (1998) oder Flury & Flühler (1994b). In der verwendeten Konzentration von 4 g/l ist eine Gefährdung von Flora oder Fauna ausgeschlossen, trotzdem garantiert die Konzentration eine gute Wahrnehmbarkeit im Boden. Brilliant Blue ist nach Flury & Flühler (1995b) abhängig von der Bodenart um den Faktor 1.1 bis 2.0 gegen den konservativen Tracer Bromid retardiert. Laut Schmidt (1996) zeigen das Herbizid Isoproturon und Brilliant Blau in nicht zu stark tonigen Böden eine ähnliche Mobilität. Detaillierte Angaben der chemischen Eigenschaften von BB finden sich bei Flury (1994a). Im folgenden wird Brilliant Blue auch als Brilliant Blau angesprochen.

Das Anion **Bromid** wird oft als konservativer Tracer für bilanzierende Untersuchungen in der ungesättigten Bodenzone verwendet (Schmidt, 1996; Flury et al.; 1994a; Delbrück, 1997). Seine Hintergrundkonzentration im Regen- und im Grundwasser ist gering. Aufgrund der hauptsächlich negativen Ladung der Bodenbestandteile ist eine Adsorption von Bromid an Bodenpartikeln sehr unwahrscheinlich. Bromid wird als Salz der Bromsäure zwar nicht abgebaut, auf längeren Zeitskalen kann aber durchaus eine Aufnahme durch Pflanzen erfolgen (Delbrück, 1997). Die Menge von 7.41 g/m² Kaliumbromid bzw. 0.165 g/l Bromid, die bei den nachstehend beschriebenen Versuchen ausgebracht wurde, orientiert sich an der Untersuchung von Schmidt (1996). Diese Dosis ist zwar deutlich geringer als die von Flury et al. (1994a) ausgebrachte Menge, überschreitet aber trotzdem den empfohlenen Grundwassergrenzwert noch immer um den Faktor 160. Daher ist auch diese Dosis keineswegs unbedenklich. Angaben zur akuten Toxizität findet man bei Flury & Flühler (1994b).

Isoproturon (IPU) ist ein im Kraichgau häufig verwendetes Herbizid zur Bekämpfung sogenannter "Schadgräser". Die Applikation erfolgt im Frühjahr oder Herbst im Vor- oder Nachauflauf. Auf dem Markt ist IPU als Suspension *Arelon flüssig* mit einem IPU-Gehalt von 500 g/l erhältlich. Der mikrobielle Abbau, die Sorptionseigenschaften und das Verlagerungsverhalten von IPU wurden im Rahmen von mehreren Diplomarbeiten an der Staatlichen Landwirtschaftlichen Untersuchungs- und Forschungsanstalt Augustenberg (LUFÄ) untersucht (Schierholz et al., 1997; Schmidt, 1996; Bolduan, 1998). Schmidt hat an mehreren

Standorten des Weiherbachgebiets präferentiellen Transport von IPU bis in 90 cm Tiefe nachgewiesen. In Anhang A2 sind ausgewählte physiko-chemische Eigenschaften von IPU tabelliert.

3.3.2 Material und Feldmeßmethoden

Die Messung der **Bodenfeuchte** wurde nach der TDR-Methode durchgeführt. Ein elektromagnetisches Signal wird dabei entlang von zwei Stäben in den Boden geschickt, am offenen Ende des Hohlleiters reflektiert und wieder empfangen. Aus der Laufzeit läßt sich die Dielektrizitätskonstante des Mediums – einer Mischung aus Wasser, Festsubstanz und Luft – und daraus mit einer Eichbeziehung der Wassergehalt bestimmen. Das Integrationsvolumen beträgt dabei jedoch nur wenige cm^3 . Die Länge der verwendeten Zweistabsonden beträgt 15, 30, 45 und 60 cm. An dieser Stelle wird spätestens klar, daß eine Bodenfeuchtemessung direkt auf der Parzelle nicht in Frage kommt. Ansonsten entstünden zusätzliche "technogene" Makroporen auf der Fläche. Der absolute Fehler der Messung liegt bei ca. 1 - 3 Volumenprozent.

Die **Beregnung** der Kleinparzellen erfolgte mit einem automatischen Düsenregner, einer Leihgabe des Instituts für Terrestrische Ökologie der ETH Zürich. Wie in Abbildung 3.4 skizziert, sind auf dem 1.4 langen Sprüharm des Regners 6 Magnetventile des Typs Festo 2187 MC-2-1/8 mit Düsen des Typs Tee Jet 800 15 LP (Spraying Systems Co., Wheaton, II) in einem Abstand von jeweils 20 cm montiert.

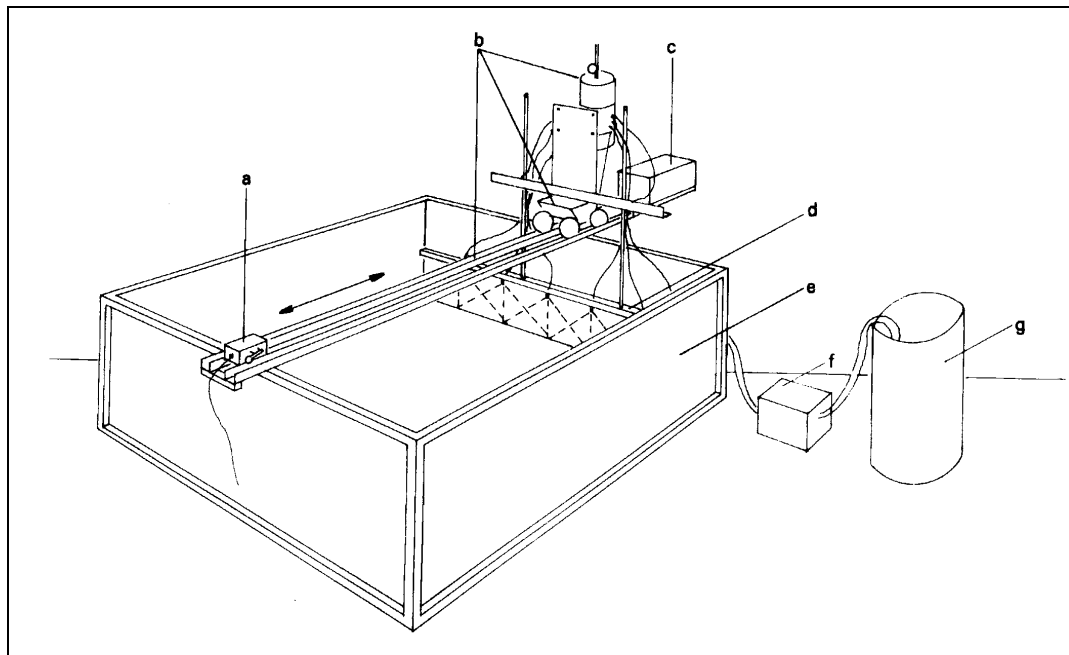


Abb. 3.4: Schematische Darstellung des Düsenregners: a Endschalter, b Laufschiene, c Steuereinheit, d Sprüharm mit Düsen, e Seitenwände, f Pumpe, g Vorratsbehälter

Wüst 1998 hat im Rahmen seiner Vertieferarbeit gezeigt, daß diese Düsenanordnung bei einem Abstand des Sprüharms von 17.5 cm die Variation der Beregnungsmenge auf dem inneren Quadratmeter der 1.96 m² großen Beregnungsfläche minimiert. Bei der Auswertung der Kleinberegnungen wurde daher nur dieser innere Bereich berücksichtigt. Die kumulative Beregnungsmenge CI im inneren Quadratmeter der Parzelle wurde mit fünf zufällig verteilten Behältern der Grundfläche 100 cm² bestimmt. Der absolute Meßfehler beträgt ca. 1.5 mm. Detaillierte Angaben zum Regner finden sich bei Flury et al. (1995a) und Schmidt (1996).

Die **Kartierung** der **Makroporen** auf den Testflächen des Standorts Mp 97 wurde auf zwei Horizontalprofilen einer Größe von jeweils 4m² durchgeführt (Abbildung 2.7 in Abschnitt 2.5.2). Die Makroporen wurden durch Wegschnellen der obersten Bodenschicht mit einer Maurerkelle freigelegt. Die Zählung der Makroporen erfolgte dann auf sechs 0.25 m² großen Teilflächen dieser Profile. Zur Messung des Makroporendurchmessers bzw. der Makroporenlänge standen 4 Durchschläge von 3, 5, 7 und 9 mm Durchmesser und ein Bowdenzug zur Verfügung. Die Entnahme ungestörter **Bodenproben** erfolgte mit 100cm³-Stechzylindern. Dabei wurden auch makroporöse Bodenproben durch mittiges Ausstechen der Makropore mit dem Zylinder gewonnen. Zur Applikation der Pflanzenschutzmittels Arelon auf der Versuchsfläche stand eine Druckspritze der LUFA Augustenberg zur Verfügung.

Im Rahmen des **Durchbruchversuchs** am dränierten Spechtacker erfolgte die **Beregnung** der Testfläche mit 12 Flächenregnern der Marke Gardena in drei Phasen. Zur Speisung dieser Regner wurde Wasser aus einem nahegelegenen Hydranten der Stadt Kraichtal entnommen, die Gesamtmenge des verregneten Wassers wurde mit einer Wasseruhr gemessen. Für die Durchflußmessung und Probennahme am Drainageauslaß standen ein Venturirohr, eine Drucksonde und Weithalsflaschen zur Verfügung. Die Versuchsidee und der Aufbau gehen wesentlich auf die Initiative von Ackermann zurück (1998).

3.4 Versuchsaufbau und Messung der Anfangs-Randbedingungen

3.4.1 Vorbereitung der Kleinberegnungen der ersten Versuchsphase

Kurz vor der jeweiligen Beregnung wurde der Bewuchs auf den Parzellen auf ca. 10 cm Länge gekürzt, ohne die Wurzeln zu entfernen. Bei Beregnungsbeginn erfolgt ca. 10 cm neben der Parzelle eine Bodenfeuchtemessung in den Schichten 0 - 15, 0 - 30, 0 - 45 und 0 - 60 cm. Diese Punktmessungen sind zwar nicht repräsentativ für die Feuchte der Parzellen, geben aber einen Hinweis, ob sich das System in einem trockenen, mittleren oder feuchten Anfangszustand befindet. Tabelle 3.1 zeigt das Datum der Beregnung, die Landnutzung und den Bodentypen

am Versuchsstandort, die Vorfeuchte in den obersten 15 cm sowie die Hangposition und die Neigung der Parzellen.

Einen Tag vor der 2. Beregnung der Parzelle Mp 3 sowie vor der Beregnung der Parzelle Mp 23 wurde 0.5 g/m² an IPU auf den Parzellen appliziert. Das entspricht dem Fünffachen der normalen Aufwandmenge. Das IPU wurde in Form von Arelon in 2 l Wasser gelöst und mit der Druckspritze ausgebracht. Eine Blindprobe vor der Applikation ermöglichte die Untersuchung der Parzelle auf eine eventuelle Vorbelastung mit Isoproturon. Die Parzellen wurden bis zum Versuchsbeginn mit einer Plane abgedeckt.

Tabelle 3.1: Eckdaten der kleinskaligen Transportversuche wie Name des Versuchsstandorts und Datum der Durchführung, Bodentyp und Landnutzung am Standort, Vorfeuchte θ in den oberen 15 cm des Bodens (mit absolutem Meßfehler) sowie Hangposition und Neigung der Parzellen

| Name / Datum | Bodentyp | Landnutzung | θ [m ³ /m ³] | Hangposition | Neigung [%] |
|---------------|---------------|-------------|---|--------------|----------------|
| Mp 1 (5/96) | Pararendzina | Weizen | 0.335 ± 1 | Hangtop | 4 |
| Mp 3 (6/96) | Parabraunerde | Weizen | 0.228 ± 1 | Hangfuß | 4 |
| Mp 3 (7/96) | Parabraunerde | Weizen | 0.179 ± 1 | Hangfuß | 4 |
| Mp 5 (6/96) | Kolluvium | Mais | 0.171 ± 1 | Hangfuß | 4 |
| Mp 14 (6/96) | Pararendzina | Brache | 0.180 ± 1 | Hangmitte | 27 |
| Mp 21 (6/96) | Parabraunerde | Weizen | 0.168 ± 1 | Oberhang | 8 |
| Mp 23 (6/96) | Pararendzina | Mais | 0.237 ± 1 | Hangtop | 5 |
| Mp 25 (6/96) | Kolluvium | Weizen | 0.253 ± 1 | Hangfuß | 4 |
| Mp 31 (7/96) | Pararendzina | Mais | 0.159 ± 1 | Hangtop | 4 |
| Mp 33 (7/96) | Kolluvium | Weizen | 0.232 ± 1 | Aue | 4 |
| Mp 63 (6/96) | Parabraunerde | Mais | 0.205 ± 1 | Hangmitte | 9 |
| Mp 97 (11/97) | Kolluvium | Senf | 0.278 ± 1 | Aue | 3 |

3.4.2 Messung der Anfangs-Randwerte an der Intensivmeßparzelle Mp 97

In Abschnitt 2.4.2 wurden das Ziel und die Strategie der Messung der Anfangs-Randwerte auf den umgebenden Testflächen der Parzelle Mp 97 bereits eingehend erläutert. Die Bodenfeuchte in den oberen 15 cm wurde auf zwei Testflächen von 4 m² Größe und einer Entfernung von ca. 10 m zur Beregnungsparzelle an jeweils 25 Punkten gemessen. Jede Punktmessung wurde fünfmal wiederholt. Auf zwei weiteren Testflächen gleicher Größe und gleichen Abstands zur Beregnungsparzelle wurde das Makroporensystem auf sechs Zählflächen der Größe 0.25 m² wie oben beschrieben kartiert. Danach erfolgte auf diesen Zählflächen die Entnahme ungestörter 100 cm³-Bodenproben aus 2 Horizonten. Dabei wurden auch Makroporen

verschiedener Durchmesser mittig mit Stechzylindern ausgestochen¹⁷. Abbildung 2.5 in Abschnitt 2.4.2 skizziert schematisch die Anordnung der Testflächen. Einen Tag vor Beregnungsbeginn wurde 1 g/m² IPU auf der Versuchsfläche in oben beschriebener Weise appliziert und die Parzelle bis zum Beregnungsbeginn abgedeckt.

3.4.3 Vorbereitung des Durchbruchsexperiments

Vor Versuchsbeginn wurde die ca. 900 m² große Testfläche mit 25 Auffangbehältern für den Niederschlag bestückt. Die Testfläche liegt in ca. 15 - 20 m Abstand vom Vorfluter direkt über einem Dränagerohr in 1.2 m Tiefe. Der Spechtacker wird seit längerem durch den ansässigen Landwirt nur noch pfluglos bearbeitet, somit hatte das Makroporensystem auch zu diesem Zeitpunkt im Frühjahr optimalen Anschluß an die Erdoberfläche. Zur Durchflußmessung am Dränageauslaß waren ein geeichtes Venturirohr und eine Drucksonde installiert (Ackermann, 1998).

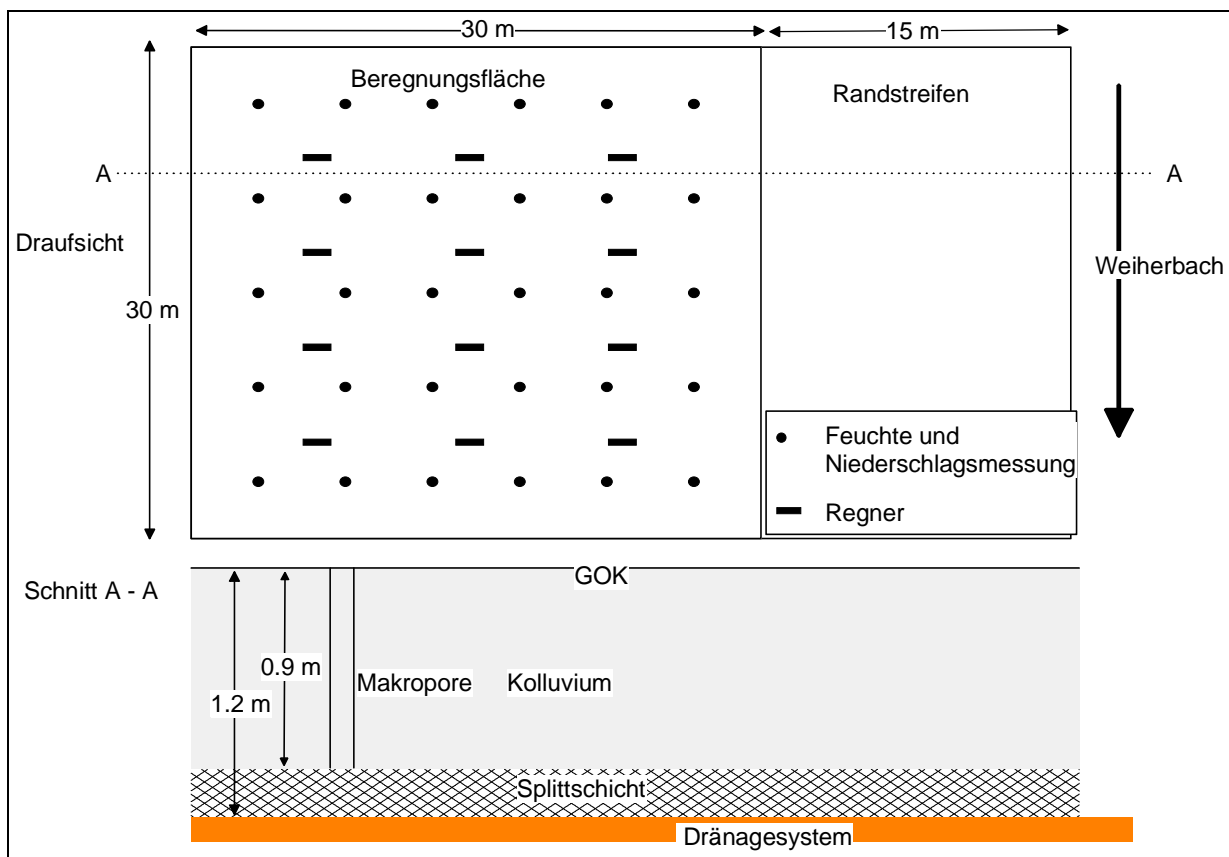


Abb. 3.5: Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus sowie des Bodenaufbaus am Spechtacker

¹⁷ Insbesondere die Makroporenkartierung lieferte eine wichtige Datengrundlage für den Ansatzes zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität in Kapitel 6.

3.5 Versuchsdurchführung und Datenaufnahme

3.5.1 Kleinskalige Transportversuche

Die Beregnung der Kleinparzellen erfolgte mit dem bereits erwähnten automatischen Düsenregner. Das Gerät ermöglichte eine ungesättigte Infiltration der Flächen ohne Überstau. Die Tracerlösung enthielt in allen Fällen 4 g/l Brilliant Blau und in fast allen Fällen 0.165 g/l Bromid. Ausnahmen bilden die Versuche am Standort Mp 1 und der erste Versuch am Standort Mp 3. Um die Zahl der Einflußgrößen zu reduzieren, sollten alle Standorte möglichst mit gleicher Menge CI und Intensität I beregnet werden. Tabelle 3.2 zeigt die mittlere Intensität I, die Beregnungsmenge CI sowie deren absolute Fehler, ermittelt aus der Variation der Beregnungsmenge innerhalb der 5 Behälter. Ferner ist aufgeführt, ob IPU auf der Testfläche appliziert wurde und ob das Wasser mit Bromid getracert war. Bis auf den Versuch am Standort Mp 1 sind der Gesamtfehler der kumulativen Beregnungsmenge und der Einzelmeßfehler der Beregnungsmenge von 1.5 mm von ähnlicher Größenordnung. Das spricht für die Homogenität der Beregnung. Eine detaillierte Untersuchung zur räumlichen Beregnungshomogenität des verwendeten Regnertyps findet sich bei Godrathi et al. (1990) oder Wüst (1998).

Tabelle 3.2: Daten zur Durchführung der Kleinberegnungen wie mittlere Intensität I und kumulative Beregnungsmenge CI jeweils mit absolutem Fehler, Bromidkonzentration C_{Br} in der Tracerlösung und IPU-Konzentration C_{IPU} auf der Versuchsfläche

| Name / Datum | I [mm/h] | CI [mm] | C_{Br} [g/l] | C_{IPU} [g/m ²] |
|---------------|------------|------------|----------------|-------------------------------|
| Mp 1 (5.96) | 10.6 ± 2.9 | 23.3 ± 6.2 | 0 | 0 |
| Mp 3 (6.96) | 10.4 ± 1.0 | 23.3 ± 2.3 | 0 | 0 |
| Mp 3 (7.96) | 10.8 ± 1.1 | 23.8 ± 2.4 | 0.165 | 0.5 |
| Mp 5 (6.96) | 9.1 ± 0.8 | 21.9 ± 1.8 | 0.165 | 0 |
| Mp 14 (6.96) | 10.7 ± 1.1 | 23.4 ± 2.3 | 0.165 | 0 |
| Mp 21 (6.96) | 10.2 ± 1.1 | 22.2 ± 2.4 | 0.165 | 0 |
| Mp 23 (6.96) | 10.7 ± 1.2 | 22.8 ± 2.5 | 0.165 | 0.5 |
| Mp 25 (6.96) | 10.9 ± 1.2 | 22.8 ± 2.5 | 0.165 | 0 |
| Mp 31 (7.96) | 10.2 ± 1.1 | 22.9 ± 2.5 | 0.165 | 0 |
| Mp 33 (7.96) | 9.7 ± 0.8 | 22.3 ± 1.8 | 0.165 | 0 |
| Mp 63 (6.96) | 10.9 ± 0.8 | 21.8 ± 1.5 | 0.165 | 0 |
| Mp 97 (11.97) | 11.0 ± 1.0 | 25.3 ± 2.3 | 0.165 | 1 |

Einen Tag nach der Beregnung wurde neben der jeweiligen Parzelle eine Grube von ca. 1.2 m Tiefe und 1.5 m Breite ausgehoben. Von diesem Arbeitsgraben wurden drei Vertikalprofile oder Schnitte, zwei davon am ersten Tag nach der Beregnung und der dritte zu einem späteren Zeitpunkt, im Boden der jeweiligen Parzelle wie folgt präpariert. Vor dem Photographieren des blauen Fließmusters mit einem 100-ASA Diafilm, wurde ein 1 x 1 m² großes Gitter mit einer Rasterweite von 0.1 x 0.1 m² im inneren Bereich des Profils plaziert. Nach der Aufnahme erfolgte in jeder gefärbten Rasterzelle sowie 10 cm unterhalb der Farbstofffront die Entnahme gestörter Bodenproben mit 100 cm³-Stechzylindern. Diese Beprobungsstrategie ermöglicht die gezielte Beprobung präferentieller Fließwege mit einem Minimum an Bodenproben (Schmidt, 1996) und berücksichtigt, daß Bromid mindestens um den Faktor 1.1 tiefer in den Boden vordringt als der Farbstoff. Hauptziel der Probennahme war das Auffinden präferentieller Fließstrukturen bzw. Fließmuster (sofern diese auftraten). Daher wurden die Schnitte nicht in einem fixen räumlichen Raster angelegt, sondern mit variablen Abständen in die Parzelle gegraben. Der innere Quadratmeter der Parzelle wurde dazu in der Richtung senkrecht zum Sprüharm des Regners (Abbildung 3.6) in 3 Bereiche der Breite 30 cm eingeteilt. Zur Präparation des ersten Schnittes wurde der Boden im vorderen Bereich einer Meßparzelle vertikal mit dem Spaten abgestochen bis ein präferentielles Fließmuster zum Vorschein kam. Der zweite und dritte Schnitt wurden in den Bereichen 2 und 3 auf die gleiche Art mit einem Mindestabstand von 10 cm zum nächst niederen Schnitt herauspräpariert und beprobt.

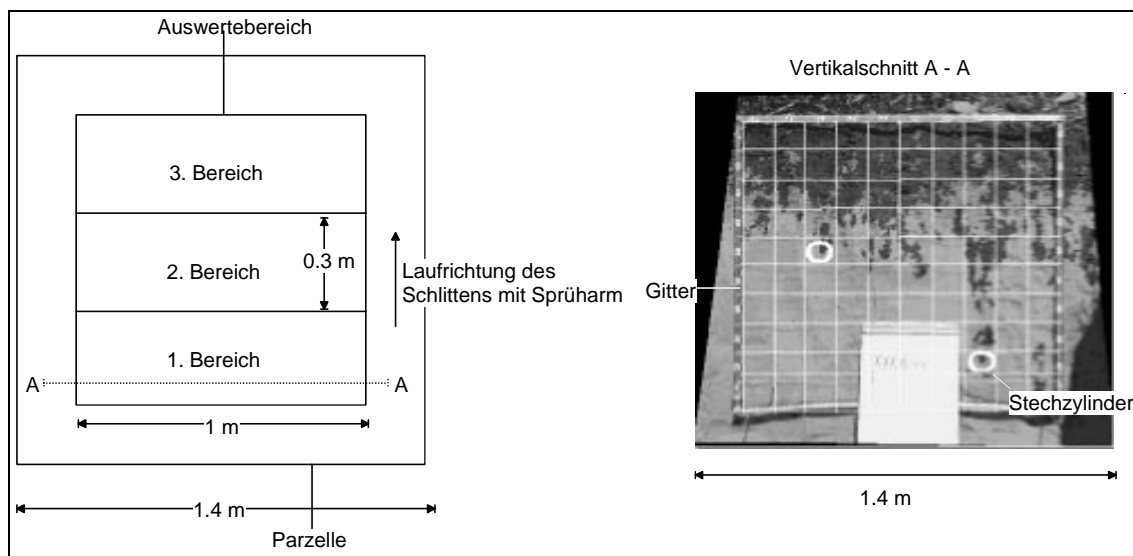


Abb. 3.6: Beprobung einer Parzelle, das linke Bild zeigt die Parzelle in der Draufsicht, die Stechzylinder im rechts gezeigten Profil sind durch die weißen Kreise angedeutet

Aus dieser Beprobungsstrategie resultierte eine Gesamtzahl von 2000 Bodenproben. Eine größere Zahl an Schnitten pro Parzelle wäre wünschenswert, aber im Rahmen einer "Ein-Mann-Feldsaison" ist der entsprechend gesteigerte Arbeitsaufwand nicht zu bewältigen. Stenger (1997) untersuchte im Rahmen einer Diplomarbeit u.a. die Frage nach der Anzahl von zweidimensionalen Profilen, die nötig ist, um ein dreidimensionales Fließmuster repräsentativ

zu beschreiben. Die Zahl der notwendigen Schnitte hängt stark vom Zeitpunkt der letzten Oberflächenbearbeitung ab, kurz danach sind weniger Schnitte nötig als lange danach.

3.5.2 Durchbruchexperiment am Spechtacker

Einen Tag vor Versuchsbeginn erfolgte auf der Testfläche die Applikation von 54 l einer IPU-Lösung der Konzentration 5 g/l in "guter landwirtschaftlicher Praxis" durch den Landwirt Sandbühler. Dies entspricht dem 1.5-fachen der normalen Aufwandmenge von 2 kg/ha. Die Beregnung der Parzelle erfolgte in drei Phasen, Tabelle 3.3 zeigt deren Dauer, Intensität und Beregnungsmenge. Die mittlere Beregnungsintensität betrug 13.8 ± 5 mm/h, die kumulative Gesamtmenge 46 ± 5 mm.

Tabelle 3.3: Beregnungsphasen des Durchbruchexperimentes

| Beregnungsdauer | Beregnungsmenge [mm] | Beregnungsintensität [mm/h] |
|------------------|-------------------------|--------------------------------|
| 1. Phase: 75 min | 13 ± 5 | 11 ± 4 |
| 2. Phase: 70 min | 17 ± 5 | 15 ± 4 |
| 3. Phase: 60 min | 16 ± 5 | 16 ± 5 |

Die Zugabe der Tracer erfolgte 10 min nach Beregnungsbeginn in Form eines Rechteckpulses mit einem Volumen von 1.3 m³, einer Dauer von 10 min und einer Bromid- bzw. Brilliant-Blau-Konzentration von 1.5 g/l bzw. 3.8 g/l. Daraus resultiert eine Applikationsmenge von 2.2 g Bromid pro Quadratmeter. Während der Beregnung wurden am Drainageauslaß Wasserproben mit ca. 0.5 l Volumen entnommen. Bei einer Basisschüttung der Drainage von 0.35 l/s stellt die Probe eine Momentaufnahme der Tracer- und IPU-Belastung des Drainagewassers dar. Die Dichte der Probennahme orientierte sich an der Abflußreaktion der Drainage. Auch hier war der Einsatz des Farbstoffes Brilliant Blau als optisches Hilfsmittel sehr hilfreich. Weitere Angaben zu Versuchsaufbau und Durchführung finden sich bei Ackermann (1998).

3.6 Datenaufbereitung

3.6.1 Die Wasserproben des Durchbruchversuchs

Das eventuell in den Wasserproben enthaltene Isoproturon wurde nach dem C18-Verfahren (Michels et al., 1991) im Labor der LUFA Augustenberg angereichert und extrahiert. Das Wasser einer Probe wurde dazu mit Unterdruck durch den organischen C18 Filter gesogen, dabei reichte sich das gelöste Isoproturon im Filter an. Nach der Anreicherungsphase wurden zur Extraktion des Isoproturons 5 ml Methanol für 5 min in den Filter eingesogen. Die

IPU-Konzentration im so entstandenen Extrakt wurde mit HPLC (**H**igh **P**ressure **L**iquid **C**hromatography) bestimmt. Der relative Gesamtfehler beläuft sich auf ca. 5 %. Auch die Bromidkonzentration der Wasserproben wurde mit HPLC mit einem relativen Gesamtfehler von ca. 5 % ermittelt.

3.6.2 Die Bodenproben der Kleinberechnungen

Sofern Bodenproben auf den Gehalt von Bromid und IPU hin untersucht werden sollten, wurden diese geteilt. Zur IPU-Extraktion wurden 50 g feldfrischer Boden vom Rest der Probe getrennt und mit 100 ml Methanol 20 min bei 400 Umdrehungen pro Minute gerührt. Fünfzig ml des aufgeklärten Überstands wurden filtriert (0.1 µm Filter), mit einem Rotationsverdampfer auf 5 ml eingeeengt und dann auf 20 ml Bezugsvolumen aufgefüllt. Die Messung der IPU-Konzentration erfolgte mit HPLC, der relative Gesamtfehler beträgt ca. 5 %. Der Rest der Bodenprobe wurde gewogen, bei 105°C 24 h getrocknet und nochmals gewogen. Aus dem Differenzgewicht ergibt sich der gravimetrische Wassergehalt. Zur Bromidextraktion wurden 20 g trockener Boden mit 50 ml destilliertem Wasser 30 min bei 300 Umdrehungen pro Minute gerührt. Der Überstand wurde filtriert (0.1 µm Filter) und mit HPLC auf seinen Bromidgehalt untersucht. Der relative Gesamtfehler beträgt ca. 5 %. Mit Hilfe des Volumens der HPLC-Proben V_b und dem Trockengewicht der jeweiligen Bodeneinwaage m_b wurde aus der gemessenen Konzentration C_w in der flüssigen Phase die Konzentration C_b in der Trockenmasse des Bodens errechnet:

$$C_b = \frac{C_w V_b}{m_b} \quad (3.1)$$

Mit Gaußscher Fehlerfortpflanzung ergibt sich für die Konzentration C_b anhand der relativen Einzelfehler ein relativer Gesamtfehler von 5.5 %. Zur Berechnung der Wiederfindungsraten wurde der Bromid- bzw. Isoproturon Gehalt der Profile, die einen Tag nach der Beregnung beprobt wurden, auf das Volumen der Meßparzelle extrapoliert. Die dazu notwendigen Lagerungsdichten in Tabelle 3.4 stammen aus der Arbeit von Delbrück (1997).

Tabelle 3.4: Mittlere Lagerungsdichten am IUP-Hang nach Delbrück (1997)

| Boden | ρ_l [kg/m ³] |
|----------------------------|-------------------------------|
| "0 - 10 cm" | 1300 ± 0.10 |
| Ap-Horizont über Kolluvium | 1590 ± 0.02 |
| Kolluvium | 1500 ± 0.02 |
| Lößlehm | 1520 ± 0.02 |
| Ap-Horizont über Löß | 1450 ± 0.02 |
| Löß | 1430 ± 0.02 |

3.6.3 Messung der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit

Zur Messung der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit k_s der Bodenproben von beiden Testflächen der Intensivmeßparzelle Mp 97 nach DIN 19683 wurden die Proben 24 h von unten aufgesättigt und dann wie in Abbildung 3.7 skizziert mit einem Wasserspiegel konstanter Höhe H überstaut. Die Wasserflußrate Q ermittelt sich aus dem Volumen V das in der Zeit t durch den Meßzylinder perkoliert, dabei sorgt die Verbindung zum Wasserreservoir für die Konstanz der Überstauhöhe. Da am unteren Rand der Bodenprobe Atmosphärendruck herrscht, errechnet sich die gesättigte Leitfähigkeit der Probe wie folgt:

$$k_s = \frac{Q}{A} \underbrace{\frac{l}{H+b}}_{=1} \quad (3.2)$$

mit b = Höhe des Stechzylinders
 A = Grundfläche des Stechzylinders

Falls die zu untersuchende Bodenprobe eine Makropore enthielt, wurde deren Durchmesser an der Ober- und Unterseite der Probe vor der Messung mit einer Schieblehre ermittelt. Grundsätzlich wurden die Messung an jeder Bodenprobe mindestens viermal wiederholt.

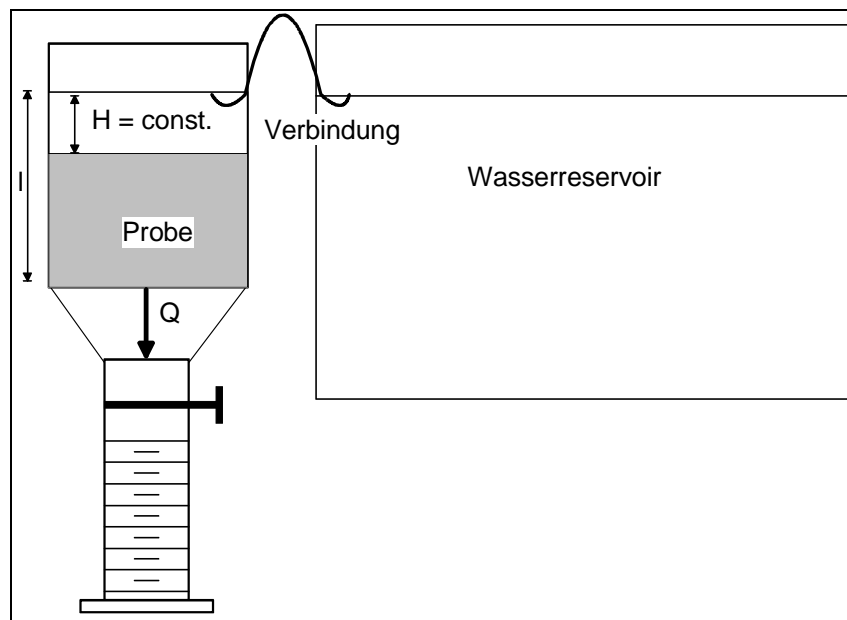


Abb. 3.7: Schematische Darstellung des Aufbaus zur Messung des k_s -Werts

3.6.4 Transformation der Farbmuster in Grauwertbilder

Für die angestrebte Behandlung der Fließmuster mit statistischen Analyseverfahren müssen diese mathematischen Methoden zugänglich sein. Bei den Bromidmustern ist das von vornherein der Fall, bei den Farbmustern jedoch nicht. Farbtracerdaten werden als "weiche Daten"

meist nur zur qualitativen Beschreibung des Infiltrationsprozesses eingesetzt. Ob Farbtracerdaten für bestimmte Fragestellungen die gleiche Information über den Infiltrationsprozesses liefern wie Bromid, läßt sich jedoch nur mit quantitativen Methoden untersuchen. Dem Vorteil der Exaktheit auf der Seite der Bromiddaten steht die flexible Auflösung und die schnelle Verfügbarkeit der Farbtracerdaten gegenüber. Falls Farbtracerdaten z.B. bei der Ausweisung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens gleichwertige Ergebnisse liefern wie Bromiddaten, könnten der Aufwand und die Kosten von Felduntersuchungen beträchtlich reduziert werden. Methoden zum Vergleich beider Datenquellen werden in Kapitel 5 bereitgestellt.

Ziel der Datenaufbereitung ist somit die Übersetzung der Farbmuster in ein Analogon einer zweidimensionalen Konzentrationsverteilung, so daß Farb- und Bromidmuster mit den gleichen Methoden behandelt werden können. Das Verfahren, das im Rahmen der vorliegenden Arbeit mit der Hilfe von Casper am Institut für Wasserwirtschaft und Kulturtechnik entwickelt wurde, ist in Abbildung 3.8 schematisch dargestellt.

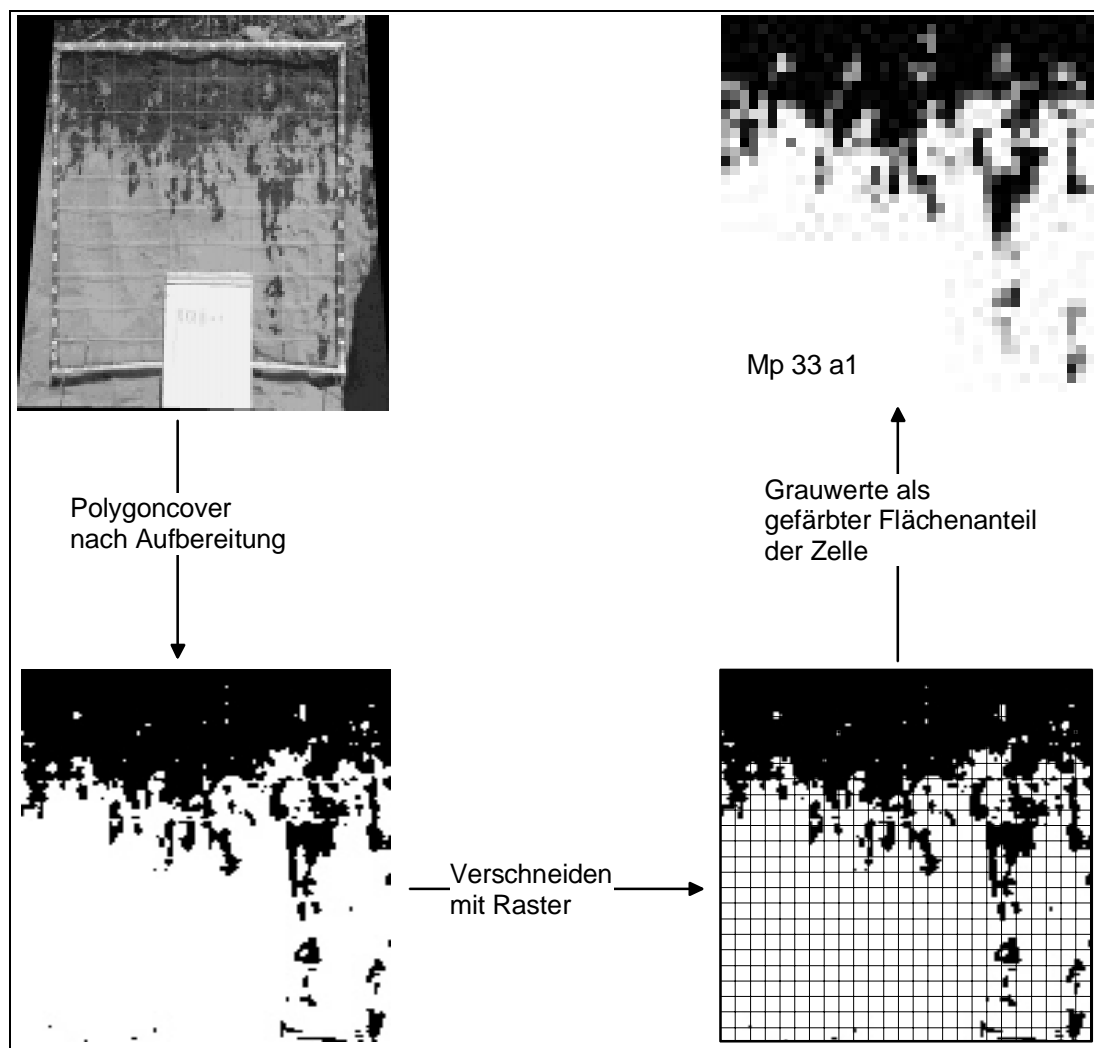


Abb. 3.8: Darstellung der Schritte zur Übersetzung der Farbmuster in Grauwertmatrizen

Im ersten Schritt wurden die digitalisierten Photos der Farbmuster mit dem Programm *MS Picture Publisher* optisch aufbereitet. Sämtlichen Farbanteilen des Brilliant-Blau-Spektrums – den Kanälen 72 - 252 – wurde der einheitliche Wert 255 zugewiesen, die übrigen Kanäle erhielten den Wert 55. Das resultierende Bild enthält somit nur noch binäre Information über gefärbte und nicht gefärbte Flächen. Zwar wird hierdurch der Kontrast zwischen Farbmuster und Hintergrund optimiert, allerdings werden intensiv und weniger intensiv gefärbte Flächen gleich gewichtet. Da sich die wenig intensiv gefärbten Flächen meist im unteren Bereich des Farbmusters befinden, wird die Färbung im unteren Bildbereich systematisch überschätzt.

Im nächsten Schritt wurden die aufbereiteten Photos mit dem geographischen Informationssystem (GIS) *ARC/INFO* entzerrt. Die Ränder der gefärbten Flächen wurden als Linien digitalisiert und zu Polygonen verschnitten. Den gefärbten Polygonen wurde der Grauwert 255, den ungefärbten Polygonen der Grauwert 0 zugewiesen. Durch Verschneiden dieses "Polygoncovers" mit einem ein rechtwinkligen Raster geeigneter Auflösung und Errechnen der gefärbten Flächenanteile in jeder Rasterzelle, entsteht ein Grauwertbild auf der Skala 0 - 255. Der Grauwert jeder Rasterzelle entspricht deren gefärbtem Flächenanteil, 255 bedeutet völlige, 0 bedeutet keine Färbung. Die zu dem Grauwertbild gehörige Grauwertmatrix entspricht nicht ganz der oben geforderten zweidimensionalen Farbkonzentrationsverteilung. Der systematische Fehler der optischen Aufbereitung überträgt sich natürlich auch auf die Grauwertbilder, die Grauwerte im unteren Bereich der Bilder sind systematisch zu hoch.

4 Experimentelle Untersuchungen zu präferentiellem Stofftransport im Weiherbachgebiet: Ergebnisse

Das vorliegende Kapitel beginnt mit der weiterführenden Auswertung der von Schmaland (1996) durchgeführten Untersuchung zur räumlichen Verteilung der Makroporosität im Weiherbachgebiet. Im Anschluß werden die Ergebnisse der umfangreichen Messungen zur Erfassung der makroskopischen Anfangs-Randbedingungen des Versuchs an der Intensivmeßparzelle Mp 97 präsentiert. Die nachfolgenden Abschnitte beinhalten die wesentlichen Ergebnisse des Durchbruchexperiments am Spechtacker, die Bromidmassenbilanzen der Kleinberechnungen sowie die Diskussion des kleinskaligen IPU-Transports an den Standorten Mp 3, Mp 23 und Mp 97.

4.1 Strukturierte Verteilung der Makroporosität auf der Hangskale

Wie bereits in Abschnitt 3.2.2 angesprochen, fand Schmaland¹⁸ (1996) bei der Kartierung der Makroporosität an 10 Standorten des Weiherbachgebiets Hinweise auf eine strukturierte Verteilung der Makroporosität auf der Hangskale. Tabelle 4.1 zeigt, daß die Makroporenvolumina an Standorten, an denen Kolluvium ansteht, deutlich größer sind als an Standorten, an denen Pararendzinen oder Parabraunerden anstehen. Die Makroporosität stellt mit Sicherheit einen Schlüsselparameter für die Variabilität der Infiltration auf der Kleinskala dar. Läßt sich dieser qualitative Zusammenhang zumindest teilweise quantifizieren? Auf den ersten Blick erscheint das schwierig. Die Größe "Bodentyp" ist vom meßtheoretischen Standpunkt eine nominal skalierte Variable. Eine Korrelation mit einer metrischen Größe wie dem Makroporenvolumen erfordert Methoden für gemischte Variablen (Fahrmeir, 1984). Wesentlich einfacher ist es, nach einem leicht verfügbaren, metrischen "Korrelat" der Variablen Bodentyp zu suchen (Blöschl, 1996). Sehr hilfreich bei dieser Suche ist die bereits mehrfach angesprochene, typische Bodentypenverteilung an den Lößhängen des Weiherbachgebiets. Aufgrund der starken Erodierbarkeit der Lößhänge steht am Hangfuß **fast immer** Kolluvium an. Den Zählstandorten wurden mit dem Geographischen Informationssystem *ARCINFO* unter Mithilfe von Glüsing (Institut für Wasserwirtschaft und Kulturtechnik) zwei dimensionslose Parameter zugeordnet:

- Die normierte Hangposition nl mißt, bezogen auf die Gesamtlänge der Hangfallinie, den Abstand vom Hangtop zur Parzelle, $nl = 0$ bedeutet die Parzelle liegt am Hangtop, $nl = 1$ bedeutet, sie liegt am Hangfuß, also mit großer Wahrscheinlichkeit in einem Kolluvium.
- Die normierte Fließlänge nfl mißt den Weg, den hypothetischer Oberflächenabfluß von der Parzelle über die Hangfallinie und die lokale Tiefenlinie bis zum Vorfluter zurücklegen muß; $nfl = 1$ bedeutet, der Parzelle liegt am Hangtop, $nfl \sim 0$ bedeutet, die Parzelle liegt in einem Auenkolluvium. Standorte mit einer geringen normierten Fließlänge bieten daher gute Lebensbedingungen für Regenwürmer (siehe Abschnitt 3.2.2). Für Hänge, deren Fuß direkt am Vorfluter liegt, gilt $1 - nl = nfl$.

Tabelle 4.1 zeigt den Standort der Zählflächen, die anstehenden Bodentypen, die normierte Fließlänge nfl und die normierte Hanglänge nl sowie die Makroporenvolumina beider Zählungen¹⁹ V_{m1} und V_{m2} . Sofern die Zählstandorte mit den Standorten der kleinskaligen Transportversuche übereinstimmen, werden die Bezeichnungen der Beregnungsstandorte benutzt.

Tabelle 4.1: Daten zur Makroporenkartierung nach Schmaland wie Standort, anstehender Bodentyp, normierte Hangposition nl und Fließlänge nfl sowie Makroporenvolumina der Zählflächen V_{m1} und V_{m2}

| Standort | Bodentyp | nl [-] | nfl [-] | V_{m1} [10^{-3} m^3] | V_{m2} [10^{-3} m^3] |
|------------|---------------|-------------|--------------|---------------------------------------|---------------------------------------|
| Weiherberg | Pararendzina | 0.144 | 0.988 | 0.149 | 0.134 |
| Altenberg | Kolluvium | 0.901 | 0.100 | 2.029 | 2.044 |
| Ebertsberg | Pararendzina | 0.664 | 0.851 | 0.280 | 0.307 |
| Frankhang | Kolluvium | 0.897 | 0.103 | 1.092 | 1.088 |
| Mp 25 | Kolluvium | 0.945 | 0.750 | 1.165 | 1.289 |
| Mp 3 | Parabraunerde | 0.951 | 0.627 | 0.419 | 1.267 |
| IUP-Hang | Parabraunerde | 0.664 | 0.841 | 0.574 | 0.490 |
| Mp 33 | Kolluvium | 0.897 | 0.103 | 2.506 | 2.221 |
| Mp 23 | Pararendzina | 0.134 | 0.994 | 0.142 | 0.136 |
| Mp 14 | Parabraunerde | 0.794 | 0.206 | 0.911 | 1.006 |
| Leihferfaß | Parabraunerde | 0.343 | 0.879 | 0.346 | 0.334 |
| Mp 5 | Kolluvium/ | 0.945 | 0.817 | 0.739 | 1.044 |

Sowohl die normierte Fließlänge als auch die normierte Hangposition der Standorte zeigen eine gute Korrelation mit dem mittleren Makroporenvolumen mit Korrelationskoeffizienten von -0.84 und 0.8. Abbildung 4.1 zeigt die lineare Regression des Makroporenvolumens mit der normierten Fließlänge. Der Anteil erklärter Varianz von ca. 70 % ist für natürliche Daten

¹⁸ Die in Abschnitt 3.3.2 vorgestellte Methode zur Makroporenkartierung wurde von Schmaland eingeführt.

¹⁹ Schmaland hat zwei Zählungen auf jeweils 0.25 m² Fläche durchgeführt.

bemerkenswert hoch. Diese Tatsache sollte jedoch nicht zu dem Trugschluß verleiten, die Verteilung der Makroporosität würde alleine durch den Bodentypen erklärt.

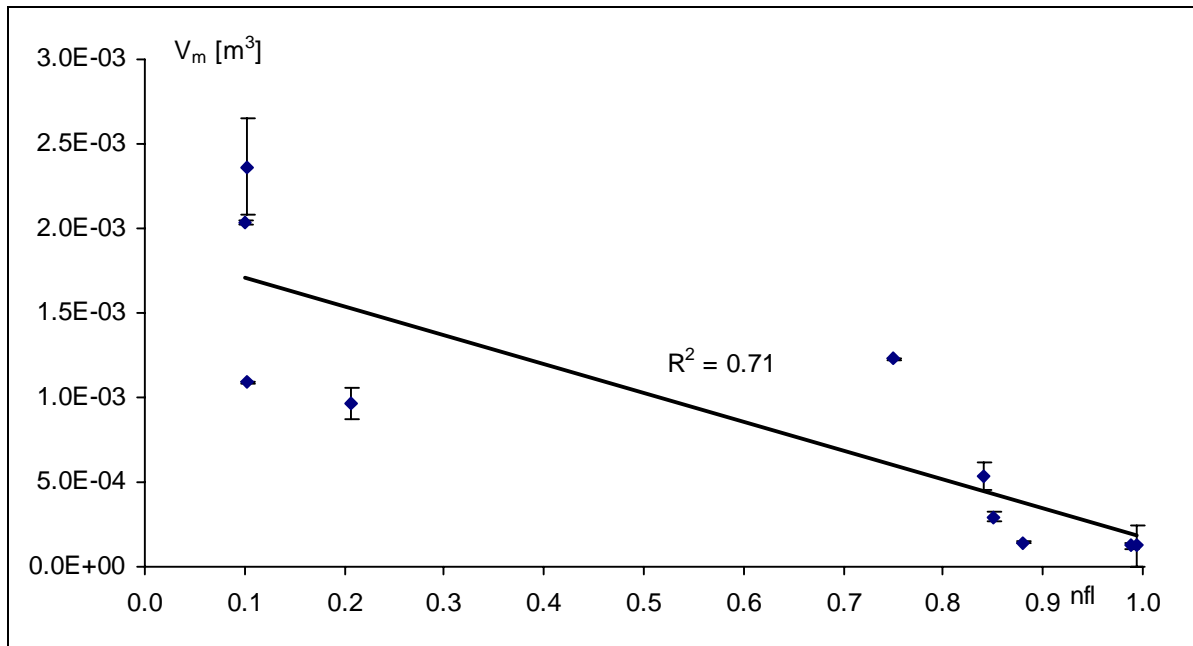


Abb. 4.1: Lineare Regression des Makroporenvolumens V_m mit der normierten Fließlänge nfl ; das Fehlermaß ist der Absolutbetrag der Differenz der Volumina beider Zählungen.

Wie bereits in Abschnitt 2.3.2 erwähnt, kann der Einfluß der Landnutzung den Einfluß des Bodentypen völlig überdecken, im vorliegenden Fall herrschten zum Glück einfache Verhältnisse. Eventuell spiegelt sich in der Korrelation der Makroporosität mit der normierten Fließlänge eine Grundtendenz einer Lößlandschaft wider, begründet durch die Besonderheit der Erosionscatenen und die Habitatpräferenzen anezischer Regenwürmer. Möglicherweise bewegt sich die "Landschaft" nach Störungen immer wieder auf diese "natürliche" Verteilung der Makroporenvolumina auf der Hangskale zu. Daher wird die gute Korrelation zwischen den einfach zugänglichen Größen nfl und nl und dem Makroporenvolumen eines Standorts in Kapitel 5 und Kapitel 7 genutzt, um das Makroporenvolumen der Beregnungsstandorte zu repräsentieren bzw. die Verteilung der Makroporosität am IUP-Hang abzuschätzen.

4.2 Die Anfangs-Randbedingungen des Versuchs an der Intensivmeßparzelle Mp 97

Der vorliegende Abschnitt liefert mit den Anfangs-Randwerten der Beregung der Intensivmeßparzelle Mp 97 die Datengrundlage für die numerische Untersuchung der Wiederholbarkeit kleinskaliger Beregungsexperimente in Kapitel 7. Zur Erinnerung sei erwähnt, daß die in Abschnitt 2.4.2 vorgestellte Meßstrategie den räumlichen Mittelwert und die Standardabweichung der jeweiligen Meßgröße auf zwei Testparzellen miteinander vergleicht. Stimmen diese im Rahmen der Meßfehler überein, so wird postuliert, daß die ermittelten räumlichen Momente der jeweiligen Meßgröße auch den statistischen Zustand der Beregungsparzelle erfassen. Letztlich handelt es sich um eine konsequente Umsetzung der Idee des Repräsentativen Elementarvolumens. Neben dieser statistischen Wiederholbarkeit steht die Messung der Wasserflußrate in Makroporen verschiedener Radien im Vordergrund. Zusammen mit den Ergebnissen der Makroporenkartierung liefern diese Daten die Parameter für den in Kapitel 6 vorgestellten Ansatz zur effektiven Beschreibung präferentieller Fließaktivität.

4.2.1 Die Bodenfeuchte als Anfangsbedingung

Die räumlich gemittelte Bodenfeuchte der Parzellen, deren räumliche Standardabweichung sowie der mittlere Meßfehler²⁰ finden sich in Tabelle 4.2. Sowohl der Mittelwert als auch die Standardabweichung der Bodenfeuchte der Meßflächen stimmen im Rahmen des Meßfehlers überein. Damit wurde die Wiederholbarkeit der Bodenfeuchtemessung im statistischen oder makroskopischen Sinne exemplarisch belegt. Das Ergebnis stützt die Hypothese, daß zumindest die beiden ersten Momente der Bodenfeuchte repräsentativ gemessen wurden und somit auch den Anfangszustand der Beregungsparzelle beschreiben.

Tabelle 4.2: Räumlicher Mittelwert $\langle \theta \rangle$ und Standardabweichung σ_θ der Bodenfeuchte in den oberen 15 cm des Bodens sowie deren absoluter Meßfehler für beide Testparzellen

| Testparzelle | $\langle \theta \rangle$ [%] | σ_θ [%] | Meßfehler [%] |
|--------------|---------------------------------|------------------------|------------------|
| 1 | 27.6 | 2 | 1 |
| 2 | 27.4 | 1.9 | 1 |

²⁰ Der Meßfehler ist die Standardabweichung der fünf Wiederholungen am Punkt, gemittelt über die Messungen an allen 25 Meßpunkten der Testflächen.

4.2.2 Die mittleren Tiefen und mittlere Anzahl der Makroporen

Generell sind nur die Makroporen bei der Auswertung berücksichtigt worden, die zum Zeitpunkt der Kartierung mit der Erdoberfläche in Verbindung standen. Laut Beven und Germann (1982) spielen nur diese Poren eine wesentliche Rolle beim Transportgeschehen. Diese Einschätzung ist plausibel. Der Wasserfluß in Makroporen, die nicht mit der Erdoberfläche verbunden sind, wird durch die Leitfähigkeit der darüber liegenden Bodenmatrix begrenzt. Für Makroporen, die bis zur Erdoberfläche reichen, ist das nicht der Fall. Das obere Diagramm in Abbildung 4.2 zeigt die Makroporenzahl der 6 Zählflächen der Testparzelle 1. Besonders die Zahl kleiner Makroporen mit Durchmessern zwischen 2 - 4 und 4 - 6 mm ist auf den jeweiligen Zählflächen sehr unterschiedlich. Hingegen ist, wie das untere Diagramm der Abbildung 4.2 zeigt, die mittlere Makroporenzahl der jeweiligen 6 Zählflächen im Rahmen der Standardabweichung für beide Testparzellen gleich.

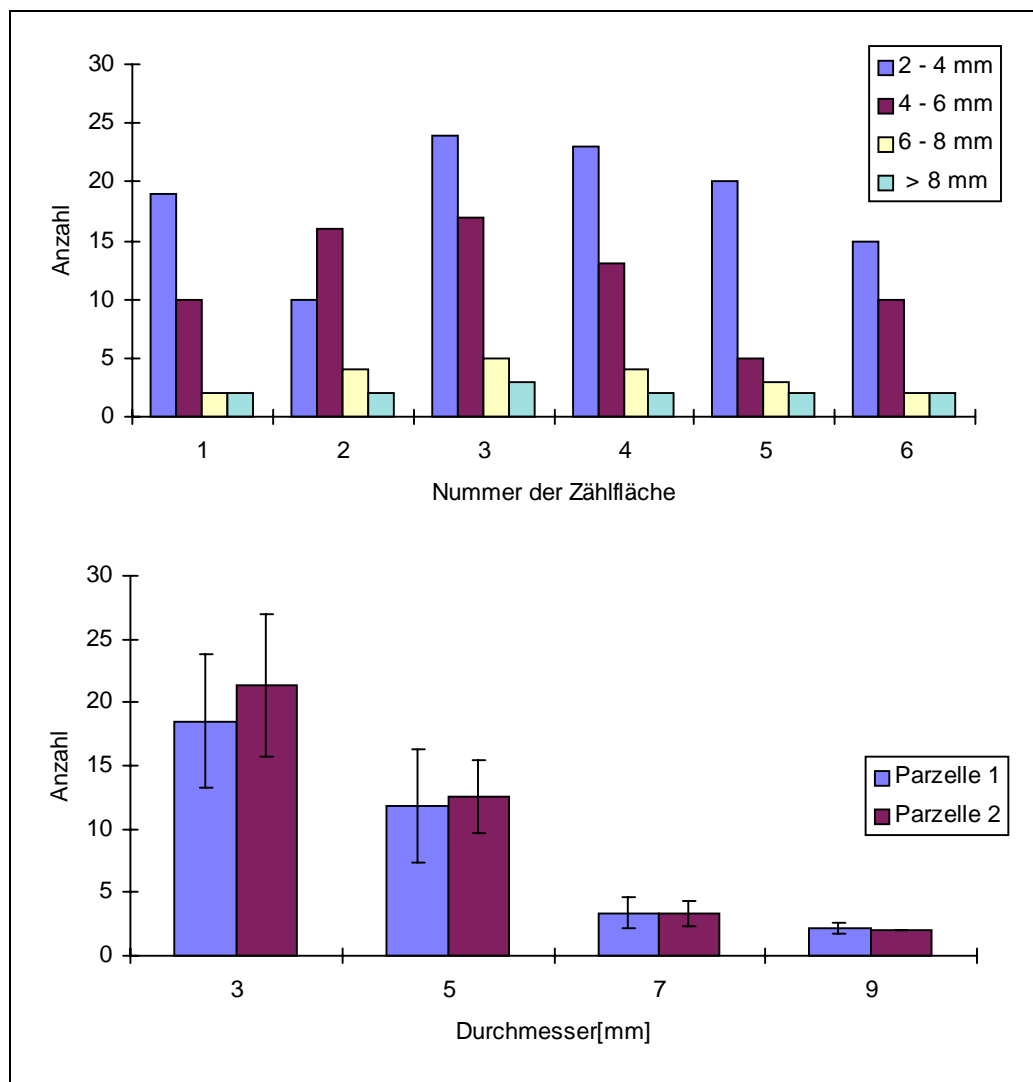


Abb. 4.2: Anzahl der Makroporen des jeweiligen Durchmessers auf den sechs Zählflächen der Testparzelle 1 sowie die über alle Zählflächen gemittelte Makroporenzahl, aufgetragen gegen die Mitte der Durchmesserklasse

Das gleiche gilt für die mittleren Tiefen der Makroporen in Tabelle 4.3. Somit liefert auch die Makroporenkartierung statistisch wiederholbare Ergebnisse für die mittlere Makroporenzahl und -länge. Im vorliegenden Fall waren die Kartierflächen ca. 1.5 m² groß. Die charakteristische laterale Ausdehnung des Makroporensystems lag somit zu diesem Zeitpunkt um fast 3 Größenordnungen über der Fläche eines 100 cm³ Stechzylinders.

Tabelle 4.3: Mittlere Zahl $\langle N_m \rangle$ und mittlere Tiefe $\langle l_m \rangle$ der Makroporen im Boden der Zählparzellen, jeweils mit Standardabweichung; die Bezugsfläche ist 0.25 m²

| | D = 2 - 4 mm | | D = 4 - 6 mm | | D = 6 - 8 mm | | D > 8 mm | |
|-------------------------------|--------------|-------------|--------------|------------|--------------|------------|------------|------------|
| | Parzelle 1 | Parzelle 2 | Parzelle 1 | Parzelle 2 | Parzelle 1 | Parzelle 2 | Parzelle 1 | Parzelle 2 |
| $\langle N_m \rangle$ [-] | 18.5 ± 5.2 | 21.3 ± 5.6 | 11.8 ± 4.5 | 12.5 ± 2.9 | 3.3 ± 1.2 | 3.3 ± 1.0 | 2.2 ± 0.41 | 2 ± 0.0 |
| $\langle l_m \rangle$ [cm] | 49.6 ± 21.9 | 50.6 ± 17.5 | 59.2 ± 17.9 | 59.0 ± 9.3 | 67.5 ± 8.5 | 67.5 ± 8.5 | 80 ± 5.3 | 78.3 ± 5.4 |

4.2.3 Messung der gesättigten Leitfähigkeit der Bodenmatrix und der Wasserflußrate in Makroporen

Tabelle 4.4 zeigt den Mittelwert und die Standardabweichung der gesättigten Leitfähigkeit nicht makroporöser Bodenproben beider Entnahmehorizonte sowie deren mittlere Porosität θ_s , ebenfalls mit Standardabweichung. Die Leitfähigkeit des oberen Horizonts entspricht der Größenordnung, die Schäfer (1996) für ein typisches Kolluvium des Weiherbachgebiets ermittelt hat. In beiden Horizonten ist der Variationskoeffizient der Leitfähigkeit ungefähr eins.

Tabelle 4.4: Mittelwert und Standardabweichung der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit k_s und der Porosität θ_s

| Tiefe unter GOK [m] | k_s [m/s] | σ_{k_s} [m/s] | θ_s [-] | σ_{θ} [-] |
|---------------------|-----------------------|------------------------|----------------|-----------------------|
| 0.2 | 4.9 10 ⁻⁰⁶ | 4.88 10 ⁻⁰⁶ | 0.441 | 0.042 |
| 0.5 | 1.6 10 ⁻⁰⁶ | 2.20 10 ⁻⁰⁶ | 0.410 | 0.027 |

Die Auswertung der Messungen an makroporösen Bodenproben erfolgte unter der Annahme, daß die Flußrate in der Matrix gegenüber der Wasserflußrate in der Makropore vernachlässigt werden kann. Zur Berechnung der Flußdichte q_{mak} bzw. der Abstandsgeschwindigkeit v_a in der Makropore der Bodenproben wurde der gemessene Fluß Q daher nicht auf die Querschnittsfläche des Stechzylinders, sondern auf die mittlere Querschnittsfläche der Makropore bezogen. Abbildung 4.3 zeigt im oberen Graphen die lineare Regression der Flußdichte q_{mak} mit dem Quadrat des mittleren Makroporenradius r^2 . Der gute Zusammenhang ist in Anbetracht des Gesetzes von Hagen-Poiseuille in Gleichung (4.1) zu erwarten.

$$q_{\text{mak}} = \underbrace{\frac{\rho g \Delta H}{8 \eta \Delta z}}_{\text{kons tan t}} r^2 \quad (4.1)$$

- mit q_{mak} = Flußdichte in der Makropore [m/s]
 g = Erdbeschleunigung [m/s²]
 ρ = Dichte des Wasser [kg/m³]
 η = dynamische Zähigkeit [kg/(ms)]
 r = Radius der Makropore [m]
 $\Delta H/\Delta z$ = Druckhöhengradient [-]
 z = Vertikalkoordinate [-]

In Tabelle 4.5 sind die Werte für die Flußrate und die Abstandsgeschwindigkeiten in Makroporen²¹, die sich anhand der Regressionsbeziehung ergeben, aufgeführt. Demnach transportiert eine Makropore mit einem Radius von 4.5 mm fast so viel Wasser pro Sekunde wie die gesättigte Bodenmatrix in 1 m² Querschnittsfläche (vergleiche Tabelle 4.4).

Tabelle 4.5: Flußrate und Abstandsgeschwindigkeit in Makroporen verschiedener Radien, errechnet aus der Regressionsgleichung in Abbildung 4.3

| r [m] | 0.0015 | 0.0025 | 0.0035 | 0.0045 |
|--|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| v_a [m/s] | 6.5 10 ⁻³ | 1.8 10 ⁻² | 3.5 10 ⁻² | 5.8 10 ⁻² |
| Q_{mak} [m³/s] | 4.6 10 ⁻⁸ | 3.5 10 ⁻⁷ | 1.4 10 ⁻⁶ | 3.8 10 ⁻⁶ |

Allerdings sind die Makroporen weder hydraulisch glatt noch ideale Röhren zylindrischen Querschnitts. Die gemessenen Flußdichten sind dementsprechend wesentlich kleiner als diejenigen Werte q_{hag} , die sich aus dem Gesetz von Hagen-Poiseuille ergeben. Der untere Graph der Abbildung 4.3 zeigt das Verhältnis der nach Hagen-Poiseuille berechneten Flußdichten q_{hag} zu den Meßwerten q_{exp} als Maß für den spezifischen Reibungsverlust in der Makropore, aufgetragen gegen die minimale Querschnittsfläche der Makropore r_{min}^2 . Der spezifische Reibungsverlust nimmt mit wachsender minimaler Querschnittsfläche plausiblerweise ab. Beim Durchströmen der Makropore kommt es vermutlich zur Ausbildung einer Grenzschicht an der Makroporenwand. Mit zunehmender Querschnittsfläche wächst der Bereich der Makropore, in der freies Strömen auftritt. Außerdem stimmt die Richtung des vertikalen Druckgradienten sicherlich nicht überall in der gewundenen Makropore mit der Strömungsrichtung überein. Auch diese Tatsache erklärt die Diskrepanz zwischen Messung und Theorie. Zur Ermittlung der absoluten Rauheit der Makroporen anhand der spezifischen Reibungsverluste wäre eine detailliertere Untersuchung der Strömung in Makroporen mit Methoden der Rohrhydraulik angemessen. Vorrangiges Ziel der vorliegenden Untersuchung war jedoch keine detaillierte Prozeßaufklärung, sondern die Abschätzung der Flußrate in

²¹ Als Radien wurden die Klassenmitten aus Tabelle 4.4 gewählt.

Makroporen in Abhängigkeit des Durchmessers als Grundlage für einen Ansatz zur effektiven Beschreibung präferentieller Fließaktivität.

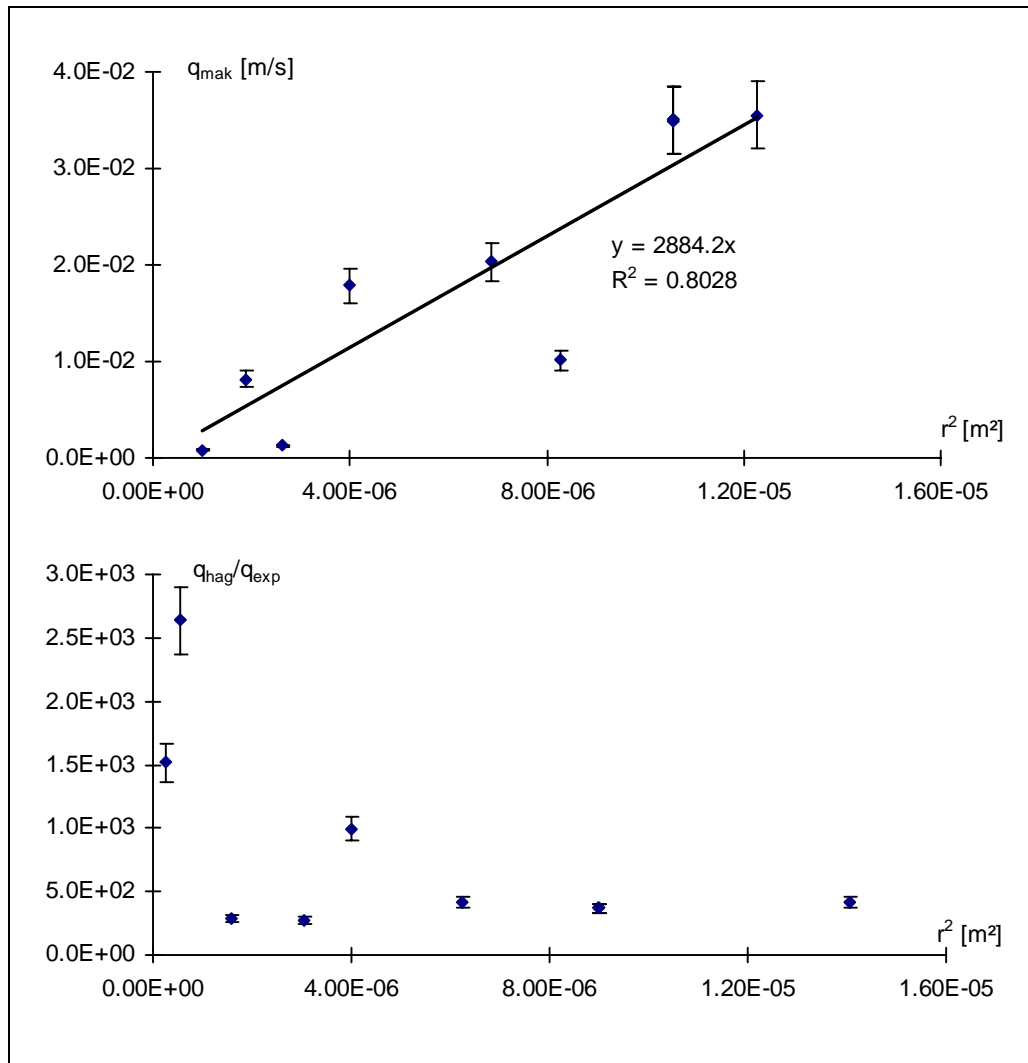


Abb. 4.3: Lineare Regression der gesättigten Leitfähigkeit k_s mit dem Quadrat r^2 des mittleren Makroporenradius sowie die Abnahme des spezifischen Reibungsverlustes mit zunehmender, minimaler Querschnittsfläche der Makropore

4.3 Durchbruchexperiment am Spechtacker

4.3.1 Ergebnisse

Im vorliegenden Abschnitt wird der Durchbruchversuch vornehmlich im Hinblick auf schnellen Stofftransport diskutiert. Die Graphen der Abbildungen 4.4 zeigen die Ganglinien der IPU- und Bromidkonzentration sowie die Ganglinie des Drainageabflusses und der Abflußerhöhung. Bereits zehn Minuten nach Ende der Tracerzugabe erreicht die Bromid-

konzentration ihr Maximum. Die IPU-Konzentration zum gleichen Zeitpunkt beträgt 19 $\mu\text{g/l}$, der Konzentrationspeak folgt ca. dreißig Minuten später. Der Bromiddurchbruch durch den 1.2 m mächtigen Bodenkörper erfolgt also in weniger als 10 min, der IPU-Durchbruch in weniger als 20 min.

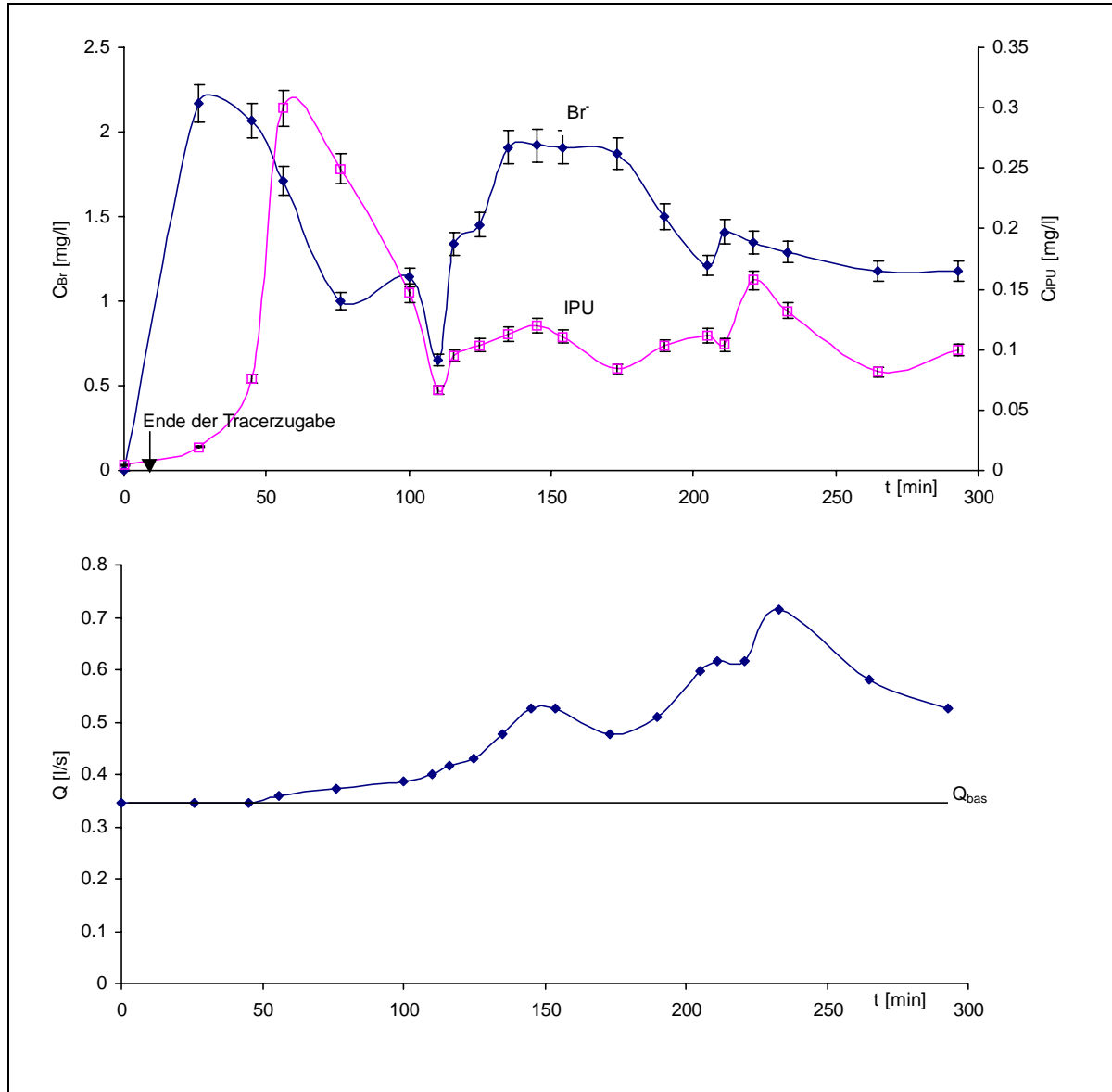


Abb. 4.4: Ganglinien der IPU- (rechte Größenachse) bzw. Bromidkonzentration (linke Größenachse) im Dränagewasser sowie des Dränageabflusses und Dränage-Basisabflusses Q_{bas} im unteren Graphen

Die aufgetretenen Abstandsgeschwindigkeiten liegen in einem Bereich von 0.002 m/s. Mit einer geschätzten Verweilzeit von 8 - 9 min in der Dränage resultiert eine maximale Abstandsgeschwindigkeit in den Makroporen von ca. 0.01 m/s, die typische Abstandsgeschwindigkeit in der Bodenmatrix wird um den Faktor $10^3 - 10^4$ übertroffen. Diese Größenordnung stimmt sehr gut mit den Ergebnissen der Labormessungen in Tabelle 4.5 aus Abschnitt 4.2.3 überein. Beven und Germann (1982) bestätigen in ihrem Review zu präferentiell fließen in Makroporen, daß solch hohe Abstandsgeschwindigkeiten in Makroporen bereits mehrfach

beobachtet wurden. Stamm (1997) hat an einem dränierten Standort in der Schweiz gezeigt, daß Phosphat ebenfalls über präferentielle Fließwege und ein Dränagesystem in einen nahegelegenen Bach transportiert wurde. Das vorliegende Ergebnis ist also kein Einzelfall.

Bemerkenswert ist auch, daß im Zeitraum von 0 - 3300 s im Dränagewasser Bromid und IPU enthalten waren, ohne daß in dieser Zeit eine meßbare Abflußerhöhung beobachtet wurde. In der Anfangsphase des Versuchs sind augenscheinlich extrem hohe Stofffrachten mit sehr wenig neuem Wasser in die Dränage durchgebrochen und dort weiter in den Weiherbach transportiert worden.

Wie Tabelle 4.6 zeigt, nimmt die IPU-Retardation, ermittelt aus der Differenz der Schwerpunktslaufzeit beider Stoffe, gegen Ende des Durchbruchsexperiments deutlich ab. Eine mögliche Erklärung ergibt sich aus dem lokalen Charakter präferentiellen Stofftransports. Die Austauscherplätze in den wenigen hydraulisch aktiven Makroporen werden im Lauf der Beregnung vollständig besetzt, danach wird ein Großteil des Isoproturons ohne Wechselwirkung mit der Bodenmatrix transportiert.

Tabelle 4.6: Retardation des Isoproturons in verschiedenen Phasen des Versuchs mit absolutem Fehler

| Versuchsdauer [s] | 3960 | 7200 | 18100 |
|----------------------|-------------|-------------|-------------|
| Retardationsfaktor | 1.18 ± 0.08 | 1.28 ± 0.08 | 1.01 ± 0.08 |

In Tabelle 4.7 ist die gesamte Applikationsmenge M_{app} des IPU bzw. Bromids sowie der kumulative Wiedererhalt M_B am Ende des Beobachtungszeitraumes aufgeführt. Insgesamt wurde ca. 1g an IPU also 0.4 % der applizierten Gesamtmenge in den Weiherbach ausgetragen. Dies scheint auf den ersten Blick nicht dramatisch viel, reicht aber aus, um mehr als 1000 m³ Wasser für die Trinkwasseraufbereitung unbrauchbar zu machen.

Tabelle 4.7 : Wiedererhalt des Isoproturons und des Bromids

| | M_{app} [g] | M_B [g] | Wiedererhalt [%] |
|--------|------------------|--------------|---------------------|
| IPU | 270 | 0.97 | 0.004 |
| Bromid | 1342 | 12.2 | 0.009 |

4.3.2 Diskussion

Ein wesentliches Schutzkonzept gegen eine Belastung der Umwelt durch Herbizidtransport basiert auf der Verwendung von Substanzen, die durch Sorption nur geringe Mobilität im Boden aufweisen. Applizierte Pflanzenschutzmittel sollen dadurch im Oberboden verbleiben, wo sie relativ schnell abgebaut werden. Dieses Konzept geht von der Vorstellung eines gleichmäßigen, kontinuierlichen Stofftransports im Boden aus. Der oben beschriebene lokale Charakter präferentiellen Stofftransports reduziert die Filterwirkung des Bodens und damit die Wirksamkeit dieses Schutzkonzeptes erheblich. Die grundsätzlichen Überlegungen aus Abschnitt 3.2.2 haben also durchaus eine praktische Bedeutung. Eine unzureichende Prozeßvorstellung über Stofftransport führt letztlich auch zu einem unzureichenden Schutzkonzept.

Abbildung 4.5 stellt den schnellen Stoffdurchbruch durch eine kontinuierliche Makropore in die Dränage schematisch dar. Voraussetzung für die schnelle Reaktion war der optimale Anschluß des Makroporensystems an die Erdoberfläche **und** an das Dränagesystem. Die Intensivmeßparzelle Mp 97 liegt ebenfalls auf dem Spechtacker, daher ist das Makroporensystem im anstehenden Kolluvium gut untersucht (siehe Abbildung 3.4). Auf beiden Testparzellen reichten mehrere Makroporen von der Oberfläche bis in die Splittschicht über dem Drainagerohr. Da die Dränage im Spechtacker immer Wasser führt, kommt es aufgrund der verschwindend geringen Retention in der Splittschicht beim Transport in solchen Wurmgängern vermutlich zu keinem großen Rückstau. Daher wirken solche Makroporen wie eine Direktleitung in die Dränage und damit in den Vorfluter.

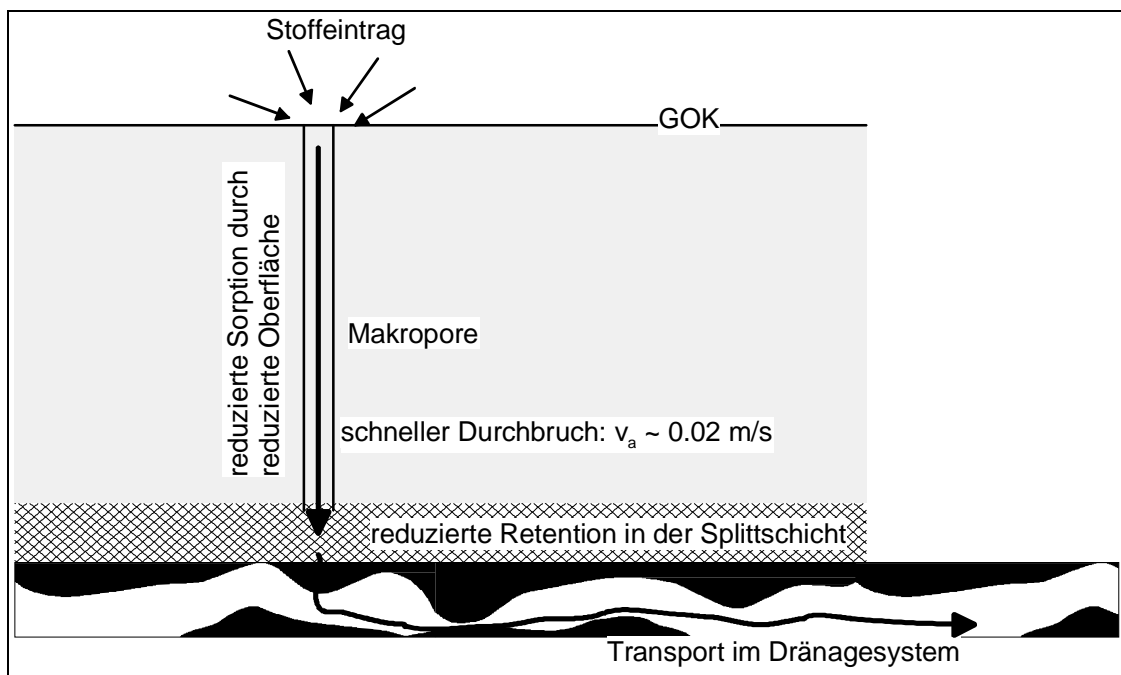


Abb. 4.5: Schematische Darstellung des schnellen Stoffdurchbruchs durch einen Wurmgang in das Dränagesystem

Stenger (1997) hat bei ihrer Untersuchung zu präferentiellem Fließen sehr deutlich den Einfluß der Bodenbearbeitung herausgestellt und u.a. gezeigt, daß der Pflughorizont im frisch gepflügten Boden eine Grenze für das Vordringen von Wasser und damit auch von Stoffen darstellt. Durch Pflügen würde die direkte Verbindung der Makroporen von der Erdoberfläche in den Unterboden gekappt, die angesprochene Direktleitung wäre unterbrochen. Insofern eröffnet das Ausbringen von Herbiziden im Nachauflauf, also nach dem Pflügen, eine einfache Möglichkeit, das Risiko einer Belastung des Baches durch präferentiellen Stofftransport zu vermeiden.

4.4 Ein kurzer Blick auf die Tracerdaten

4.4.1 Die Farbtracermuster des Brilliant Blau

Die in Abschnitt 4.1 quantifizierte systematische Verteilung der Makroporosität auf der Hangskale hatte in der Tat einen ordnenden Einfluß auf die räumliche Verteilung des kleinskaligen Infiltrationsgeschehens. An den Auenstandorten Mp 33 und Mp 97 fanden sich stark präferentielle Infiltrationsmuster. Natürlich ist der Infiltrationsprozeß multikausal, daher ist eine hohe Makroporosität nur eine der möglichen Ursachen für präferentielles Fließen. Präferentielle Fließmuster wurden auch an vorfluterfernen Standorten gefunden. Um den möglichen Einfluß verschiedener Größen wie der Anfangsfeuchte, Beregnungsintensität oder Makroporosität auf die Struktur der Fließmuster zu untersuchen, benötigt man ein Verfahren, das Ähnlichkeiten zwischen Fließmustern quantifiziert und diese Ähnlichkeiten als Funktion der Anfangs-Randbedingungen erklärt. Kapitel 5 stellt solch ein Verfahren vor. In Anbetracht der Gesamtheit aller Fließmuster (siehe Abbildung A 3.1 in Anhang A3) wird klar, daß die beiden Kategorien "präferentielles Fließen" und "klassische Front" nur die beiden Extreme einer Fülle möglicher Fließmuster darstellen. Zur Verdeutlichung zeigt Abbildung 4.6 zwei Fließmuster, die beide präferentiell und somit ähnlich, im Detail jedoch sehr verschieden sind. Das rechte Fließmuster stammt von der Parzelle Mp 97 und gibt somit eine Vorstellung über Strukturen, die bei dem IPU-Durchbruch am Spechtacker möglicherweise aktiv waren. Die maximale Eindringtiefe des Farbtracers an diesem Standort betrug ca. 1 m, die Splittschicht zum Schutz des Dränagerohrs beginnt bereits in 90 cm Tiefe.

4.4.2 Die Massenbilanz der Bromiddaten

Der vorliegende Abschnitt stellt die Massenbilanzen der Transportexperimente vor. Tabelle 4.8 zeigt die ausgebrachte Bromidmenge und den wiedergefundenen Anteil jeweils mit absolutem Meßfehler für alle Kleinberechnungen. Zur Berechnung der Wiederfindungsraten wurde der Bromidgehalt der Profile, die einen Tag nach der Beregnung beprobt wurden, auf das Vo-

lumen der Meßparzelle extrapoliert. Die dazu notwendigen Lagerungsdichten sind in Tabelle 3.4 in Abschnitt 3.6.2 aufgeführt.

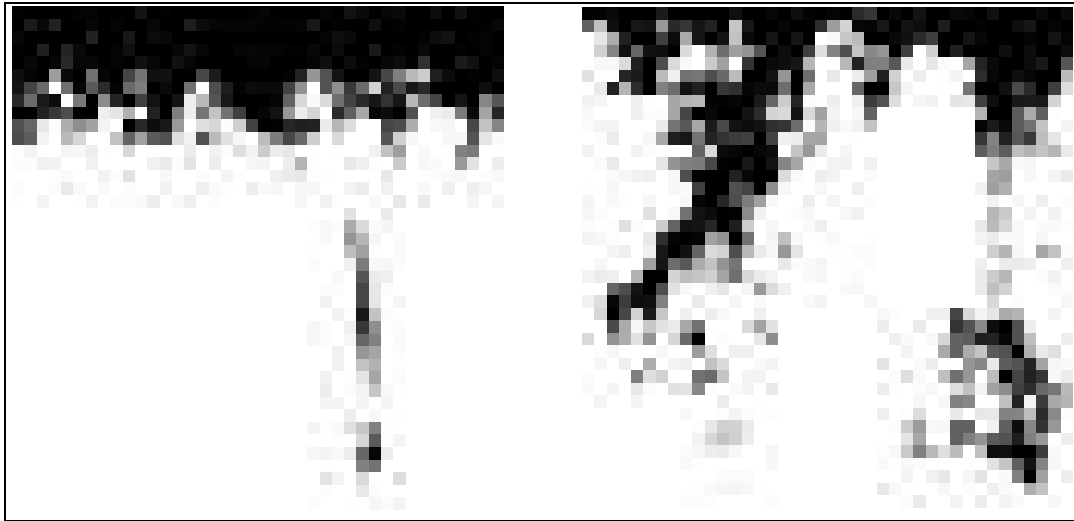


Abb. 4.6: Zwei unterschiedliche Beispiele für präferentielle Fließmuster

Tabelle 4.8: Ausgebrachte Bromidmenge und Wiedererhalt durch die Probennahme

| Parzelle | M_{app} [g] | Wiedererhalt [%] |
|----------|---------------|------------------|
| Mp3 | 3.9 ± 0.4 | 75 ± 12 |
| Mp5 | 3.6 ± 0.5 | 78 ± 14 |
| Mp14 | 3.8 ± 0.5 | 61 ± 14 |
| Mp21 | 3.9 ± 0.4 | 69 ± 12 |
| Mp23 | 3.8 ± 0.1 | 74 ± 6.0 |
| Mp25 | 3.8 ± 0.4 | 74 ± 12 |
| Mp31 | 3.8 ± 0.4 | 78 ± 12 |
| Mp33 | 3.7 ± 0.3 | 59 ± 9.0 |
| Mp63 | 3.6 ± 0.2 | 78 ± 7.0 |
| Mp97 | 4.2 ± 0.4 | 95 ± 10 |

Mit Ausnahme der Versuche an den Standorten Mp 14, Mp 33 und Mp 97 liegt die Wiederfindungsrate meist im Bereich von 70 - 75%. Im Rahmen der Fehler ist nur die Massenbilanz an der Intensivmeßparzelle Mp 97 geschlossen. An den Standorten Mp 33 und Mp 14 ist die Wiederfindung besonders gering. Die Bromidmuster beider Standorte sind, sofern die Auflösung von $10 \times 10 \text{ cm}^2$ diese Aussage zuläßt, stark strukturiert. An beiden Standorten war die Retardation des Farbtracers größer als 1.1, denn in beiden Fällen wurde offensichtlich nicht tief genug beprobt²². Zumindest am Standort Mp 33 kann die stärkere Retardation des Farb-

²² Wie bereits erwähnt, wurden Bodenproben nur bis 10 cm unterhalb der Farbstofffront entnommen.

stoffs durch verstärkte Adsorption infolge des erhöhten Tongehalts des anstehenden Kolluviums erklärt werden.

4.5 Der kleinskalige Transport von Isoproturon

4.5.1 Massenbilanz und Retardation der Versuche

Tabelle 4.9 zeigt die ausgebrachte IPU-Menge M_{IPU} und deren Wiederfindung im Boden für die drei Standorte. Generell ist die Wiederfindungsrate des Isoproturons höher als die des Bromids in Tabelle 4.8. Die Konzentrationsverteilungen beider Stoffe liegen in den jeweiligen Vertikalprofilen als quadratische 10×10 -Matrizen vor. Der Wert an der Stelle (i, j) solcher Konzentrationsmatrix bezeichnet die mittlere Konzentration in der Tiefe $(i - 0.5) \times 10$ cm in der Spalte j . Das Mittelungsvolumen von 400 cm^3 ergibt sich aus der Fläche einer Gitterzelle und der Höhe eines 100 cm^3 -Stechzylinders. Mit Hilfe der Tiefe des Bromid- bzw. IPU-Schwerpunkts z_{Br} und z_{IPU} in jeder der zehn Spalten läßt sich die Retardation des Isoproturons in jeder Spalte einfach als Quotient der Schwerpunkttiefen abschätzen:

$$R(x) = \frac{z_{Br}}{z_{IPU}} \quad (4.2)$$

Der Mittelwert über alle Spalten beider Profile ergibt den mittleren Retardationsfaktor $\langle R \rangle$ der jeweiligen, dargestellt Parzelle in Tabelle 4.9. Für die Standorte Mp 97 und Mp 3 erhält man auf diese Weise einen mittleren Retardationsfaktor kleiner als 1. Dieses Ergebnis erscheint unsinnig, bedeutet es doch, daß sich das sorbierende Pflanzenschutzmittel im Durchschnitt schneller im Boden bewegt hat als der konservative Tracer. Bei Versuch Mp 3 ist dies noch mit der Wiederfindung des Bromids von 75 % erklärbar. Hätte man tiefer beprobt, wäre mehr Bromid gefunden worden, der Bromidschwerpunkt läge tiefer im Boden und die Retardation wäre vermutlich größer als 1.

Tabelle 4.9: Wiedererhalt und Retardation des Isoproturons mit absolutem Fehler

| Versuchsparzelle | $M_{IPU} [\text{g/m}^2]$ | Wiedererhalt [%] | $\langle R \rangle [-]$ |
|------------------|--------------------------|------------------|-------------------------|
| Mp23 | 0.5 | 79 ± 12 | 2.3 ± 0.4 |
| Mp3 | 0.5 | 98 ± 14 | 0.9 ± 0.2 |
| Mp97 | 1 | 90 ± 13 | 0.7 ± 0.1 |

Beim Transportversuch am Standort Mp 97 hilft diese Erklärung nicht weiter, denn sowohl die IPU- als auch die Bromidmassenbilanz sind im Rahmen der Fehler geschlossen. Abbildung 4.7 zeigt den Retardationsfaktor $R(x)$ aufgetragen gegen die x -Koordinate der jeweils

zehn Spalten der Vertikalprofile Mp 97 a1 und Mp 97 b1 des Standorts Mp 97. In den Spalten mit einem $R < 1$ ist der IPU-Schwerpunkt tiefer in den Boden vorgedrungen als der Bromidschwerpunkt.

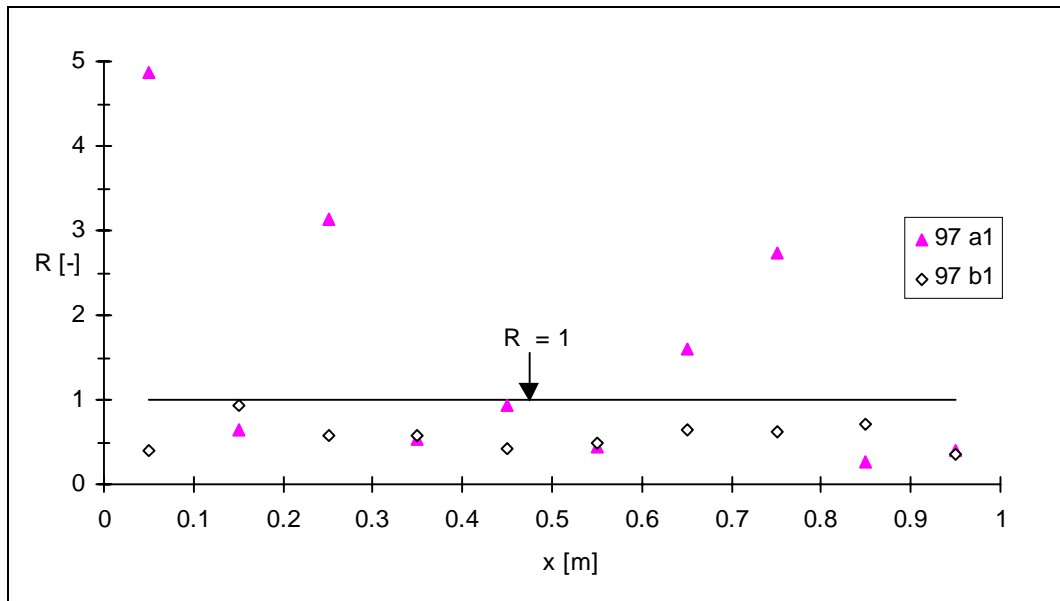


Abb. 4.7: Retardationskoeffizienten des Isoproturons in den Spalten der Konzentrationsmatrizen der Profile M 97 a1 und Mp 97 b1

4.5.2 Partikulär gebundener Transport von Isoproturon, ein relevanter Transportprozeß?

Eine mögliche Erklärung dieses anomalen Verhaltens wäre, daß ein Teil des Pflanzenschutzmittels an Tonpartikel oder Humuspartikel adsorbiert in größere Tiefen des Bodens transportiert wurde. Die Verlagerung von Tonpartikeln in tiefere Schichten des Bodens, auch Lesivierung genannt, ist ein typischer Bodenbildungsprozeß in schwach sauren Böden (Scheffer & Schachtschabel, 1992), Voraussetzung ist ein pH-Wert zwischen 5 und 7. Der Transport von dispergierten Tonpartikeln findet vornehmlich in Makro- und Grobporen statt, dabei können erhebliche Transportdistanzen zurückgelegt werden. Falls ein Pflanzenschutzmittel an dispergierten Tonpartikeln adsorbiert durch Makroporen transportiert würde, so geschähe dies ohne Wechselwirkung mit der Makroporenwandung, d.h. nicht retardiert.

Bei einer genaueren Betrachtung der IPU-Applikation, wie sie jeweils 1 Tag vor dem kleinskaligen Transportversuch am Standort Mp 97²³ und dem Durchbruchversuch am Spechtacker erfolgt ist, sind 2 Grenzfälle für die Infiltration der applizierten Arelon-Suspension in die oberste Bodenschicht denkbar.

²³ Zur Erinnerung: Die Intensivmeßparzelle Mp 97 und die Testfläche des Durchbruchexperiments befinden sich beide auf dem selben Feld (siehe auch Abbildung 3.1).

Fall 1: Die Wasserlöslichkeit L des Isoproturons spielt beim Eindringen in die oberste Bodenschicht keine Rolle, der gesamte Wirkstoff M_{IPU} dringt in eine Schicht der Dicke Δz ein. Dort bildet sich im einfachsten Fall spontan ein Gleichgewicht zwischen adsorbiertem und gelösten IPU. Für die IPU-Konzentration in der Wasserphase in dieser Schicht gilt aufgrund der Massenerhaltung:

$$(\theta C_{\text{Iw}} + \rho C_{\text{Itr}}) dz = M_{\text{IPU}} \quad (4.3)$$

$$C_{\text{Iw}}^0 = \frac{M_{\text{IPU}}}{\Delta z (\rho K_d + \theta)} \leq L$$

mit M_{IPU} = applizierte Masse an IPU pro m^2
 K_d = Gleichgewichtskonstante der linearen Adsorptionsisotherme
 C_{Iw} = IPU-Konzentration in der Wasserphase
 C_{Itr} = IPU-Konzentration in der adsorbierten Phase

Fall 2: Die Wasserlöslichkeit begrenzt den Eintrag des Isoproturons, nur die Menge $M_{\text{INF}} = L \times V_{\text{app}}$ dringt in oberste Bodenschicht ein, wobei V_{app} das applizierte Wasservolumen pro m^2 bezeichnet. Das Gros des Wirkstoffs bleibt in granularer Form an der Erdoberfläche zurück, die IPU-Konzentration in der oberen Bodenschicht entspricht dem Löslichkeitsprodukt L .

Im Zuge der Beregnung mischt sich das Beregnungswasser mit dem Wasser der oberen Bodenschicht, bzw. das an der Erdoberfläche verbliebene IPU wird in Fall 2 durch das Beregnungswasser gelöst und in den Boden eingetragen, und es kommt zum Transport beider Substanzen im Boden. In **beiden** Extremfällen stellt das Löslichkeitsprodukt L die maximale IPU-Konzentration im Bodenwasser dar.

Die Testfläche des bereits diskutierten Durchbruchexperiments und die Intensivmeßparzelle Mp 97 liegen beide auf dem gleichen Feld – dem Spechtacker. Zur Klärung der Frage, ob an diesem Standort der Transport von an Tonpartikeln adsorbiertem Isoproturon statt gefunden haben könnte, wurde der IPU-Gehalt der Wasserproben des Durchbruchversuchs auf die Differenz aus Abfluß und Basisabfluß, die Abflußerhöhung Q_{eff} , bezogen. Dadurch läßt sich, wie in Abbildung 4.9 dargestellt, abschätzen, wie hoch die IPU-Konzentration beim Transport in der Wasserphase im Boden war, bevor sich das Bodenwasser mit dem Dränagewasser vermischt hat. Im Zeitraum von 3960 - 6600 s lag die IPU-Konzentration in der Abflußerhöhung und damit im durchbrechenden Bodenwasser um das 2 bis 10-fache über dem Löslichkeitsprodukt von $L = 0.065 \text{ mg/l}$. Da erst zum Zeitpunkt $t = 3960 \text{ s}$ eine meßbare Abflußerhöhung eintrat, kann über die IPU-Konzentration oder besser die IPU-Fracht im Bodenwasser zu früheren Zeitpunkten keine gesicherte Aussage erfolgen. Diese hohen IPU-Frachten in der Anfangsphase lassen sich ebenfalls durch Transport von an Tonpartikeln adsorbiertem IPU durch Makroporen und Dränagerohr bis zum Dränageauslaß erklären.

Die Anreicherung des in den Wasserproben enthaltenen Isoproturons erfolgte wie in Abschnitt 3.6.1 ausgeführt, indem das Wasser durch einen organischen C18 Filter gesogen wurde. In der Probe enthaltene Schwebstoffe wie feine Tonpartikel blieben dabei als sichtbare, bräunliche Schicht an der Oberseite des Filters zurück. Zur Extraktion des adsorbierten IPU wurden 5 ml Methanol in den Filter eingetropfert und nach 5 min wieder ausgesogen. Da Methanol auch zur IPU-Extraktion aus Bodenproben verwendet wird, extrahiert das C18 Verfahren die gesamte IPU-Fracht aus der Probe, d.h. angereichertes IPU in der C18-Säule und solches, welches an Tonpartikeln adsorbiert ist, die sich an der Oberseite des Filters abgelagert haben.

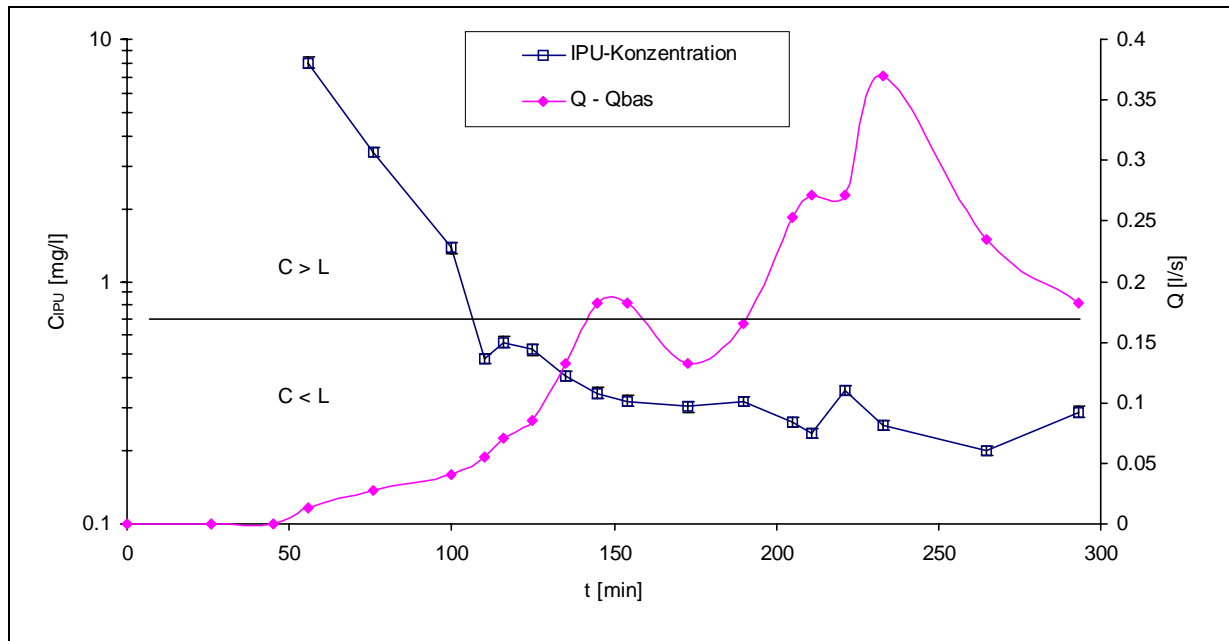


Abb. 4.8: Ganglinie der IPU-Fracht in der Drainageabflußerhöhung $Q - Q_{bas}$, die horizontale Linie trennt das Diagramm in die Bereiche $C > L$ bzw. $C < L$

4.6 Zusammenfassende Diskussion

4.6.1 Praktische Folgerung aus dem Durchbruchexperiment

Die Größe²⁴ der Versuchsparzelle sowie die bereits erwähnte Untersuchung von Stamm (1997) sprechen für die Güte der vorgestellten Ergebnisse des Durchbruchexperiments am Spechtacker. Eine wesentliche Ursache für die beobachtete, schnelle Reaktion war der optimale Anschluß der Makroporen an die Erdoberfläche **und** das Dränagesystem. Es ist nicht nur die Auffassung des Verfassers, daß die Applikation von IPU an **Auenstandorten** im sogenannten Vorauflauf im Herbst auch bei normaler Applikationsmenge und -technik ein

²⁴ Das Integrationsvolumen beträgt bei einer Fläche von ca. 900 m² gut 1000 m³, die Messung ist mit hoher Wahrscheinlichkeit ergodisch.

besonders hohes Risiko für eine Stoffbelastung durch präferentielle Fließereignisse birgt (Mokry, mündliche Mitteilung, 1998). Die Ausführungen aus Abschnitt 3.3.2 zum Zusammenwirken der saisonalen Verläufe der Niederschlagstätigkeit und der Wurmakktivität stützen diese Hypothese. Dieses Zusammenwirken bietet jedoch auch eine effiziente Möglichkeit, das Risiko einer Stoffbelastung durch eine Applikation im sogenannten Nachauflauf zu mindern. Durch Pflügen vor der Ausbringung wird die Verbindung der Makroporen mit der Erdoberfläche unterbrochen und damit eine wesentliche Voraussetzung für präferentiellen Transport in das Dränagesystem von vornherein beseitigt.

4.6.2 Forschungsbedarf in Hinblick auf Herbizidtransport

Sowohl der Retardationskoeffizient von 0.7, der beim Transportversuch an der Intensivmeßparzelle Mp 97 auftrat, als auch die hohen IPU-Frachten im Bodenwasser, die in der ersten Phase des Durchbruchversuchs deutlich über dem Löslichkeitsprodukt L lagen, stehen im Widerspruch zum klassischen Bild, daß Transport von Herbiziden im Boden ausschließlich in gelöster Form stattfindet. Die Auswaschung von dispergierten Tonpartikeln in tiefere Bodenhorizonte ist ein bekannter Bodenbildungsprozeß (Scheffer & Schachtschabel, 1992). Weiterhin ist bekannt, daß stark sorbierende Stoffe wie Phosphat an Partikel gebunden im Oberflächenabfluß transportiert werden können (Flury, 1996; Stamm; 1997). Die Kombination dieser beiden Fakten bietet als mögliche, mit den Versuchsergebnissen und den angewandten Analysemethoden vereinbare Erklärung, daß bei beiden Versuche zumindest ein Teil des Isoproturons an Ton- oder Humuspartikeln adsorbiert transportiert wurde. Eine strenge Prüfung dieser Hypothese verlangt eine gezielt Untersuchung in einem adäquaten Experiment. Falls der Transport von an Partikeln adsorbierten Pestiziden wirklich ein relevanter Prozeß sein sollte, ergäben sich daraus weitreichende Konsequenzen für Forschung und Praxis:

- Zur experimentellen Untersuchung des Transportprozesses könnte man sich nicht mehr allein auf konservative Tracer beschränken. Parameter wie die Sorptivität des interessierenden Stoffes oder der pH-Wert des untersuchten Bodens entschieden darüber, ob es zu partikulärem Transport käme oder nicht. Da es eine Korrelation zwischen den Transporteigenschaften eines Stoffes, seinen chemischen Eigenschaften und dem genetischen Stadium des Bodens gäbe, wäre die wesentliche Voraussetzung für die Trennung von Transport und "Chemie" nicht mehr erfüllt.
- Die gängigen Ansätze zur effektiven Beschreibung makroskopischen Stofftransports beziehen sich auf gelösten Transport und müßten daher erweitert werden. Eine Beschreibung partikulär gebundenen Transports unter der chemischen Eigenschaften des Bodens und der Stoffe erscheint wesentlich schwieriger.
- Die Verwendung von Stoffen hoher Sorptivität wäre kein wirksames Konzept mehr für eine geringe Mobilität von Pflanzenschutzmitteln, sondern in einigen Fällen eine "Fahrkarte" in tiefere Bodenhorizonte.

Die vorgestellten Ergebnisse und deren mangelnde Vereinbarkeit mit klassischen Vorstellungen vom Pestizidtransport im Boden zeigen vor allem zweierlei. Um geeignete

Empfehlungen für die landwirtschaftliche Praxis bereitzustellen, müssen die relevanten Prozesse im Stoffhaushalt natürlicher Böden besser verstanden werden als bisher. Zum zweiten wird deutlich, daß die Tatsache, ob es bei einem Transportereignis zu präferentieller Fließaktivität kommt, maßgeblich darüber entscheidet, ob eine bedenkliche Tiefenverlagerung von Pestiziden stattfindet oder nicht. Diese Erkenntnis ist nicht neu wie die nachstehend zitierten Arbeiten zeigen (Rao, 1974; Jury, 1986b; Flury et. al., 1995a; Flury, 1996; Stamm, 1997, Schmidt, 1996). Sie unterstreicht jedoch die Wichtigkeit der in Kapitel 5 vorgestellten Untersuchung.

5 Ausgliedern von Flächen ähnlicher Infiltrationsneigung mittels multivariater statistischer Methoden

Das vorliegende Kapitel präsentiert die Auswertung der kleinskaligen Transportversuche mit Hilfe der Analyseverfahren Cluster- und Diskriminanzanalyse und leitet daraus wesentliche Einflußgrößen für den präferentiellen Fließprozeß in den Böden des Weiherbachgebiets ab. Eine Einführung in die Grundlagen der beiden Verfahren findet sich in Anhang A1.

5.1 Was bedeutet Regionalisierung im gegenwärtigen Kontext?

5.1.1 Gesucht sind Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens

In Abschnitt 4.4.1 wurde bereits betont, daß sich die in Abschnitt 4.1.1 quantifizierte, strukturelle Verteilung der Makroporosität auf der Hangskale zumindest teilweise im Infiltrationsgeschehen widerspiegelt. Ziel des vorliegenden Kapitels ist es, auf Basis der kleinskaligen Transportexperimente Größen zu identifizieren, die das Auftreten präferentieller Fließereignisse steuern. Zum einen wird mittels dieses Prozeßverständnisses in Kapitel 6 ein Ansatz zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität aufgebaut. Zum zweiten soll gezeigt werden, daß kleinskalige Transportversuche für die Ausweisung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens benutzt werden können. Zu diesem Zweck wird ein Verfahren entwickelt, welches die makroskopische Ähnlichkeit von Fließmustern quantifiziert und als Funktion der Anfangs-Randbedingungen wie folgt erklärt:

- Durch Einteilung der Stichprobe in Gruppen ähnlicher Fließmuster mittels einer Clusteranalyse (Schuchard-Ficher, 1980; Fahrmeir, 1984). Die Zahl der Fließmustergruppen sollte sich dabei anhand eines a priori festgelegten Kriteriums ergeben.
- Durch die Erklärung der Unterschiede zwischen den Fließmustergruppen, durch eine Kombination der "morphologischen" Randbedingungen wie lokale Ausprägung des Makroporensystems oder Bodenart am Versuchsstandort und ereignisabhängiger Größen wie Vor-

feuchte und Beregnungsintensität mit Hilfe einer Diskriminanzanalyse (Schuchard-Ficher, 1980; Fahrmeir, 1984).

Angesichts der in Abschnitt 2.3 angestellten ausführlichen Skalenbetrachtung stellt sich die Frage, welchen Nutzen solch ein Verfahren haben soll. In diesem Abschnitt wurde doch für die saisonale Zeitskala der Einfluß von Landnutzungsänderungen und anderen antropogenen Aktivitäten auf den Porenraum²⁵ und damit die Zeitabhängigkeit von Schlüsselparametern betont. Welchen Sinn macht die Ausweisung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens, wenn sich die räumliche Verteilung der Schlüsselgrößen langfristig ändert? Auch für eine (Löß-)Landschaft existieren mit Sicherheit stabile Gleichgewichtszustände, die das Gesamtsystem auf lange Sicht anstrebt. In diesem Gleichgewichtszustand prägen die jeweiligen landschaftlichen Besonderheiten in ihrem Zusammenwirken eine räumliche Ordnung von Strukturen aus (Klemes, 1983). Diese beeinflussen zumindest zum Teil den Ablauf von Geoprozessen und wirken so selbstorganisierend (Haken, 1990). Für das Weiherbachgebiet ist das beispielsweise der Einfluß der Erosionscatenen auf die räumliche Verteilung der Wurmpopulation, der sich in einer tendenziellen räumlichen Ordnung der Makroporosität widerspiegelt. Regionalisierung bedeutet, solche Tendenzen in einer Landschaft aufzuspüren und daher eine mögliche räumliche Ordnung von Prozessen zu erkennen. Abschnitt 8.3.2 greift diese Gedanken auf und diskutiert die Frage, was Regionalisierung bestenfalls zu leisten vermag.

Neben diesen prinzipiellen Schwierigkeiten führt das angesprochene Ziel auch auf formale Probleme. Die Einflußgrößen für die Infiltration sind vom meßtheoretischen Standpunkt unterschiedlich skaliert: Bodentyp und Landnutzung sind nominal skalierte Variablen, die Bodenfeuchte und Niederschlagsintensität hingegen sind metrische Größen. Formal muß ein angemessenes Verfahren zur Ausweisung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens die Information unterschiedlich skalierten Daten verarbeiten und deren Einfluß auf die Infiltration berücksichtigen können. Das erfordert statistische Analyseverfahren für gemischte Variablen (Fahrmeir, 1984). Abbildung 5.1 illustriert die oben angesprochenen Probleme schematisch, die Infiltration "schwingt" zwischen verschiedenen Einflüssen hin und her, bis sich ein Gleichgewichtszustand einstellt.

5.1.2 Grundsätzliches Vorgehen

Das Verfahren zur Ausgliederung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens nutzt eine Kombination der in Anhang A1 vorgestellten Methoden Cluster- und Diskriminanzanalyse. Die Clusteranalyse reduziert Ähnlichkeit zwischen Objekten bzw. Gruppen von Objekten auf deren Abstände in einem Parameterraum, ein geringer Abstand bedeutet hohe Ähnlichkeit. Daher werden den Fließmustern im nächsten Abschnitt metrische Parameter zugeordnet, die

²⁵ Beispielsweise hat die Fruchtfolge Weizen, Senf eine deutliche Reduktion des Wurmbestandes in der Aue am Spechtacker zu Folge.

dann anstelle der Fließmuster im Rahmen der Clusteranalyse gruppiert werden. Somit ist die Suche nach guten Parametern essentiell. Sind diese gefunden, so ist der Ablauf des Verfahrens wie folgt:

- Die Fließmuster werden anhand der Parameter in mehrere Klassen mit Hilfe der Clusteranalyse gruppiert. Daraus resultiert eine partitionierte Stichprobe.
- Ist eine signifikante Einteilung der Fließmuster in Gruppen gelungen, so wird im Rahmen einer Diskriminanzanalyse geprüft, ob sich die Gruppenzugehörigkeit der Fließmuster durch eine gewichtete Kombination der zugehörigen Anfangs-Randwerte erklären läßt. Die Gewichte heißen "standardisierte Diskriminanzkoeffizienten" und ermöglichen es, den Anteil eines einzelnen Parameters an der Erklärung der Gruppeneinteilung zu quantifizieren.
- Die auf Basis der Gruppierung ermittelte Diskriminanzfunktion ermöglicht die Prognose der zu erwartenden Klassenzugehörigkeit der Fließmuster eines neuen Transportversuchs als Funktion der zugehörigen Anfangs-Randwerte.

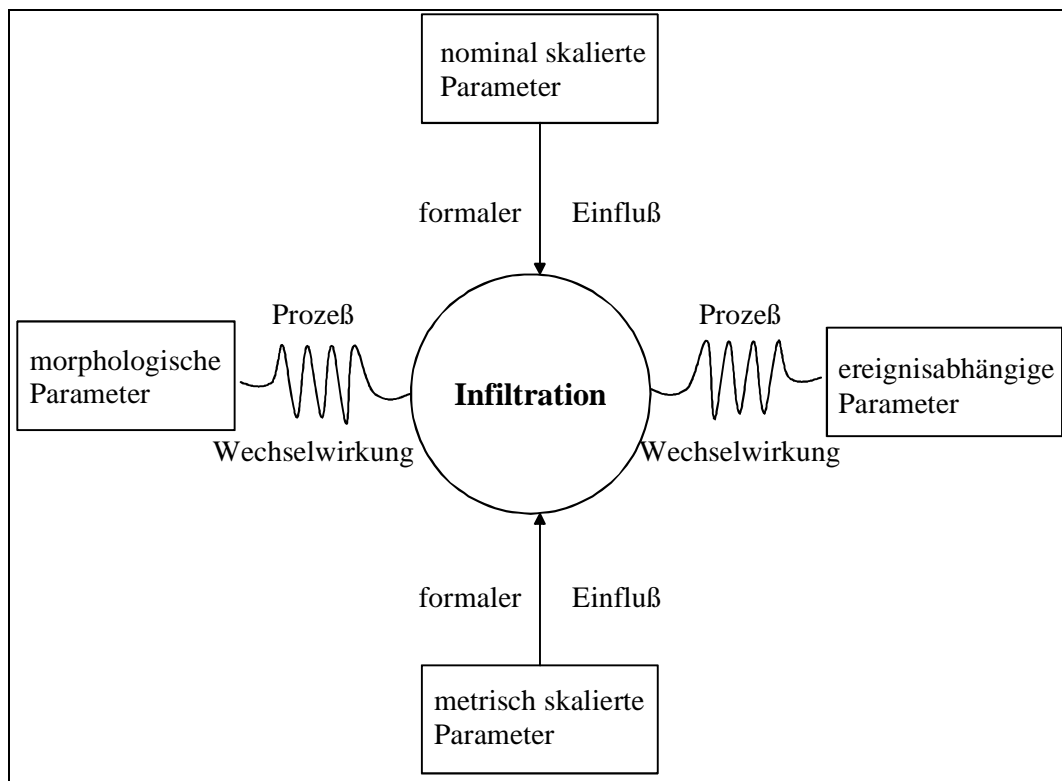


Abb. 5.1: Natürliche und formale Einflüsse auf den Infiltrationsprozeß

Als mögliche Einflußgrößen für den im Rahmen der Transportexperimente beobachteten Infiltrationsprozeß kommen die Vorfeuchte, die an der Parzelle anstehende Bodenart, das Makroporenvolumen im Boden, die Landnutzung sowie die Beregnungsintensität und Beregnungsmenge in Frage. Diskriminanzanalysen mit gemischten Variablen sind schwierig und entsprechende Methoden sind in den meisten Programmpaketen nicht enthalten. Insofern scheiden Landnutzung und Bodentyp vorerst als Parameter aus. Da nicht an allen Beregnungsstandorten eine Kartierung der Makroporen erfolgt ist, wurde deren Einfluß durch

das in Unterkapitel 4.1 vorgestellte metrische Korrelat "normierte Fließlänge²⁶" n_{fl} vertreten. Zusätzlich wurde noch die normierte Hangposition n_l berücksichtigt.

Es sei noch einmal betont, daß die Parameter, die zur Cluster- bzw. Diskriminanzanalyse verwendet wurden, nicht die gleichen sein dürfen. Zur Gruppierung dienen Parameter, die im nächsten Abschnitt anhand der Fließmuster errechnet werden. Die Klasseneinteilung "weiß" somit nichts vom Wunsch Bearbeiters nach ursächlichen Erklärung derselben durch die Anfangs-Randbedingungen. Sie spiegelt nur die Ähnlichkeit der Fließmuster, d.h. deren Abstände im Raum der Repräsentationsparameter, wider. Die Diskriminanzanalyse schätzt dann, wie in Anhang A1 erklärt, eine optimale Entscheidungsfunktion, die es ermöglicht, die Klasseneinteilung der Fließmuster anhand der unabhängigen Anfangs-Randbedingungen zu erklären.

5.2 Repräsentation der Fließmuster bei der Clusteranalyse

5.2.1 Zwei unterschiedliche Parametersätze

Der Erfolg des Verfahrens steht und fällt mit der Wahl der metrischen Repräsentationsparameter, denn diese werden an Stelle der Fließmuster im Rahmen der Clusteranalyse gruppiert. Die Repräsentationsparameter sollten folgenden Kriterien genügen:

- Sie sollten einfach zu errechnen sein und trotzdem genug Information über die wesentlichen räumlichen Strukturen – wie Fließfinger – der Fließmuster konservieren.
- Die Parameter sollten der Tatsache Rechnung tragen, daß ein physikalischer Transportprozeß zum Entstehen der Muster geführt hat.

Insbesondere das zweite Kriterium wird durch die klassischen, auf topologischen Invarianten beruhenden Mustererkennungsformalismen (Jänich, 1990) nicht erfüllt. Ein sehr wesentliches Merkmal präferentieller Fließaktivität ist die enorme kleinskalige Variabilität der vertikalen Transportdistanz²⁷. Gute Repräsentationsparameter sollten diese Variabilität statistisch erfassen. Ein Infiltrationsmuster entspricht einer 40×40-Grauwertmatrix bzw. einer 10×10-Konzentrationsmatrix in der x-z-Ebene. Betrachtet man die Verteilung der Bromidschwerpunkte \tilde{z} (Gleichung 5.1) in den 10 Spalten eines Fließmuster als zufällig, so liefern die räumlichen Momente dieser "horizontalen" Schwerpunktsverteilung die gewünschte Information über die kleinskalige Variation der vertikalen Transportdistanz (Schönwiese, 1985). Für die Grauwertmatrizen gilt natürlich das Gleiche. Abbildung 5.2 illustriert die "Transformation" vom Fließmuster zur Schwerpunktsverteilung.

²⁶ Der Korrelationskoeffizient zwischen n_{fl} und dem Makroporenvolumen beträgt -0.84.

²⁷ Diese Variabilität zeigt, daß die laterale Durchmischung wesentlich langsamer ist als der vertikale Transport.

$$\tilde{z}_j = \frac{\sum_{i=1}^N \rho_i C_{ij} \left(z_{i-1} + \frac{\Delta z}{2} \right) \Delta z^3}{\sum_{i=1}^N \rho_i C_{ij} \Delta z^3} \quad (5.1)$$

mit ρ_i = Lagerungsdichte
 \tilde{z}_j = Schwerpunkstiefe
 C_{ij} = Grauwert bzw. Bromidkonzentration in Rasterzelle i, j
 Δz = Gitterweite
 $z_i + \Delta z/2$ = Abstandsvektor der Rasterzelle zur Erdoberfläche

Der Mittelwert $\langle z_{sp} \rangle$ der Schwerpunktsverteilung mißt die durchschnittliche Verlagerungstiefe des Schwerpunkts:

$$\langle z_{sp} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \tilde{z}_j \quad (5.2)$$

Die Standardabweichung σ_{sp} mißt die kleinskalige Variabilität des Transportprozesses:

$$\sigma_{sp} = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N \left(\tilde{z}_j - \langle z_{sp} \rangle \right)^2 \quad (5.3)$$

Das dritte Zentralmoment σ_{3sp} ist ein Maß dafür, ob die Verteilung der Wahrscheinlichkeitsmasse asymmetrisch in Richtung großer oder kleiner Verlagerungstiefen ist und somit für das Vorhandensein von Fließfingern:

$$\sigma_{3sp} = \frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^N \left(\tilde{z}_j - \langle z_{sp} \rangle \right)^3 \quad (5.4)$$

Die ersten drei Momente der Schwerpunktsverteilung werden von nun an als Parameter der Schwerpunktsverteilung oder auch als Schwerpunktsparameter der Fließmuster bezeichnet.

Im Hinblick auf die Beschreibung des Stofftransports mit linearer Systemtheorie (siehe Abschnitt 2.1.2) wurde noch ein weiterer Parametersatz zur Repräsentation der Fließmuster getestet. Dazu betrachtet man das Vertikalprofil der horizontal gemittelten Bromidkonzentration (Gleichung 5.5). Aus der Lage des Schwerpunkts $\langle z_{cdf} \rangle$, der Standardabweichung σ_{cdf} und dem dritten Zentralmoment σ_{3cdf} dieses Profils lassen sich zumindest im Prinzip die entsprechenden Parameter der Transportdistanz-cdf (cumulative density function) schätzen, dies ist die über alle Transportdistanzen integrierte Transferfunktion (Jury & Roth, 1990; Jury; 1982; Jury et al. 1986a):

$$\bar{C}_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N C_{ij} \quad (5.5)$$

Die Berechnung der drei Momente erfolgt analog zu den Gleichungen (5.2 - 5.4). Die Momente der Transportdistanz-cdf werden künftig als Parameter der Transportdistanz-cdf angesprochen. Abbildung 5.2 illustriert den Übergang vom Fließmuster zum Vertikalprofil. Der Mittelwert, die Standardabweichung und das dritte Zentralmoment der Schwerpunktsverteilung bzw. Transportdistanz-cdf werden im folgenden auch als Mittelungsparameter, Variationsparameter und Schiefeparameter der jeweiligen Verteilung angesprochen.

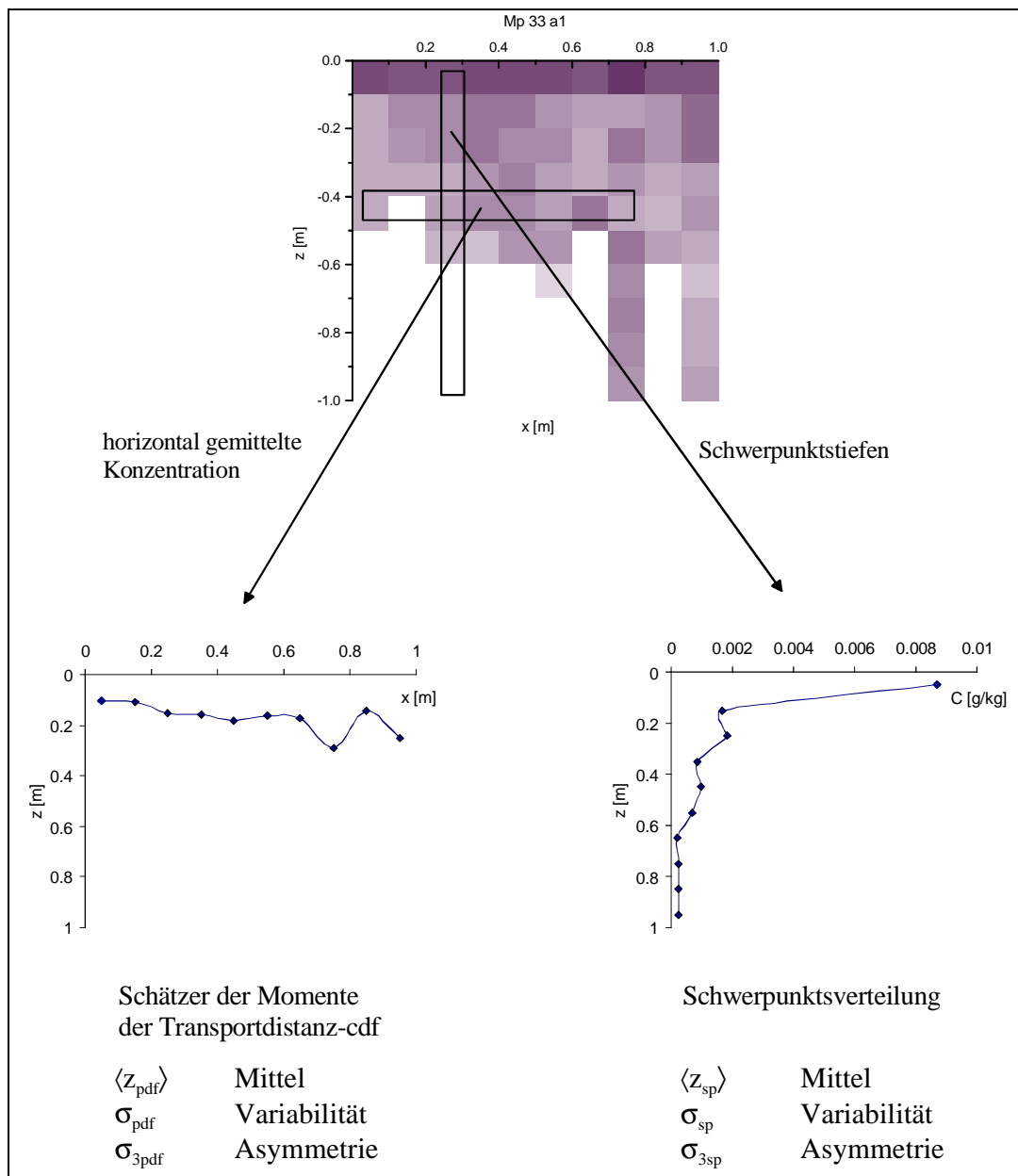


Abb. 5.2: Zwei Parametersätze zur Repräsentation der Fließmuster bei der Gruppierung

5.2.2 Grundsätzliche Unterschiede zwischen den Parametersätzen

Bevor beide Parametersätze im nächsten Abschnitt hinsichtlich ihrer Tauglichkeit zur Repräsentation der Fließmuster verglichen werden, erfolgt noch ein Blick auf Unterschiede zwischen beiden Parametersätzen:

- Die Schwerpunktsverteilung betrachtet die horizontale Verteilung der Stoffschwerpunkttiefe als Zufallsgröße. Die Standardabweichung und das dritte Zentralmoment messen somit direkt die kleinskalige Variabilität der Transportdistanz. In der Schwerpunktsverteilung im rechten Graphen der Abbildung 5.2 findet sich der Fließfinger des Infiltrationsmusters deutlich wieder.
- Die Transportdistanz-cdf betrachtet die vertikale Verteilung der horizontal gemittelten Konzentration \bar{C} als Zufallsgröße. Durch die horizontale Mittelung wird die kleinskalige laterale Variabilität der Konzentration und damit die Variabilität der Transportdistanz geglättet. Dies gilt insbesondere für isolierte Fließfinger, wie in Abbildung 5.2 angedeutet.

Abbildung 5.3 zeigt ein komplexes und ein einfaches Fließmuster von den Standorten Mp 33 und Mp 23. In Tabelle 5.1 sind die entsprechenden Parameter der Transportdistanz-cdf und der horizontalen Schwerpunktsverteilung gegenübergestellt. Die Mittelungsparameter $\langle z_x \rangle$ sind wie erwartet von vergleichbarer Größenordnung.

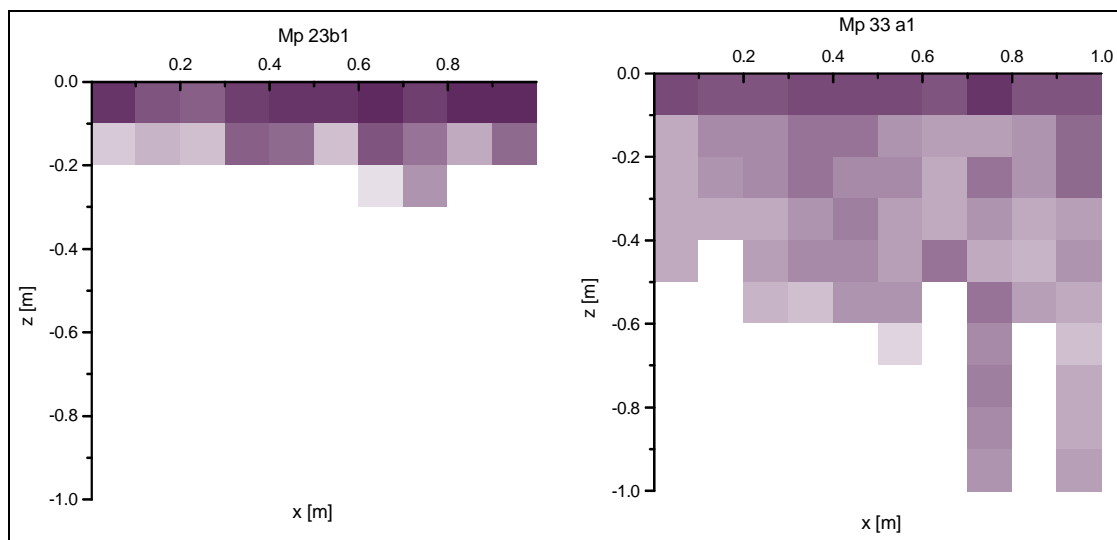


Abb. 5.3: Bromidmuster der Standorte Mp 23 und Mp 33; die zugehörigen Parameter sind in Tabelle 5.1 aufgelistet

Die relative Variabilität des Transportprozesses innerhalb des jeweiligen Profils wird durch den normierten Variationskoeffizienten $\sigma_x / \langle z_x \rangle$ und den Schiefekoeffizienten $\sigma_{3x} / (\sigma_x)^3$ der Schwerpunktsverteilung bzw. der Transportdistanz-cdf beschrieben. Anschaulich erwartet man eine Zunahme der relativen Variabilität mit zunehmender "Präferentialität" der Fließmuster. Für die Schwerpunktsparameter sind der Variationskoeffizient und die Schiefe des

präferentiellen Musters Mp 33 a1 größer als die entsprechenden Größen des Fließmusters Mp 23 b1. Die Parameter der Transportdistanz-cdf verhalten sich genau umgekehrt, bei der einfachen Infiltrationsfront Mp 23 b1 sind der Variationskoeffizient und die Schiefe größer als beim präferentiellen Fließmuster Mp 33 a1. Insofern erscheinen die Parameter der Schwerpunktsverteilung a priori besser geeignet, um bei der Clusteranalyse Unterschiede zwischen präferentiellen und nicht präferentiellen Fließmustern herauszustellen.

Tabelle 5.1: Vergleich der Repräsentationsparameter der Fließmuster Mp 33 a1 und Mp 23 b1

| | Fließmuster | $\langle z_x \rangle$ | σ_x | σ_{3x} | $\sigma_x / \langle z_x \rangle$ | $\sigma_{3x} / (\sigma_x)^3$ |
|-----------------------------------|--------------------|-----------------------|------------|---------------------|----------------------------------|---------------------------------------|
| Transport- distanz-cdf | Mp 23 b1 | 0.063 | 0.142 | 0.006 | 2.26 | 0.012 |
| | Mp 33 a1 | 0.192 | 0.079 | $7.0 \cdot 10^{-4}$ | 0.41 | $8.0 \cdot 10^{-4}$ |
| Schwerpkt.- Verteilung | Mp 23 b1 | 0.060 | 0.013 | $3.1 \cdot 10^{-6}$ | 0.21 | $1.3 \cdot 10^{-5}$ |
| | Mp 33 a1 | 0.181 | 0.061 | $1.9 \cdot 10^{-4}$ | 0.34 | $4.0 \cdot 10^{-4}$ |

5.2.3 Vergleich der Tauglichkeit der Repräsentationsparameter für die Clusteranalyse

Um herauszufinden, welcher Parametersatz die Unterschiede zwischen den Fließmustern im Rahmen der Clusteranalyse besser herausstellt, wurde die Gruppierung der Bromidmuster auf Basis beider Parametersätze verglichen. Im folgenden wird nur von der Gruppierung im entsprechenden Parameterraum gesprochen, wenn die Parameter der Schwerpunktsverteilung bzw. Transportdistanz-cdf zur Repräsentation der Fließmuster bei der Clusteranalyse verwendet wurden. Zur Beurteilung dienten der Anteil an erklärter Varianz R^2 , der Pseudo-F-Wert (siehe Anhang A1) sowie die Unabhängigkeit der Ergebnisse von der Ausgangspartition. Grundsätzlich erfolgte die Gruppierung der Fließmuster in zwei Schritten:

- Eine hierarchische Clusteranalyse mit der Ward-Methode im ersten Schritt gab Auskunft über eine statistisch begründete Zahl von Fließmustergruppen. Als Kriterium wurde die minimale Gruppenzahl gewählt, bei der der Anteil erklärter Varianz R^2 noch über 90 % lag. Die unterschiedlichen Dimensionen der Parameter, Länge für Mittelwert und Standardabweichung sowie $(\text{Länge})^3$ für das dritte Zentralmoment werden als natürliche Gewichte betrachtet. Daher wurden die Daten nicht standardisiert.
- Im zweiten Schritt wurde das Ergebnis des hierarchischen Verfahrens mittels einer partitionierenden Clusteranalyse optimiert. Um die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Ausgangspartition zu testen (siehe Anhang A1), wurden die Clustercentroide der Ausgangspartition, die sogenannten "seeds", auf vier verschiedene Arten ausgewählt:
 - Fall a:** Aus jeder Gruppe der hierarchischen Klasseneinteilung wurde jeweils ein Objekt als "seeds" für die Startpartition gewählt.
 - Fall b:** Die komplexesten Muster der Stichprobe wurden als "seeds" gewählt.
 - Fall c:** Die einfachsten Muster der Stichprobe wurden als "seeds" gewählt.

Fall d: Die "seeds" wurden zufällig gewählt.

Sämtliche Clusteranalysen erfolgten mit dem statistischen Programmpaket SAS 6.1. Eine praxisorientierte Einführung findet sich bei Nagl et al. (1992), eine vollständige Übersicht über die Möglichkeiten des Pakets bietet Gogolok et al. (1992).

In Fall a führt die Clusteranalyse in beiden Parameterräumen zur gleichen Gruppeneinteilung. Abbildung 5.4 zeigt das Ergebnis in der σ_{sp} - $\langle z_{sp} \rangle$ -Ebene im Raum der Schwerpunktparameter. Wie die Projektion der Punkte auf die entsprechenden Koordinatenachsen zeigt, sind die Gruppen hinsichtlich beider Parameter $\langle z_{sp} \rangle$ und σ_{sp} vollständig getrennt.

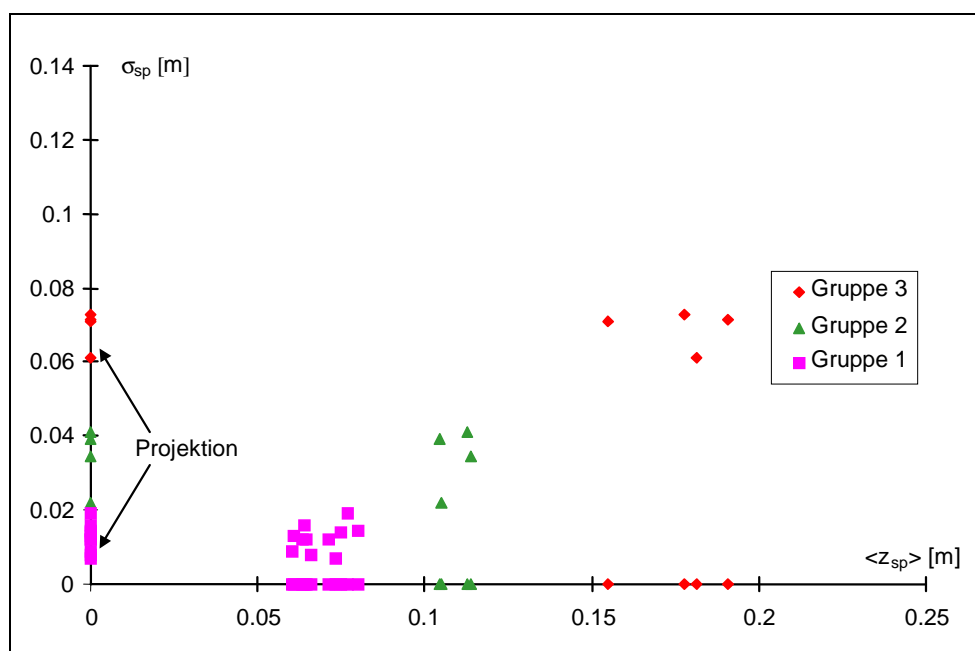


Abb. 5.4: Klasseneinteilung der Fließmuster auf Basis der Schwerpunktparameter, aufgetragen ist die Standardabweichung σ_{sp} gegen den Mittelwert $\langle z_{sp} \rangle$ der Schwerpunktsverteilung der Fließmuster

Ein Blick auf die Gütemasse in Tabelle 5.2 zeigt, daß trotz der Gleichheit der Gruppeneinteilung in Fall a die Parameter der Schwerpunktsverteilung statistisch gesehen eine signifikantere Trennung ermöglichen als die Parameter der Transportdistanz-cdf: der Anteil erklärter Varianz R^2 ist geringfügig größer, der Pseudo-F-Wert sogar deutlich größer. Ferner tritt bei der Verwendung der Schwerpunktparameter keine Abhängigkeit der Gruppierung von der Wahl der "seeds" auf, im Gegensatz dazu führt die Clusteranalyse im Raum der Parameter der Transportdistanz-cdf in allen Fällen auf verschiedene Ergebnisse unterschiedlicher Güte.

Die Parameter der Schwerpunktsverteilung erlauben somit eine signifikantere Gruppierung der Infiltrationsmuster, die keine Abhängigkeit von der Wahl des "seeds" zeigt. Unterschiede zwischen präferentiellen und nicht präferentiellen Fließmustern treten im Raum der Schwerpunktparameter besser zutage als im Parameterraum der Transportdistanz-cdf. Daher wurden

die nachfolgenden Untersuchungen auf Basis der Parameter der Schwerpunktsverteilung durchgeführt.

Tabelle 5.2 Abhängigkeit der Gruppeneinteilung von der "seed"-Auswahl zur Festlegung der Startpartition für beide Parametersätze

| Fall | R² (Schwerpunkts- verteilung) | R² (Transport- distanz-cdf) | Pseudo-F (Schwerpunkts- verteilung) | Pseudo-F (Transport- distanz-cdf) |
|-------------|---|---|--|--|
| a) | 78.4 | 76.6 | 212.2 | 83.5 |
| b) | 78.4 | 76.6 | 212.2 | 81.6 |
| c) | 78.4 | 76.6 | 212.2 | 41.6 |
| d) | 78.4 | 76.6 | 212.2 | 41.9 |

5.3 Test des Gruppierungsverfahrens an der maximalen Stichprobe

Wie bereits in Abschnitt 3.4.1 erwähnt, wurden der Berechnungsversuch am Standorten Mp 1 und der erste Versuch am Standort Mp 3 nur mit Brilliant Blau als Tracer durchgeführt. An beiden Standorten kam es zu präferentieller Fließaktivität, beide Standorte liegen nicht im Auenbereich. Insofern stehen diese Versuche nicht für den Vergleich beider Tracer im nächsten Unterkapitel zur Verfügung. Um das Gruppierungsverfahren an einer möglichst diversen Stichprobe auf seine Tauglichkeit zu prüfen, wurden es zunächst auf alle Farbmuster, die am ersten Tag nach Ende der jeweiligen Beregnung aufgenommen wurden, angewendet.

Im gegenwärtigen Kontext wird die vertikale Transportdistanz des Bromid- bzw. Grauwertschwerpunkts in den Spalten einer Bromid- bzw. Grauwertmatrix als Zufallsvariable aufgefaßt. Durch die periodische Verteilung der Beregnungsmenge entlang des Sprüharms, bedingt durch die Überlagerung der Sprühstrahlen der 6 Einzeldüsen und deren Sprühcharakteristik, wird der Niederschlagsverteilung und damit der Variabilität des Transportgeschehens streng genommen eine räumliche Anisotropie aufgeprägt. Vernachlässigt man diesen Effekt, so läßt sich unter der Annahme, daß sowohl die Makroporen als auch die Bodenfeuchte auf der Kleinskala statistisch homogen verteilt sind, die Verteilung der Transportdistanz des Tracerschwerpunkts im Boden der Versuchsfläche als räumlich homogene Zufallsvariable auffassen. Die Transportdistanzen der Tracerschwerpunkte in den Spalten beider Fließmuster einer Versuchsparzelle liefern somit die Grundlage zur Berechnung der zugehörigen Schwerpunktsparameter. Dieser Form der Auswertung entspricht anschaulich das "Zusammenkleben" beider Fließmuster einer Parzelle zu einem einzigen. Im folgenden wird daher von der den Parametern der Verteilung der Transportdistanz der Schwerpunkts innerhalb der Parzelle und oder

kurz von den Schwerpunktparametern des aggregierten Fließmusters einer Parzelle gesprochen.

Wie in allen Fällen, wurde auch im Rahmen der Gruppierung aller Fließmuster die in Abschnitt 5.2.3 vorgestellte Kombination aus hierarchischer und partitionierender Clusteranalyse angewendet. Der dort beschriebene Test auf Abhängigkeit der Ergebnisse von der Startpartition wurde ebenfalls durchgeführt.

5.3.1 Ergebnis der Farbmustergruppierung

Fließmuster, die sich durch eine hohe Variabilität der vertikalen Transportdistanz auszeichnen, werden im vorliegenden Kontext auch als komplex oder stark strukturiert bezeichnet. Abbildung 5.5 zeigt als Ergebnis der Clusteranalyse die Aufteilung aller aggregierten Farbmuster in drei Gruppen. Gruppe 1 enthält die 8 einfachsten aggregierten Fließmuster, die zwar teilweise kleine Fließfinger aufweisen sich aber noch am ehesten als klassische Infiltrationsfronten bezeichnen ließen. Die aggregierten Fließmuster der Gruppe 2 von den eingangs erwähnten Standorten Mp 1 und Mp 3 sind komplexer mit ausgeprägteren präferentiellen Strukturen und einer größeren mittleren Schwerpunktstiefe $\langle z \rangle$. Die aggregierten Fließmuster der Gruppe 3, sie stammen von den beiden Auenstandorten Mp 33 und Mp 97, sind sehr stark strukturiert mit maximalen Transportdistanzen bis zu 1 m.

5.3.2 Der Gruppencentroid als Repräsentant eines Fließmustertypus

In Abbildung 5.6 ist die Gruppierung der aggregierten Fließmuster mit den entsprechenden Gruppencentroiden in der $\langle z \rangle$ - σ -Ebene bzw. der $\langle z \rangle$ - σ_3 -Ebene dargestellt. Die Gruppen sind bezüglich der mittleren Schwerpunktstiefe $\langle z \rangle$ und der Standardabweichung σ etwas besser getrennt als bezüglich des Schiefeparameters σ_3 . Die mittlere Schwerpunktstiefe $\langle z \rangle$ eines aggregierten Fließmuster ist somit eindeutig der Parameter mit dem meisten Einfluß auf die Trennung der Gruppen.

Die in den Graphen der Abbildung 5.6 markierten Gruppencentroide repräsentieren das mittlere Infiltrationsgeschehen in der jeweiligen Gruppe und stellen abstrakte Infiltrationstypen dar. Das heißt, sie beschreiben den charakteristischen Infiltrationsverlauf in der jeweiligen Gruppe, jedoch nicht als konkretes aggregiertes Fließmuster, sondern in statistischer Form mittels der gemittelten Schwerpunktparameter; zu dieser Statistik passen unterschiedliche Fließmuster als konkrete Realisierung.

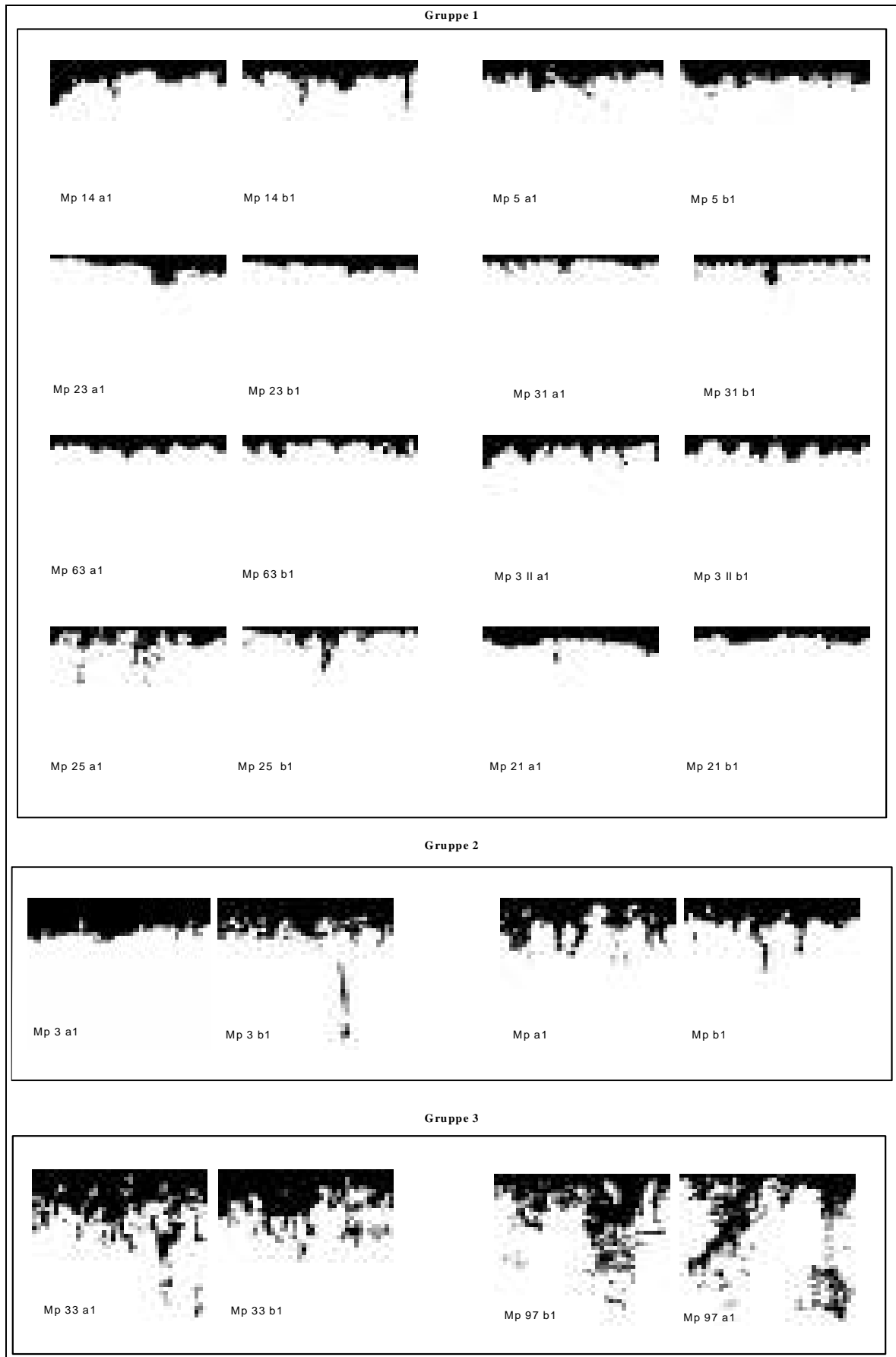


Abb. 5.5: Aufteilung der aggregierten Farbmuster in 3 Gruppen, die jeweils zwei Fließmuster eines Standorts werden wie ein einzelnes behandelt

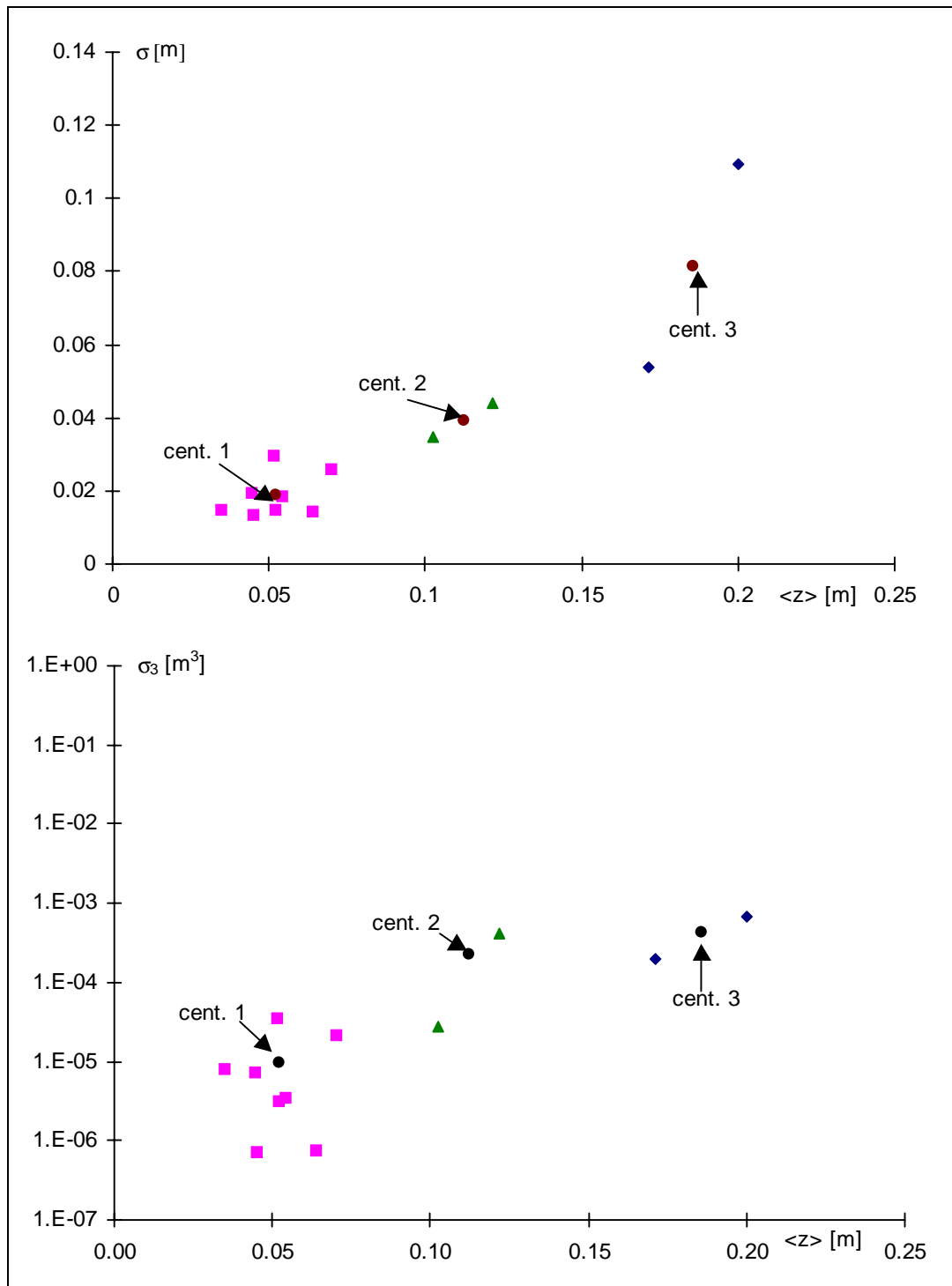


Abb. 5.6: Gruppeneinteilung der aggregierten Farbmuster in der $\langle z \rangle$ - σ -Ebene und der $\langle z \rangle$ - σ_3 -Ebene

Die Variationskoeffizienten der Schwerpunktparameter innerhalb der jeweiligen Gruppe liefern zusätzlich ein Maß für deren Homogenität bezüglich der einzelnen Parameter. Tabelle 5.3 zeigt die Gruppencentroide und die Variationskoeffizienten der Schwerpunktparameter innerhalb der Gruppen sowie die Mittelwerte und Variationskoeffizienten der Schwerpunktparameter bezogen auf die gesamte Stichprobe.

Tabelle 5.3: Mittelwerte und Variationskoeffizienten der Parameter $\langle z \rangle$, σ und σ_3 innerhalb der Gruppen und der ganzen Stichprobe

| Gruppe | Mittelungsparameter | | Variationsparameter | | Schiefeparameter | |
|------------|---------------------|-----------------------|---------------------|-----------------------|----------------------|-----------------------|
| | Centroid | Variationskoeffizient | Centroid | Variationskoeffizient | Centroid | Variationskoeffizient |
| 1 | 0.052 | 0.215 | 0.019 | 0.313 | $9.96 \cdot 10^{-6}$ | 1.207 |
| 2 | 0.112 | 0.120 | 0.040 | 0.167 | $2.24 \cdot 10^{-4}$ | 1.241 |
| 3 | 0.186 | 0.110 | 0.081 | 0.483 | $4.36 \cdot 10^{-4}$ | 0.645 |
| Stichprobe | 0.084 | 0.639 | 0.033 | 0.832 | $1.17 \cdot 10^{-4}$ | 1.849 |

Generell ist die Variabilität der Schwerpunktparameter innerhalb der Gruppen deutlich geringer als in der gesamten Stichprobe, dies gilt vorallem für die mittlere Schwerpunkstiefe $\langle z \rangle$. Im Hinblick auf die Wirksamkeit der Infiltrationstypen beim Stofftransport ergibt sich folgende Bewertung:

- Gruppe 1 besteht aus unkritischen aggregierten Fließmustern, es findet kein Durchbruch durch die Pflugsohle in den Unterboden.
- Gruppe 2 enthält kritische aggregierte Fließmuster mit Transport durch die Pflugsohle in den Unterboden.
- In Gruppe 3 enthält sehr kritische aggregierte Fließmuster. Die Pflugsohle wird auf breiter Front durchbrochen und die maximale Transportdistanz des Tracers ist größer als 0.9 m.

Die aggregierten Fließmuster in Gruppe 2 stammen von den eingangs erwähnten Standorten Mp 3, gelegen an einem Hangfuß im Kolluvium, und Mp 1, gelegen in einer Pararendzina auf der Grenze des Einzugsgebiets. Aufgrund der schon mehrmals erwähnten geordneten räumlichen Verteilung der Makroporosität war die Zahl und die Tiefe der Makroporen in Parzelle Mp 1 vermutlich deutlich geringer als am Standort Mp 3²⁸. Trotzdem verhalten sich die beiden Standorte bei der Infiltration ähnlich. Der Standort Mp 1 wies mit ca. 34 % eine deutlich höhere Vorfeuchte auf als der Standort Mp 3 mit 23 %. Steuert die Vorfeuchte somit den Übergang ins präferentielle Fließregime? Das wäre mit Sicherheit zu einfach, aber gewiß spielt sie eine wichtige Rolle bei diesem Prozeß. Jedenfalls machen die Fließmuster der Gruppe 2 deutlich, daß die Morphologie immer nur einen Teil der Infiltrationsvariabilität erklären kann.

²⁸ Das Makroporenvolumen für den Standort Mp 3 findet sich in Tabelle 4.1 in Unterkapitel 4.1.

5.4 Konservativer Tracer oder Farbtracer – das ist hier die Frage

Welcher Tracer liefert die verlässlichere Information über den kleinskaligen Infiltrationsprozeß und damit die bessere Basis für eine Ausweisung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens? Sicher wird Brilliant Blau nicht die Rolle des Bromids bei Bilanzierung des Transportgeschehens einnehmen können, darauf zielt die Frage auch nicht ab. Es geht darum, ob die Farbmusterdaten für die Einteilung des kleinskaligen Infiltrationsgeschehens in Fließmusterarten ähnlich gute Ergebnisse liefern wie die Bromiddaten. In diesem Fall könnten der Aufwand und die Kosten von Felduntersuchungen erheblich gesenkt werden. Zum Vergleich beider Tracer wurden

- im ersten Schritt sowohl die aggregierten Bromid- als auch die Farbmuster mit der Kombination aus hierarchischer und partitionierender Clusteranalyse in Klassen eingeteilt,
- im zweiten Schritt die daraus resultierenden Fließmustertypisierungen mit Hilfe der Diskriminanzanalyse verglichen.

5.4.1 Standorteinteilung in Gruppen ähnlichen Infiltrationsverhaltens

Im folgenden werden die Schwerpunktparameter der Bromid- bzw. Farbmuster durch die Indizes Br bzw. BB unterschieden. Die Graphen der Abbildung 5.7 zeigen die jeweilige Einteilung der aggregierten Bromid- und der aggregierten Farbmuster im Raum der Schwerpunktparameter. Die minimale Gruppenanzahl mit einem R^2 größer als 0.9 beträgt für die aggregierten Bromidmuster $g = 3$ mit $R^2 = 0.98$, für die Farbmuster $g = 2$ mit $R^2 = 0.91$.

Rein optisch fällt für die aggregierten Farbmuster die Trennung der Gruppen hinsichtlich sämtlicher Schwerpunktparameter etwas besser aus. Gruppe 3 der Bromid- und Gruppe 2 der Farbmuster enthalten die stark strukturierten aggregierten Fließmuster der Auenstandorte Mp 33 und Mp 97. Der wesentliche Unterschied zwischen beiden Klasseneinteilungen liegt in der Existenz einer weiteren Gruppe kritischer aggregierter Bromidmuster der Standorte Mp 14 und Mp 25, die bei der Clusteranalyse der aggregierten Farbmuster nicht auftritt. Die Bromidmuster der Gruppe 2 sind in ihrem Grad an Komplexität zwischen den sehr kritischen Bromidmustern der Gruppe 3 und den einfachen Bromidmustern der Gruppe 1 einzuordnen.

Tabelle 5.4 stellt die Gruppencentroide beider Gruppierungen gegenüber. Die Centroide der Gruppen 1 bzw. der Gruppe 2 und Gruppe 3 der aggregierten Farb- und Bromidmuster sind in beiden Fällen von gleicher Größenordnung. Die Standardabweichung und die Schiefe der aggregierten Farbmuster sind ein wenig größer, das rührt jedoch von der besseren Auflösung der Farbmuster her. Insofern liefern beide Tracer für alle Versuchsstandorte mit Ausnahme von Mp 14 und Mp 25 eine sehr ähnliche Einteilung in Gruppen ähnlichen Infiltrationsverhaltens.

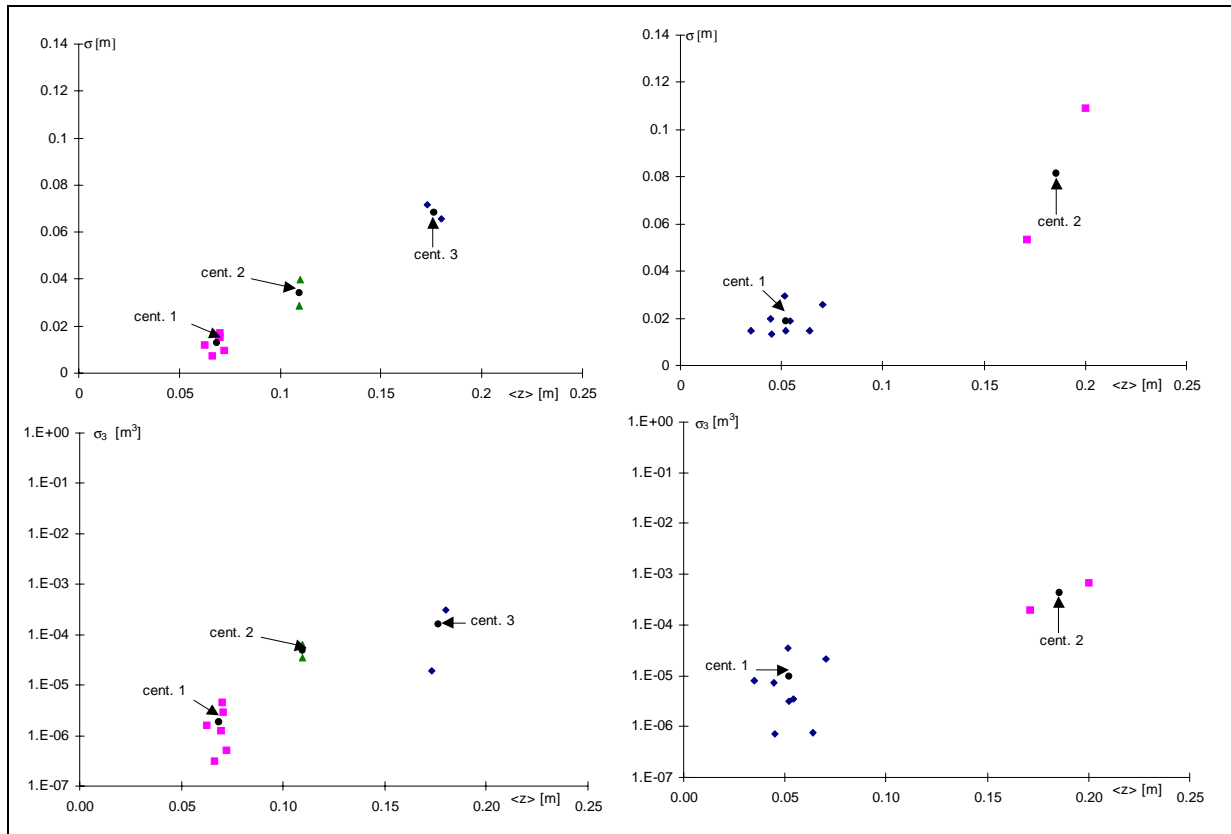


Abb. 5.7: Gruppierung der aggregierten Bromidmuster (linke Graphen) sowie der aggregierten Farbmuster (rechte Graphen) im Raum der Schwerpunktparameter

Tabelle 5.4: Inner-Gruppen-Mittelwerte und Gesamtmittelwerte der Parameter für beide Gruppierungen

| | Gruppe oder Fließ- mustertypus | Mittelwert von <z> | Mittelwert von σ | Mittelwert von σ_3 |
|-----------------------|-----------------------------------|-----------------------|----------------------------|------------------------------|
| Brilliant Blau | 1 | 0.052 | 0.019 | $1.0 \cdot 10^{-5}$ |
| | 2 | 0.186 | 0.081 | $4.4 \cdot 10^{-4}$ |
| Bromid | 1 | 0.068 | 0.013 | $1.9 \cdot 10^{-6}$ |
| | 2 | 0.110 | 0.034 | $5.0 \cdot 10^{-5}$ |
| | 3 | 0.176 | 0.069 | $1.6 \cdot 10^{-4}$ |

5.4.2 Identifikation von Einflußgrößen mit Hilfe der Diskriminanzanalyse

Ein gutes Maß für die weitere Beurteilung der Güte der beiden Standorteinteilungen in Gruppen ähnlichen Infiltrationsverhaltens ist die Erklärbarkeit der jeweiligen Einteilung durch die zugehörigen Anfangs-Randwerte der Transportversuche im Rahmen einer klassischen, linearen Diskriminanzanalyse. Der am Standort beobachtete Infiltrationsprozeß wird dazu durch die jeweilige Gruppenzugehörigkeit k des aggregierten Fließmusters sowie durch folgenden Eigenschaftsvektor repräsentiert, wobei Id die Standortkennung darstellt:

$$(Id, k, nfl, nl, \theta, CI, I)$$

$k \in \{1, 2, 3\}$ für die Bromidmuster
 $k \in \{1, 2\}$ für die Farbmuster

Die Klassenzugehörigkeit k der Standorte stellt die abhängige Größe dar, deren Variation durch eine Kombination der unabhängigen Eigenschaften erklärt werden soll. Dazu stehen die Vorfeuchte θ , die Beregnungsintensität I , die Kumulative Beregnungsmenge CI , sowie die normierte Hangposition nl und die normierte Fließlänge nfl zur Verfügung. Diese fünf Eigenschaften werden im folgenden auch als die Anfangs-Randwerte der zugehörigen Transportversuche angesprochen, die entsprechenden Werte finden sich in Anhang A4.

Wie in den ergänzenden Grundlagen in Anhang A1 skizziert wird, führt das Trennkriterium bei der linearen Diskriminanzanalyse auf eine Eigenwertgleichung für die Matrix $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$, \mathbf{W} ist die Inner-Gruppen-Streumatrix und \mathbf{B} die Zwischen-Gruppen-Streumatrix. Der Rang der Matrix $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$ ergibt sich als $q = \min(g-1, p)$, wobei g die Zahl der Gruppen und p die Zahl der unabhängigen Eigenschaften ist (Fahrmeir, 1984). Die Zahl der Eigenwerte λ_i und damit der Diskriminanzfunktionen ist daher auf q beschränkt. Tabelle 5.5 zeigt verschiedene Gütemaße für die Diskriminanzanalyse beider Standorteinteilungen. Das Wilkssche Λ ist eine multivariate Größe zur Prüfung, ob die Mittelwerte der Diskriminanzwerte $\langle y_i \rangle$ der einzelnen Gruppen gleich sind:

$$H_0: \langle y_1 \rangle = \langle y_2 \rangle = \dots = \langle y_g \rangle \text{ gegen } H_1: \langle y_i \rangle \neq \langle y_j \rangle \text{ für mindestens ein Paar } i \neq j$$

Je kleiner Λ (es liegt stets zwischen 0 und 1) bei fester Anzahl der Freiheitsgrade ausfällt, desto geringer ist die Wahrscheinlichkeit α für die Richtigkeit von H_0 und um so besser ist die Gruppierung. Aus den Eigenwerten λ_i der jeweiligen Diskriminanzfunktion y_i läßt sich der zugehörige kanonische Korrelationskoeffizient CR errechnen (siehe Anhang A1). Das Quadrat dieses kanonischen Korrelationskoeffizienten entspricht dem Bestimmtheitsmaß R^2 bei einer multiplen Regression (Schuchard-Fischer, 1980) und mißt den Anteil der Streuung der errechneten Diskriminanzwerte, der sich anhand des Gruppenindex k erklären läßt.

Tabelle 5.5 zeigt für die Diskriminanzanalyse beider Standorteinteilungen das Wilkssche Λ , die Eigenwerte der Diskriminanzfunktionen und deren relative Anteile rea_i (siehe Gleichung 5.6), die Wahrscheinlichkeit $1 - \alpha$ für die Richtigkeit der Hypothese H_1 , die quadrierten kanonischen Korrelationskoeffizienten CR^2 sowie die Anzahl der Freiheitsgrade DF für den oben beschriebenen χ^2 -Test. Das Signifikanzniveau der Standorteinteilung auf Basis der aggregierten Farbmuster ist mit 89% geringfügig größer als bei der Nutzung der aggregierten Bromidmuster. Trotz der recht geringen Werte für das Wilkssche Λ ist das Signifikanzniveau in beiden Fällen etwas unbefriedigend, dies liegt vor allem am geringen Stichprobenumfang (siehe Anhang A1) von $N = 10$ Standorten. Die quadrierten kanonischen Korrelationskoeffizienten CR^2 zeigen, daß in beiden Fällen ein Großteil der Streuung der errechneten Diskriminanzwerte durch die Gruppenzugehörigkeit der Standorte erklärt werden kann, im Falle der Bromidmuster erklärt die erste Diskriminanzfunktion bereits mehr als 90% der Streuung der Diskriminanzwerte.

Tabelle 5.5: Gütekriterien der Diskriminanzanalyse beider Standorteinteilungen: Wilksches Lambda Λ , Eigenwerte der Diskriminanzfunktionen λ_i , deren relativer Eigenwertanteil rea_i , Quadrat des kanonischen Korrelationskoeffizienten CR^2 , Anzahl der Freiheitsgrade DF und das Signifikanzniveau $1 - \alpha$

| Diskriminanzfunktion | Λ_{ges} | λ_i | rea_i | CR^2 | DF | $1 - \alpha$ |
|-----------------------------|-----------------------------------|-------------------------------|---------------------------|--------------------------|-----------|--------------------------------|
| Bromid 1 | 0.04 | 14.60 | 0.81 | 0.94 | 10 | 0.84 |
| Bromid 2 | | 0.47 | 0.19 | 0.32 | - | - |
| Brill. Blau | 0.17 | 4.98 | 1.00 | 0.84 | 5 | 0.89 |

Von besonderem Interesse ist der relative Einfluß rpg einzelner unabhängiger Eigenschaften auf die Streuung der Diskriminanzwerte, auch Trennschärfe oder Diskriminanzstärke der Eigenschaft genannt. Dieser Anteil errechnet sich mit Hilfe der standardisierten Diskriminanzkoeffizienten (Anhang A1) wie folgt. Für eine Diskriminanzfunktion y_n ergibt sich die relative Diskriminanzstärke rka_{ni} einer Eigenschaft x_i aus dem relativen Anteil ihres standardisierten Diskriminanzkoeffizienten an deren Gesamtsumme (Gleichung 5.6). Die gesamte relative Diskriminanzstärke einer Eigenschaft erhält man durch Gewichtung der rka_{ni} mit dem relativen Eigenwertanteil rea_n der Diskriminanzfunktion y_n und Summation über alle n :

$$rpg_i = \sum_n rea_n rka_{ni}$$

$$rea_n = \frac{\lambda_n}{\sum_{i=1}^r \lambda_i}, \quad rka_{ni} = \frac{|\tilde{a}_{ni}|}{\sum_{j=1}^p |\tilde{a}_{nj}|}, \quad \forall n = 1, \dots, r. \quad (5.6)$$

mit λ_n = Eigenwert der Diskriminanzfunktion y_n
 \tilde{a}_{ni} = standardisierter Diskriminanzkoeffizient des Parameters x_i in der Diskriminanzfunktion y_n

Tabelle 5.6 stellt die relativen Diskriminanzstärken, die den unterschiedlichen Größen bei der jeweiligen Standorteinteilung zukommen, gegenüber. Für beide Standorteinteilungen bewirken die normierte Fließlänge nfl und die normierte Hangposition nl , als Korrelat für die Makroporosität und den Bodentypen am Standort, zusammengenommen ca. 58% der Streuung der Diskriminanzwerte. Die Morphologie induziert somit fast 60% der beobachteten Variabilität. Das Gewicht der Vorfeuchte ist in beiden Fällen mit ca. 21% gleich, die restlichen 19% der Variabilität wird durch die beiden "Berechnungsparameter" CI und I erklärt.

Tabelle 5.6: Relativer Gesamtanteil rpg_{Br} bzw. rpg_{BB} der Variablen an der Erklärung der Streuung der Diskriminanzwerte auf Basis der Bromid- und der Farbmuster

| Parameter | nfl | nl | θ | CI | I |
|------------|-------|-------|----------|-------|-------|
| rpg_{Br} | 0.462 | 0.125 | 0.212 | 0.096 | 0.105 |
| rpg_{BB} | 0.418 | 0.192 | 0.212 | 0.175 | 0.003 |

Die Diskriminanzanalyse der beiden Standorteinteilungen in Gruppen ähnlichen Infiltrationsverhaltens führt im wesentlichen auf die gleichen Schlüsselgrößen. Durch die gute Erklärbarkeit der Streuung der Diskriminanzwerte von 84% bzw. 94% durch die Gruppenzugehörigkeit der aggregierten Farb- bzw. Bromidmuster sind im Umkehrschluß folgende, sehr plausible Aussagen begründet:

- Die Standorteinteilung läßt sich zum größten Teil durch die morphologischen Parameter nfl und nl erklären, dabei hat die normierte Fließlänge als Korrelat für die Makroporosität bei weitem das größte Gewicht.
- Wie erwartet spielt auch die Vorfeuchte eine große Rolle. Die Vorfeuchte und die morphologischen Parameter erklären zusammengenommen über 80 % der Streuung der Diskriminanzwerte, somit 65 bis 70% des Gruppenindex und damit der großskaligen Infiltrationsvariabilität.

5.4.3 Prognose des Fließmustertypus auf empirischer Basis

Die Diskriminanzfunktionen in Gleichung 5.7 bilden die Grundlage für die Prognose des zu erwartenden Fließmustertypus für ein Berechnungsexperiment an einem neuen Standort als Funktion der zugehörigen Anfangs-Randwerte (siehe Anhang A1). Aus den unterschiedlichen Standorteinteilungen auf Basis der aggregierten Bromid- bzw. Farbmuster resultieren natürlich auch unterschiedlichen Diskriminanzfunktionen, dargestellt in Gleichung (5.7).

$$\begin{aligned}
 \text{Bromid} \quad & \begin{cases} y_{1Br} = 8.45 \cdot nfl + 1.19 \cdot nl - 0.33 \cdot \theta + 0.32 \cdot I + 0.62 \cdot CI \\ y_{2Br} = 0.18 \cdot nfl + 1.27 \cdot nl - 0.29 \cdot \theta + 1.39 \cdot I - 0.60 \cdot CI \end{cases} \\
 \text{Brilliant} & \\
 \text{Blau} & \quad \begin{cases} y_{1BB} = 5.56 \cdot nfl + 2.64 \cdot nl - 0.25 \cdot \theta + 1.53 \cdot I - 0.01 \cdot CI \end{cases}
 \end{aligned}
 \tag{5.7}$$

Der Klassifikationstest nach der leaving-out-one-Methode zur Prüfung der Prognosegüte beider Diskriminanzmodelle liefert auch bei kleinen Stichproben eine robuste Schätzung der bei der Prognose zu erwartenden Fehlerrate (siehe Anhang A1). In den Tabellen 5.7 und 5.8 sind die Ergebnisse des Klassifikationstests für beide Standorteinteilung dargestellt. Die Gruppenzugehörigkeit der 6 aggregierten Bromidmuster aus Gruppe 1 wird für jeden Standort richtig prognostiziert. Für den Standort Mp 25 aus Gruppe 2 wird fälschlicherweise der Infiltrationstypus 1 vorhergesagt. Da nur 2 Standorte zur Gruppe 2 gehören, entspricht das einer bedingten Fehlerrate von $\phi = 50\%$. Der zu erwartende Fließmustertypus an den Standorten der Gruppe 3 wird wiederum richtig getroffen.

Tabelle 5.7: Ergebnis des Klassifikationstests auf Basis Standorteinteilung der aggregierten Bromidmuster

| von Gruppe | klassifiziert in Gruppe | | | ϕ |
|------------|-------------------------|---|---|--------|
| | 1 | 2 | 3 | |
| 1 | 6 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 1 | 1 | 0 | 0.5 |
| 3 | 0 | 0 | 2 | 0 |

Beim Prognosetest des zu erwartenden Fließmustertypus auf Basis der aggregierten Farbmuster kommt es zu keiner Fehlklassifikation.

Tabelle 5.8: Ergebnis des Klassifikationstests auf Basis Standorteinteilung der aggregierten Bromidmuster

| von Gruppe | klassifiziert in Gruppe | | ϕ |
|------------|-------------------------|---|--------|
| | 1 | 2 | |
| 1 | 6 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 2 | 0 |

Mit Hilfe der sogenannten a-priori-Wahrscheinlichkeiten p_i (Anhang A1) für die Zugehörigkeit eines aggregierten Fließmusters zu einer bestimmten Fließmustergruppe i , läßt sich die geschätzte zu erwartende Gesamtfehlerrate ε wie folgt aus den bedingten Fehlerraten ϕ_i errechnen:

$$\varepsilon = \sum_i p_i \phi_i \quad (5.8)$$

Für die Standorteinteilung der aggregierten Bromidmuster in 3 Gruppen gilt $p_i = 1/3$. Tabelle 5.9 zeigt die geschätzte, bei der Prognose des Fließmustertypus zu erwartende Gesamtfehlerrate für beide Standorteinteilungen sowie die zu erwartende Fehlerrate, die sich bei rein zufälliger Einordnung der Fließmuster in die $g = 2$ bzw. $g = 3$ Gruppen ergibt.

Tabelle 5.9: Zu erwartende Gesamtfehlerraten bei der Prognose des Fließmustertypus auf Basis der aggregierten Farb- und Bromidmuster sowie bei rein zufälliger Klassifikation

| Klassifikationsbasis | g | Dk-funktion ε [%] | zufällig ε [%] |
|----------------------|---|----------------------|-------------------|
| aggr. Bromidmuster | 3 | 16.6 | 66.6 |
| aggr. Farbmuster | 2 | 0.0 | 50.0 |

Sowohl für die aggregierten Farb- als auch für die Bromidmuster ist die Prognose des am Standort zu erwartenden Fließmustertypus auf Basis der jeweiligen Diskriminanzfunktion deutlich besser als bei einer rein zufälligen Zuordnung der Fließmuster zu den Gruppen. In Anbetracht des geringen Stichprobenumfangs und der in Abschnitt 3.6.4 angesprochenen systematischen Fehlers, der beim Übersetzen der Farbmuster in Grauwertmatrizen auftritt, sollte die geringfügig bessere Prognosegüte des Diskriminanzmodells auf Basis der aggregierten Farbmuster nicht zu hoch gewichtet werden. Die Prognosegüte beider Diskriminanzfunktionen ist im wesentlichen gleich.

5.5 Ausgliedern von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens: Bewertung und Ausblick

5.5.1 Vorstellen des Konzepts

Die vorgestellte Kombination aus einem einfachen Mustererkennungsformalismus und den multivariaten statistischen Analyseverfahren Cluster- und Diskriminanzanalyse ermöglichen es, die bildhafte Information von Fließmustern über die kleinskalige Variabilität der Infiltration zu quantifizieren und für die Ausweisung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens zu Nutzen. An dieser Stelle sei die Vorgehensweise noch einmal zusammengefaßt:

- Die beobachtete Variabilität der vertikalen Transportdistanz an einem Standort wird durch die ersten drei Momente der Schwerpunktsverteilung der aggregierten Fließmuster quantifiziert. Die Ähnlichkeit zwischen aggregierten Fließmustern und damit zwischen dem an

verschiedenen Standorten beobachteten Infiltrationsprozeß läßt sich so über den Abstand der aggregierten Fließmuster im entsprechenden Parameterraum definieren.

- Durch eine Kombination aus hierarchischer und partitionierender Clusteranalyse lassen sich ähnliche Fließmuster in Gruppen zusammenfassen. Die Anzahl der Gruppen und die Güte der Einteilung wird dabei a priori mit Hilfe des Bestimmtheitsmaßes R^2 festgelegt. Es resultiert eine Einteilung der Standorte in Gruppen ähnlichen Infiltrationsverhaltens.
- Die Schwerpunktparameter des Centroiden repräsentieren das mittlere Infiltrationsgeschehen und damit den typischen Infiltrationsverlauf in einer Gruppe und können zur Bewertung des jeweiligen Infiltrationstypus herangezogen werden. Die Variationskoeffizienten der Schwerpunktparameter innerhalb der Gruppen liefern zusätzlich ein Maß für die Homogenität der Gruppen.
- Mit Hilfe der klassischen Diskriminanzanalyse läßt sich untersuchen, ob sich diese rein phänomenologische Standorteinteilung in Gruppen ähnlichen Infiltrationsverhaltens durch die unabhängigen Anfangs-Randwerte erklären läßt. Dabei werden die wesentlichen Einflußgrößen herausgestellt.
- Weiterhin bildet die Diskriminanzfunktion die Basis für eine Vorhersage des charakteristischen Infiltrationsverlaufs auf der Kleinskala. Sie prognostiziert für ein neues Transportexperiment die Gruppenzugehörigkeit des zu erwartenden Infiltrationsverlaufs als Funktion der zugehörigen Anfangs-Randwerte. Anhand der Schwerpunktparameter des Centroiden der vorhergesagten Gruppe läßt sich die zu erwartende kleinräumige Statistik der vertikalen Transportdistanz der Tracerschwerpunkte abschätzen. Die Variationskoeffizienten – als Maß für die Homogenität der Gruppen – liefern zusätzlich ein Maß für die Schärfe dieser Vorhersage.

Das vorgestellte Verfahren bietet zumindest prinzipiell die Möglichkeit, auf Basis einer Stichprobe räumlich verteilter kleinskaliger Transportexperimente ein dynamisches "upscaling" durchzuführen, d.h. die großskalige Verteilung verschiedener Infiltrationstypen als Funktion morphologischer Randbedingungen **und** ereignisabhängiger Parameter zu berechnen und einen Hang so in Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens einzuteilen. Vorhergesagt wird nur die zu erwartende räumliche Statistik des kleinskaligen Infiltrationsgeschehens in Form der Schwerpunktparameter, zu dieser makroskopischen Information können eine Fülle von Fließmustern als konkrete Realisierung passen. Voraussetzung für eine erfolgreiche Anwendung des Verfahrens ist allerdings eine repräsentative Stichprobe von Fließmustern.

Die Anwendung des oben beschriebenen Verfahrens auf die Bromid- und Farbtracerdaten liefert, mit Ausnahme für die Standorte Mp 25 und Mp 14, die gleiche Einteilung der Versuchsstandorte in Gruppen mit unkritischem und sehr kritischem Infiltrationsverlauf. Die Centroide der entsprechenden Gruppen, die Gruppen 1 sowie die Gruppe 2 der aggregierten Farb- und die Gruppe 3 der aggregierten Bromidmuster, stimmen auffallend gut überein. Eine Diskriminanzanalyse beider Standorteinteilungen zeigt, beide Einteilungen sind ähnlich signifikant und bei beiden Standorteinteilungen treten die gleichen Schlüsselgrößen mit fast glei-

chen Gewichten zu Tage. Auch die Prognosegüte beider Diskriminanzmodelle ist im wesentlichen gleich. Insofern sind beide Tracer im wesentlichen gleich gut geeignet, Daten für das oben beschriebene Verfahren zur Ausweisung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens zu liefern.

5.5.2 Methodische Kritik

Zur Durchführung des oben beschriebenen Verfahrens ist nur kommerzielle, leicht erhältliche Software notwendig. Die Berechnung der Schwerpunktparameter der aggregierten Fließmuster ist einfach und kann notfalls sogar mit Tabellenkalkulationsprogrammen wie *MS-EXCEL* ohne Programmierkenntnisse durchgeführt werden. Cluster- und Diskriminanzanalysen sind Standardverfahren, die in jedem statistischen Programmpaket wie *SAS*, *SPSS*, *WINSTAT* oder *SIGMASTAT* implementiert sind. Trotzdem hat das Verfahren neuralgische Punkte, die über Güte der erzielten Ergebnisse entscheiden:

- Die optische Aufbereitung der Farbmusterdias und die Übersetzung in gefärbte Flächenanteile ist entscheidend für die Güte der Datenbasis. Das in Abschnitt 3.6.4 vorgestellte Schwellenwertverfahren und die nachfolgende Übersetzung in Grauwerte ist zwar schnell, führt jedoch zur systematischen Überschätzung der Grauwerte im unteren Bildbereich. Wesentlich erfolgversprechender erscheinen Methoden der modernen Bildanalyse, wie sie am Institut für Terrestrische Ökologie der ETH Zürich angewendet werden, um die spektrale Information der Farbmuster in eine echte Konzentration zu übersetzen (Flühler, mündliche Mitteilung, 1998). Durch eine verbesserte Aufbereitung ließe sich die erwiesene Tauglichkeit von Farbtracerdaten für die Ausweisung von Flächen ähnlicher Infiltrationsneigung erheblich steigern.
- Die zweite Schwachstelle ist die Wahl der richtigen Parameter zur Repräsentation der Fließmuster bei der Clusteranalyse. Die Parameter sollten einfach sein, aber trotzdem die wesentlichen Strukturen der Fließmuster "konservieren". Was dabei wesentliche Strukturen sind, hängt vom Betrachter ab.

5.5.3 Konzeptionelle Kritik

Eine wesentliche konzeptionelle Schwäche des vorgestellten Verfahrens ist allen empirischen Ansätzen gemein. Der experimentelle Aufwand, um eine wirklich repräsentative Trainingsstichprobe an Fließmustern zusammenzutragen, ist immens. Die Güte der Diskriminanzfunktion steigt mit der Diversität der analysierten Experimente. So hatten bei den vorgestellten Experimenten die Kenngrößen der Berechnung I und CI den geringsten Anteil an der Erklärung der Gruppenzugehörigkeit der Standorte, da diese Parameter bei den Versuchen so weit als möglich konstant gehalten wurden. Die vorgestellten Ergebnisse sind somit noch stark vom beschränkten Umfang und der geringen Diversität der Stichprobe geprägt. Daher sind die entsprechenden Diskriminanzfunktionen auch noch nicht nutzbar, um im Rahmen der Langzeitsimulation des Bromidtransports am IUP-Hang in Kapitel 7 eine Parametrisierung der kleinskaligen Infiltrationsvariabilität auf der Hangskale vorzunehmen

Läge jedoch eine Stichprobe vor, in der alle wichtigen Parameter wie Bodentyp, Feuchte und Beregnungsintensität und -rate über einen großen Bereich streuen würden, so hätte die darauf basierende Diskriminanzfunktion, wie in Abbildung 5.8 schematisiert, mit Sicherheit eine erhebliche statistische Vorhersagegüte, die durch jedes neue Experiment verbessert würde.

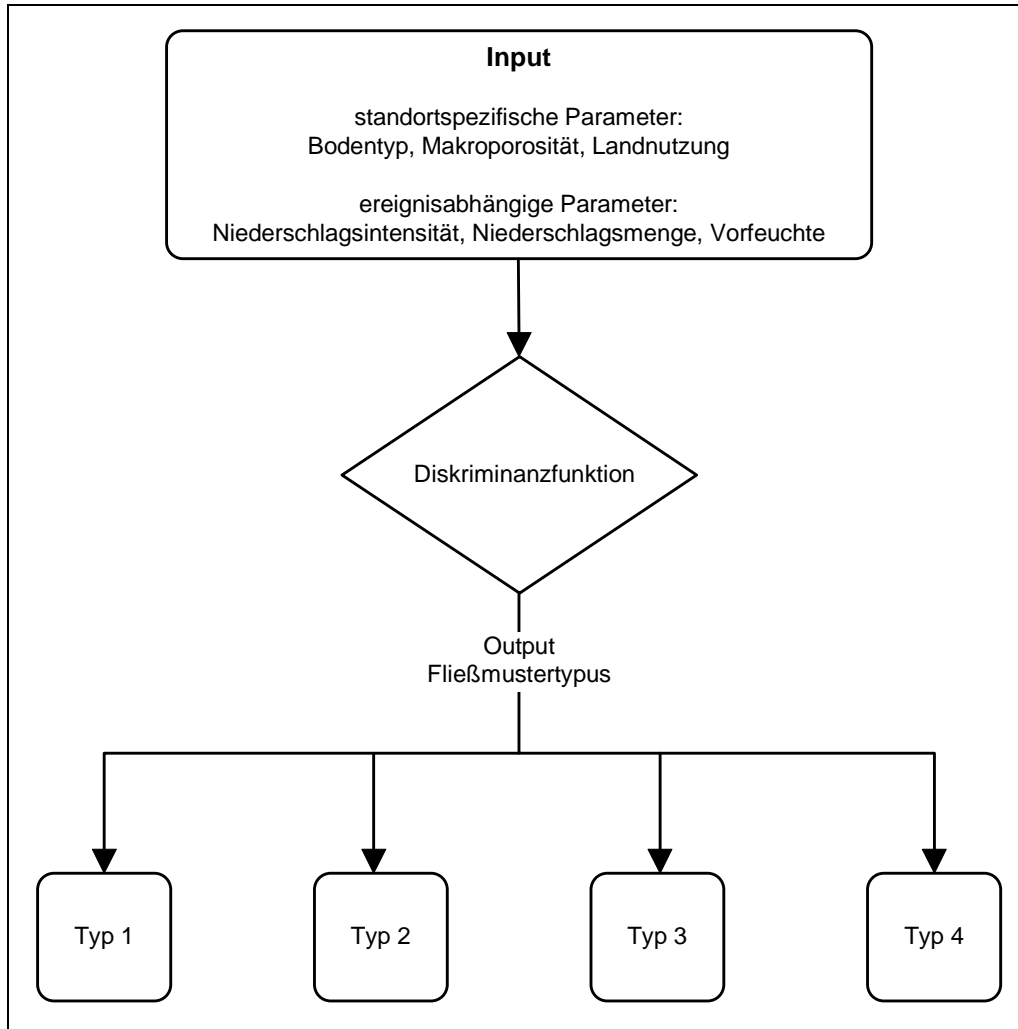


Abb. 5.8: Schematische Darstellung einer Regionalisierung des kleinskaligen Transportgeschehens auf Basis einer repräsentativen Stichprobe von Fließmustern

Um den Nutzen des vorgestellten "upscaling"-Konzepts umfassend beurteilen zu können, fehlt darüber hinaus die in der Einleitung geforderte Information über die Reproduzierbarkeit und damit Güte der experimentellen Ergebnisse an den einzelnen Standorten.²⁹ In Kapitel 7 wird diese Lücke durch eine numerischen Untersuchung der Reproduzierbarkeit des Beregnungsversuchs am Standort Mp 97 geschlossen.

²⁹ Jeder Transportversuch wurde nur einmal realisiert.

5.5.4 Größerskalige Ordnung kleinskaliger Fließmuster

Konkret für das Infiltrationsgeschehen im Weiherbachgebiet wurde eine Ordnungstendenz für die Variabilität der Infiltration auf der Hangskale gefunden, einem Prozeß der auf der Kleinskale eher eine (für uns) zufällige räumliche Variation zeigt. Die vorgestellte Standort-einteilung in Gruppen ähnlichen Infiltrationsverhaltens läßt sich zum größten Teil durch den Einfluß der morphologischen Parameter n_{fl} und n_l erklären, dabei hat die normierte Fließlänge n_{fl} als Korrelat der Makroporosität bei weitem das größte Gewicht. Die Vorfeuchte und die morphologischen Parameter erklären zusammen 65 bis 70% der beobachteten großskaligen Verteilung des kleinskaligen Infiltrationsprozesses. Die systematische Verteilung der Bodentypen und deren Einfluß auf die lokale Ausprägung des Makroporensystems, d.h. das Zusammenspiel zweier typischer Landschaftsfaktoren führt zu dieser "tendenziellen räumlichen Ordnung" mit eher klassischen Fließmustern an Hangtop und Hangmitte sowie stark präferentiellen Fließmustern im Auenbereich. Im Untersuchungsjahr war das Auffinden dieser Tendenz durch die geringe Variation der Landnutzung glücklicherweise sehr einfach. Die Übertragbarkeit dieser Ergebnisse auf ähnliche Lößgebiete wird in Abschnitt 8.3.2 diskutiert.

Die Ergebnisse des vorliegenden Kapitels betätigen die in 2.4.3 geäußerte Vermutung, daß das Auftreten präferentieller Fließaktivität auf der Kleinskale stark durch das lokale Zusammenspiel der Vorfeuchte im oberen Bodenhorizont und der Flächendichte der Makroporen an der Erdoberfläche geprägt wird. Der im nächsten Kapitel vorgestellte Ansatz zur effektiven Beschreibung präferentieller Fließaktivität, basiert auf der konsequenten Umsetzung setzt dieser Erkenntnis.

6 Aufbau des erweiterten Modellsystems: Prozeßansätze, Numerik und "preprocessing"

Mit dem im vorliegenden Kapitel beschriebenen Aufbau des erweiterten Modellsystems beginnt der theoretische Teil der vorliegenden Arbeit. Aus der Zielsetzung der angestrebten numerischen Untersuchungen werden zunächst Anforderungen an das Modellsystem und das sogenannte "preprocessing" abgeleitet. Danach werden die Prozeßansätze zur Simulation der Stoffdynamik angesprochen und ein Ansatz zur effektiven Simulation präferentieller Fließaktivität auf Basis der Meßdaten aus Unterkapitel 4.2 und des in Kapitel 5 erworbenen Prozeßverständnisses vorgestellt. Ferner werden die numerischen Verfahren zur Lösung der sogenannten Transportgleichung präsentiert, das erweiterte Modellsystem CATFLOW 2.0 vorgestellt und die Methoden zur Simulation heterogener Anfangs-Randbedingungen erläutert.

6.1 Zielsetzung der Modellierung auf verschiedenen Skalen

6.1.1 Langzeitsimulation des Tracertransports auf der Hangskale

Eines der wesentlichen theoretischen Ziele dieser Arbeit ist die Langzeitsimulation des von Delbrück (1997) experimentell untersuchten Bromidtransports am sogenannten IUP-Hang des Weiherbachtals. Bereits in der Einführung wurde betont, daß die Identifizierung von Prozeßansätzen mit Hilfe von hydrologischen Modellen durch die oftmals große Unschärfe hydrologischer Meßdaten sehr erschwert wird (Beven, 1998; Reddi, 1994). Trotzdem ist dies der einzige Weg, "gute" von "schlechten" Prozeßansätzen zu unterscheiden (Popper, 1984). Aus diesem Grund steht bei der Langzeitsimulation die Frage im Vordergrund, ob sich die gewählten Ansätze zur Prozeßbeschreibung im Rahmen der Güte der Datengrundlage falsifizieren lassen. Die Simulation wird daher "unabhängig" durchgeführt, d.h. alle Modellparameter werden aus Messungen oder plausiblen Annahmen abgeleitet und **vor** der Simulation explizit festgelegt. Eine nachträgliche Anpassung des Modells zur "besseren" Beschreibung der Messung erfolgt nicht.

6.1.2 Numerische Untersuchung der Reproduzierbarkeit von Transportversuchen

Zur Beurteilung der Güte des in Kapitel 5 vorgestellten Verfahrens zur Ausgliederung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens auf Basis kleinskaliger Beregnungsversuche fehlt Information über die Reproduzierbarkeit dieser Versuche unter identischen Anfangs-Randbedingungen. Daher wird in Kapitel 7 das erweiterte Modellsystem genutzt, um diese fehlende Information im Rahmen einer Monte-Carlo-Simulation zu liefern. Die Datengrundlage für diese Untersuchung liefert der Transportversuch an der Intensivmeßparzelle Mp 97. Folgende Frage sollen dabei beleuchtet werden:

- Gibt es Anfangszustände, in denen die in Abschnitt 2.4.2 diskutierten Unschärfen der Anfangs-Randwerte bei der Wiederholung einer Beregnung zu einer besonders großen Variation der simulierten Versuchsergebnisse führen?
- Existiert somit ein Instabilitätsbereich im Zustandsraum, in dem das System gleichermaßen zu beiden Extremen der Infiltration tendiert und die Vorhersagbarkeit des Infiltrationsverlaufs daher wesentlich schlechter ist als im restlichen Zustandsraum? Oder ist die Nichtlinearität im System "gutmütig", d.h. die Variation der Ergebnisse in allen Systemzuständen von gleicher Größenordnung?

6.1.3 Anforderungen an das erweiterte Modellsystem und das "preprocessing"

Zur Durchführung beider Untersuchungen benötigt man ein einfaches Prozeßmodell zur Simulation des Transports in Wasser gelöster Stoffe – vor allem von Tracern – im Boden. Die angestrebte Unabhängigkeit der Simulation auf der Hangskale erfordert, daß sich alle Modellparameter aus Messungen oder zumindest aus plausiblen, physikalisch motivierten Annahmen ableiten lassen. Zur Durchführung der numerischen Untersuchung zur Reproduzierbarkeit des Beregnungsversuchs am Standort Mp 97 benötigt man ferner:

- Ein einfaches Modell zur Simulation präferentieller Fließaktivität und des Makroporenraums im anstehenden Boden. Der Makroporenraum wird künftig auch als heterogene Randbedingung angesprochen. Diese heterogene Randbedingung wird zu Beginn der Monte-Carlo-Simulation nur einmal generiert und bleibt dann fest. Aufgrund der in Kapitel 5 gewonnen Erkenntnisse wird die relative Sättigung S als Kontrollparameter für das lokale Initiieren von Makroporenfluß gewählt.
- Ein Verfahren zur Simulation unscharfer, makroskopisch identischer Anfangszustände in Form statistischer Bodenfeuchtefelder immer gleichen Mittelwerts $\langle \theta \rangle$ und gleicher Standardabweichung σ_θ . Im folgenden wird auch von der Inputunschärfe oder Inputvariabilität der Anfangsfeuchte gesprochen.

Die Vorgehensweise bei der angestrebten Monte-Carlo-Simulation ist einfach: Im ersten Schritt werden unterschiedliche Realisierungen des gleichen Anfangsfeuchtefeldes generiert. Diese dienen dann bei der wiederholten Simulation der Beregnung als Anfangszustände. Die

Realisationen der Anfangsfeuchtefelder sind natürlich mikroskopisch unterschiedlich. Daher ist die räumliche Verteilung der Anfangsfeuchte in Bezug auf die festen Heterogenitäten im Boden der Parzelle bei jeder Wiederholung anders. Wie in Abschnitt 2.4.3 ausgeführt, beeinflussen diese Unterschiede ob, wann und wo präferentielle Strukturen anspringen und führen damit zu einer Variation der Simulationsergebnisse. Dieses unscharfe Zusammenwirken der Anfangsfeuchte und der heterogenen Randbedingung entspricht exakt den in Abschnitt 2.4.2 angesprochenen Unschärfen, die den Anfangs-Randbedingungen der vorgestellten Berechnungsversuche aufgrund der unzureichenden Meßmethoden innewohnen. Weitere Details zur Vorgehensweise bei der Monte-Carlo-Simulation finden sich in Abschnitt 7.3.2.

Grundsätzlich werden im folgenden zwei Qualitäten an Information unterschieden:

- Information, die sich ohne a-priori-Annahmen aus der in Abschnitt 2.4.2 beschriebenen Art der Messung filtern läßt wie z.B. der räumliche Mittelwert und die Standardabweichung der Bodenfeuchte bzw. Makroporosität sowie deren Meßfehler. Diese **Information erster Art** reicht jedoch nicht aus, um den Verlauf der Infiltration eindeutig zu bestimmen (Merz, 1996; Blöschl, 1996)
- Plausible a-priori-Annahmen über die räumliche Kovarianzstruktur des Bodenfeuchtefeldes oder Makroporensystems. Diese **Information zweiter Art** ist entscheidend für den Verlauf der Infiltration, kann jedoch mit der in Abschnitt 2.4.2 vorgestellten Meßstrategie nicht gewonnen werden.

Die folgenden Unterkapitel stellen die geforderten Prozeßmodelle und Verfahren sowie numerische Methoden zu deren Lösung vor.

6.2 Prozeßansätze zur Modellierung der Stoffdynamik

6.2.1 Abbau, Sorption und Transport in der Bodenmatrix

Zur Beschreibung der wesentlichen Prozesse des Stoffhaushalts ungesättigter Böden wurden im vorliegenden Fall bewußt einfache Ansätze gewählt:

- Beschreibung des mikrobiellen Abbaus als Reaktion erster Ordnung,
- Beschreibung der Sorption als spontane lineare Gleichgewichtssorption,
- Beschreibung des subskaligen Austauschterms in der Transportgleichung mit Hilfe des molekularen Diffusionskoeffizienten für Bromid in freiem Wasser.

Für den Fall stationären Wassergehalts lassen sich diese Prozesse in folgender Transportgleichung zusammenfassen:

$$R \frac{\partial(C_w)}{\partial t} = -\mathbf{v}_a \nabla(C_w) + \nabla(D_{\text{mol}} \nabla C_w) - \lambda C_w \quad (6.1)$$

$$R = 1 + \frac{\rho_s K_d}{\theta}$$

- mit D_{mol} = molekularer Diffusionskoeffizient in freiem Wasser [m²/s]
 C_w = Konzentration in der Wasserphase [kg/m³]
 R = Retardationskoeffizient [-]
 ρ_s = Lagerungsdichte [kg/m³]
 θ = volumetrischer Wassergehalt [-]
 v_a = Abstandsgeschwindigkeit [m/s]
 K_d = K_d -Wert der linearen Adsorptionsisotherme [m³/kg]
 λ = Abbaukonstante [1/s]

Insbesondere die Ansätze zur Beschreibung des Abbaus und der Sorption werden der Komplexität der realen Prozesse mit Sicherheit nicht gerecht. Nur der cometabolische Abbau von Pflanzenschutzmitteln, bei dem der Wirkstoff zusammen mit gut nutzbaren Substanzen durch Mikroorganismen umgesetzt wird, läßt sich als Reaktion erster Ordnung beschreiben (Bolduan, 1998). Und nur im Falle sehr niedriger Konzentrationen, wenn die Zahl der Austauschplätze viel größer ist als die Zahl der darum konkurrierenden Stoffmoleküle, läßt sich die Sorptionsisotherme linearisieren. Realistischere Modelle sind die nichtlinearen Isothermen von Langmuir oder Freundlich sowie Ansätze, die die Adsorptionskinetik berücksichtigen (Kinzelbach, 1992; Zurmühl, 1994). Die einfachen Ansätze wurden trotzdem gewählt, da beide wurden im Rahmen des Weiherprojekts detailliert untersucht und somit verlässliche Daten für die Böden des Weiherbachgebiets vorhanden sind (Schierholz et al., 1997; Bolduan, 1998).

Der subskalige Austausch von Stoffmolekülen mit der Umgebung beim Transport in der Bodenmatrix wird bewußt nur mit Hilfe der molekularen Diffusion beschrieben, dies hat folgende Gründe:

- Im Rahmen der Auswertung des Tracerexperiments am IUP-Hang durch Delbrück (1997) ergab sich aus den analysierten Peakbreiten ein maximaler Dispersionskoeffizient von 1.6×10^{-9} m²/s. Das ist deutlich kleiner als der molekulare Diffusionskoeffizient von Bromid in freiem Wasser mit $D_{\text{mol}} = 2.5 \times 10^{-9}$ m²/s.
- Der molekulare Diffusionskoeffizient von Bromid in freiem Wasser in ist guter Näherung eine Konstante, deren Wert vor der Simulation festgelegt werden kann.
- Die typische Transportdistanz, die bei den in den Kapiteln 3 - 5 vorgestellten, kleinskaligen Berechnungsversuchen auftrat, ist in allen Fällen kleiner als die vertikale Ausdehnung des Makroporensystems im anstehenden Boden. Der asymptotische Grenzfall guter Durch-

mischung ist nach dieser kurzen Strecke noch nicht erreicht³⁰. Eine effektive Beschreibung als konvektiv-dispersiver Prozeß ist daher unangemessen.

Im Rahmen der Monte-Carlo-Simulation eines kleinskaligen Transportversuchs in Kapitel 7 werden Begriffe wie Dispersivität oder Dispersionskoeffizient bewußt vermieden, da sie strenggenommen noch gar nicht definiert sind. Die Konzentrationsverteilung des Bromid-tracers wird nach dieser kurzen Transportdistanz maßgeblich von der kleinskaligen, räumlichen Struktur des Geschwindigkeitsfelds bestimmt (Roth et al., 1996). Daher ist es wichtiger, eine gute Beschreibung des Geschwindigkeitsfelds durch eine geeignete Beschreibung des Makroporensystems im anstehenden Boden und des Transports in Makroporen anzustreben.

6.2.2 Effektive Beschreibung von Makroporensystem und Makroporenfluß

Für die Modellerweiterung wird ein Ansatz benötigt, der das Makroporensystem im Boden und den Wasserflusses in Makroporen zweidimensional auf Basis der in Unterkapitel 4.2 vorgestellten Meßdaten beschreibt. Das lokale Zusammenwirken von Prozessen bzw. Größen bei der Entstehung und beim Ablauf präferentieller Fließaktivität ist komplex und seit mehr als 15 Jahren Gegenstand aktueller Forschung (Beven & Germann, 1981; Ritsema, 1998). Im einfachen Fall hoher Vorfeuchte kommt es durch Sättigung der umgebenden Bodenmatrix zu lokalem Überstau im Bereich der Makroporen und daher zum Einsetzen präferentieller Fließaktivität. Doch auch bei extrem trockenem Oberboden kann es infolge der schlechten Benetzbarkeit der Bodenmatrix zu Überstau und zum Einsickern von Wasser in Makroporen kommen. Besonders in diesem Fall wird das Fortschreiten des Wasserfilms in der Makropore vermutlich durch Effekte beeinflusst, die auch bei der Erstbenetzung eines porösen Mediums eine Rolle spielen (Joanny & Gennes, 1986; Schlechter et al., 1991). Eine explizite Beschreibung dieser Mechanismen in einem **zweidimensionalen** numerischen Modell mit einer minimalen Modellauflösung von 5 cm ist weder möglich noch sinnvoll, selbst wenn diese Mechanismen besser bekannt wären.

Daher wird in der vorliegenden Arbeit bewußt ein einfacher Weg beschritten. Der im folgenden vorgestellte Ansatz beschreibt den **Effekt** hydraulisch aktiver Makroporen über eine lokale Erhöhung der hydraulischen Leitfähigkeit des Bodens an einem Modellknoten. Es handelt sich um ein sogenanntes Bulk-Modell, das die Wasserbewegung in der Matrix und den Makroporen gemeinsam in einer effektiven Domäne basierend auf der Darcygleichung beschreibt. Die Steuergröße ist die lokale Sättigung S im Boden. Wird ein bestimmter Schwellenwert S_0 erreicht, so wird die hydraulische Leitfähigkeit in Richtung der Makroporen linear um den sogenannten Makroporositätsfaktor f_{mak} erhöht. Wählt man die Schwellensättigung S_0 kleiner als 1, so ist die Simulation von präferentieller Fließaktivität in ungesättigten Böden möglich:

³⁰ Die Größe der Lagrangeschen Längenskala wird laut Germann (1990) vor allem auch durch die Länge der Makroporen bestimmt (siehe Abschnitt 2.1.2).

$$k_S^B = \underbrace{k_S}_{\text{Matrixanteil}} + \underbrace{k_S f_{\text{mak}} \left(\frac{S - S_0}{1 - S_0} \right)}_{\text{Makroporenanteil}} \quad \text{für } S_0 \leq S \leq 1 \quad (6.2)$$

$$k_S^B = k_S \quad \text{sonst}$$

- mit k_S^B = Gesamtleitfähigkeit des Makroporensystems und der Matrix [m/s]
 k_S = gesättigte Leitfähigkeit der Matrix [m/s]
 S = relative Sättigung, $0 < S < 1$ [-]

Bei Germann (1990) wird Wasserfluß in Makroporen als Wasserbewegung in nichtkapillaren Poren definiert, die ausschließlich durch die Gravitation angetrieben wird. Von diesem Standpunkt betrachtet, erscheint der Ansatz in Gleichung (6.2) falsch, denn hier beeinflusst im ungesättigten Fall das Matrixpotential ψ sowohl über das Darcygesetz und als auch über die bodenhydraulische Funktion $k(\psi)$ den Wasserfluß in einer Makropore. Dazu sei folgendes bemerkt:

- Im gesättigten Grenzfall beschreibt das Modell den Effekt hydraulisch aktiver Makroporen richtig, wie die Meßergebnisse in Abschnitt 4.2.3 belegen.
- Das Modell ermöglicht ferner eine einfache Beschreibung des **Effekts** hydraulisch aktiver Makroporen im ungesättigten Fall. In diesem Fall scheint die Definition des Makroporenflusses als reiner Gravitationsfluß falsch, da die Filmströmung in der Makropore durch Benetzungseffekte infolge der trockenen Makroporenwand beeinflusst wird.
- Der Exponent a im Ansatz $q_{\text{mak}} = b w^a$ zur Beschreibung der Flußdichte in Makroporen nach Beven und Germann (1981) ist als Maß für die effektive Makroporosität nur durch inverse Modellierung bestimmbar. Dabei zeigt er eine enorme Ereignisabhängigkeit³¹ (Merz, 1996). Die Parameter S_0 und f_{mak} in Gleichung (6.2) lassen sich, wie noch gezeigt wird, aus Messungen errechnen, oder werden plausibel festlegen. In Abbildung 6.1 ist der wesentliche Unterschied zwischen einem Bikontinuumsansatz und dem effektiven Ansatz zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität schematisch dargestellt.

Der Makroporositätsfaktor f_{mak} läßt sich anschaulich als Verhältnis von gesamtem, gesättigten Wasserfluß in allen Makroporen Q_{mak}^B zum gesättigten Matrixfluß in einem Modellelement der Fläche A deuten:

$$f_{\text{mak}}(z) = \frac{Q_{\text{mak}}^B(z)}{k_s(z)A} \quad (6.3)$$

³¹ Bei der inversen Modellierung wird eben nur der **hydraulisch aktive Anteil** der Makroporen für ein Ereignis erfaßt. Dieser Anteil ist natürlich ereignisabhängig.

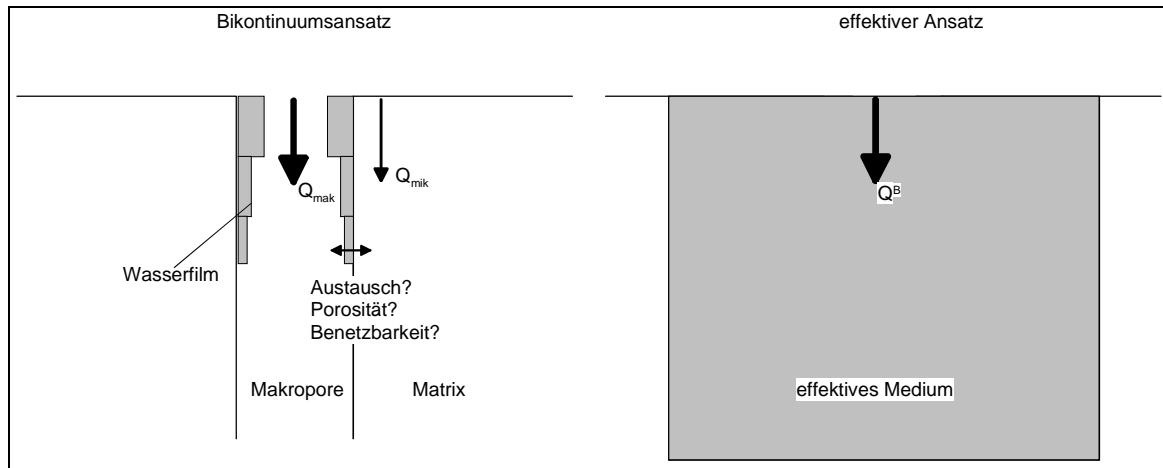


Abb. 6.1: Schematische Gegenüberstellung eines bikontinuierlichen und des vorgestellten, effektiven Ansatzes zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität

Daher läßt sich f_{mak} recht einfach aus Ergebnissen aus Kapitel 4.2 wie folgt bestimmen:

- Im ersten Schritt wird das Makroporensystem der Parzelle statistisch simuliert. Grundlage für diese Simulation bilden die Ergebnisse einer Makroporenkartierung, z.B. die aus Abschnitt 4.2.2. Benötigt werden die mittlere Anzahl der Makroporen verschiedener Radien, sowie der Mittelwert und die Standardabweichung der zugehörigen Makroporenlängen.
- Im zweiten Schritt wird auf dieser Grundlage der Makroporositätsfaktor mit Hilfe der in Abschnitt 4.2.3 vorgestellten Regressionsgleichung für die gesättigte Wasserflußrate in Makroporen als Funktion des Makroporenradius errechnet.

Aufgrund der zu Verfügung stehenden Meßdaten werden die Makroporen in die Durchmesserklassen 2 - 4 mm, 4 - 6 mm, 6 - 8 mm sowie > 8 mm eingeteilt, diese Einteilung rührt von der Meßmethode der Durchmesser mit Stahldurchschlägen her. Aus der mittleren Zahl der Makroporen n_r pro Quadratmeter (vergleiche Tabelle 4.3 in Abschnitt 4.2.2) und deren Querschnittsfläche πr^2 läßt sich für Makroporen festen Durchmessers der relative Anteil errechnen, den alle Makroporen insgesamt an der Erdoberfläche der Parzelle einnehmen. Wird dieser Flächenanteil als Wahrscheinlichkeit p_r für das Auftreten einer Makropore des jeweiligen Durchmessers interpretiert, so läßt sich das Makroporensystem im Boden der Parzelle Mp 97 statistisch simulieren. Zu diesem Zweck wird ein Modellelement der Fläche A in Pixel der Größe πr^2 eingeteilt. Die Simulation der Makroporen im Modellelement reduziert sich so auf das N_r -malige Ziehen von gleichverteilten Pseudozufallszahlen ξ_r aus dem Einheitsintervall, welches dazu in die Bereiche $[0, 1-p_r]$ und $(1-p_r, 1]$ eingeteilt wird:

$$\begin{aligned}
 \xi_r \in [0, 1-p_r] &\rightarrow \text{Pixel enthält keine Makropore} \\
 \xi_r \in (1-p_r, 1] &\rightarrow \text{Pixel enthält eine Makropore mit Radius } r
 \end{aligned}
 \tag{6.4}$$

$$N_r = \frac{A}{\pi r^2} \quad p_r = \frac{1}{n_r \pi r^2}$$

Enthält ein Pixel eine Makropore mit Radius r , so wird deren Länge durch Ziehen einer zweiten, gleichverteilten Pseudozufallszahl ξ_l simuliert. Nach N_r Ziehungen erhält man die Zahl der Makroporen $n_r(z)$ mit Radius r im Modellelement als Funktion der Tiefe z . Tabelle 6.1 zeigt die relevanten Daten zur Simulation des Makroporensystems im Boden der Intensivmeßparzelle Mp 97 wie die Wahrscheinlichkeit p_r für das Auftreten einer Makropore mit Radius r , deren mittlere Länge $\langle l_r \rangle$ und die zugehörige Standardabweichung σ_r . Ferner sind die anhand der Regressionsbeziehung³² aus Abschnitt 4.2.3 errechneten gesättigten Wasserflußraten $Q_{\text{mak}}(r)$ in einer Makropore als Funktion des Radius angegeben.

Tabelle 6.1: Daten für die Simulation der Makroporosität der Parzelle Mp 97

| r [m] | r = 0.0015 | r = 0.0025 | r = 0.0035 | r = 0.0045 |
|---|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| p_r | 5.2×10^{-4} | 9.2×10^{-4} | 5.1×10^{-4} | 5.5×10^{-4} |
| $\langle l_r \rangle$ | 0.49 | 0.59 | 0.67 | 0.80 |
| σ_r | 0.22 | 0.18 | 0.09 | 0.05 |
| $Q_{\text{mak}}(r)$ [m³/s] | 4.6×10^{-8} | 3.5×10^{-7} | 1.4×10^{-6} | 3.8×10^{-6} |

Mit Hilfe dieser gesättigten Wasserflußraten in einer Makropore mit Radius r und der simulierter Anzahl $n_r(z)$ dieser Makroporen läßt sich die gesättigte Gesamtflußrate in allen Makroporen eines Modellelements als Funktion der Tiefe z errechnen:

$$Q_{\text{mak}}^{\text{B}}(z) = \sum_r n_r(z) Q_{\text{mak}}(r) \quad (6.5)$$

$\{r\} \in \{0.0015, 0.0025, 0.0035, 0.0045\}$

mit $Q_{\text{mak}}^{\text{B}}$ = asymptotische Gesamtflußrate in allen Makroporen eines Modellelements
 $n_r(z)$ = Zahl der Makroporen mit Radius r in einem Modellelement

Der gesuchte Makroporositätsfaktor $f_{\text{mak}}(z)$ des Modellelements ergibt sich mittels Gleichung (6.3) als Verhältnis der Gesamtflußrate $Q_{\text{mak}}^{\text{B}}(z)$ in allen Makroporen und zum gesättigten Wasser in der Bodenmatrix in einem Modellelement. Der Einfluß hydraulisch aktiver Makroporen auf den Wasserfluß im Boden der Meßparzelle Mp 97 läßt sich mit Hilfe des Makroporositätsfaktors und der Beziehung (6.2) sehr instruktiv als Feld der gesättigten Gesamtleitfähigkeit k_s^{B} darstellen. Die Abbildung 6.6 in Abschnitt 6.5.1 zeigt ein Beispiel.

³² Die Güte dieser Regression ist mit $R^2 = 0.8$ recht gut.

6.3 Numerische Lösungsverfahren

6.3.1 Lösung der Transportgleichung mit dem Random-Walk-Verfahren

Die zu lösende Transportgleichung (6.1) aus Abschnitt 6.2.1 ist eine partielle Differentialgleichung parabolisch elliptischen Typs. Falls der konvektive Term den Transportprozeß jedoch dominiert, zeigt sie hyperbolischen Charakter (Vreugdenhil & Koren, 1993). In diesem Fall beschreibt die Gleichung keinen Ausgleichsprozeß, sondern den Transport entlang charakteristischer Linien. Numerische Verfahren, die bei der Lösung parabolisch elliptischer Differentialgleichungen wie der Richardsgleichung gute Arbeit leisten – wie das FTCS-Schema (**F**orward **T**ime **C**entered **S**pace) oder das modifizierte Picardverfahren (Celia & Bouloutas, 1990) – liefern bei der Lösung hyperbolischer Differentialgleichungen nur vernünftige Lösungen, wenn die Transportdistanzen, die ein Stoffmolekül konvektiv bzw. diffusiv in einer Gitterzelle zurücklegt, von gleicher Größenordnung sind. Ansonsten kommt es zu Oszillationen im Bereich großer Gradienten³³. Um dies zu verhindern, muß die Gitterpeletzahl Pe kleiner oder gleich zwei sein (Vreugdenhil & Koren, 1993):

$$Pe = \frac{v_a \Delta x}{D_{mol}} \leq 2 \quad (6.6)$$

mit $\Delta x =$ Gitterkonstante

Das numerische Gebietsmodell CATFLOW (Maurer, 1997) löst die Richardsgleichung auf einem zweidimensionalen, orthogonalen, krummlinigen Gitter mit einem impliziten, massenkonservativen, modifizierten Picardverfahren (Celia & Bouloutas, 1990). Sollte die Transportgleichung mit dem gleichen Differenzenverfahren gelöst werden, so müßte aufgrund von Gleichung (6.6) eine sehr feine, räumliche Diskretisierung des Berechnungsgebiets erfolgen.

Wesentlich geeigneter zur Lösung einer hyperbolischen Differentialgleichung sind die sogenannten Charakteristiken-Verfahren (Kinzelbach, 1992; Vreugdenhil 1993; Zurmühl, 1994). Kinzelbach (1992) bevorzugt das "Random-Walk-Verfahren" zur numerischen Lösung der Transportgleichung gegenüber herkömmlichen Charakteristiken-Verfahren, da es massenkonservativ und einfach zu implementieren ist. Das Random-Walk-Verfahren beschreibt den Transport einer großen Zahl fiktiver Partikel fester oder variabler Masse als Überlagerung aus einem deterministischen Driftanteil und einem zufälligen, diffusiven Anteil mit Erwartungs-

³³ Es handelt sich hierbei nicht um ein Problem numerischer Stabilität, sondern von numerischer Akkuratessse (Vreugdenhil, 1993), genauer gesagt sind die oben beschriebenen Löser nicht monoton.

wert 0 (Uffink, 1990; Gardiner, 1985). Die Ortsänderung $d\mathbf{x}$ eines einzelnen Partikels genügt dabei (Thompson, 1987) folgender Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= \mathbf{A}(\mathbf{x}(t), t)dt + \mathbf{H}(\mathbf{x}(t), t) \bullet d\mathbf{W}(t) \\ \langle d\mathbf{W}(t) \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (6.7)$$

Der Term $\mathbf{A}(\mathbf{x}(t), t)dt$ beschreibt den deterministischen Anteil der Ortsänderung, $\mathbf{W}(t)$ steht für einen Wiener Prozeß (Gardiner, 1985; Thompson; 1987) und die symmetrische Matrix $\mathbf{H}(\mathbf{x}(t), t)$ repräsentiert die Stärke der zufälligen Einflüsse in verschiedenen Koordinatenrichtungen. In der oben dargestellten Ito-Form sind die Größen $d\mathbf{W}(t)$ und \mathbf{H} statistisch unabhängig (Thompson, 1987).

Der Random Walk ist ein Markov-Prozeß (Thompson, 1987). Einfach gesagt, ist die Zukunft der Stoffpartikel unabhängig von der Vergangenheit, wenn der gegenwärtige Zustand bekannt ist. Daher genügt eine Zweipunkt-Schrittwahrscheinlichkeitsdichte $f(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2)$ zur Charakterisierung der zeitlichen Entwicklung der Teilchenpositionen (Uffink; 1990; Kinzelbach & Uffink, 1991). Diese Schrittwahrscheinlichkeitsdichte beschreibt die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zur Zeit t_1 in einem Volumenelement $(d\mathbf{x})^3$ am Ort \mathbf{x}_1 zu finden, falls es sich zur Zeit t_2 im Volumenelement $d^3\mathbf{x}$ am Ort \mathbf{x}_2 befand. Die zeitliche Entwicklung der Schrittwahrscheinlichkeitsdichte und damit die Dynamik des Random Walk wird durch Chapman-Kolmogorov-Gleichung beschrieben (Gardiner, 1985):

$$f(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_3, t_3) = \int d\mathbf{x}_2 f(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) f(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) \quad (6.8)$$

mit $t_1 > t_2 > t_3$

Die Fokker-Planck-Gleichung (6.9) läßt sich unter gewissen Voraussetzungen als differentielle Form der Chapman-Kolmogorov-Gleichung interpretieren (Gardiner, 1985):

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, \tau)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x_i} (A_i(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, \tau)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (B_{ij}(\mathbf{x}, t) f(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, \tau)) \\ \mathbf{B} &= \mathbf{H}(t) \mathbf{H}^t(t); B_{ij} = H_{ik} H_{kj} \end{aligned} \quad (6.9)$$

mit A = deterministische Drift
 B = Diffusionstensor

Hierbei bezeichnet \mathbf{H}^t die Transponierte der Matrix \mathbf{H} . Identifiziert man die Schrittwahrscheinlichkeitsdichte mit der Konzentration C_w des Stoffes in der Wasserphase (Roth et al., 1996; Jury & Roth, 1990), so sind die Transportgleichung (6.1) und die Fokker-Planck-Gleichung (6.9) formal identisch genau dann, wenn (Thompson, 1987):

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{2} \nabla \mathbf{B}$$

$$\mathbf{D}_{\text{mol}} \equiv \frac{1}{2} \mathbf{B} = \frac{1}{2} \mathbf{H} \mathbf{H}^t \quad (6.10)$$

mit \mathbf{D}_{mol} = Diffusionstensor [m^2/s]
 \mathbf{B}' = Transponierte der Matrix \mathbf{B}

Im vorliegenden Fall ist die molekulare Diffusion eine skalare Größe und in guter Näherung konstant. Für den ungesättigten Fall ergibt sich schließlich folgende Gleichung für einen diskreten Random-Walk-Schritt in zwei Dimensionen:

$$\mathbf{H} = \sqrt{2\mathbf{D}_{\text{mol}}}, \quad \Delta \mathbf{W}(t) = \mathbf{R} \sqrt{3\Delta t}$$

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \left[v_x(x^*(t^*), t^*) + D_{\text{mol}} \frac{\partial}{\partial x} \ln(\theta) \right] \Delta t + R_x \sqrt{6D_{\text{mol}}\Delta t} \quad (6.11)$$

$$z(t + \Delta t) = z(t) + \left[v_z(z^*(t^*), t^*) + D_{\text{mol}} \frac{\partial}{\partial z} \ln(\theta) \right] \Delta t + R_z \sqrt{6D_{\text{mol}}\Delta t}$$

mit x = laterale Koordinate
 z = vertikale Koordinate
 $\mathbf{R} = (R_z, R_x)$ = gleichverteilte Pseudozufallszahlen aus dem Einheitsintervall
 θ = Bodenfeuchte

Wird die Geschwindigkeit bei der Berechnung des Random-Walk-Schrittes zum alten Zeitpunkt $t^* = t$ ausgewertet, so handelt sich um ein voll explizites Zeitschrittverfahren. Die voll implizite Vorgehensweise entsteht durch die Auswertung der Geschwindigkeit zum neuen Zeitpunkt $t^* = t + \Delta t$. Die vorliegende Arbeit orientiert sich mit der Wahl des Zeitpunktes t^* am Verfahren von Roth et al. (1996).

6.3.2 Die Random-Walk-Schrittgleichung in krummlinigen Koordinaten

Die in CATFLOW benutzte räumliche Diskretisierung mittels orthogonaler, krummliniger Koordinaten vereinfacht die Behandlung von Randflüssen in unregelmäßig berandeten Gebieten wie z.B. einem Hang (Maurer, 1997). Formuliert man eine Differentialgleichung in koordinatenunabhängiger Form, so treten sogenannte metrische Koeffizienten g als zusätzliche Faktoren vor räumlichen Ableitungen auf (Maurer, 1997; Kiefer et al., 1990). Beschreiben die Funktionen $u(\eta, \xi)$ und $v(\eta, \xi)$ die **lokale** Transformation des η - ξ -Systems in kartesischen x - z -Koordinaten, so folgt aus der Erhaltung der Metrik und der Orthogonalität die in Gleichung (6.12) dargestellte Transformation für den Gradienten in zwei Dimensionen:

$$\begin{aligned}
 ds^2 &= dx^2 + dy^2 = d\eta^2 + d\xi^2 \\
 \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{1}{\sqrt{g_{\xi\xi}}} \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{\sqrt{g_{\eta\eta}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \\
 g_{\xi\xi} &= \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial \xi} \right)^2 \\
 g_{\eta\eta} &= \left(\frac{\partial u}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial \eta} \right)^2
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

Im allgemeinen gehen die kartesische Vertikal- und Horizontalrichtung h und s aus dem η - ξ -System durch eine lokale Drehung hervor. Beispiele für einfache orthogonale, krummlinige Koordinatensysteme sind Polarkoordinaten in zwei Dimensionen sowie Kugel- und Zylinderkoordinaten in drei Dimensionen (Honerkamp & Roemer, 1986). In koordinatenunabhängiger Form hat die Random-Walk-Schrittgleichung – im folgenden kurz Schrittgleichung genannt – die Form:

$$\begin{aligned}
 \xi(t + \Delta t) &= \xi(t) + \frac{1}{R(\xi, \eta)} v_{\xi}'(\xi^*(t^*), t^*) \Delta t + Z_{\xi}(\Delta t^{1/2}) \\
 \eta(t + \Delta t) &= \eta(t) + \frac{1}{R(\xi, \eta)} v_{\eta}'(\eta^*(t^*), t^*) \Delta t + Z_{\eta}(\Delta t^{1/2}) \\
 v_{\eta}' &\equiv v_{\eta} + D_{\text{mol}} \frac{1}{\sqrt{g_{\eta\eta}}} \frac{\partial}{\partial \eta} \ln(\theta), \quad v_{\xi}' \equiv v_{\xi} + D_{\text{mol}} \frac{1}{\sqrt{g_{\xi\xi}}} \frac{\partial}{\partial \xi} \ln(\theta) \\
 Z_{\eta}(\Delta t^{1/2}) &\equiv R_{\eta} \sqrt{6D_{\text{mol}} \Delta t}, \quad Z_{\xi}(\Delta t^{1/2}) \equiv R_{\xi} \sqrt{6D_{\text{mol}} \Delta t}
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

mit R = Retardationskoeffizient

Im folgenden werden v_{η}' und v_{ξ}' auch als verallgemeinerte Geschwindigkeiten angesprochen.

6.3.3 Räumliche und zeitliche Interpolation des verallgemeinerten Geschwindigkeitsfelds

Zur Lösung der Schrittgleichung (6.13) im ξ - η -System benötigt man die verallgemeinerte Geschwindigkeit (v_{ξ}' , v_{η}') am Ort (ξ^* , η^*) zur Zeit $t^* \in [t, t + \Delta t]$. Bei geringen Konzentrationen wie in der vorliegenden Untersuchung ist die Wasserdynamik unabhängig vom Transportprozeß. Somit liefert die Lösung der Richardsgleichung das Geschwindigkeitsfeld (v_{ξ} , v_{η}) an den Modellknoten sowohl zur Zeit t als auch zur Zeit $t + \Delta t$. Das nachfolgend vorgestellte Verfahren zur räumlichen Interpolation des verallgemeinerten Geschwindigkeitsfelds auf einen beliebigen Punkt (ξ^* , η^*) ist divergenzerhaltend. Auch die Stetigkeit der Bodenfeuchtgradienten an den Grenzen der Modellelemente ist gewährleistet. Dadurch wird auch die **lokale** Massenerhaltung gesichert (La Bolle et al., 1996; Kinzelbach, 1992). Trotzdem

werden durch das Verfahren lokale Geschwindigkeitsunterschiede nicht zu stark geglättet (Kinzelbach, 1992). Die Interpolation der verallgemeinerten Geschwindigkeit v_η' vollzieht sich in 3 Schritten: Zuerst wird v_η' in ξ -Richtung auf die Hilfspunkte P1 und P2 linear interpoliert, v_η' am Punkt (ξ^*, η^*) ergibt sich dann aus der linearen Interpolation der Hilfsgrößen v_{h1} und v_{h2} in η -Richtung (Abbildung 6.2). Die Interpolation der Geschwindigkeitskomponente v_ξ' verläuft analog, die metrischen Koeffizienten kürzen sich weg:

$$\begin{aligned}
 v_{h1}' &= v_\eta(\eta_{i+1,j}, \xi_{i+1,j}) + \frac{\xi^* - \xi_{i+1,j}}{\xi_{i+1,j} - \xi_{i+1,j+1}} (v_\eta(\eta_{i+1,j}, \xi_{i+1,j+1}) - v_\eta(\eta_{i+1,j}, \xi_{i+1,j})) \\
 v_{h2}' &= v_\eta(\eta_{i,j}, \xi_{i,j}) + \frac{\xi^* - \xi_{i,j}}{\xi_{i,j} - \xi_{i,j+1}} (v_\eta(\eta_{i,j}, \xi_{i,j+1}) - v_\eta(\eta_{i,j}, \xi_{i,j})) \\
 v_\eta'(\eta^*, \xi^*) &= v_{h1}' + \frac{\eta^* - \eta_{i+1,j}}{\eta_{i+1,j} - \eta_{i,j}} (v_{h2}' - v_{h1}')
 \end{aligned} \tag{6.14}$$

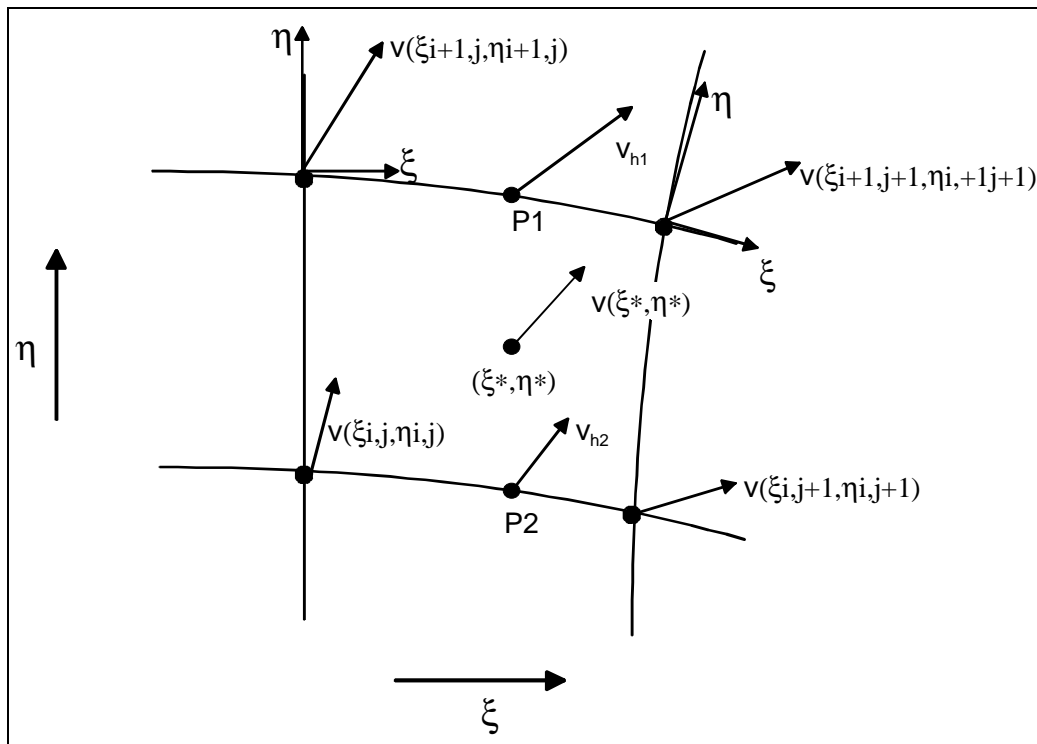


Abb. 6.2: Räumliche Interpolation des Geschwindigkeitsfelds in drei Schritten

Analog zum Vorgehen von Roth et al. (1996) wird der Zeitpunkt t^* zur Auswertung der Geschwindigkeit in der Schrittgleichung mit einem modifizierten Runge-Kutta-Verfahren bestimmt (Press et al., 1992; Vreugdenhil & Koren, 1993). Die Position eines Stoffpartikels zur Zeit $\mathbf{r}(t+\Delta t) = (\xi(t+\Delta t), \eta(t+\Delta t))$ errechnet sich aus der alten Position $\mathbf{r}(t)$ wie folgt:

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{v}(\mathbf{r}(\tau), \tau) d\tau \quad (6.15)$$

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(\mathbf{r}(t^*), t^*) \Delta t$$

Die Existenz von t^* folgt aus dem Mittelwertsatz der Integralrechnung (Barner und Flohr, 1987). Zur Lösung der folgenden Arbeitsgleichung muß die verallgemeinerte Geschwindigkeit nur an zwei Zeitpunkten ausgewertet werden. Mit einem Zeitschritt von $\Delta t = 0.6$ CFL erzielt man gute Ergebnisse (Roth et al., 1996).

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{v}'(\mathbf{r}, t)}{R(\mathbf{r})} + \frac{\mathbf{v}'(\mathbf{r} + \mathbf{v}'(\mathbf{r}, t)\Delta t, t + \Delta t)}{R(\mathbf{r} + \mathbf{v}'(\mathbf{r}, t)\Delta t)} \right) + \mathbf{Z}(\Delta t^{1/2}) \quad (6.16)$$

$$\mathbf{r} = (\xi, \eta), \quad \mathbf{v}' = (v_\xi', v_\eta'), \quad \mathbf{Z} = (Z_\xi, Z_\eta)$$

6.3.4 Interpolation der Stoffkonzentration im krummlinigen Gitter

Im Hinblick auf den Vergleich von Modellrechnung und Messung interessiert die simulierte Stoffkonzentrationverteilung $C_b(x, z)$ in realen Koordinaten bezogen auf die Trockenmasse des Bodens in einer Rasterzelle (Abbildung 6.3).

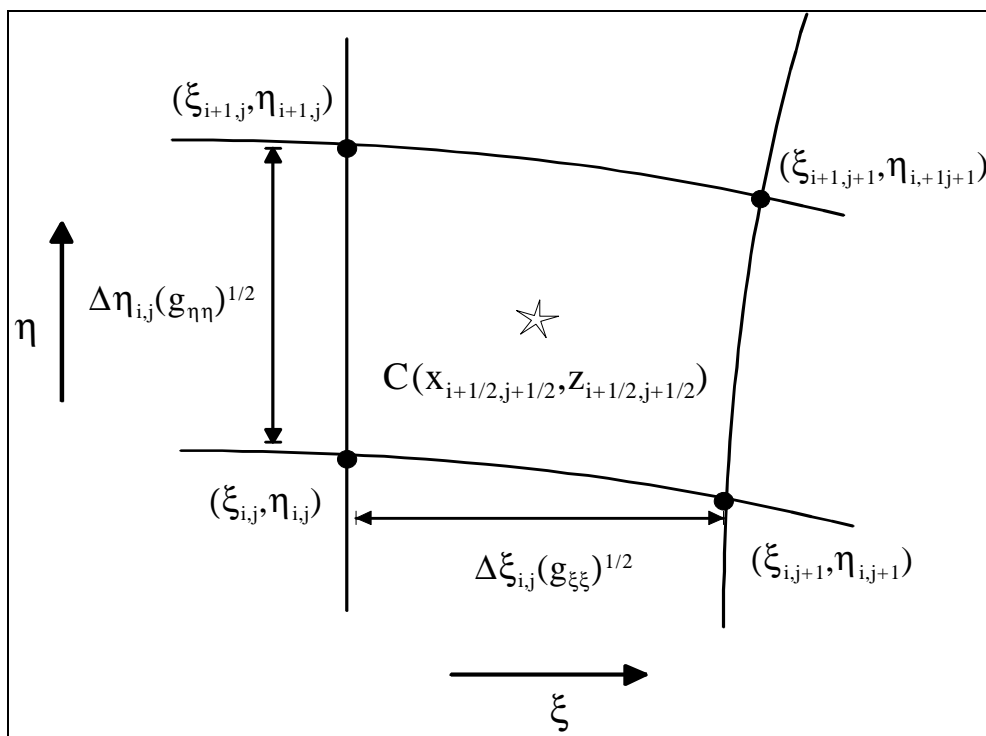


Abb. 6.3: Berechnung der Konzentration im krummlinigen, orthogonalen Gitter

Die Zahl der Teilchen N_p in der jeweiligen Rasterzelle ermittelt man einfach durch Auszählen. Die Stoffmasse in der Zelle ergibt sich durch Multiplikation mit der Teilchenmasse m_p , wobei mikrobieller Abbau nicht konservativer Stoffe dabei durch eine zeitabhängige Teilchenmasse

berücksichtigt wird. Die Stoffkonzentration in der Trockenmasse ergibt sich somit wie in Gleichung (6.17) dargestellt.

$$m_p(t) = m_p^0 \exp(-\lambda t)$$

$$C_b(x_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}, z_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}) = \frac{m_p N_p(\xi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}, \eta_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}})}{\underbrace{(\Delta\xi_{i,j} \sqrt{g_{\xi\xi}} \Delta\eta_{i,j} \sqrt{g_{\eta\eta}} \Delta y)}_{\text{Volumen der Rasterzelle}}} \rho_l(\xi_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}, \eta_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}) \quad (6.17)$$

mit $\Delta\xi_{i,j}/\Delta\eta_{i,j}$ = Gitterweite in ξ/η -Richtung an der Stelle i, j
 $\rho_l(\xi_{i+1/2,j+1/2}, \eta_{i+1/2,j+1/2})$ = mittlere Lagerungsdichte
 Δy = Ausdehnung der Rasterzelle in der dritten Koordinatenrichtung

Die Zahl der Teilchen, die pro Modellelement benötigt wird, um zu reproduzierbaren Konzentrationsverteilungen zu kommen, liegt bei ca. 25 (Kinzelbach & Uffink, 1991). Im vorliegenden Fall hat das Berechnungsgebiet eine Ausdehnung von $1 \text{ m} \times 1.2 \text{ m}$. Löst man dieses Gebiet in einem $0.05 \times 0.05 \text{ m}^2$ Raster auf, so erhält man mit 480 Zellen eine erforderliche Teilchenzahl von 12000.

6.3.5 Die Berechnung der Abstandsgeschwindigkeit im Bereich hydraulisch aktiver Makroporen

In Abschnitt 2.2.2 wurde bereits der lokale Charakter von Makroporenflüssen angesprochen. Der Transportquerschnitt ist lokal auf eine oder mehrere Makroporen begrenzt. Die wahre Abstandsgeschwindigkeit in der Makropore ist somit viel größer als der Wert, der sich strenggenommen aus einem Kontinuumsansatz ergibt :

$$v_a = \frac{Q_{\text{mak}}}{\pi r^2} \gg \frac{Q_{\text{mak}}}{\theta_s A} \quad (6.18)$$

mit A = Bezugsfläche, im allgemeinen die Einheitsfläche

Der in Abschnitt 6.2.2 vorgestellte Ansatz beschreibt den Wasserfluß in Makroporen und Wasserfluß in der Bodenmatrix gemeinsam in einem effektiven Medium. Um trotzdem zu einer guten Abschätzung der mittleren Abstandsgeschwindigkeit im Falle von präferentieller Fließaktivität zu kommen, wird folgender Weg beschritten. Man betrachte ein Modellelement der Querschnittsfläche A , in dem die Makroporen den Anteil a_{mak} am Transportquerschnitt einnehmen. Kommt es zu Makroporenfluß im Modellelement, so denkt man sich den Fluß über alle Makroporen im Element verschmiert. Der effektive Transportquerschnitt ist also $a_{\text{mak}} A \theta_s$. Der Makroporositätsfaktor f_{mak} des Modellelements beschreibt das Verhältnis aus Makroporenfluß Q_{mak} und Matrixfluß Q_{mik} . Somit läßt sich Q_{mak} wie folgt aus dem bekannten "Bulkfluß" Q_B errechnen:

$$\begin{aligned}
 Q_B &= Q_{\text{mak}} + Q_{\text{mik}} = (f_{\text{mak}} + 1)Q_{\text{mik}} \\
 Q_{\text{mak}} &= \frac{f_{\text{mak}} Q_B}{f_{\text{mak}} + 1}, \quad Q_{\text{mik}} = \frac{Q_B}{f_{\text{mak}} + 1} \\
 v_{\text{mak}} &= \frac{Q_{\text{mak}}}{a_{\text{mak}} A \theta_s}, \quad v_{\text{mik}} = \frac{Q_{\text{mik}}}{A \theta_s} = \frac{q_{\text{mik}}}{\theta_s}
 \end{aligned} \tag{6.19}$$

- mit v_{mak} = Abstandsgeschwindigkeit im gesamten Makroporensystem des Modellelements
 v_{mik} = Abstandsgeschwindigkeit in der Matrix des Modellelements
 θ_s = Porosität im Modellelement

Im vorliegenden Fall wird als effektive Abstandsgeschwindigkeit in einem Modellelement das geometrische Mittel der Abstandsgeschwindigkeiten in beiden Porensystemen verwendet:

$$\begin{aligned}
 v_{\text{eff}} &= \sqrt{v_{\text{mak}} v_{\text{mik}}} \\
 v_{\text{eff}} &= \frac{q_B}{\theta_s} \left(\frac{1}{(f_{\text{mak}} + 1)} \right) \sqrt{\frac{f_{\text{mak}}}{a_{\text{mak}}}} \\
 v_{\text{eff}} &= \sqrt{\frac{f_{\text{mak}}}{a_{\text{mak}}} \frac{q_{\text{mik}}}{\theta_s}} = K_{\text{eff}} \frac{q_{\text{mik}}}{\theta_s} \\
 \lim_{\substack{f_{\text{mak}} \rightarrow 0 \\ a_{\text{mak}} \rightarrow 0}} K_{\text{eff}} &= 1
 \end{aligned} \tag{6.20}$$

- mit q_B = Bulkflußdichte im Modellelement

Der Anteil a_{mak} der Makroporen am Transportquerschnitt läßt sich ebenfalls aus den Daten der Tabelle 6.1 in Abschnitt 6.2.2 errechnen. Sowohl f_{mak} als auch a_{mak} sind proportional zur Zahl der Makroporen der verschiedenen Radienklassen. Falls keine Makroporen vorhanden sind, konvergiert K_{eff} gegen 1³⁴. Die effektive Abstandsgeschwindigkeit wird dann wie gewohnt durch $v_{\text{eff}} = q/\theta_s$ beschrieben. Im Falle hydraulisch aktiver Makroporen ist die effektive Abstandsgeschwindigkeit hingegen um den Faktor K_{eff} größer als die Abstandsgeschwindigkeit bei reinem Transport in der Bodenmatrix.

6.4 Das erweiterte Gebietsmodell CATFLOW 2.0

Abbildung 6.4 zeigt die Kopplung des ursprünglichen Modells CATFLOW 1.0 zur Simulation der Wasserdynamik mit dem vorgestellten Prozeßmodell zur Simulation der Stoffdynamik. Im vorliegenden Fall geringer Stoffkonzentrationen in der Wasserphase ist die Wasserdynamik unabhängig vom Transportprozeß. Die physikalische Schnittstellen beider Prozeßmodelle bilden, wie bereits angedeutet, das Geschwindigkeitsfeld und die Bodenfeuchte zur Lösung der Schrittgleichung. Die Unabhängigkeit der Wasserdynamik vom Transportgeschehen spie-

gelt sich im modularen Aufbau des Gesamtmodellsystems wider. Das ursprüngliche Modell CATFLOW 1.0 bildet in unveränderter Form das Modul zur Beschreibung der Wasserdynamik im Gesamtmodell. Detaillierte Angaben zur räumlichen Diskretisierung, Zeitschrittsteuerung und zu einzelnen Prozeßansätzen von CATFLOW 1.0 finden sich bei Maurer (1997). Das zusätzliche Modul zur Beschreibung der Stoffdynamik ist vollkommen eigenständig und benötigt einzig das Geschwindigkeitsfeld und das Bodenfeuchtefeld als Input. Die Rückkopplung des Stoffmoduls auf das Wassermodul ist rein numerischer Natur, z.B. bei der Zeitschrittsteuerung mit 0.6 CFL als maximalem Zeitschritt.

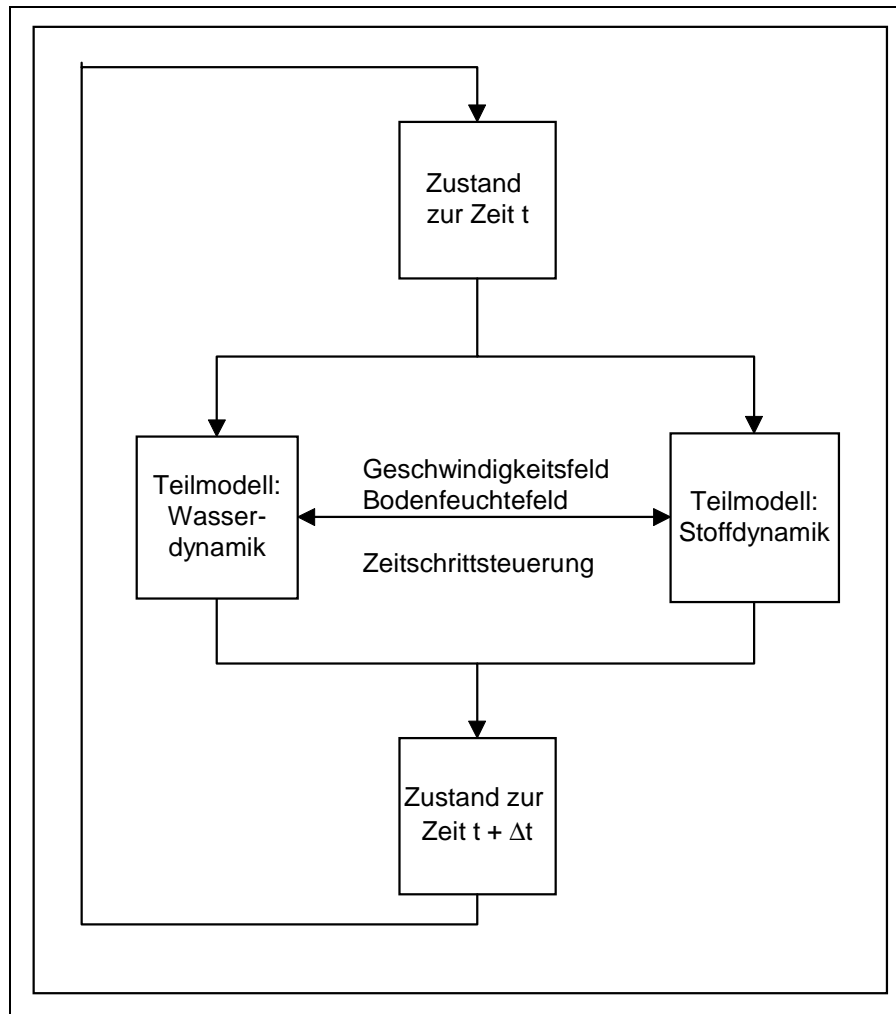


Abb. 6.4: Schema der Modellkopplung

Abbildung 6.5 zeigt schematisch die Lösung der Schrittgleichung nach der Übergabe des Geschwindigkeitsfelds und des Bodenfeuchtefelds zu den Zeiten t und $t+\Delta t$: Im ersten Schritt werden an jedem Knoten die verallgemeinerten Geschwindigkeiten und die Retardationskoeffizienten berechnet. Danach erfolgt die räumliche Interpolation des verallgemeinerten Geschwindigkeitsfelds $\mathbf{v}'(t)$ auf die Teilchenposition $\mathbf{r}(t)$ zur Zeit t und der Zwischenschritt auf den Ort $\mathbf{r}^* = \mathbf{r}(\Delta t) + \mathbf{v}(\mathbf{r}(t),t) \times \Delta t$. Dann wird die verallgemeinerte

³⁴ Nach der Regel von de l'Hopital.

Geschwindigkeit $\mathbf{v}'(t+\Delta t)$ zum neuen Zeitpunkt auf den virtuellen Ort \mathbf{r}^* interpoliert. Schließlich erfolgt der endgültige Teilchenschritt nach Formel (6.16).

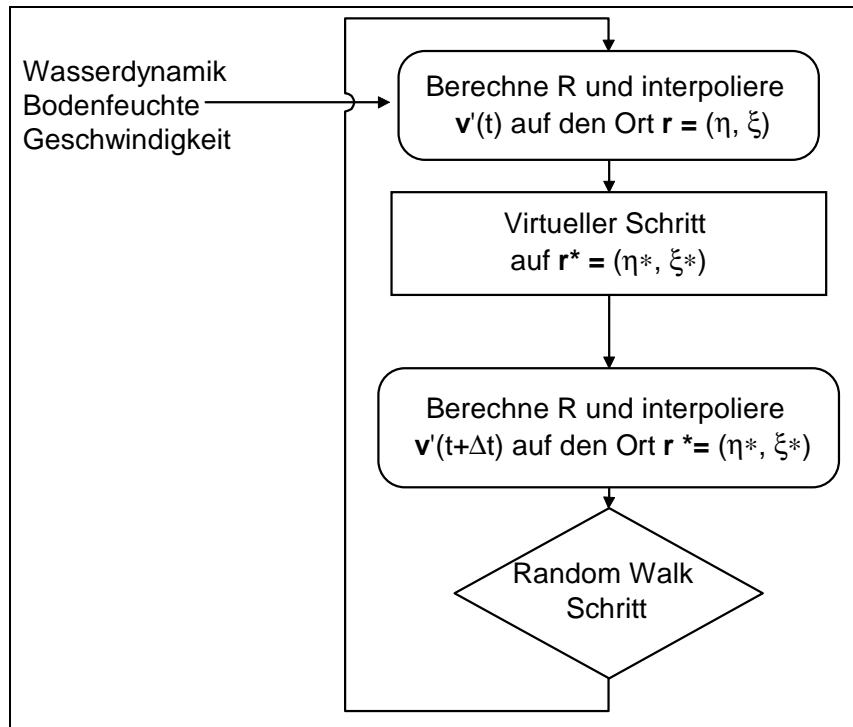


Abb. 6.5: Lösungsschema der Random-Walk-Schrittgleichung

An den gewünschten Ausgabezeitpunkten werden die Konzentrationsverteilung und die Momente der Schwerpunktsverteilung errechnet. Die relationale Datenstruktur, die Maurer (1997) zur Verwaltung der Randbedingungen und zum Zuweisen von Parametern aufgebaut hat, wurde auch im erweiterten Modell beibehalten. Redundanzen und vor allem Inkonsistenzen bei der Parameterzuweisung können so explizit ausgeschlossen werden. Die Datenstruktur des Gesamtmodells ist in der Modelldokumentation erklärt (Maurer, 1997).

6.5 Simulation der Anfangs-Randbedingungen

Für die in Kapitel 7 vorgestellte Monte-Carlo-Simulation benötigt man neben der in Abschnitt 6.2.2 vorgestellten Methode zur Simulation des Makroporensystems ein Verfahren zur Simulation der unscharfer Anfangszustände in Form von zufälligen Bodenfeuchtefeldern.

6.5.1 Simulation heterogener Randbedingungen: das Feld der gesättigten Gesamtleitfähigkeit k_s^B

Abbildung 6.6 zeigt das Feld der gesättigten Gesamtleitfähigkeit im Boden der Intensivmeßparzelle Mp 97 im rechten Diagramm sowie einer Parzelle B mit zehnfach niedrigerer Makroporosität im linken Diagramm, simuliert mit der in Abschnitt 6.2.2 vorge-

stellten Methode. Beide Abbildungen sind so skaliert, daß der kleinste Wert der Skala größer ist als die Leitfähigkeit der Bodenmatrix. Bereiche, in denen die Makroporen nicht zu einer Erhöhung der Gesamtleitfähigkeit führen, erscheinen daher weiß. Die Meßdaten der Tabelle 6.1 – die Wasserflußraten in Makroporen und die räumlichen Momente der Makroporendichte bzw. Makroporenlänge – bilden bei der Simulation Information erster Art, ebenso die mittleren Leitfähigkeiten der Bodenmatrix mit 4.9×10^{-6} m/s für den Ober- bzw. 1.6×10^{-6} m/s für den Unterboden aus Tabelle 4.4 in Abschnitt 4.2.3. Wesentlich für die Simulation ist die Annahme zweiter Art, daß Makroporen, die an der Oberfläche eines Modellelements beginnen, nicht seitlich in ein anderes Element eindringen. Die simulierten Makroporen verlaufen also im Rahmen der Modellauflösung ausschließlich vertikal, d.h. in z-Richtung. Die in Kapitel 3 vorgestellten Felduntersuchungen haben gezeigt, daß der Verlauf von Wurmgingen oft nur wenig von der vertikalen Richtung abweicht. Für Modellelemente mit nicht zu kleiner Querschnittsfläche ist diese Annahme daher näherungsweise erfüllt. Die wichtigste Information zweiter Art stellt die Schwellensättigung S_0 für das Initiieren von präferentieller Fließaktivität dar. Ihr Wert muß vor der Untersuchung explizit festgelegt werden.

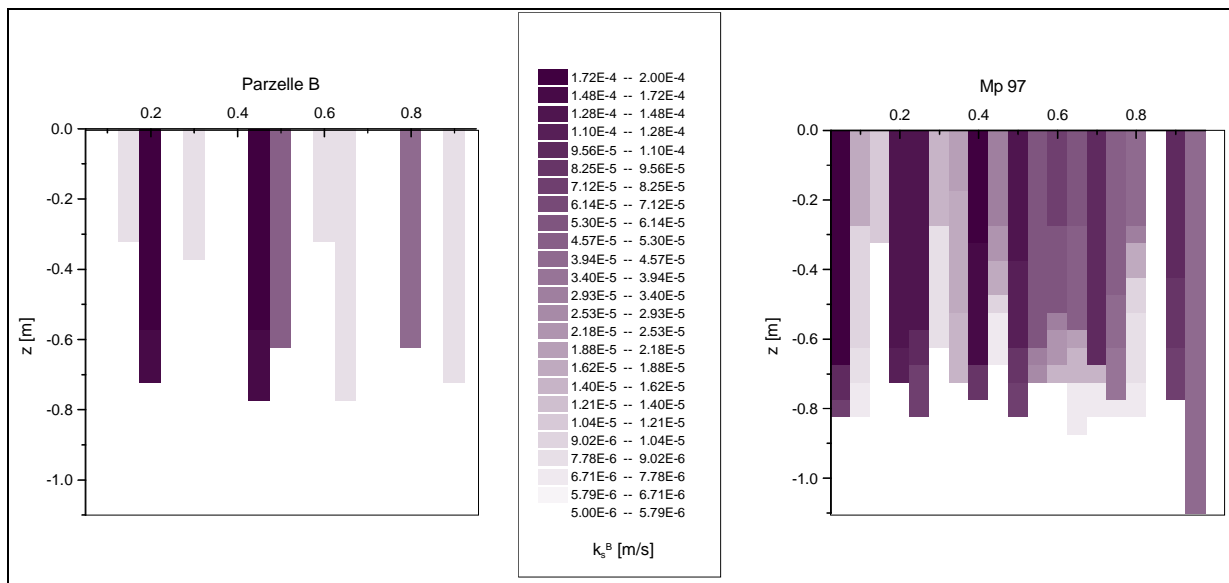


Abb. 6.6: Gesättigtes Gesamtleitfähigkeitsfeld der Parzelle Mp 97 und einer Parzelle B mit zehnfach niedrigerer Makroporosität

6.5.2 Simulation unscharfer Anfangsbedingungen mit dem "turning-band"-Algorithmus

Zur Generierung der zufälligen Bodenfeuchtefelder wurde ein entsprechendes Programm von Bardossy (1994) auf Basis der "turning-band"-Methode modifiziert. Der zweidimensionale "turning-band"-Algorithmus simuliert ein räumliches Zufallsfeld Z_2 mit Mittelwert 0 und Kovarianzfunktion C_2 als Linearkombination unabhängiger Realisationen eines eindimen-

sionalen Zufallsfeldes Z_1 mit Mittelwert 0 und Kovarianzfunktion C_1 . Betrachtet man den Wert des zweidimensionalen Zufallsfeldes Z_2 am Ort \mathbf{x}_n , so gilt:

$$Z_2(\mathbf{x}_n) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{i=1}^L Z_1(\mathbf{x}_n \cdot \hat{\mathbf{u}}_i) \quad (6.21)$$

mit \mathbf{u}_i = Einheitsvektor in Richtung der Bande i , $i = 1, \dots, L$

Zwischen den (schwach stationären) Kovarianzfunktionen des zweidimensionalen Zufallsfeldes C_2 und des eindimensionalen Prozesses C_1 besteht im isotropen Fall folgender Zusammenhang (Bras & Rodriguez-Iturbe, 1985; Brooker, 1985) :

$$C_2(\mathbf{l}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{Einheitskreis}} C_1(\mathbf{l} \cdot \hat{\mathbf{u}}) d\mathbf{u} \quad (6.22)$$

mit \mathbf{l} = Abstandsvektor zwischen zwei Punkten $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$

Folgende Größen bilden bei der "turning-band"-Simulation Information erster Art:

- Der Mittelwert und die Standardabweichung des Anfangsfeuchtefeldes aus Tabelle 4.2 in Abschnitt 4.2.1.
- Der Meßfehler der Bodenfeuchtemessung. Diesem Meßfehler entspricht in der Sprache der Geostatistik der sogenannte "nugget" eines Variogramms. Mit Hilfe des "nugget" läßt sich aus der Gesamtvarianz der sogenannte "sill" eines Variogramms errechnen.

Zur Generierung der Bodenfeuchtefelder benötigt man noch folgende Information zweiter Art:

- die Verteilungsfunktion der Bodenfeuchte
- die Variogrammfunktion zur Simulation der räumlichen Kovarianzfunktion C_1 des eindimensionalen Zufallsfeldes sowie den "range" (Reichweite) der Variogrammfunktion
- Im Falle einer geometrischen Anisotropie benötigt man zusätzlich das Verhältnis der Reichweiten sowie die Hauptrichtung der Anisotropie (Bardossy, 1994).

Bei bekannter Varianz maximiert die Normalverteilung die Zufälligkeit der betrachteten Bodenfeuchte-Stichprobe (Merz, 1996), daher wurde dieser Verteilungstyp für die Generierung von Bodenfeuchtefeldern gewählt. In der Geostatistik erfolgt die Beschreibung der räumlichen Variabilität einer Zufallsgröße Z üblicherweise mit Hilfe des Variogramms $\gamma(h)$ (Bras & Rodriguez-Iturbe, 1985, Dagan, 1989). Diese Größe geht unter gewissen Voraussetzungen in die klassische Varianz aller Bodenfeuchtemessungen über. Die Beschreibung der räumlichen Kovarianzstruktur erfolgte im vorliegenden Fall mit der in Gleichung (6.23) dargestellten sphärischen Variogrammfunktion (Bardossy, 1994; Brooker, 1985). Abbildung 6.7 zeigt ein sphärisches Variogramm und verdeutlicht die Begriffe "nugget", "sill" und "range". Der "nugget" entspricht dem Teil der Bodenfeuchtevarianz, der nicht durch räumliche Variation erklärbar ist, im vorliegenden Fall also dem Meßfehler am Punkt. Die Summe aus "sill" und "nugget"

ergibt die Gesamtvarianz σ^2 der Bodenfeuchtemessung. Der "range" gibt den Abstand zweier Punkte an, ab dem das Variogramm den Wert der Gesamtvarianz annimmt. Punkte die einen größeren Abstand aufweisen, sind statistisch gesehen unkorreliert.

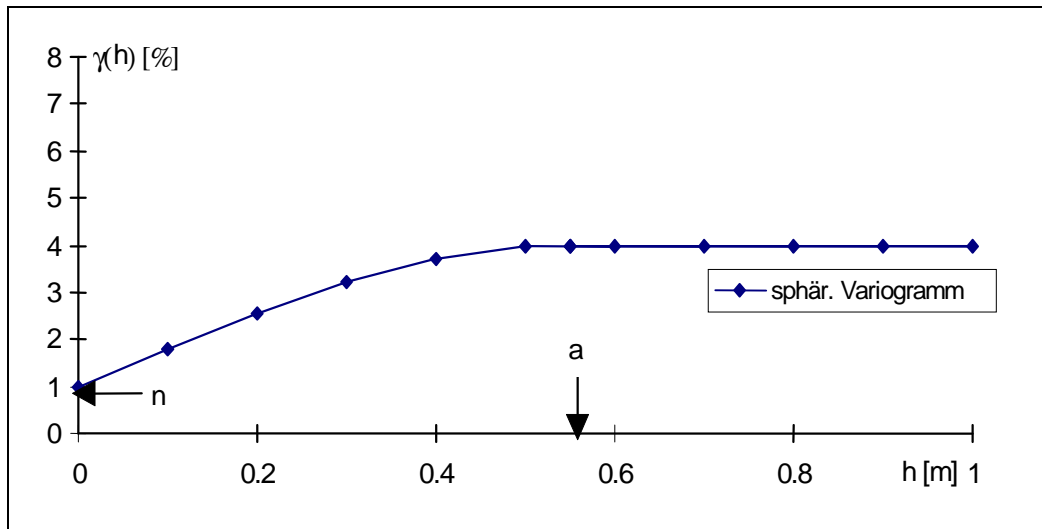


Abb. 6.7: Sphärisches Variogramm für die Bodenfeuchte mit einem "sill" s von 3 Vol.-%, einem "nugget" n von 1 %, einer Reichweite a von 0.55 m und einer Varianz von 4 Vol.-%.

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} E\left[(Z(x+h) - Z(x))^2\right]$$

$$\gamma(h) = n + s \left(\frac{3h}{2a} - \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right) \quad h \leq a \quad (6.23)$$

$$\gamma(h) = n + s \quad \text{sonst}$$

- mit
- h = "lag" oder Abstand der Punkte
 - a = Reichweite oder "range" der Variogrammfunktion
 - $E[-]$ = Erwartungswert der Größe
 - s = "sill"
 - n = "nugget" oder Mikrovariabilität der Messung

Bei der Generierung der Anfangsfeuchtefelder in Kapitel 7 wurden zwei Fälle unterschieden:

- a) **Anisotropie mit Hauptrichtung in der Vertikalen:** Das Bodenfeuchtefeld ist von vertikalen Strukturen geprägt, beispielsweise kurz nach einem präferentiellen Fließereignis. Als Reichweiten des Variogramms in der Vertikalen bzw. Horizontalen wurden die mittlere Tiefe des Makroporensystems $a_v = 0.55$ m und die Hälfte des mittleren Makroporenabstands an der Erdoberfläche $a_h = 0.16$ m festgelegt.
- b) **Anisotropie mit horizontaler Hauptrichtung:** Das Bodenfeuchtefeld ist von der Schichtung des Bodens geprägt. Als Reichweiten des Variogramms in der Horizontalen bzw. Vertikalen wurde die Größe der Parzelle $a_h > 1$ m und die Tiefe der TDR-Meßstäbe $a_v = 0.15$ m benutzt.

Da a priori keine Gründe für eine Isotropie des Anfangsfeuchtefeldes erkennbar sind, wurde auf die Generierung solcher Felder verzichtet. Abbildung 6.8 stellt jeweils eine Realisierung der Anfangsfeuchte bei horizontaler bzw. vertikaler Haupttrichtung der Anisotropie gegenüber. Im folgenden werden beide Fälle auch kurz als horizontale bzw. vertikal anisotrope Anfangsfeuchte angesprochen.

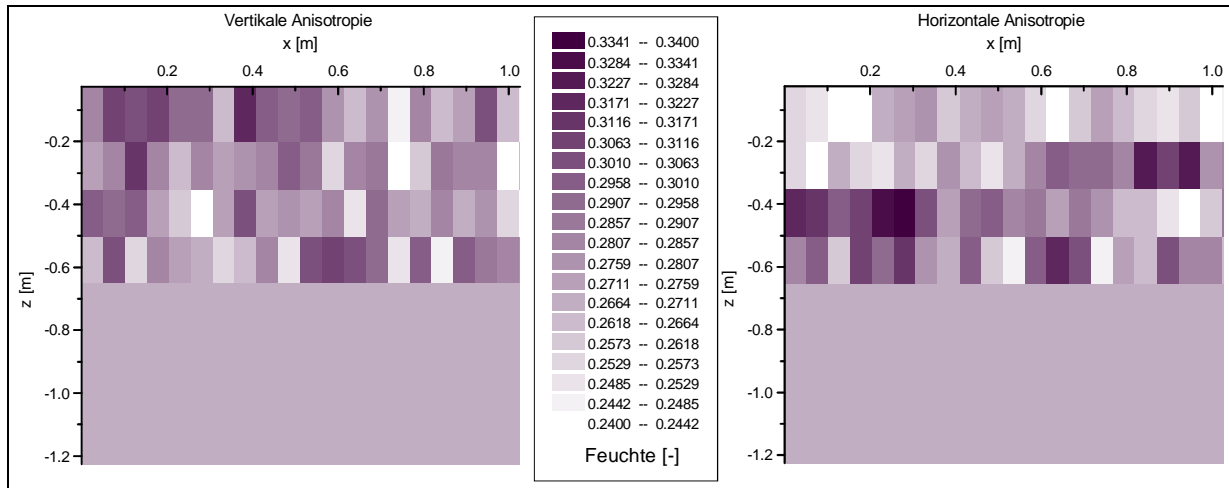


Abb. 6.8: Horizontal und vertikal anisotropes Feuchtefeld als unscharfer Anfangszustand für die Monte-Carlo-Simulation in Kapitel 7

7 Simulation der Wasser- und Stoffdynamik auf der Hang- und der Kleinskala

In den Abschnitten 7.1 und 7.2 des vorliegenden Kapitels wird die Langzeitsimulation des Transportexperiments am IUP-Hang mit dem erweiterten Gebietsmodell CATFLOW 2.0 präsentiert und diskutiert. Die Abschnitte 7.3 bis 7.5 zeigen ein sinnvolles Einsatzfeld für CATFLOW 2.0, nämlich die Prüfung der Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportexperimente am Beispiel der Berechnung der Intensivparzelle Mp 97 im Rahmen einer Monte-Carlo-Simulation.

7.1 Vorbereitung der Simulation auf der Hangskale

Ein wesentliches Ziel dieser Arbeit ist die Simulation des von Delbrück (1997) experimentell untersuchten Transportgeschehens am IUP-Hang (siehe auch Abbildung 3.1 in Kapitel 3) mit dem erweiterten Modellsystem CATFLOW 2.0. Dabei ist, wie in Abschnitt 6.1.1 bereits ausgeführt wurde, die Klärung der Frage, ob sich die im Modell implementierten Prozeßansätze auf Basis der Datengrundlage in Strenge falsifizieren lassen, von zentralem Interesse. Zum Einstieg werden im folgenden die Ziele, die relevanten Ergebnisse und die von Delbrück (1997) verwendeten Beprobungsmethoden kurz genannt.

Ziel des Tracerexperiments war sowohl eine geschlossene Wasserbilanz für den Hang als auch die Ableitung repräsentativer Parameter für die bodenhydraulischen Funktionen nach van Genuchten-Mualem (van Genuchten, 1980; Mualem, 1976) und für den Stofftransport. Zu diesem Zweck hat Delbrück (1997) den Transport von Bromid am IUP-Hang des Weiherbachgebiets auf einer Fläche von 9403 m² über mehr als zwei Jahre bis in mehr als 4 m Tiefe verfolgt. Insgesamt wurden auf der Fläche 65.3 kg Bromid ausgebracht, dies entspricht einer Flächenkonzentration von 7.0 g/m². Die Probennahme erfolgte mit Bohrstöcken, dabei wurden maximal 15 Bohrungen am ganzen Hang an Tagen hoher Beprobungsdichte entnommen. Zwar ergab die erste Probennahme nach der Applikation eine geschlossene Bromidmassenbilanz für den Hang, doch die beobachtete lokale Abweichung von der mittleren Flächenkonzentration mit 7.0 g/m² lag zwischen 30 - 40%. Demnach erzeugte bereits die Applikation eine erhebliche räumliche Variabilität der ausgebrachten Bromidmenge. Der mittlere Abstand der Bohrprofile liegt laut Delbrück (1997) bei 12 - 15 m, die ermittelten Konzentrationsprofile beschreiben somit den mittleren vertikalen Verlauf der

Bromidkonzentration für ein Flächenelement von mehr als 100 m². In Anbetracht der in Kapitel 5 präsentierten enormen kleinskaligen Variabilität des Transportprozesses, stellen diese Profile vor allem in der Frühphase des Experiments bestenfalls eine Annäherung an den tatsächlichen Verlauf der mittleren Bromidkonzentration in den Flächenelementen dar.

Besonders hervorzuheben ist der ganzheitliche Ansatz des Experiments, Delbrück (1997) versuchte, alle für die Modellierung der Wasser- und Stoffdynamik relevanten Parameter am IUP-Hang zu messen oder zumindest abzuschätzen. Vor allem die detaillierte, räumlich hochaufgelöste Information über die am Untersuchungsang anstehenden Bodenarten und die entsprechenden van Genuchten-Mualem-Parameter ist für die Anpassung eines numerischen Modells sehr wertvoll. Für jeden Horizont einer jeweiligen Bodenart wurden die bodenhydraulischen Parameter an mehreren ungestörten Bodenproben durch inverse Modellierung bestimmt (siehe Tabellen 7.1 und 7.2).

7.1.1 Vergleichsstrategie für Messung und Simulation

Welche Übereinstimmung zwischen den gemessenen und den simulierten Tracerdaten läßt sich in Anbetracht der Probennahmetechnik und -zahl sowie der räumlichen Variabilität der Bromidapplikation von 30 - 40% überhaupt erwarten? Prinzipiell stehen zwei Wege zum Vergleich der zweidimensionalen Simulationsergebnisse mit den Meßdaten offen:

Strategie 1: Interpolation der gemessenen Bohrstockprofile zu einem zweidimensionalen Konzentrationsfeld, z.B. mit geostatistischen Methoden und Vergleich der räumlichen Felder.

Strategie 2: Zuordnung der Meßpunkte zu Modellknoten und Vergleich der gemessenen und simulierten Bromidprofile an den Vergleichspunkten.

Laut Geib (mündliche Mitteilung, 1998) gibt es sehr deutliche Unterschiede zwischen den Bromidprofilen an der Ost- und Westseite des Hanges. Insofern erscheint eine Aggregation der Bromidprofile von Ost- und Westseite des Hanges zu **einem** zweidimensionalen Feld und damit ein Vergleich nach Strategie 1 wenig erfolgversprechend. Doch auch mit Strategie 2 läßt sich die Güte der im Modell implementierten Prozeßansätze nur begrenzt prüfen. So ist der Vergleich der an den Punkten simulierten Massenbilanzen mit den Massenbilanzen der Meßprofile in Anbetracht der enormen Variation der Bromidapplikation, des begrenzten Integrationsvolumens der Bohrstöcke und auch wegen der zweidimensionalen Modellstruktur nicht sinnvoll. Angemessen erscheint hingegen der Vergleich der simulierten und gemessenen Schwerpunktstiefen³⁵ und der Peakbreiten an den Meßpunkten sowie der Vergleich des simulierten und beobachteten räumlichen Musters der Schwerpunktstiefen am IUP-Hang.

³⁵ Die Tiefe der Bromidschwerpunkt in den Meßprofilen wird durch der Applikationsfehler nicht betroffen.

7.1.2 Die Anfangs-Randbedingungen der Langzeitsimulation

Maurer (1997) hat bereits im Rahmen seiner Dissertation die Bodenwasserdynamik am IUP-Hang für den Zeitraum April '93 bis März '95 mit dem Modellsystem CATFLOW 1.0 untersucht. Der Vergleichbarkeit halber, benutzt die vorliegende Untersuchung die gleiche dynamische Initialisierung des Anfangszustands des IUP-Hangs sowie die gleichen Randbedingungszeitreihen wie Maurer (1997). Zur Initialisierung des Modells wurde der IUP-Hang bei "ausgeschalteter Verdunstung" so lange mit einer Niederschlagsrate von 250 mm/a berechnet, bis sich ein stationäres Fließfeld einstellte. Diese Niederschlagsrate entspricht der mittleren Grundwasserneubildungsrate am IUP-Hang. Das Bodenfeuchtefeld dieses stationären Zustands dient als Anfangsfeld für alle 4 noch vorzustellenden Simulationsvarianten. Diesem Vorgehen liegt die Annahme zugrunde, daß sich am Ende der verdunstungsarmen Winterperiode ein stationäres Fließgleichgewicht im Hang eingestellt hat (Maurer, 1997).

Die meteorologischen Randflüsse für die Simulationen ergeben sich aus den Niederschlagsmessungen an der Station WB 2 (siehe auch Abbildung 3.1 in Abschnitt 3.1.) sowie den Daten der ca. 1 km entfernten meteorologischen Station. Eine Darstellung der entsprechenden Zeitreihen für den Simulationszeitraum von 21.04.1993 bis 20.04.1995 finden sich bei Maurer (1997).

Auch die räumliche Diskretisierung und die Bodenartenverteilung am IUP-Hang ist die gleiche wie bei Maurer (1997). Der 198 m × 53 m große Modellhang wurde in 22 × 39 Modellzellen bis in 5 m Tiefe diskretisiert. Die Fläche des Modellhangs ist mit 10480 m² um den Faktor 1.1 größer als die Versuchsfläche am IUP-Hang. Um die gleiche Flächenkonzentration von 7.0 g/m² zu erhalten, wurde der Hang daher mit einer entsprechend höheren Menge Bromid von 71.8 kg in Form von 30000 Tracerpartikeln beaufschlagt.

Ähnlich wie am Meßhang "am Neuenbürger Pfad", dessen geologischer Schnitt in Abbildung 7.1 gezeigt ist, befinden sich im oberen Bereich des Mittelhangs sowie am Fuß des IUP-Hangs in ca. 3 m Tiefe teilweise verlehnte Horizonte, die laut Delbrück (1997) noch vor der letzten Eiszeit entstanden sind. Diese Horizonte werden als Paläoboden oder Lößlehm angesprochen. In Abbildung 7.2 ist die Bodentypenverteilung und die Diskretisierung des Modellhangs dargestellt. Der am Oberhang anstehende Paläoboden wird im folgenden auch als 1. Lößlehm, der Paläobodenhorizont am Hangfuß als 2. Lößlehm bezeichnet. Neben den bereits erwähnten Lößlehmhorizonten befindet sich am Hangtop eine Lößpararendzina, am Hangfuß steht ein Kolluvium an.

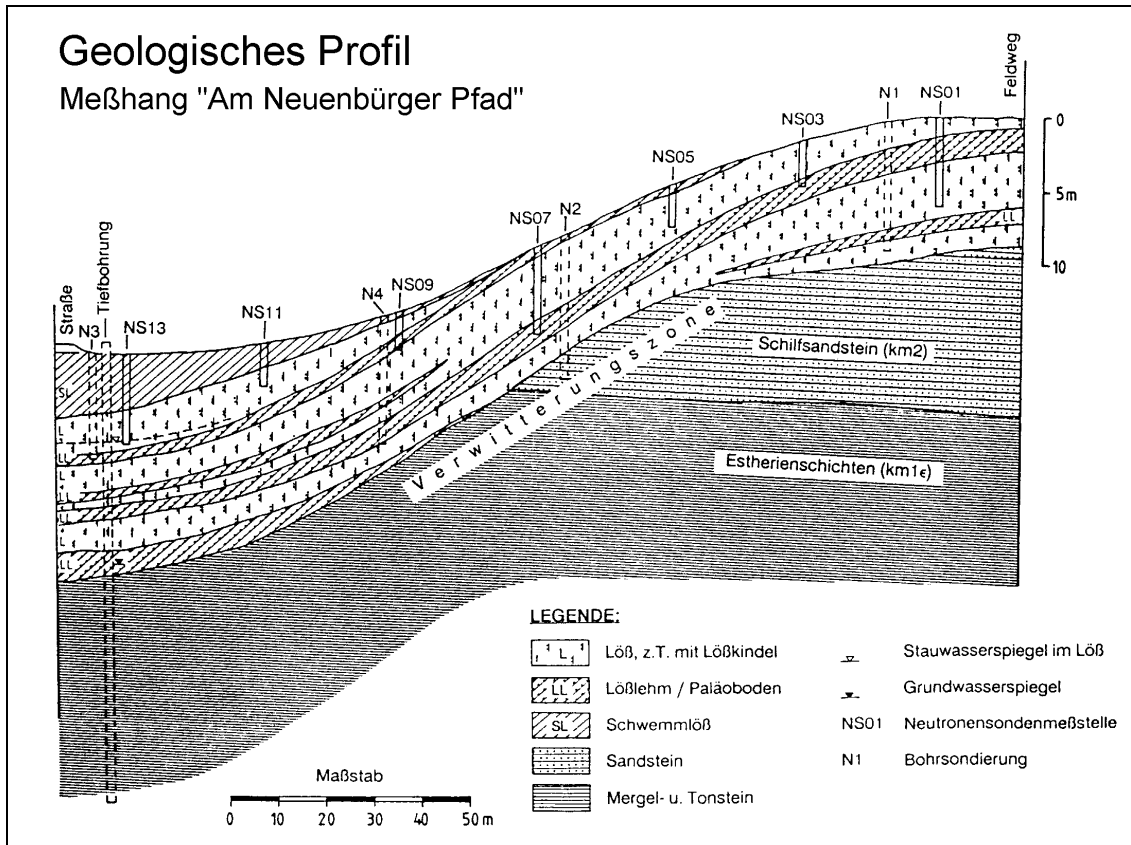


Abb. 7.1: Geologischer Schnitt eines nahegelegenen Hangs am "Neubürger Pfad" (aus Bohleber, 1992)

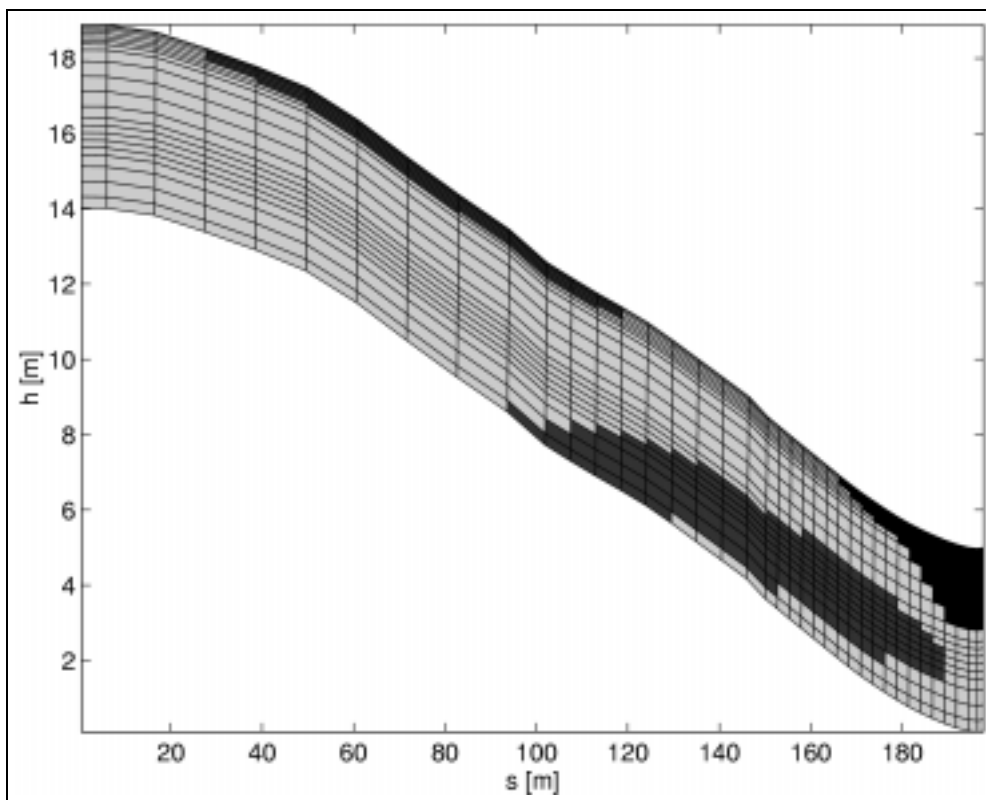


Abb. 7.2: Verteilung der Bodenarten am Modellhang, dargestellt in relativen, kartesischen Höhen- und Seitenkoordinaten h und s . Die dunkelgrauen Bereiche stellen Kolluvium bzw. Lößlehm dar, die hellgrauen Löß.

7.1.3 Modellanpassung

Da CATFLOW 1.0 kein Modul zur Beschreibung von Stofftransport enthält, standen Maurer (1997) im wesentlichen nur die räumliche Bodenfeuchteverteilung am IUP-Hang und die Grundwasserneubildungsrate für den Vergleich zwischen Messung und Simulation zur Verfügung. Die vorliegende Untersuchung vergleicht vier Anpassungsvarianten auf ihre Tauglichkeit zur Langzeitsimulation des Bromidtransports am IUP-Hang, zwei davon entsprechen den von Maurer (1997) untersuchten REF- und ORG-Varianten.

In den Tabellen 7.1 und 7.2 finden sich die van Genuchten-Mualem-Parameter der am IUP-Hang anstehenden Böden. Die gesättigten hydraulischen Leitfähigkeiten der Bodenproben wurden laut Delbrück (1997) sowohl direkt gemessen (bei $pF = 0$) als auch durch Extrapolation der invers modellierten ungesättigten Leitfähigkeitskurve bestimmt. Das Verhältnis aus direkt zu invers bestimmter gesättigter Leitfähigkeit in Tabelle 7.1 ist nach Delbrück (1997) ein Maß für den Effekt hydraulisch aktiver Makroporen bei der Infiltration. Für den 2. Lößlehm, gelegen in ca. 3 m Tiefe am Hangfuß (siehe Abbildung 7.2), liegen keine gesonderten Meßdaten vor. Die dem Bodentyp "Kolluvium" entsprechende Bodenart wird in Anlehnung an Delbrück (1997) im folgenden als Schwemmlöß angesprochen.

Tabelle 7.1: Van Genuchten-Mualem-Parameter der Bodenarten (Ap: Pflughorizont bis ca. 40 cm) des IUP-Hangs nach Delbrück (1997)

| Bodenart | k_s direkt [m/s] | k_s invers [m/s] | θ_s [%] | θ_r [%] | α [1/cm] | n [-] |
|-----------------|--------------------------------|--------------------------------|-------------------|-------------------|--------------------|------------|
| Löß | $(2.1 \pm 0.9) \times 10^{-6}$ | $(3.1 \pm 0.7) \times 10^{-7}$ | 0.44 | 0.06 | 0.004 | 2.06 |
| 1. Lößlehm | $(5.0 \pm 2) \times 10^{-6}$ | $(6.3 \pm 4) \times 10^{-6}$ | 0.47 | 0.11 | 0.059 | 1.23 |
| Schwemmlöß | $(1.1 \pm 0.2) \times 10^{-5}$ | $(1.7 \pm 0.5) \times 10^{-6}$ | 0.40 | 0.04 | 0.019 | 1.25 |
| Löß (Ap) | $(3.4 \pm 1.5) \times 10^{-6}$ | $(1.1 \pm 0.2) \times 10^{-6}$ | 0.46 | 0.06 | 0.015 | 1.36 |
| 1. Lößlehm (Ap) | $(3.7 \pm 0.9) \times 10^{-6}$ | $(8.3 \pm 3) \times 10^{-6}$ | 0.41 | 0.12 | 0.053 | 1.17 |
| Schwemmlöß (Ap) | $(4.1 \pm 2) \times 10^{-5}$ | $(4.2 \pm 1) \times 10^{-6}$ | 0.43 | 0.11 | 0.012 | 1.20 |

Tabelle 7.2: Direkt gemessene, gesättigte Leitfähigkeiten verschiedener Horizonte unter Einschluß von Makroporeneffekten nach Delbrück (1997)

| Horizont | Schwemmlöß [m/s] | Löß [m/s] | Lößlehm [m/s] |
|------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| 0 - 10 cm | 5.4×10^{-5} | 6.0×10^{-6} | 2.7×10^{-4} |
| > 10 cm | 2.7×10^{-5} | 1.7×10^{-6} | 3.7×10^{-6} |
| Unterboden | 1.0×10^{-6} | 2.1×10^{-6} | - |

Im folgenden werden die einzelnen Anpassungsvarianten vorgestellt. Die Varianten unterscheiden sich vor allem dadurch, ob den Bodenarten am IUP-Hang die direkt oder die invers bestimmten gesättigten Leitfähigkeiten zugewiesen werden..

Variante 1 entspricht der REF-Variante der Untersuchung von Maurer (1997). Den Bodenarten am IUP-Hang werden die direkt gemessenen gesättigten Leitfähigkeiten aus Tabelle 7.1 sowie die Werte aus Tabelle 7.2 für die oberen 10 cm des Pflughorizontes zugewiesen. Der 2. Lößlehmhorizont erhält mit $k_s = 5 \times 10^{-5}$ m/s eine 10 mal größere gesättigte Leitfähigkeit als der 1. Lößlehm. Diese Anpassung wurde durch Maurer (1997) vorgenommen, nachdem es bei der Simulation mit der unten vorgestellten Simulation ORG-Variante zu lateralem Abfließen des infiltrierenden Wassers an der Obergrenze des 2. Lößlehms kam, welches durch Delbrück (1997) jedoch nicht beobachtet wurde. Durch die Anpassung des k_s -Werts im 2. Lößlehm trat im Rahmen der REF-Variante die laterale Wasserbewegung an der Horizontgrenze des 2. Lößlehms nicht mehr auf. Die Simulation führte laut Maurer (1997) zu zufriedenstellenden Ergebnissen für die Grundwasserneubildungsrate und die räumliche Bodenfeuchteverteilung am IUP-Hang. Da in den direkt bestimmten gesättigten Leitfähigkeiten der Effekt aktiver Makroporen enthalten ist, müssen die Parameter des Makroporenmodells nicht spezifiziert werden, das Teilmodul bleibt bei der Simulation ausgeschaltet.

Variante 2 entspricht der ORG-Variante bei Maurer (1997). Der Unterschied zu Variante 1 ist, daß dem 2. Lößlehm und dem Kolluvium im Unterboden am Fuß des IUP-Hangs die plausibleren gesättigten Leitfähigkeiten von $k_s = 5 \times 10^{-6}$ m/s und $k_s = 1.1 \times 10^{-6}$ m/s aus den Tabellen 7.1 und 7.2 zugewiesen werden.

Variante 3: Den Bodenarten werden die invers bestimmten, gesättigten Leitfähigkeiten aus Tabelle 7.1 zugewiesen. Da diese Werte den Effekt aktiver Makroporen nicht berücksichtigen, werden zum Betreiben des Makroporenmodells nach den Abschnitten 6.2.2 und 6.3.5 der Makroporositätsfaktor f_{mak} , den Makroporenflächenanteil a_{mak} sowie die Schwellensättigung S_0 benötigt. Bei der Simulation der Gebietswasserdynamik hat Maurer (1997) gute Ergebnisse mit $S_0 = 0.8$ erzielt, dieser Wert wurde für die Varianten 3 und 4 übernommen. Für Variante 3 ergibt sich f_{mak} aus dem Verhältnis der direkt zur invers bestimmten gesättigten Leitfähigkeiten in Tabelle 7.1. Allerdings erhält man auf diese Art für den Lößlehm Werte für f_{mak} , die kleiner als 1 sind. Da die gesamte Bulkflußdichte in Makroporen und Matrix nicht kleiner werden kann als die reine Matrixflußdichte, wurde der Wert auf 1 gesetzt. Diese Änderung liegt im Fehlerbereich der Messung.

Im Falle präferentieller Fließaktivität dient der Makroporenflächenanteil zur Abschätzung des Transportquerschnitts und damit zur Abschätzung der effektiven Abstandsgeschwindigkeit in den Makroporen eines Modellelements. Auf Basis der Ergebnisse der in Unterkapitel 4.1 (siehe Tabelle 4.1) vorgestellten Makroporenkartierungen (Schmaland, 1996) läßt sich eine Regressionsbeziehung des Makroporenflächenanteils a_{mak} als Funktion der normierten Hang-

position für einen typischen Hang des Weiherbachgebiets aufstellen (siehe Tabelle 7.3)³⁶. Mit Hilfe dieser Regressionsbeziehung läßt sich den Knoten des Modellhangs ein Makroporenflächenanteil zuordnen.

Variante 4: In Variante 4 werden den Bodenarten am IUP-Hang die invers bestimmten gesättigten Leitfähigkeiten zugewiesen, genau wie in Variante 3. Die Schwellensättigung für das Initiieren präferentieller Fließaktivität beträgt ebenfalls $S_0 = 0.8$. Der Unterschied liegt in der Berechnung des Makroporositätsfaktors für die Böden des IUP-Hangs. Die in Kapitel 5 präsentierte strukturierte Variabilität der Infiltration, wurde maßgeblich durch die Verteilung der Makroporosität auf der Hangskale bestimmt. Aus den Ergebnissen der Makroporenkartierungen (siehe Abschnitt 4.1) folgt im wesentlichen, daß im Jahr 1996 an einem typischen Hang des Weiherbachtals die Makroporosität im Kolluvium am Hangfuß höher war als am Hangtop oder der Hangmitte. Für Variante 3 wird auf Basis dieser einfachen Vorstellung die räumliche Verteilung des Makroporositätsfaktors bestimmt. Tabelle 7.3 zeigt die zugrundeliegenden Regressionsgleichungen für das Gesamtvolumen der Makroporen V_m im Boden für 3 verschiedene Radien, die Regressionsgleichung für mittlere Länge l_{mak} und die Regressionsgleichung für den Makroporenflächenanteil a_{mak} als Funktion der Hangposition nl .

Tabelle 7.3: Regressionsbeziehungen für das Makroporenvolumen V_m , die mittlere Tiefe der Makroporen l_{mak} und den Makroporenflächenanteil a_{mak}

| Parameter | Regressionsbeziehung | R ² |
|-------------------------------------|--------------------------------|----------------|
| a_{mak} [-] | $a_{mak} = 0.0084 nl + 0.0018$ | 0.66 |
| l_{mak} [m] | $l_{mak} = 0.211 nl + 0.194$ | 0.67 |
| v [m ³], $r = 2.5$ mm | $V_m = 0.0004 nl + 0.00001$ | 0.69 |
| v [m ³], $r = 2.5$ mm | $V_m = 0.0003 nl + 0.00001$ | 0.57 |
| v [m ³], $r = 2.5$ mm | $V_m = 0.0002 nl$ | 0.69 |

Unter Zuhilfenahme der Matrixleitfähigkeiten aus Tabelle 7.1 und der gesättigten Wasserflußraten in Makroporen aus Tabelle 6.1 läßt sich mit den Regressionsgleichungen in Tabelle 7.3 die Verteilung des Makroporositätsfaktors für einen typischen Lößhang des Weiherbachgebiets abschätzen. Abbildung 7.3 zeigt die räumlichen Verteilungen der Gesamtleitfähigkeit, die sich in den Varianten 3 und 4 für den makroporösen Oberboden des IUP-Hangs ergeben.

Die Verteilung des Makroporositätsfaktors am Modellhang in Variante 4 entspricht einer mittleren Tendenz, wie sie im Jahr 1996 im Weiherbachgebiet zu finden war. Diese Tendenz muß auch aufgrund des Einflusses der Fruchtfolge auf die Makroporosität nicht für die Verhältnisse am IUP-Hang zutreffen. Variante 3 hingegen nutzt das Verhältnis der direkt zur invers bestimmten gesättigten Leitfähigkeit als Makroporositätsfaktor.

³⁶ Da der IUP-Hang in einem Seitental des Weiherbachgebiets liegt wurden bei der Regression des Makroporenflächenanteils keine Auenstandorte berücksichtigt.

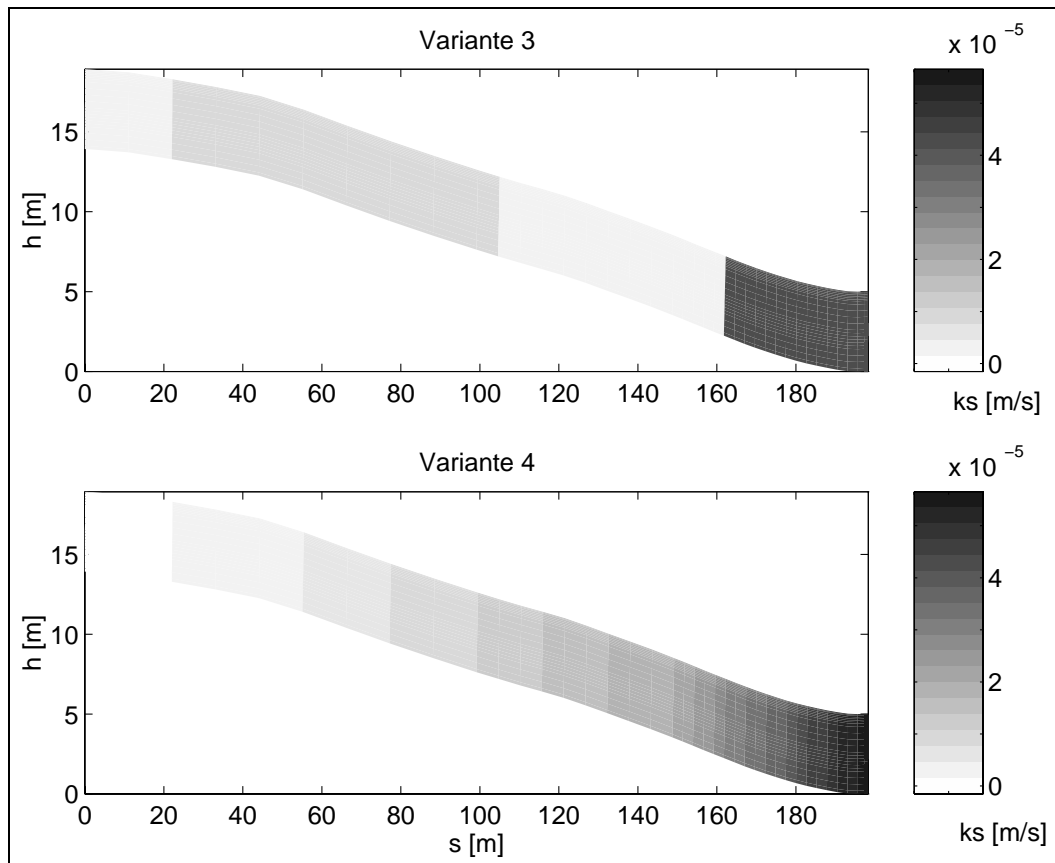


Abb. 7.3: Räumliche Verteilungen der Gesamtleitfähigkeit im makroporösen Oberboden des IUP-Hangs für die Varianten 3 und 4

In diesem Fall ergibt sich dessen räumliche Verteilung am Modellhang aus der detailliert bekannten Bodenverteilung am IUP-Hang. Die Verteilung des Makroporenflächenanteils a_{mak} ist in **beiden** Varianten die gleiche. Der Vergleich der Simulationsergebnisse der Varianten 3 und 4 liefert daher die Sensitivität der Ergebnisse für Veränderungen der Parameter a_{mak} und f_{mak} . Tabelle 7.4 gibt zusammenfassend einen Überblick über die wesentlichen Unterschiede zwischen den 4 Anpassungsvarianten. Zum Vergleich zwischen Simulation und Experiment wurden die folgenden Termine mit besonders hoher Beprobungsdichte mit der freundlichen Hilfe von Geib (IUP) ausgewählt:

1. **Vergleichstermin:** Der 8. September 1993, ca. 5 Monate nach der Tracerapplikation und vor dem Beginn der feuchten Jahreszeit.
2. **Vergleichstermin:** Der 23. März 1994, ziemlich genau ein Jahr nach der Applikation, gegen Ende der Hauptniederschlagsperiode.
3. **Vergleichstermin:** Der 26. Juli 1994, mitten in der Verdunstungsphase.
4. **Vergleichstermin:** Der 24. März 1995, zwei Jahre nach Applikation und nach einer weiteren Niederschlagsperiode.

Für den Vergleich zwischen Simulation und Messung dienen die über den Hang gemittelte Schwerpunkstiefe $\langle z_{\text{sp}} \rangle$, die Standardabweichung σ_{sp} der Schwerpunkstiefen an den Ver-

gleichspunkten vom Mittelwert und um zu prüfen, wie gut das räumliche Muster der simulierten Schwerpunkstiefen mit dem beobachteten Muster der Schwerpunkstiefen übereinstimmt, wird zusätzlich deren Korrelationskoeffizient R_{sp} berechnet:

$$\begin{aligned}
 \langle z_{sp} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_i z_{sp}(s_i) \\
 \sigma_{sp} &= \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_i (z_{sp}(s_i) - \langle z_{sp} \rangle)^2} \\
 R_{sp} &= \frac{1}{N} \frac{\sum_i (z_{sp_{mess}}(s_i) - \langle z_{sp_{mess}} \rangle)(z_{sp_{sim}}(s_i) - \langle z_{sp_{sim}} \rangle)}{\sigma_{sp_{mess}} \sigma_{sp_{sim}}}
 \end{aligned} \tag{7.1}$$

mit s_i = Seitenkoordinate des Vergleichspunkts i

N = Zahl der Vergleichspunkte

$z_{sp_{mess}}, z_{sp_{sim}}$ = gemessene bzw. simulierte Schwerpunkstiefe am Vergleichspunkt

Tabelle 7.4: Zusammenfassung der Unterschiede zwischen den einzelnen Anpassungsvarianten

| Parameter | Bodenart | Variante 1 | Variante 2 | Variante 3 | Variante 4 |
|-------------|-------------------------|----------------------|----------------------------|---|----------------------|
| k_s [m/s] | Löß (0 - 10 cm) | 6.0×10^{-6} | 6.0×10^{-6} | 1.1×10^{-6} | 1.1×10^{-6} |
| k_s [m/s] | Löß (15 - 35 cm) | 3.4×10^{-6} | 3.4×10^{-6} | 1.1×10^{-6} | 1.1×10^{-6} |
| k_s [m/s] | Löß (> 35 cm) | 2.1×10^{-6} | 2.1×10^{-6} | 3.1×10^{-7} | 3.1×10^{-7} |
| k_s [m/s] | Schwemmlöß (0 - 10 cm) | 5.4×10^{-5} | 5.4×10^{-5} | 4.2×10^{-6} | 4.2×10^{-6} |
| k_s [m/s] | Schwemmlöß (15 - 35 cm) | 4.1×10^{-5} | 4.1×10^{-5} | 4.2×10^{-6} | 4.2×10^{-6} |
| k_s [m/s] | Schwemmlöß (> 35 cm) | 1.1×10^{-5} | 1.0×10^{-6} | 1.7×10^{-6} | 1.7×10^{-6} |
| k_s [m/s] | 1. Lößlehm (0 - 10 cm) | 2.7×10^{-4} | 2.7×10^{-4} | 8.3×10^{-6} | 8.3×10^{-6} |
| k_s [m/s] | 1. Lößlehm (15 - 35 cm) | 5.0×10^{-6} | $5.0 \pm 2 \times 10^{-6}$ | 8.3×10^{-6} | 8.3×10^{-6} |
| k_s [m/s] | 1. Lößlehm (> 35 cm) | 3.7×10^{-6} | 3.7×10^{-6} | 6.3×10^{-6} | 6.3×10^{-6} |
| k_s [m/s] | 2. Lößlehm | 5.0×10^{-5} | 5.0×10^{-6} | 8.3×10^{-6} | 8.3×10^{-6} |
| S_0 | alle | – | – | 0.8 | 0.8 |
| a_{mak} | alle | – | – | Regression | Regression |
| f_{mak} | alle | – | – | $k_{s\text{direkt}}/k_{s\text{invers}}$ | Regression |

7.2 Simulation auf der Hangskale: Ergebnisse und Diskussion

7.2.1 Vergleich des mittleren Transportgeschehens

Im folgenden werden zuerst die Ergebnisse der vier Termine vorgestellt und dann in Abschnitt 7.2.2 gemeinsam diskutiert.

1. Vergleichstermin, 8.9.1993: In Tabelle 7.5 finden sich die mittlere Schwerpunkstiefe $\langle z_{sp} \rangle$, die Standardabweichung σ_{sp} der Messung und aller Simulationsvarianten sowie die Korrelation R_{sp} zwischen den beobachteten und simulierten der Schwerpunkstiefen. Abbildung 7.4 zeigt im oberen Graphen die Verteilung der Transportdistanz der Bromidschwerpunkte für die Messung sowie die Varianten 2 und 3, aufgetragen gegen die normierte Hangposition nl der Vergleichspunkte. Der Absolutfehler der gemessenen Schwerpunkstiefen in Abbildung 7.5 wurde auf 10 cm geschätzt. Alle Simulationsvarianten überschätzen die Tiefenverlagerung des Bromidschwerpunkts bis zu einem Faktor 2. Allerdings beträgt die über den Hang gemittelte Massenbilanz zu diesem Zeitpunkt $4.4 \pm 0.4 \text{ g/m}^2$, das entspricht einer Wiederfindungsrate von ca. 68%. Laut Geib (mündliche Mitteilung, 1998) wurde der gesamte Hang zu diesem Zeitpunkt nur bis in 1 m Tiefe beprobt, offensichtlich wurde die Tiefenverlagerung des Bromids durch Delbrück (1997) unterschätzt. Die Korrelation zwischen der räumlichen Verteilung der gemessenen und simulierten Schwerpunkstiefen der Varianten 1 bis 3 ist von gleicher Güte, Variante 4 liefert ein völlig falsches Bild der räumlichen Verteilung. Die Standardabweichung σ_{sp} von mittleren Schwerpunkstiefe wird am besten von den Varianten 3 und 4 getroffen.

Tabelle 7.5: Vergleich zwischen Messung und Simulation am 8. September 93, dargestellt sind die mittlere Schwerpunkstiefe $\langle z_{sp} \rangle$, die Standardabweichung der Schwerpunkstiefen σ_{sp} und der Korrelationskoeffizient R_{sp} zwischen simulierten und gemessenen Schwerpunkstiefen

| | Messung | Variante 1 | Variante 2 | Variante 3 | Variante 4 |
|-------------------------------------|----------------|------------|------------|------------|------------|
| R_{sp} | | 0.44 | 0.47 | 0.46 | -0.07 |
| $\langle z_{sp} \rangle [\text{m}]$ | 0.26 ± 0.1 | 0.40 | 0.38 | 0.49 | 0.50 |
| $\sigma_{sp} [\text{m}]$ | 0.049 | 0.039 | 0.029 | 0.049 | 0.043 |

2. Vergleichstermin 23.3.1994: Tabelle 7.6 zeigt die Größen $\langle z_{sp} \rangle$ und σ_{sp} für die Messung und alle Simulationsvarianten sowie die Korrelation R_{sp} zwischen den beobachteten und simulierten der Transportdistanzen der Bromidschwerpunkte.

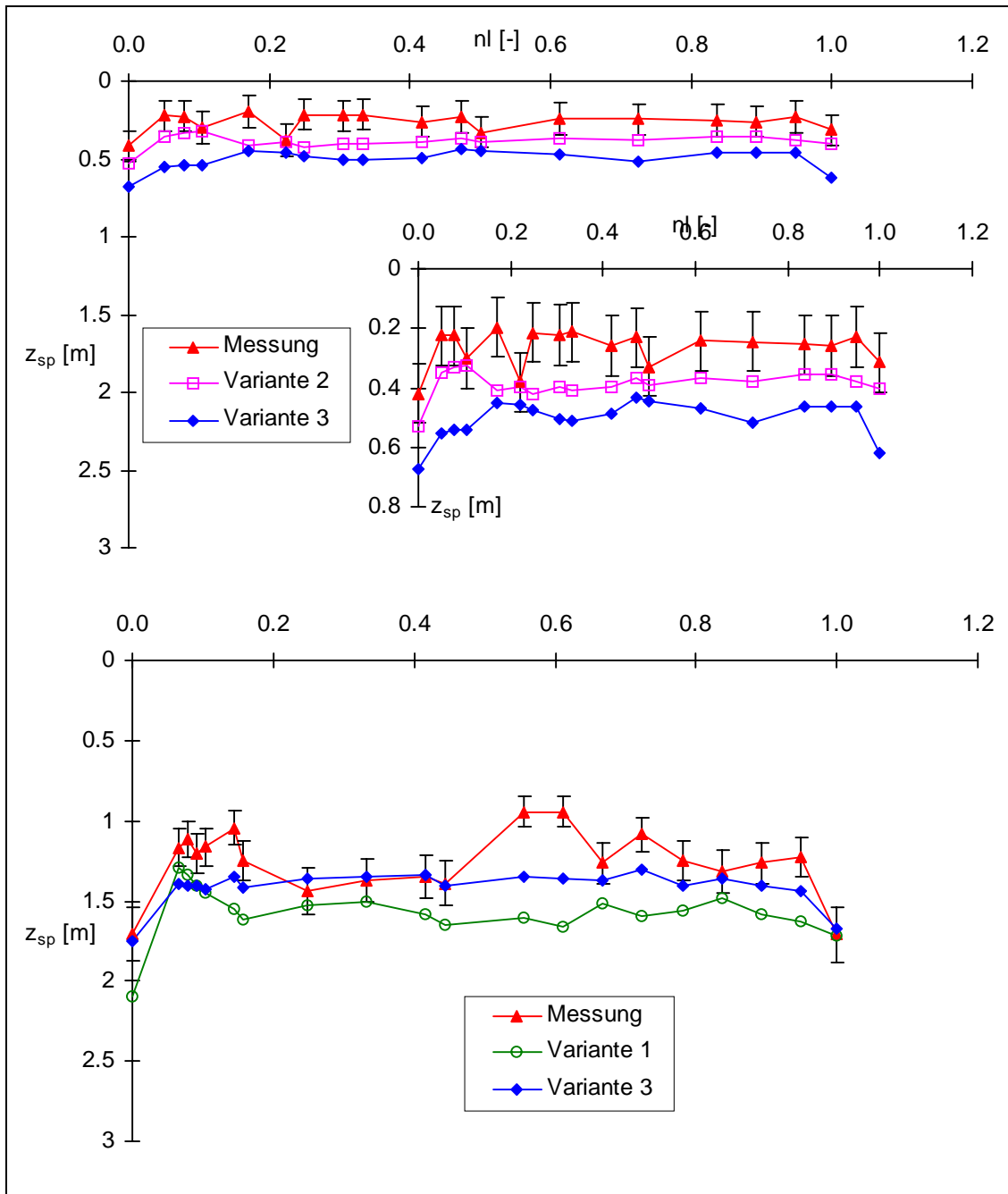


Abb. 7.4: Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Schwerpunkstiefen am 8.9.1993 (oberes Diagramm) und am 23.3.1994 (unteres Diagramm) aufgetragen gegen die normierte Hangposition nl der Vergleichspunkte. Der Kasten im oberen Diagramm zeigt den ersten Meßtermin auf einer feineren Skala.

Der untere Graph in Abbildung 7.4 stellt die räumliche Verteilung der Bromidschwerpunkte der Messung und der Simulationsvarianten 1 und 3 gegenüber. Der relative Fehler der gemessenen Schwerpunkstiefen wurde auf 10% geschätzt (Geib, mündliche Mitteilung, 1998). Die mittlere Massenbilanz beträgt zu diesem Zeitpunkt $10.6 \pm 1.1 \text{ g/m}^2$, dies entspricht einer Wiederfindungsrate von 150%.

Tabelle 7.6: Vergleich zwischen Messung und Simulation am 23. März 94, dargestellt sind die mittlere Schwerpunkstiefe $\langle z_{sp} \rangle$, die Standardabweichung der Schwerpunkstiefen σ_{sp} und der Korrelationskoeffizient R_{sp} zwischen den simulierten und gemessenen Schwerpunkstiefen

| | Messung | Variante 1 | Variante 2 | Variante 3 | Variante 4 |
|-------------------------------------|-----------------|------------|------------|------------|------------|
| R_{sp} | | 0.52 | 0.48 | 0.74 | 0.53 |
| $\langle z_{sp} \rangle [\text{m}]$ | 1.23 ± 0.12 | 1.56 | 1.42 | 1.40 | 1.41 |
| $\sigma_{sp} [\text{m}]$ | 0.157 | 0.090 | 0.107 | 0.037 | 0.045 |

Die mittlere Schwerpunkstiefe in Variante 1 ist deutlich größer als der Meßwert, die entsprechenden Werte der Varianten 2 bis 4 liegen fast im Fehlerbereich. Die Korrelation zwischen der räumlichen Verteilung der simulierten Schwerpunkstiefen und der räumlichen Verteilung der entsprechenden Meßwerte ist für Variante 3 mit $R_{sp} = 0.74$ klar am höchsten. Die räumliche Variabilität der Schwerpunkstiefen wird von allen Simulationsvarianten unterschätzt.

3. Vergleichstermin 26.7.1994: In Tabelle 7.7 finden sich $\langle z_{sp} \rangle$, σ_{sp} für die Messung und für alle Simulationsvarianten sowie die Korrelation R_{sp} zwischen den beobachteten und simulierten Schwerpunkstiefen. Die Abbildung 7.5 zeigt im oberen Graphen die räumliche Verteilung der Schwerpunkstiefe für die Messung, Variante 1 mit schlechtestem und Variante 3 mit dem beste Korrelationskoeffizienten R_{sp} . Die mittlere Massenbilanz beträgt zu diesem Zeitpunkt $5.6 \pm 0.6 \text{ g/m}^2$ ungefähr 80% des applizierten Bromids wurden wiedergefunden. Auch an diesem Termin wird die mittlere Schwerpunkstiefe durch Variante 1 überschätzt, die mittleren Schwerpunkstiefen der anderen Varianten 1 - 3 liegen im Fehlerbereich des Meßwerts.

Tabelle 7.7: Vergleich zwischen Messung und Simulation am 26. Juli 94, dargestellt sind die mittlere Schwerpunkstiefe $\langle z_{sp} \rangle$, die Standardabweichung der Schwerpunkstiefen σ_{sp} und der Korrelationskoeffizient R_{sp} zwischen den simulierten und gemessenen Schwerpunkstiefen

| | Messung | Variante 1 | Variante 2 | Variante 3 | Variante 4 |
|-------------------------------------|-----------------|------------|------------|------------|------------|
| R_{sp} | | 0.09 | 0.06 | 0.21 | -0.08 |
| $\langle z_{sp} \rangle [\text{m}]$ | 1.41 ± 0.14 | 1.68 | 1.49 | 1.51 | 1.54 |
| $\sigma_{sp} [\text{m}]$ | 0.326 | 0.203 | 0.111 | 0.165 | 0.127 |

Das räumliche Muster der gemessenen Schwerpunkstiefe wird in keiner der Varianten befriedigend simuliert, Variante 3 schneidet mit einem Korrelationskoeffizienten von 0.21 noch am besten ab. Die Variabilität der Tiefenverlagerung wird ebenfalls in allen Varianten stark unterschätzt. Ursache für die hohe räumliche Variabilität des Bromidtransports ist vermutlich der räumlich variable Wasserentzug der Pflanzen bei der Transpiration im Sommer, der zu einer starken Variation des kapillaren Aufstiegs führt. Das Modellsystem CATFLOW 2.0 ist offensichtlich nicht in der Lage, diesen Effekt realistisch zu simulieren.

4. Vergleichstermin: Tabelle 7.8 zeigt schließlich die Größen $\langle z_{sp} \rangle$ und σ_{sp} für die Messung und alle Simulationsvarianten sowie die Korrelation R_{sp} zwischen den beobachteten und simulierten Schwerpunkstiefen. Der untere Graph in Abbildung 7.5 stellt die gemessene räumliche Verteilung der Bromidschwerpunkte den Ergebnissen aller Varianten gegenüber. Die mittlere Wiederfindungsrate zu diesem Zeitpunkt beträgt 95%, d.h. im Rahmen des Gesamtfehlers ist die Massenbilanz geschlossen.

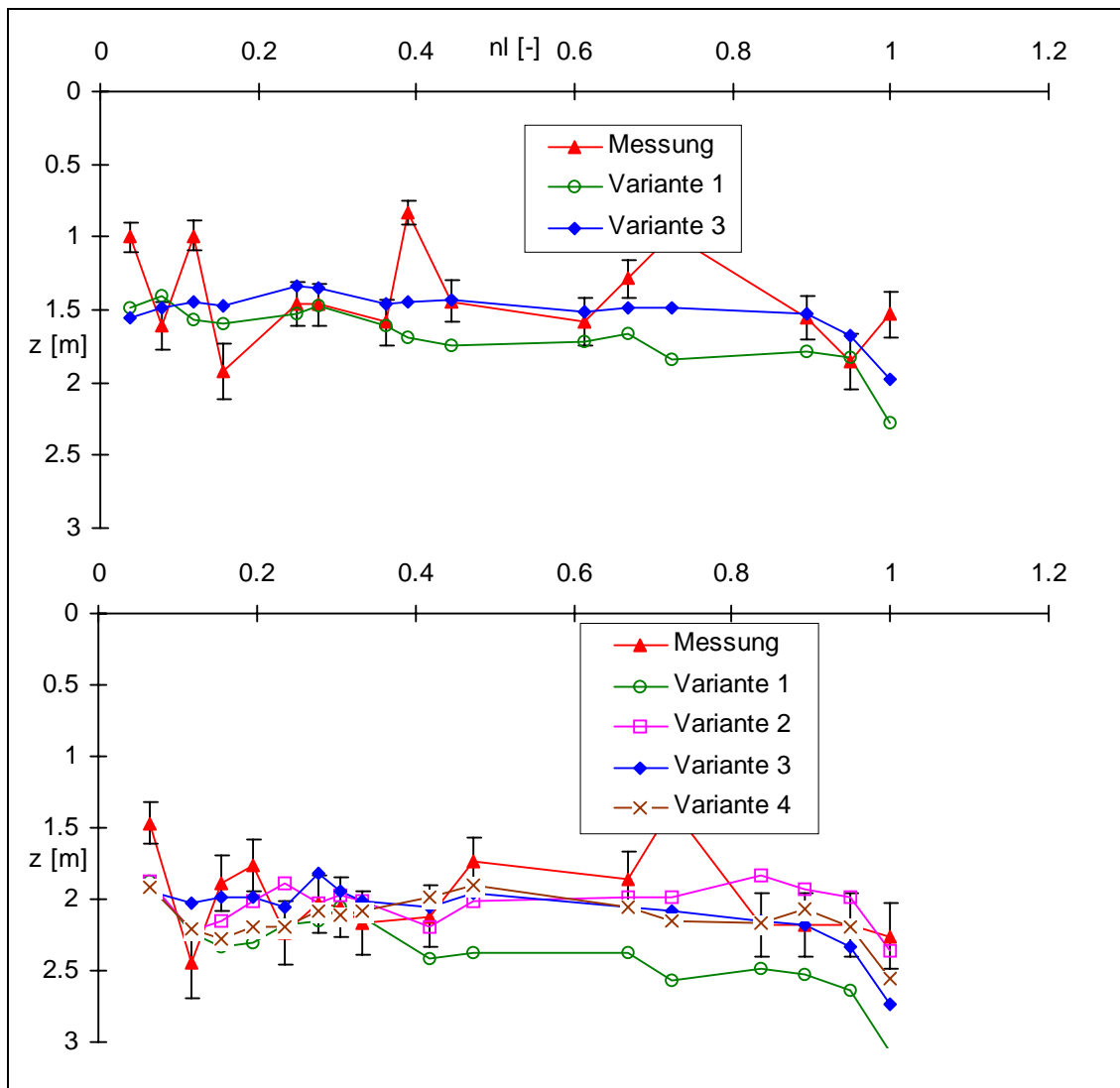


Abb. 7.5: Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Schwerpunkstiefen am 26.7.1994 (oberer Graph) und am 24.3.1995, aufgetragen gegen die normierte Hangposition nl .

Tabelle 7.8: Vergleich zwischen Messung und Simulation am 24. März 95, dargestellt sind die mittlere Schwerpunkstiefe $\langle z_{sp} \rangle$, die Standardabweichung der Schwerpunkstiefen σ_{sp} und der Korrelationskoeffizient R_{sp} zwischen den simulierten und gemessenen Schwerpunkstiefen

| | Messung | Variante 1 | Variante 2 | Variante 3 | Variante 4 |
|-------------------------------------|-----------------|------------|------------|------------|------------|
| R_{sp} | | 0.21 | 0.33 | 0.38 | 0.40 |
| $\langle z_{sp} \rangle [\text{m}]$ | 1.93 ± 0.19 | 2.25 | 2.03 | 1.99 | 2.10 |
| $\sigma_{sp} [\text{m}]$ | 0.315 | 0.187 | 0.108 | 0.074 | 0.119 |

Variante 1 überschätzt weiterhin die mittlere Schwerpunkstiefe $\langle z_{sp} \rangle$ des Bromids, die Werte der restlichen Varianten liegen weiterhin im Fehlerbereich des Meßwerts. Der Korrelationskoeffizient zwischen der räumlichen Verteilung der simulierten und der beobachteten Schwerpunkstiefen hat in allen Varianten gegenüber dem 26. Juli '94 wieder deutlich zugenommen. Die räumliche Variabilität der Schwerpunkstiefen wird weiterhin in allen Simulationsvarianten unterschätzt.

7.2.2 Diskussion des mittleren Transportgeschehens

Tabelle 7.9 faßt die Ergebnisse für die vier Termine noch einmal zusammen. Das Verhältnis der mittleren Schwerpunkstiefe der jeweiligen Anpassungsvariante zur mittleren Schwerpunkstiefe der Messung $\langle z_{sp\text{sim}} \rangle / \langle z_{sp\text{mess}} \rangle$ zeigt, ob das mittlere Transportgeschehen durch die jeweilige Variante über- oder unterschätzt wird. Eine analoge Einschätzung für die Variabilität der Schwerpunkstiefe liefert das entsprechende Verhältnis der Standardabweichung der Bromidschwerpunkte einer Simulationsvariante zur beobachteten Standardabweichung der Schwerpunkstiefen $\sigma_{sp\text{sim}} / \sigma_{sp\text{mess}}$. Ferner zeigt Tabelle 7.9 noch die Korrelationskoeffizienten R_{sp} zwischen der räumlichen Verteilung der gemessenen und simulierten Schwerpunkstiefen an allen Vergleichsterminen.

In der Zusammenschau aller Vergleichstermine liefert Variante 3 hinsichtlich des Mittelwerts und des räumlichen Musters der Schwerpunktsverlagerung die besten Übereinstimmung mit der Beobachtung. In Variante 3 wird die gesamte Information der am IUP-Hang gewonnenen Meßdaten aus Tabelle 7.1 genutzt, insbesondere das Verhältnis aus direkt gemessener zu invers bestimmter gesättigter Leitfähigkeit als Makroporositätsfaktor f_{mak} für das effektive Makroporenmodell. Insofern ist die unabhängige Simulationsvariante, die die meiste Meßinformation nutzt, auch die beste zur Simulation des mittleren Transportgeschehens.

Die Varianten 1 und 2 entsprechen der REF- und der ORG-Variante, die Maurer (1997) im Rahmen seiner Langzeitsimulation der Wasserdynamik des IUP-Hangs verglichen hat. In der vorliegenden Untersuchung führt Variante 1 aufgrund der hohen gesättigten Leitfähigkeiten des 2. Lößlehms und des Kolluviums im Unterboden (siehe Tabelle 7.4) zu einer systematischen Überschätzung der mittleren Schwerpunkstiefe. Variante 2 liefert eine deutlich bessere Einschätzung der beobachteten mittleren Schwerpunkstiefe.

Tabelle 7.9: Vergleich der Simulationsvarianten mit dem beobachteten Transportgeschehen; dargestellt ist das Verhältnis zwischen simulierter und gemessener Schwerpunkstiefe $\langle z_{sim} \rangle / \langle z_{meß} \rangle$, das Verhältnis der Standardabweichungen der simulierten und beobachteten Schwerpunkstiefen $\sigma_{sim} / \sigma_{meß}$ sowie die Korrelation zwischen den gemessenen und simulierten Schwerpunkstiefen

| Termin und Wiederfindungsrate | Variante | $\langle z_{sim} \rangle / \langle z_{meß} \rangle$ | $\sigma_{sim} / \sigma_{meß}$ | R_{sp} |
|-------------------------------|------------|---|-------------------------------|----------|
| 08.09.93 68% | Variante 1 | 1.54 ± 0.14 | 0.65 | 0.44 |
| | Variante 2 | 1.47 ± 0.14 | 0.56 | 0.47 |
| | Variante 3 | 1.93 ± 0.19 | 0.66 | 0.46 |
| | Variante 4 | 1.93 ± 0.19 | 0.79 | -0.07 |
| 23.03.94 150% | Variante 1 | 1.27 ± 0.13 | 0.58 | 0.52 |
| | Variante 2 | 1.15 ± 0.12 | 0.68 | 0.48 |
| | Variante 3 | 1.14 ± 0.11 | 0.23 | 0.74 |
| | Variante 4 | 1.14 ± 0.11 | 0.29 | 0.53 |
| 26.07.94 80% | Variante 1 | 1.20 ± 0.12 | 0.62 | 0.09 |
| | Variante 2 | 1.06 ± 0.11 | 0.34 | 0.06 |
| | Variante 3 | 1.07 ± 0.11 | 0.51 | 0.21 |
| | Variante 4 | 1.10 ± 0.11 | 0.39 | -0.08 |
| 24.03.95 95% | Variante 1 | 1.17 ± 0.12 | 0.59 | 0.21 |
| | Variante 2 | 1.05 ± 0.11 | 0.34 | 0.33 |
| | Variante 3 | 1.03 ± 0.10 | 0.23 | 0.38 |
| | Variante 4 | 1.09 ± 0.10 | 0.38 | 0.40 |

In der Untersuchung von Maurer (1997) war dies genau umgekehrt. Wie bereits in Abschnitt 7.1.3 angesprochen wurde, führte die (ORG-)Variante 2 zu einem nicht beobachteten lateralen Abfließen infiltrierenden Wassers an der Obergrenze des 2. Lößlehms und daher zu einer schlechteren Einschätzung des beobachteten Bodenfeuchtemusters am IUP-Hang als die (REF-)Variante 1 (Maurer, 1997). Dieser Widerspruch zwischen der vorliegenden und der von Maurer (1997) durchgeführten Untersuchung hat zwei Gründe. Zum einen wird der Transportprozeß am Hang maßgeblich durch das Geschwindigkeitsfeld und damit durch das Zusammenwirken der räumlichen Muster der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit **und** der Potentialgradienten bestimmt. Beide Größen sind **nichtlineare** Funktionen der Bodenfeuchte. Eine gute Modellierung der Bodenfeuchteverteilung spiegelt sich nur dann zwangsläufig in einer guten Modellierung des Geschwindigkeitsfeldes und damit des Transportgeschehens wider, wenn die bodenhydraulischen Funktionen völlig exakt wären. Dies ist jedoch nicht der Fall. Daher ist die Bodenfeuchte eine schlechte Anpassungsgröße für ein Prozeßmodell, das zur Simulation des **Stoffhaushalts** benutzt werden soll. Zum zweiten nimmt, wie Tabelle 7.4 zeigt, die gesättigte Leitfähigkeit an der Horizontgrenze zwischen Löß und 2. Lößlehm in Varianten 1 und 3 ca. um eine Größenordnung zu. Daher kommt es auch in Variante 3 zu keiner lateralen Wasserbewegung an dieser Horizontgrenze.

Der Einfluß der effektiven Beschreibung präferentieller Fließaktivität auf die Simulationsergebnisse läßt sich am ehesten anhand des ersten Vergleichstermins, dem 8.9.93, prüfen. Allerdings liegt auch zu diesem Zeitpunkt die Bromidapplikation bereits 5 Monate zurück. Der Einfluß präferentielle Fließereignisse auf den Transport eines Bromidpulses ist in der Frühphase nach der Applikation mit Sicherheit am deutlichsten, daher ist auch der erste Termin nur bedingt geeignet. Variante 4 liefert am ersten Vergleichstermin die schlechteste Übereinstimmung mit der beobachteten räumlichen Verteilung der Schwerpunktstiefen. Die räumliche Verteilung des Makroporositätsfaktors f_{mak} wird in dieser Variante mit Hilfe der Regression aus Tabelle 7.3 abgeschätzt. Diesem Vorgehen liegt die einfache Vorstellung zugrunde, daß an einem typischen Hang des Weiherbachgebiets die Makroporosität zum Hangfuß hin linear zunimmt. In Variante 3 wird hingegen die bekannte Verteilung der Bodenarten am Meßhang und das Verhältnis aus direkt zu invers bestimmter gesättigter Leitfähigkeit genutzt, um die Werte von f_{mak} und deren Verteilung am Hang zu errechnen. Beide Varianten nutzen die gleiche Abschätzung für die räumliche Verteilung des Makroporenflächenanteils. Im Hinblick auf die Wichtigkeit der Modellparameter f_{mak} und a_{mak} wird klar:

- Die exakte Verteilung des Makroporenflächenanteils a_{mak} ist für ein gutes Modellergebnis nicht wichtig, eine grobe räumliche Näherung an die tatsächlichen Verhältnisse reicht aus.
- Die Simulationsergebnisse sind hingegen sehr sensitiv für die Werte des Makroporositätsfaktors f_{mak} und dessen räumliche Verteilung.
- Das Verhältnis aus direkt gemessener zu invers bestimmter gesättigter Leitfähigkeit stellt auf dieser Modellscale eine gute und einfache Möglichkeit dar, die Größenordnung und die räumliche Verteilung des Makroporositätsfaktors f_{mak} hinreichend genau zu liefern.
- Im Rahmen von Variante 3 liefert das effektive Modell für präferentielle Fließaktivität auf Basis dieser Parameter im Rahmen der Datengüte eine gute Einschätzung des Einflusses präferentieller Fließaktivität auf die räumliche Verteilung der Schwerpunktstiefen.

Generell liefert CATFLOW 2.0 in allen Varianten nach Ablauf der jeweiligen Infiltrationsphase im März 94 und 95 bessere Ergebnisse als nach oder in der Verdunstungsphase im September 93 und Juli 94. Offensichtlich gelingt es nicht, die räumliche Variation des Wasserentzugs durch Pflanzen und dessen Einfluß auf den kapillaren Aufstieg und den Bromidtransport zu simulieren. Trotzdem liefert das Modell, ausgehend vom Zustand im Juli 94, in dem die räumliche Verteilung der Schwerpunktstiefe sehr schlecht mit der Beobachtung korreliert, bessere Ergebnisse für deren Verteilung nach der Infiltrationsperiode im März 95. Um einen Gesamteindruck zu geben, stellen die Abbildungen 7.6 und 7.7 die Ergebnisse aus Variante 3 und die Beobachtung an den Terminen bester und schlechtester Übereinstimmung, dem 24.3. 94 und dem 26.7. 94, gegenüber. Der obere Graph in Abbildung 7.7 zeigt, wie unterschiedlich das Transportverhalten auf dem Ost- und dem Westteil des IUP-Hangs vor allem im Sommer war, und wie wenig sinnvoll es erscheint, Profile von diesen Hangteilen zu einer zweidimensionalen Verteilung zusammenzufassen.

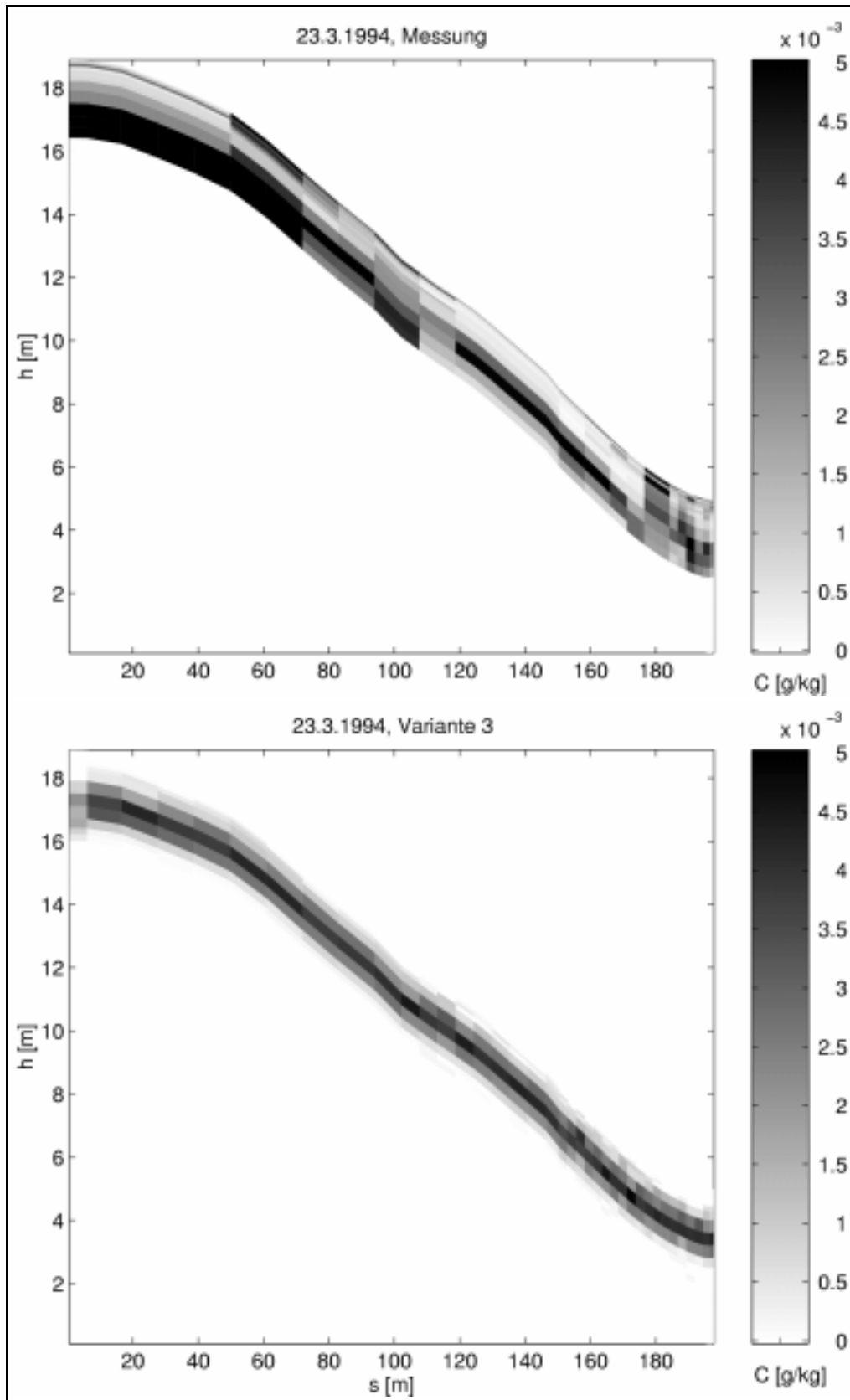


Abb. 7.6 :Vergleich der gemessenen und mit Variante 3 simulierten Bromidkonzentration im Boden des IUP-Hangs am Termin bester Korrelation zwischen gemessener und simulierter räumlicher Verteilung der Schwerpunkstiefe

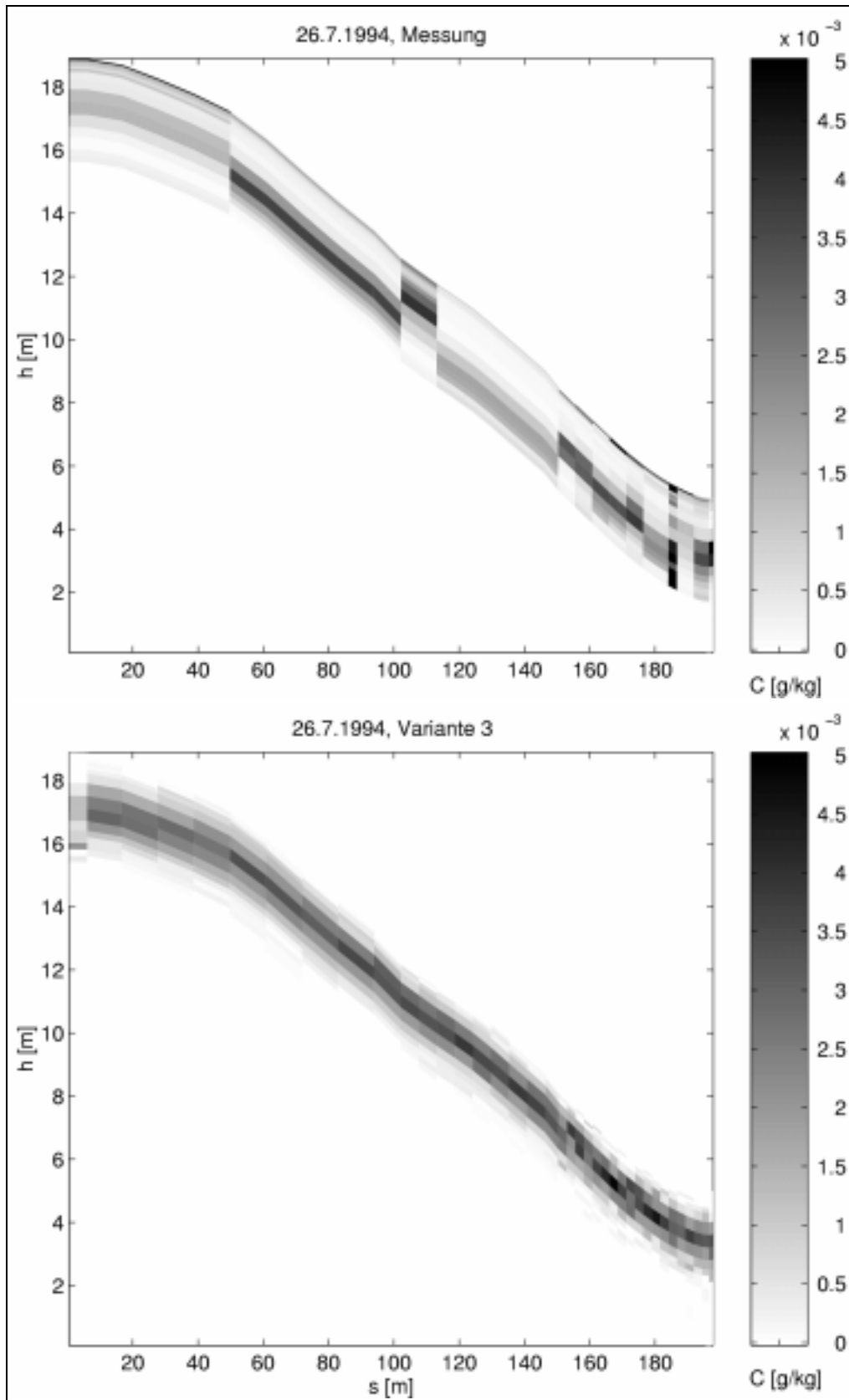


Abb. 7.7: Vergleich der gemessenen und mit Variante 3 simulierten Bromidkonzentration im Boden des IUP-Hangs am Termin schlechtester Korrelation zwischen gemessener und simulierter räumlicher Verteilung der Schwerpunktstiefe

7.2.3 Vergleich der Peakbreiten und ausgewählter Bromidprofile

Im folgenden Vergleich der Peakbreiten und ausgewählter Bromidprofile wird die Beobachtung nur noch den Ergebnissen der Variante 3 gegenübergestellt. Wie Tabelle 7.10 zeigt, trifft das Modellsystem auch im Hinblick auf die Peakbreiten die beobachteten Verhältnisse in den Versickerungsphasen besser als in den Verdunstungsphasen. Sowohl die Korrelation R_{pb} zwischen der beobachteten und der simulierten räumlichen Verteilung der Peakbreiten am IUP-Hang als auch die Übereinstimmung der mittleren Peakbreiten $\langle pb \rangle$ und der entsprechenden Standardabweichung σ_{pb} ist an den Terminen März 94 und März 95 am Ende der Infiltrationsperiode wesentlich besser als im Juli 94. Wie erwartet, wird die Verschmierung der Bromidpeaks auf lange Sicht durch das Modell überschätzt. Der diffusive Anteil des Stoffflusses wird in der Transportgleichung (7.1) durch den molekularen Diffusionskoeffizienten für Bromid in freiem Wasser abgeschätzt. Dieser ist mit $D_{mol} = 2.5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ größer als die maximale Peakverschmierung nach Delbrück (1997) mit $D_{max} = 1.6 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$.

Tabelle 7.10: Vergleich simulierter und beobachteter Peakbreiten, dargestellt sind der Mittelwert $\langle pb \rangle$ und die Standardabweichung σ_{pb} der Peakbreiten für die Messung und Variante 3 sowie der Korrelationskoeffizient R_{pb} zwischen gemessener und simulierter räumlicher Verteilung der Peakbreiten am IUP-Hang an 3 Terminen; der relative Fehler der Peakbreiten wurde auf 10% geschätzt.

| Termin | R_{pb} | $\langle pb \rangle$ [m] | | σ_{pb} [m] | |
|---------|----------|--------------------------|------------|-------------------|------------|
| | | Messung | Variante 3 | Messung | Variante 3 |
| 24.3.94 | 0.31 | 0.49 ± 0.05 | 0.40 | 0.28 | 0.21 |
| 26.7.94 | -0.23 | 0.63 ± 0.06 | 0.44 | 0.39 | 0.27 |
| 24.3.95 | 0.37 | 0.74 ± 0.07 | 1.01 | 0.47 | 0.29 |

In Abbildung 7.8 sind exemplarisch ein gemessenes und ein mit Variante 3 simuliertes Profil am Hangfuß für den 24.3.95 gegenübergestellt, entsprechende Profile für Hangtop und Hangmitte finden sich in Anhang A5. An diesem Termin wird die Form und die Lage der Hauptpeaks in allen Hangbereichen gut getroffen. Am Hangfuß ist die Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung im Hinblick auf die Aufteilung des gemessenen Profils in einen Hauptpeak mit zwei Nebenmaxima auffallend gut. Trotzdem unterschätzt das Modell in allen Hangbereichen die Bromidkonzentration des oberen Bodenhorizonts. In Anbetracht der in Kapitel 5 belegten enormen Variabilität des Transports und des beschränkten Integrationsvolumens der Bohrstockprofile, sind durchaus größere Abweichungen zwischen beobachteten und simulierten Bromidprofilen zu erwarten. Es wundert daher nicht, daß der Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Bromidprofilen am ersten Vergleichstermin 8.9.93 etwas schlechter ausfällt. Abbildung 7.9 stellt exemplarisch ein gemessenes und ein simuliertes Profil am Hangfuß am 8.9.93 gegenüber. Entsprechende Abbildungen für Profile an Hangtop und Hangmitte finden sich in Anhang A5.

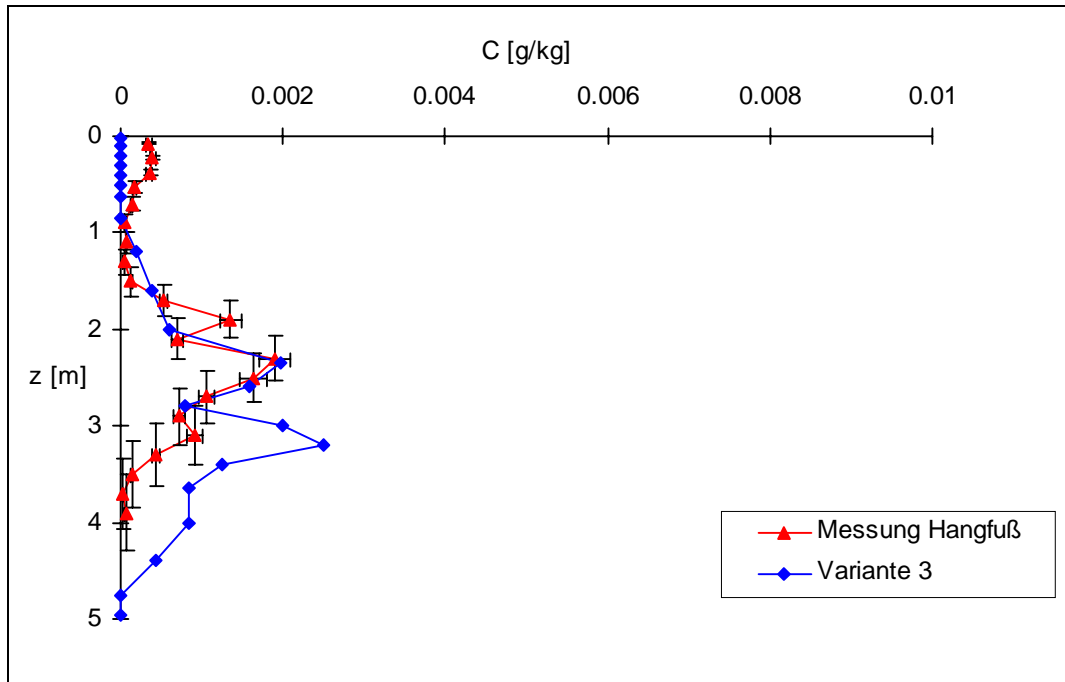


Abb. 7.8: Gemessenes und simuliertes Bromidprofil am 24.3.1995 am Hangfuß

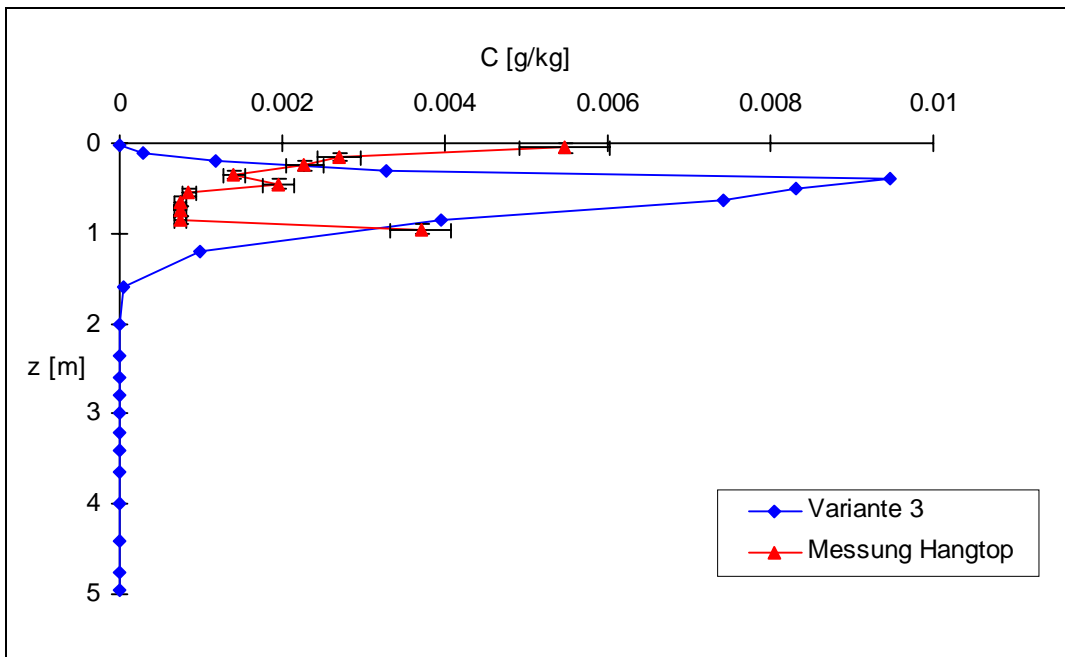


Abb. 7.9: Gemessenes und simuliertes Bromidprofil vom 8.9.1993 am Hangfuß

Wie erwartet ist die Korrelation zwischen der räumlichen Verteilung der simulierten und der beobachteten Massenbilanzen an keinem Vergleichszeitpunkt nennenswert. Auch dies liegt mit Sicherheit am geringen Meßvolumen der Bohrstöcke und der hohen räumlichen Variation der Bromidapplikation.

7.2.4 Zusammenschau und Bewertung der Hangsimulation

Das erweiterte Modellsystem CATFLOW 2.0 liefert in allen Simulationsvarianten eine plausible Einschätzung der mittleren Schwerpunktstiefe am IUP-Hang. Im Rahmen der Varianten 2, 3 und 4 wird die Beobachtung zwar etwas besser getroffen als in Variante 1, jedoch ist dieser Unterschied gradueller Natur; keine Variante liefert eine völlig falsche Größenordnung. Das beobachtete räumliche Muster der Schwerpunktstiefen wird durch die Variante 3 bis auf den letzten Termin deutlich am besten beschrieben. In Variante 3 wird das Maximum an Information genutzt, die Tabelle 7.1 bezüglich der gesättigten Leitfähigkeiten bietet. Die im Modell implementierten Prozeßansätze erlauben im Rahmen der Variante 3 trotz der Restriktionen eines zweidimensionalen Modells über 2 Jahre hinweg eine relativ gute Vorhersage des Mittelwerts und zum Teil auch des räumlichen Musters der Schwerpunktstiefen sowie der Größenordnung der Peakbreiten.

Generell bildet das Modell das beobachtete Transportgeschehen in den Infiltrationsphasen besser ab als in den Verdunstungsphasen. Ein Grund dafür ist vermutlich der Einfluß des räumlich sehr variablen Wasserentzugs der Pflanzen auf den Kapillaraufstieg und damit den Bromidtransport im Sommer. Hervorzuheben ist, daß trotz der schlechten Korrelation zwischen beobachteter und simulierter räumlicher Verteilung der Schwerpunktstiefen am 26.8. 94 diese Korrelation am 24.3. 95 nach der Infiltrationsphase für alle Varianten wieder deutlich besser wird. Offensichtlich hat das Modell den schlechten Zwischenzustand "vergessen". Eine bessere Simulation der Verdunstungsphase durch eine detailliertere Beschreibung des Wurzelentzugs erscheint in Anbetracht des komplexen Verhaltens von Pflanzen bei der Wasser- und Nahrungsaufnahme sehr schwierig, in Anbetracht des eben Gesagten aber auch nicht unbedingt notwendig, um eine befriedigende langzeitliche Modellierung des Transportgeschehens zu ermöglichen.

In Anbetracht der enormen Variabilität der Bromidapplikation, der kleinskaligen Variabilität des Transportgeschehens und des kleinen Integrationsvolumens der Bohrstöcke, bergen die beobachteten Massenbilanzen an den Vergleichspunkten eine erhebliche Unsicherheit (mindestens 30 - 40%). Die bestehende Datengrundlage reicht daher nicht aus, um die Tauglichkeit der in CATFLOW 2.0 implementierten Prozeßansätze dahingehend zu prüfen, wie gut sie lokal die Massenbilanz und die Verteilung der Stoffmasse in der Vertikalen prognostizieren können. Wenn das Modell zur Bilanzierung des Haushalts toxischer Stoffe z.B. von Pestizide eingesetzt werden soll, steht aber genau diese Frage im Vordergrund (siehe auch Abschnitte 2.2.1 und 1.2): Welcher Massenanteil wird in den Unterboden transportiert und welcher Anteil verbleibt im Pflughorizont und wird dort relativ schnell angebaut? Ob das Modells hinsichtlich dieser Fragestellung realistische Aussagen liefern kann, läßt sich auf Basis der Datengrundlage des Transportversuchs von Delbrück (1997) nicht prüfen. Insgesamt erlaubt die Genauigkeit der Daten allenfalls eine Plausibilisierung der implementierten Prozeßansätze.

Das gilt auch für den entwickelten Ansatz zur effektiven Beschreibung präferentieller Fließaktivität. Zwar wird am ersten Vergleichstermin die beobachtete mittlere Schwerpunkstiefe in Variante 3 deutlich überschätzt. Allerdings wurde der Hang am 8.9.1993 nur bis in ein 1 m Tiefe beprobt und die Wiederfindungsrate beträgt nur 68% der applizierten Bromidmenge. Daher läßt sich das Argument ins Feld führen, daß 32% des ausgebrachten Bromids tiefer als 1 m in den Boden transportiert wurden. Würde dieser Anteil berücksichtigt, wäre die beobachtete mittlere Schwerpunkstiefe größer und die Übereinstimmung mit der Simulation besser. Eine Falsifikation des Ansatzes auf Basis der Daten ist nicht möglich, obwohl er mit Sicherheit nur eine grobe Näherung des Prozeßablaufs beschreibt. Maurer kommt im Rahmen seiner Untersuchung zum gleichen Schluß (1997). Zur strengen Prüfung räumlich detaillierter Prozeßmodelle auf der Hangskale müssen künftig erheblich bessere Meßmethoden entwickelt werden.

7.3 Vorbereitung der Untersuchung der Reproduzierbarkeit kleinskaliger, nicht ergodischer Berechnungsversuche

Zur Beurteilung des in Kapitel 5 eingeführten Verfahrens zur Ausgliederung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens auf Basis der Ergebnisse kleinskaliger Transportversuche fehlt prinzipiell Information über die Reproduzierbarkeit dieser Versuche unter makroskopisch identischen Anfangs-Randbedingungen. Die Abschnitte 7.3 bis 7.5 präsentieren die numerische Untersuchung dieses Problems am Beispiel des Transportversuchs an der Intensivmeßparzelle Mp 97 und damit ein sinnvolles Einsatzfeld für das weiterentwickelte Modellsystem CATFLOW 2.0. Es wurde bereits angedeutet, daß die Sättigung der Bodenmatrix in der Umgebung präferentieller Fließwege eine Schlüsselrolle beim Entstehen präferentieller Fließaktivität spielt. Gerade diese Information kann die in Abschnitt 2.4.2 vorgestellte indirekte Strategie zur Messung der Anfangs-Randbedingungen des Transportversuchs am Standort Mp 97 nicht liefern. Die vorliegende Untersuchung mit der Monte-Carlo-Methode soll klären, wie stark der Ausgang des simulierten kleinskaligen Transportversuchs von dieser Information abhängt. Zum einen wird dadurch klar, ob die hochgradig nichtlineare Wasser- und Stoffdynamik chaotisches Verhalten zeigen könnte. Zum anderen lassen sich aus den Ergebnissen unter Umständen Ideen ableiten, welche zusätzliche Information verbesserte Meßverfahren über Zustandsgrößen liefern sollten, um die Güte der Ergebnisse kleinskaliger Transportversuche zu erhöhen.

In der vorliegenden Untersuchung wird der potentielle Einfluß präferentieller Fließaktivität auf die Infiltration durch das Feld der gesättigten Gesamtleitfähigkeit (siehe Abschnitte 6.2.2 und 6.5.1) beschrieben. Daher quantifiziert die horizontale Kreuzkorrelation $C(k_s^B, \theta)$ zwischen dem Anfangsfeuchtefeld und dem gesättigten Gesamtleitfähigkeitsfeld im Boden einer Modellparzelle, ob die Vorfeuchte der Bodenmatrix in der Umgebung der präferentiellen Fließwege eher "hoch" oder eher "niedrig" ist.

7.3.1 Vorstudie an einem einfachen System

Um zu zeigen, daß die Vorfeuchte in der Umgebung präferentieller Fließwege in der "Modellwelt" von CATFLOW 2.0 einen sehr großen Einfluß auf den Ausgang eines Transportversuches haben kann, wurde zunächst die Beregnung einer Parzelle der Fläche 1 m² mit CI = 25.3 mm einer Bromidlösung der Konzentration $C = 0.165$ g/l bei einer Intensität $I = 5.5$ mm/h simuliert. Im Boden dieser hypothetischen Parzelle existieren nur zwei präferentielle Strukturen. Bei der Simulation wurden zwei Fälle a und b verglichen. Das Anfangsfeuchtefeld war in beiden Fällen mit einem Mittelwert von 35.9% und einer Standardabweichung von 2.5% gleich. Der einzige Unterschied zwischen beiden Fällen ist die Lage der präferentiellen Fließwege relativ zum Vorfeuchtefeld. Wie Abbildung 7.10 verdeutlicht, liegen in Fall a die präferentiellen Fließwege hoher Gesamtleitfähigkeitsfeld im Bereich hoher Vorfeuchte, in Fall b befinden sich die präferentiellen Fließwege jedoch im Bereich niedriger Vorfeuchte.

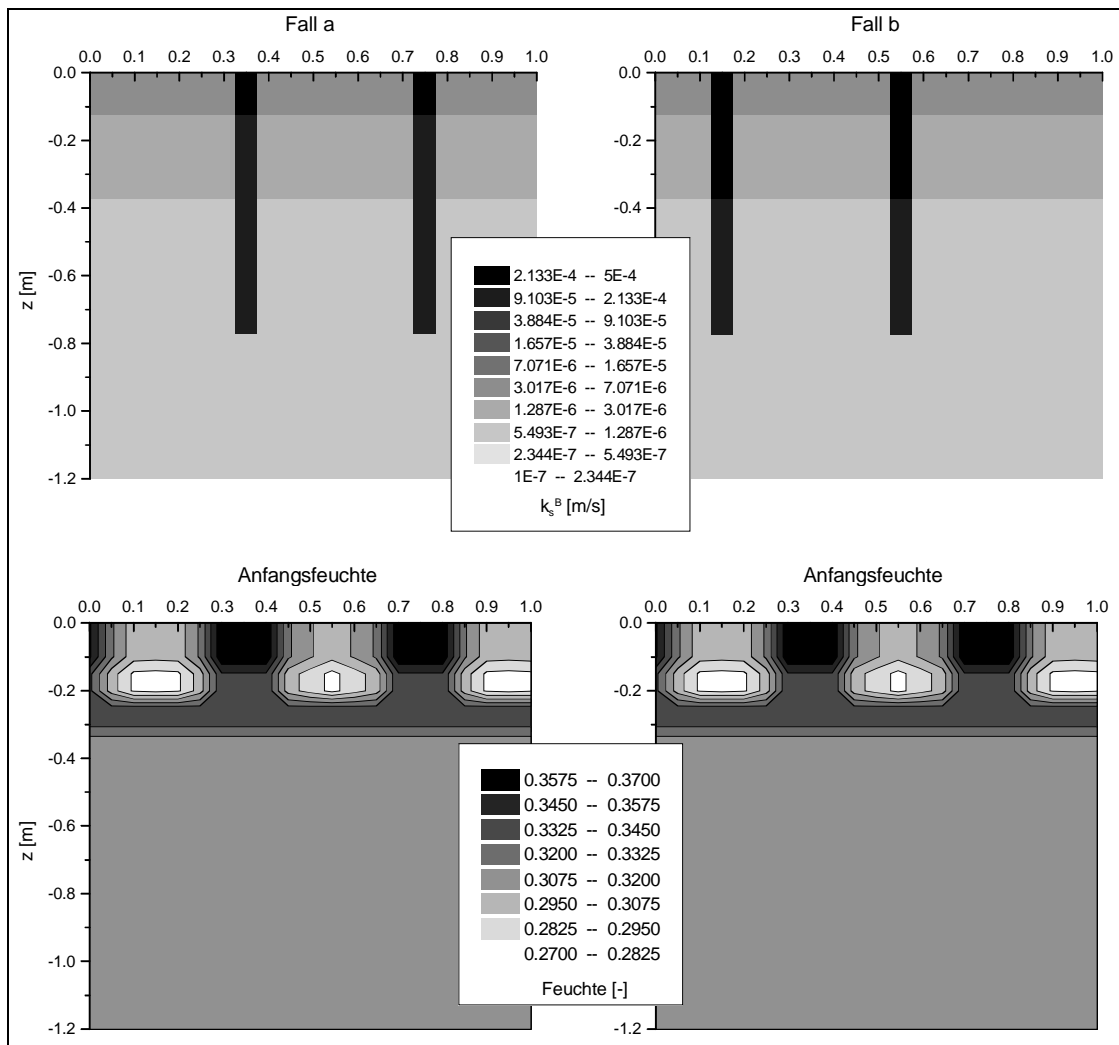


Abb. 7.10: Unterschiede zwischen den Fällen a und b

Die Schwellensättigung für das lokale Anspringen präferentieller Fließaktivität liegt bei $S_0 = 0.8$. Abbildung 7.11 zeigt die Tracerverteilung für beide Fälle 24 h nach der Beregnung. In Fall a kam es zu präferentieller Fließaktivität, in Fall b jedoch nicht. Wie Tabelle 7.11 zeigt, wirkt sich der Unterschied in den Anfangs-Randbedingungen auch sehr deutlich auf die bereits aus Kapitel 5 bekannten Schwerpunktsparameter der Fließmuster aus. Die mittlere Transportdistanz des Schwerpunkts ist in Fall a ist doppelt so groß wie in Fall b, der Variations- und Asymmetrieparameter sind um mindestens eine Größenordnung höher.

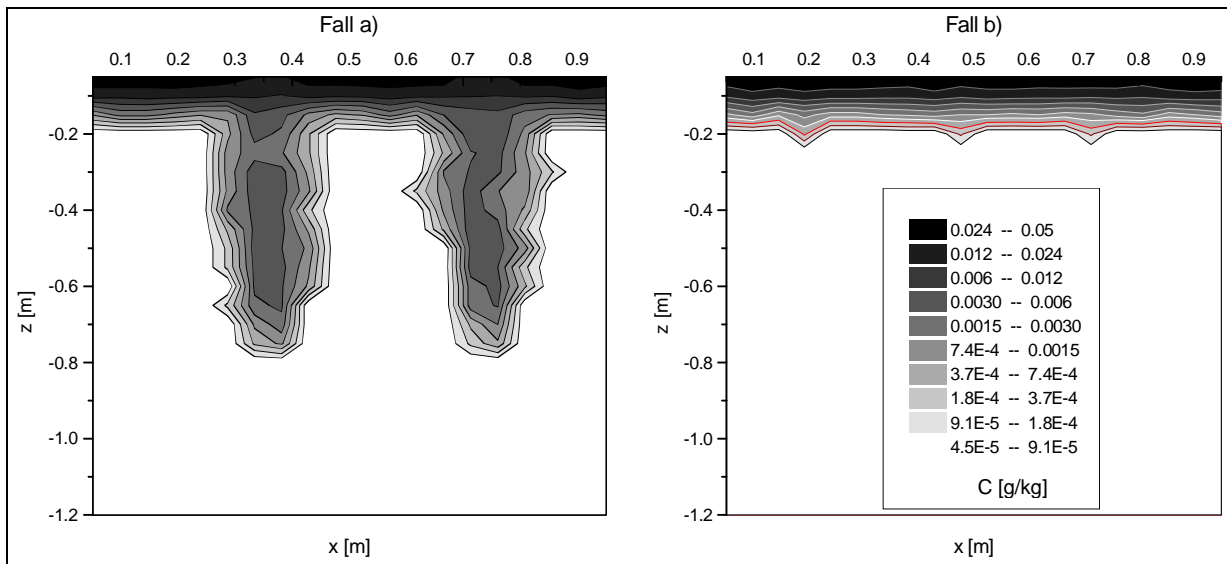


Abb. 7.11: Logarithmisch skalierte Tracerverteilung nach 24 h in den Fällen a und b

Tabelle 7.11: Gegenüberstellung der Schwerpunktsparameter der simulierten Fließmuster

| | z_{sp} [m] | σ [m] | σ_3 [m ³] |
|---------------|--------------|-----------------------|------------------------------|
| Fall a | 0.09 | 0.77×10^{-1} | 0.65×10^{-3} |
| Fall b | 0.04 | 0.14×10^{-2} | 0.13×10^{-8} |

Festzuhalten ist, daß im Zustandsraum dieser Modellparzelle ein Bereich existiert, in dem das makroskopische Transportgeschehen sehr stark von der Anordnung der präferentiellen Fließwege relativ zu den Bereichen hoher Vorfeuchten abhängt. In dieser Modellparzelle mit nur zwei Makroporen ist diese Schlüsselinformation noch meßbar. Für den anstehenden Boden der Meßparzelle Mp 97, in dem im Mittel ca. 200 Makroporen pro Quadratmeter zu finden sind, läßt sich diese Schlüsselinformation nicht messen³⁷. Die folgenden Abschnitte werden zeigen, ob sich ein solcher instabiler Bereich auch in den möglichen Anfangszuständen einer realistischeren Modellparzelle findet.

³⁷ Selbst wenn sie meßbar wäre, dann nur in statistischer Form. Die Unschärfe würde reduziert, aber nicht beseitigt.

7.3.2 Vorgehensweise bei der Monte-Carlo-Simulation

Im ersten Schritt erfolgte die Simulation der gesättigten Gesamtleitfähigkeitsfelder der zu untersuchenden Modellparzellen mit der Methode aus Abschnitt 6.2.2. Diese heterogene Randbedingung blieb während der gesamten Simulation fest.

Im zweiten Schritt wurden mit dem "turning-band"-Algorithmus unterschiedliche Realisierungen statistischer Bodenfeuchtefelder für die mittleren Anfangsfeuchten $\langle\theta\rangle = 33\%$, $\langle\theta\rangle = 32\%$, $\langle\theta\rangle = 31\%$, ... $\langle\theta\rangle = 13\%$, $\langle\theta\rangle = 12\%$ simuliert. Für jede der mittleren Anfangsfeuchte $\langle\theta\rangle$ wurden 40 Realisierungen mit konstanter Standardabweichung $\sigma_\theta = 2\%$ generiert, 20 davon mit horizontaler und 20 mit vertikaler Hauptrichtung der Anisotropie. Die horizontale und vertikale Reichweite a_h und a_v der sphärischen Variogrammfunktion betragen $a_v = 0.55$ m und $a_h = 0.16$ m im Fall vertikaler Anisotropie, $a_v = 0.15$ m und $a_h = 1$ m bei horizontaler Anisotropie. In Abschnitt 6.5.2 sind in Abbildung 6.7 für beide Fälle eine Realisierung dieser Feuchtefelder gezeigt und weitere Details aufgeführt. Da die Anisotropie der Anfangsfeuchte Information zweiter Art darstellt, werden beide Fälle im Rahmen der Auswertung getrennt betrachtet.

Die jeweils zwanzig Realisierungen mit fester mittlerer Anfangsfeuchte $\langle\theta\rangle$ und fester Anisotropierichtung dienten bei der wiederholten Simulation der Berechnungsversuche als makroskopisch identische Anfangszustände. Durch die mikroskopischen Unterschiede zwischen den einzelnen Realisierungen ist die Verteilung der Vorfeuchte relativ zu den präferentiellen Strukturen im Rahmen jeder Wiederholung anders. Wie das hinführende Beispiel zeigt, steuert die Verteilung der Vorfeuchte relativ zu den präferentiellen Strukturen, ob, wann und wo es zu präferentieller Fließaktivität in der Modellparzelle kommt. Daher führen diese Unterschiede zu einer Variation der Simulationsergebnisse im Rahmen der Wiederholungen.

Zur Charakterisierung der simulierten Fließmuster dienen die Schwerpunktparameter, insbesondere die mittlere Schwerpunkstiefe z_{sp} . Die Unschärfe des Berechnungsversuchs ergibt sich aus der Variation von z_{sp} über alle Wiederholungen bei fester mittlerer Anfangsfeuchte $\langle\theta\rangle$ und fester Anisotropierichtung. Zur Quantifizierung dieser Unschärfe wurden die Variationsmaße Var1 und Var2 errechnet. Var1 entspricht dem Variationskoeffizienten der Schwerpunkstiefen innerhalb der Wiederholungen bei fester mittlerer Anfangsfeuchte $\langle\theta\rangle$ und fester Anisotropierichtung. Var2 ist die mit dem Mittelwert $\langle z_{sp} \rangle$ aller Wiederholungen skalierte maximale Streubreite (siehe Gleichung 7.1) der Schwerpunkstiefen. Durch Veränderung der mittleren Anfangsfeuchte läßt sich die Variation, die bei der simulierten Wiederholung eines Berechnungsversuchs aufgrund der unscharfen Anfangs-Randbedingungen im Versuchsergebnis entsteht, für verschiedene Anfangszustände systematisch vergleichen. Besonders interessant ist dabei die Frage, ob die schrittweise Reduktion der mittleren Anfangsfeuchte dabei in einen instabilen Bereich der Anfangszustände führt, in dem die Infiltration gleichermaßen zu beiden Fließregimen tendiert.

$$\text{Var1} = \frac{\sigma(\langle \theta \rangle)}{\langle z_i(\langle \theta \rangle) \rangle} = \text{Variationskoeffizient}$$

$$\text{Var2} = \frac{\max(z_i(\langle \theta \rangle)) - \min(z_i(\langle \theta \rangle))}{\langle z_i(\langle \theta \rangle) \rangle} = \text{skalierte Streubreite} \quad (7.1)$$

- mit $z_i(\langle \theta \rangle)$ = Schwerpunktstiefe der i-ten Wiederholung als Funktion der mittleren Anfangsfeuchte $\langle \theta \rangle$
 $\sigma(\langle \theta \rangle)$ = Standardabweichung der Schwerpunktstiefen bei mittlerer Anfangsfeuchte $\langle \theta \rangle$
 $\max(z_i(\langle \theta \rangle))$ = maximale Schwerpunktstiefe der 20 Wiederholungen bei gleicher Anfangsfeuchte
 $\min(z_i(\langle \theta \rangle))$ = minimale Schwerpunktstiefe der 20 Wiederholungen bei gleicher Anfangsfeuchte
 $\langle z_i(\langle \theta \rangle) \rangle$ = Mittel der Schwerpunktstiefen über alle Realisierungen bei gegebener Anfangsfeuchte

7.3.3 Simulationsvarianten und Diskretisierung des Berechnungsgebiets

Um den Einfluß der Makroporendichte im Boden auf die Reproduzierbarkeit eines kleinskali- gen Transportversuchs zu untersuchen, wurde die Monte-Carlo-Simulation für zwei Modell- parzellen durchgeführt. Die eine entspricht der Intensivmeßparzelle Mp 97, an der zweiten Parzelle B steht der gleiche Boden an, jedoch ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Makroporen um den Faktor 10 reduziert. Tabelle 7.12 zeigt die Daten, die zur Simulation des gesättigten Gesamtleitfähigkeitsfelds der jeweiligen Parzelle notwendig sind: die Wahr- scheinlichkeiten p_r für das Auftreten einer Makropore mit Radius r , deren mittlere Tiefe $\langle l_r \rangle$ und die zugehörige Standardabweichung σ_r sowie die gesättigten Wasserflußraten Q_{mak} in einer Makropore mit Radius r .

Tabelle 7.12: Daten zur Simulation der Gesamtleitfähigkeitsfelder im Boden der Parzelle Mp 97 und der Parzelle B

| Parameter | $r = 0.0015$ [m] | $r = 0.0025$ [m] | $r = 0.0025$ [m] | $r = 0.0045$ [m] |
|--------------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| $p_{rMp\ 97}$ | 5.2×10^{-4} | 9.2×10^{-4} | 5.1×10^{-4} | 5.5×10^{-4} |
| p_{rB} | 5.2×10^{-5} | 9.2×10^{-5} | 5.1×10^{-5} | 5.5×10^{-5} |
| $\langle l_r \rangle$ [m] | 0.49 | 0.59 | 0.67 | 0.80 |
| σ_r [m] | 0.22 | 0.18 | 0.09 | 0.05 |
| Q_{mak} [m ³ /s] | 4.6×10^{-8} | 3.5×10^{-7} | 1.4×10^{-6} | 3.8×10^{-6} |

Abbildung 7.12 stellt die entsprechenden Gesamtleitfähigkeitsfelder für beide Parzellen gegenüber.

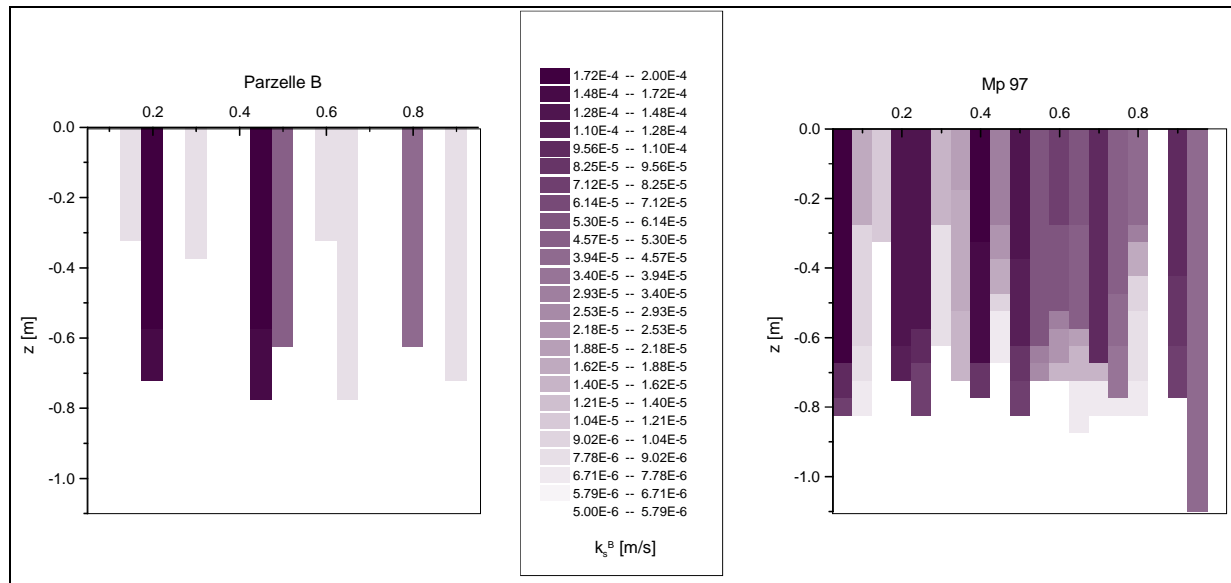


Abb. 7.12: Gesamtleitfähigkeit der Parzelle MP 97 und der Parzelle B, dargestellt in der x-z-Ebene

Um ferner den Einfluß der Beregnungsintensität I bei gleicher Beregnungsmenge sowie den Einfluß des Schwellenwerts S_0 für das Initiieren präferentieller Fließaktivität auf die Lage des oben angesprochenen instabilen Bereichs mittlerer Anfangsfeuchten zu untersuchen, wurden diese Größen wie in Tabelle 7.13 dargestellt variiert. Die Bromidkonzentration im Beregnungswasser und die Beregnungsmenge waren mit $C = 0.165$ g/l und $CI = 25.3$ mm in allen Fällen konstant. Für jede Modellparzelle ergaben sich 4 Simulationsvarianten.

Tabelle 7.13: Unterschiede zwischen den Simulationsvarianten, wie Variation der Beregnungsintensität I und des Schwellenwerts S_0

| | Parzelle Mp 97 | Parzelle Mp 97 | Parzelle B | Parzelle B |
|-------------------------|----------------|----------------|------------|---------------|
| Makroporosität | hoch | hoch | niedrig | niedrig |
| I [mm/h] | 11 (hoch) | 2.2 (niedrig) | 11 (hoch) | 2.2 (niedrig) |
| Schwellenwert S_0 [-] | 0.8 und .6 | 0.8 und 0.6 | nur 0.6 | 0.8 und 0.6 |

Aufgrund der niedrigeren Gesamtleitfähigkeit im Oberboden der Parzelle B wird diese durch die Beregnung mit hoher Intensität $I = 11$ mm/h wesentlich stärker belastet als Parzelle Mp 97. Insbesondere für niedrige Anfangsfeuchten führte diese Belastung zu Rechenzeitproblemen. Das zur Lösung der Richardsgleichung verwendete modifizierte Picardverfahren (Maurer, 1997, Celia & Bouloutas, 1990) konvergierte nur noch, wenn die Zeitschritte im Mittel deutlich geringer als eine Sekunde waren. Für die Simulationsvariante mit einem Schwellenwert von $S_0 = 0.8$ ergab sich daher ein nicht mehr vertretbarer Rechenaufwand von ca. 14 Tagen auf einer HP-Workstation. Aus diesem Grund wurde auf diese Variante verzichtet.

Die Ausdehnung des Berechnungsgebiets in der lateralen x - und der vertikalen z -Richtung beträgt $1 \text{ m} \times 1.2 \text{ m}$ sowie 1 m in der nicht explizit betrachteten y -Richtung (CATFFLOW 2.0 ist ein zweidimensionales Modellsystem). Dieses Gebiet wurde in ein quadratisches Gitter der Maschenweite 5 cm eingeteilt. Die beiden Modellparzellen haben somit an der Erdoberfläche eine Querschnittsfläche von 1 m^2 , dies entspricht der Größe des Auswertebereichs der im experimentellen Teil dieser Untersuchung durchgeführten Transportversuche (siehe Abschnitt 3.5.1).

7.4 Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation kleinskaliger Berechnungsversuche

Analog zur Ergebnisdarstellung der Hangsimulation in Unterkapitel 7.2 werden die Simulationsergebnisse der Varianten zunächst für beider Modellparzellen getrennt dargestellt. Danach folgt ein Vergleich der simulierten Berechnung der Parzelle Mp 97 bei hoher Intensität mit den entsprechenden Meßergebnissen. Die Darstellung der Ergebnisse einer weiterführenden Simulation sowie die zusammenfassende Diskussion finden sich in den Abschnitten 7.4.4 und 7.4.5.

Zur Charakterisierung der makroskopischen Struktur der simulierten Fließmuster dient die mittlere Schwerpunktstiefe z_{sp} , im folgenden auch Schwerpunktstiefe genannt. Ein einfaches Mittel zur Visualisierung des Einflusses der Unschärfe der Anfangsfeuchte auf den Infiltrationsprozeß in verschiedenen Systemzuständen sind zum einen Scatterplots der Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte $\langle \theta \rangle$. Zum anderen werden Diagramme des Variationskoeffizienten Var1 und der skalierten Streubreite der Schwerpunktstiefen Var2 als Funktion der mittleren Anfangsfeuchte gezeigt. Da die Simulationen im Bereich niedriger mittlere Anfangsfeuchten sehr rechenzeitintensiv sind, wurde zunächst nur der Bereich zwischen 33 und minimal 18% volumetrischer Anfangsfeuchte untersucht.

7.4.1 Wiederholte Berechnung der Parzelle Mp 97

Berechnung mit hoher Intensität $I = 11 \text{ mm/h}$: Abbildung 7.13 zeigt die Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.8$ in Abhängigkeit von der mittleren Anfangsfeuchte $\langle \theta \rangle$. Der obere Graph stellt den Fall vertikaler, der untere Graph den Fall horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchtefelder dar. In beiden Fällen ist eine geringe Zunahme der absoluten Streuung der Schwerpunktstiefen mit sinkender mittlerer Anfangsfeuchte zu beobachten. Diese Tendenz trat bei beiden Modellparzellen im Rahmen aller Simulationsvarianten auf, wobei die Hauptrichtung der Anisotropie der Anfangsfeuchtefelder nur einen graduellen Einfluß auf die Streubreite der Ergebnisse hatte. Der Verlauf der Variationsmaße Var1 und Var2 in Abbildung 7.14 macht diese Tendenz deutlicher, die relative Va-

riabilität der Wiederholungen nimmt im Bereich zwischen 24 und 21% mit abnehmender mittlerer Anfangsfeuchte deutlich zu. Die simulierten Versuchsergebnisse zeigen im Bereich zwischen 24 und 21% eine erhöhte Abhängigkeit von der konkreten Realisierung des Anfangsfeuchtefeldes, genauer gesagt von der Kreuzkorrelation zwischen Anfangsfeuchte- und Gesamtleitfähigkeitsfeld.

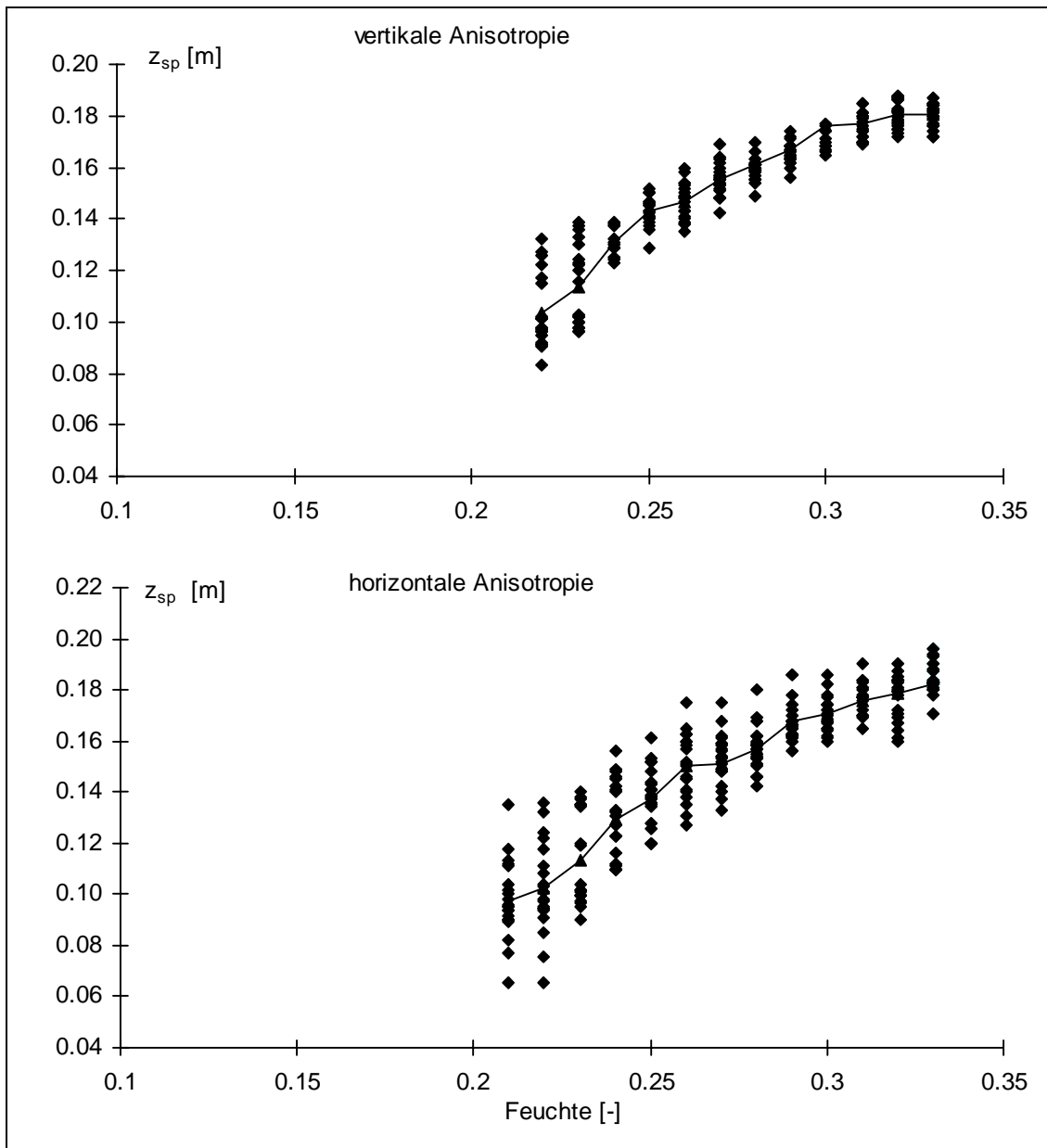


Abb. 7.13: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei hoher Intensität von $I = 11 \text{ mm/h}$ und einem Schwellenwert von $S_0 = 0.8$, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Die Kurve verbindet die mittleren Schwerpunktstiefen der jeweils 20 Wiederholungen bei konstanter mittlerer Anfangsfeuchte.

Ein Vergleich der Variationsmaße in Abbildung 7.14 zeigt, daß eine Reduktion des Schwellenwerts für das Initiieren präferentieller Fließaktivität von 0.8 auf 0.6 die relative Variation der Schwerpunktstiefen geringfügig dämpft. Die Haupttrichtung der Anisotropie der Anfangs-

feuchtefelder hat hingegen einen größeren Einfluß auf die relative Streuung der Schwerpunkstiefen, die bei der simulierten Wiederholungen des Versuchs auftritt. Im Falle horizontaler Anisotropie, dargestellt im unteren Graphen, sind beide Variationsmaße systematisch größer als bei vertikaler Anisotropie im oberen Graphen.

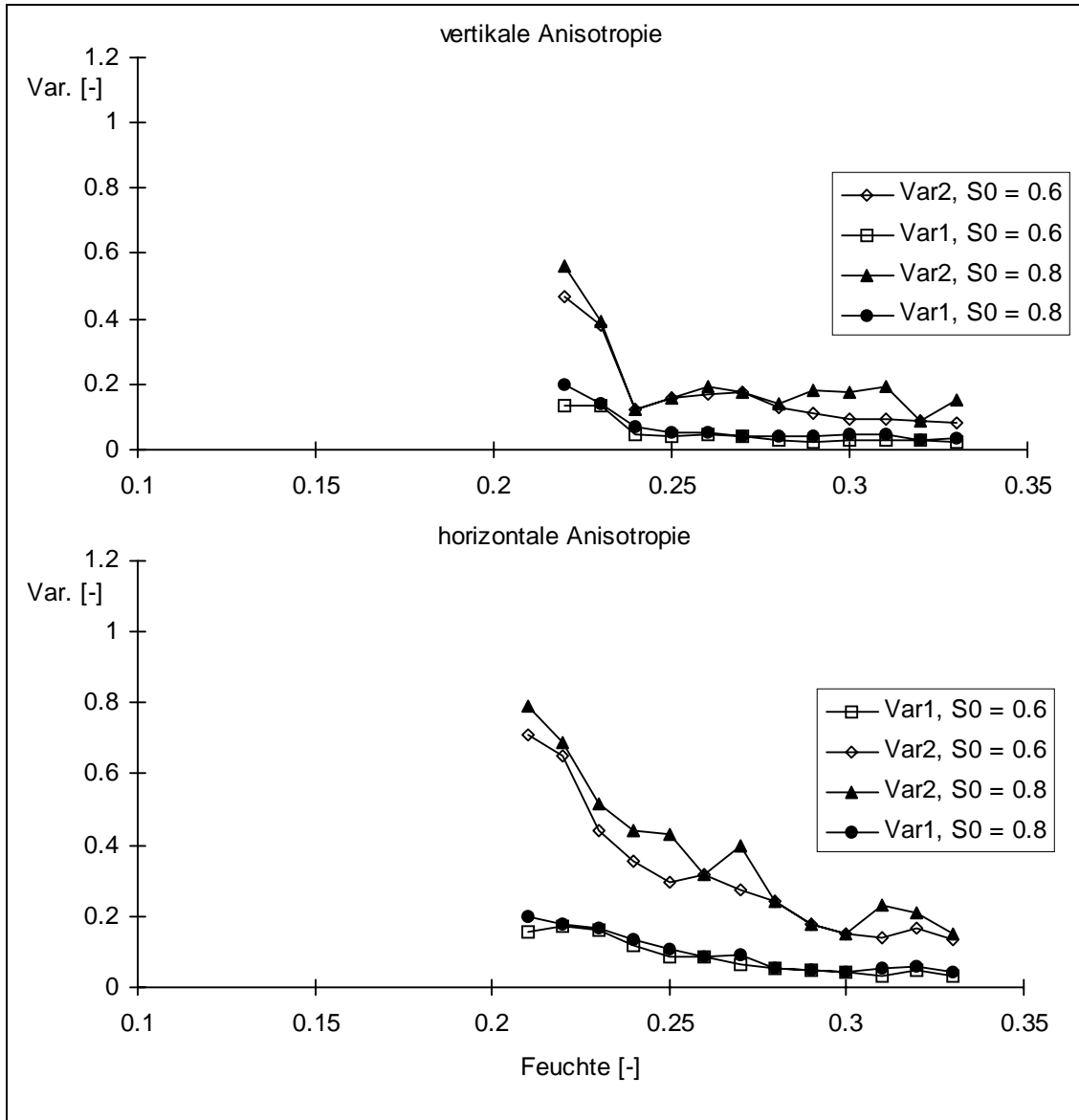


Abb. 7.14: Streumaße Var1 und Var2 für die simulierte Berechnung der Parzelle Mp 97, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte für die Schwellenwerte $S_0 = 0.8$ und 0.6 .

Berechnung der Parzelle Mp 97 bei reduzierter Intensität $I = 2.2$ mm/h: Wie die Abbildungen 7.15 und 7.16 zeigen, führt die Verminderung der Intensität auf 2.2 mm/h zu einer Verstärkung der oben beschriebenen Effekte. Die beiden Graphen der Abbildung 7.15 zeigen die Scatterplots der Schwerpunkstiefen der simulierten Fließmuster aufgetragen gegen die mittleren Anfangsfeuchten für beide Anisotropierichtungen der Anfangsfeuchte. In beiden Fällen existiert ein relativ scharf begrenzter Bereich, in dem die Simulationsergebnisse deutlich stärker streuen als bei den restlichen mittleren Anfangsfeuchten. Für den Fall horizontaler

Anisotropie, dargestellt im unteren Graphen, ist dieser Bereich mit 20 - 25% mittlerer Anfangsfeuchte breiter als im Fall vertikal anisotroper Anfangsfeuchtefelder mit 23 - 20%.

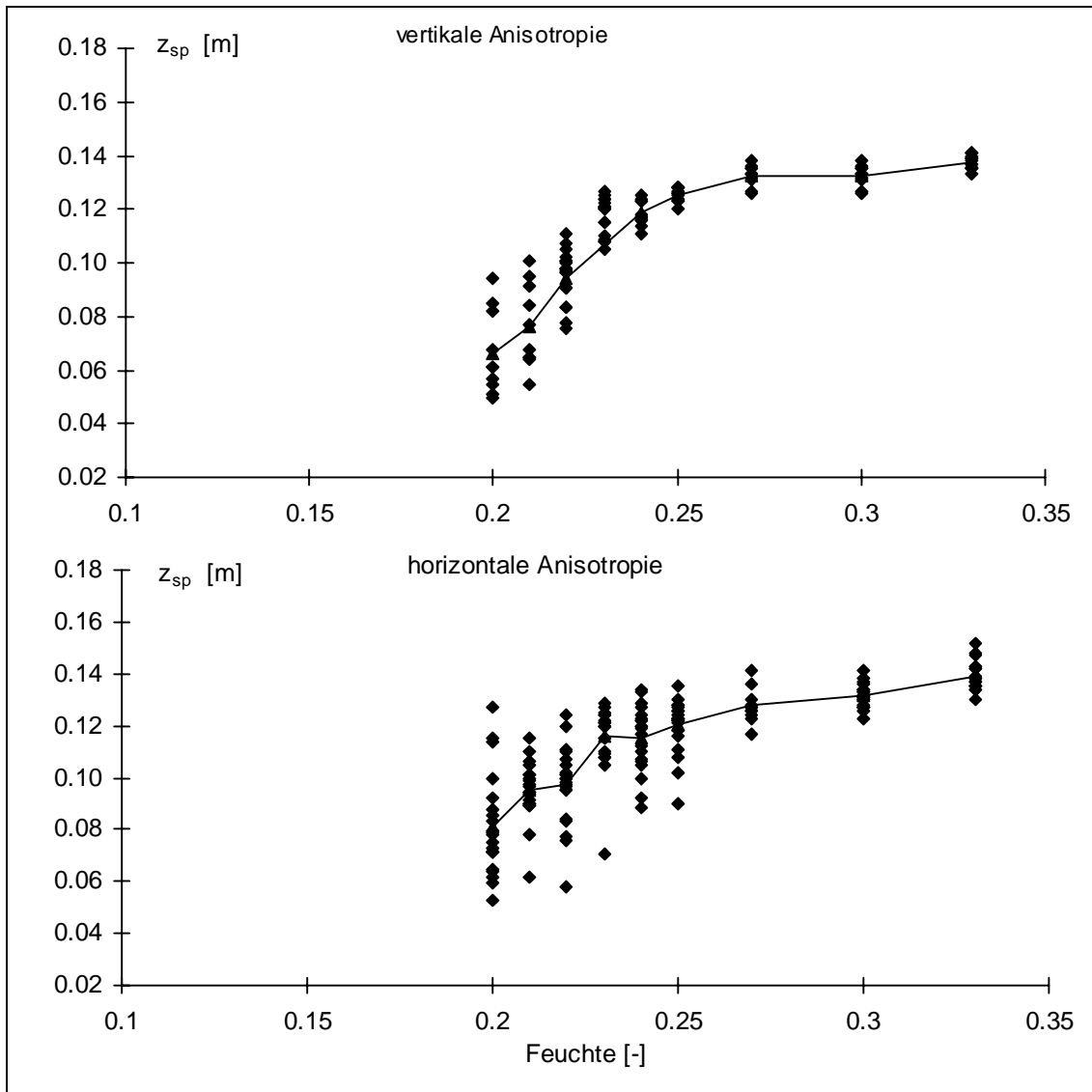


Abb. 7.15: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei niedriger Intensität von 2.2 mm/h, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Die Kurve verbindet die mittleren Schwerpunktstiefen der jeweils 20 Wiederholungen bei konstanter mittlerer Anfangsfeuchte. Der Schwellenwert für das Initiieren präferentieller Fließaktivität liegt bei 0.8.

Wie der obere Graph der Abbildung 7.16 zeigt, hat die Erniedrigung des Schwellenwerts auf $S_0 = 0.6$ eine deutliche Erhöhung der maximalen Streubreite Var2 zufolge. Das Maximum von Var2, gelegen bei 20% mittlerer Anfangsfeuchte, erreicht in beiden Graphen einen Wert von ca. 0.9. Die maximale Streuung und der Mittelwert der Schwerpunktstiefen über alle Wiederholungen sind an diesem Punkt von gleicher Größenordnung.

Offensichtlich wird durch die Erniedrigung der Beregnungsintensität die Abhängigkeit des simulierten Transportgeschehens von der Realisierung des Anfangszustands im Bereich zwischen 25 und 20% bzw. 23 und 23% mittlerer Anfangsfeuchten deutlich verstärkt.

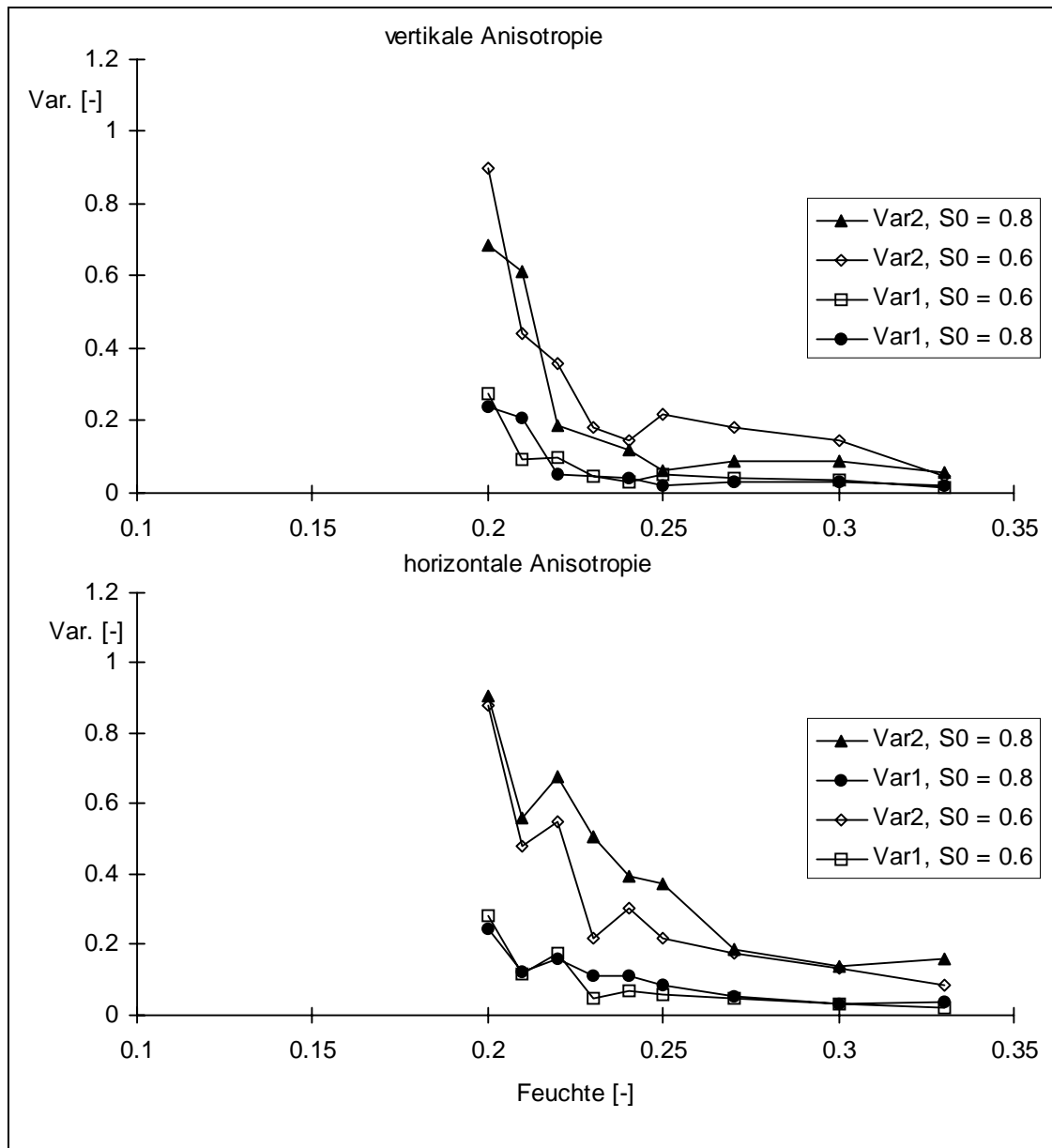


Abb. 7.16: Variationskoeffizient Var1 und skalierte Streubreite Var2 für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei niedriger Intensität von 2.2 mm/h, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte.

7.4.2 Wiederholte Beregnung der Parzelle B

Beregnung von Parzelle B bei hoher Intensität $I = 11 \text{ mm/h}$: Der dämpfende Einfluß einer hohen Beregnungsintensität auf die oben beschriebene Abhängigkeit der simulierten Fließmuster von der Realisierung des Anfangszustands wurde im Rahmen der simulierten Beregnung von Parzelle B besonders deutlich. Abbildung 7.17 zeigt im oberen Graphen die Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte für den Fall horizontaler Anisotropie. Im unteren Graphen der Abbildung 7.17 sind der Variationskoeffizient Var1 und die skalierte Streubreite Var2 der Schwerpunktstiefen dargestellt. Zwar zeigt sich eine leicht erhöhte

Streuung der Ergebnisse zwischen 23 und 20% mittlerer Anfangsfeuchte, jedoch ist diese deutlich geringer als in der entsprechenden Abbildung für die simulierte Beregnung der Parzelle Mp 97 in Anhang A5.

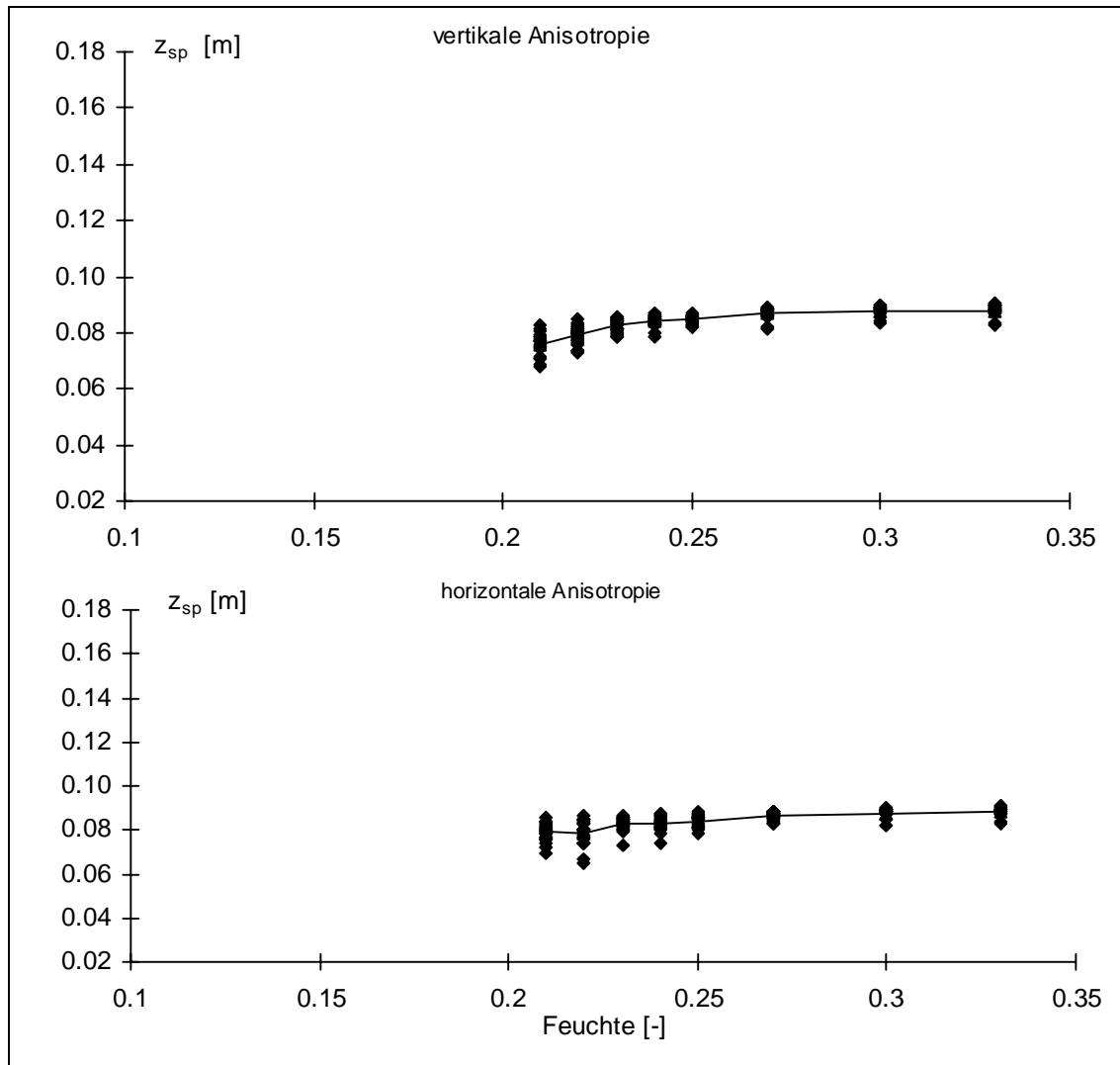


Abb. 7.17: Schwerpunktstiefen der Fließmuster für Parzelle B (oberer Graph) und die Variationsmaße Var1 und Var2 (unterer Graph) bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$ und hoher Intensität $I = 11$ mm/h, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte.

Da sich der anstehende Boden der Parzelle B nur durch eine geringere Anzahl präferentieller Fließwege vom Boden der Parzelle Mp 97 (siehe Abbildung 7.12) unterscheidet, ist dieser Unterschied offensichtlich die Ursache für den stärker gedämpften Einfluß der nichtlinearen Systemdynamik auf den Verlauf des Transportgeschehens bei hoher Beregnungsintensität. Die entsprechenden Grafiken für vertikal anisotrope Anfangsfeuchtefelder finden sich in Anhang A5.

Beregnung der Parzelle B bei niedriger Intensität $I = 2.2$ mm/h: Wie Abbildung 7.18 für die Simulation bei niedrigem Schwellenwert zeigt, kommt es bei der Beregnung der Parzelle B mit niedriger Intensität teilweise zu einer enormen Streuung der Schwerpunktstiefen.

Wieder hat die Anisotropie der Anfangsfeuchtefelder nur einen graduellen Einfluß auf die Streubreite der Ergebnisse.

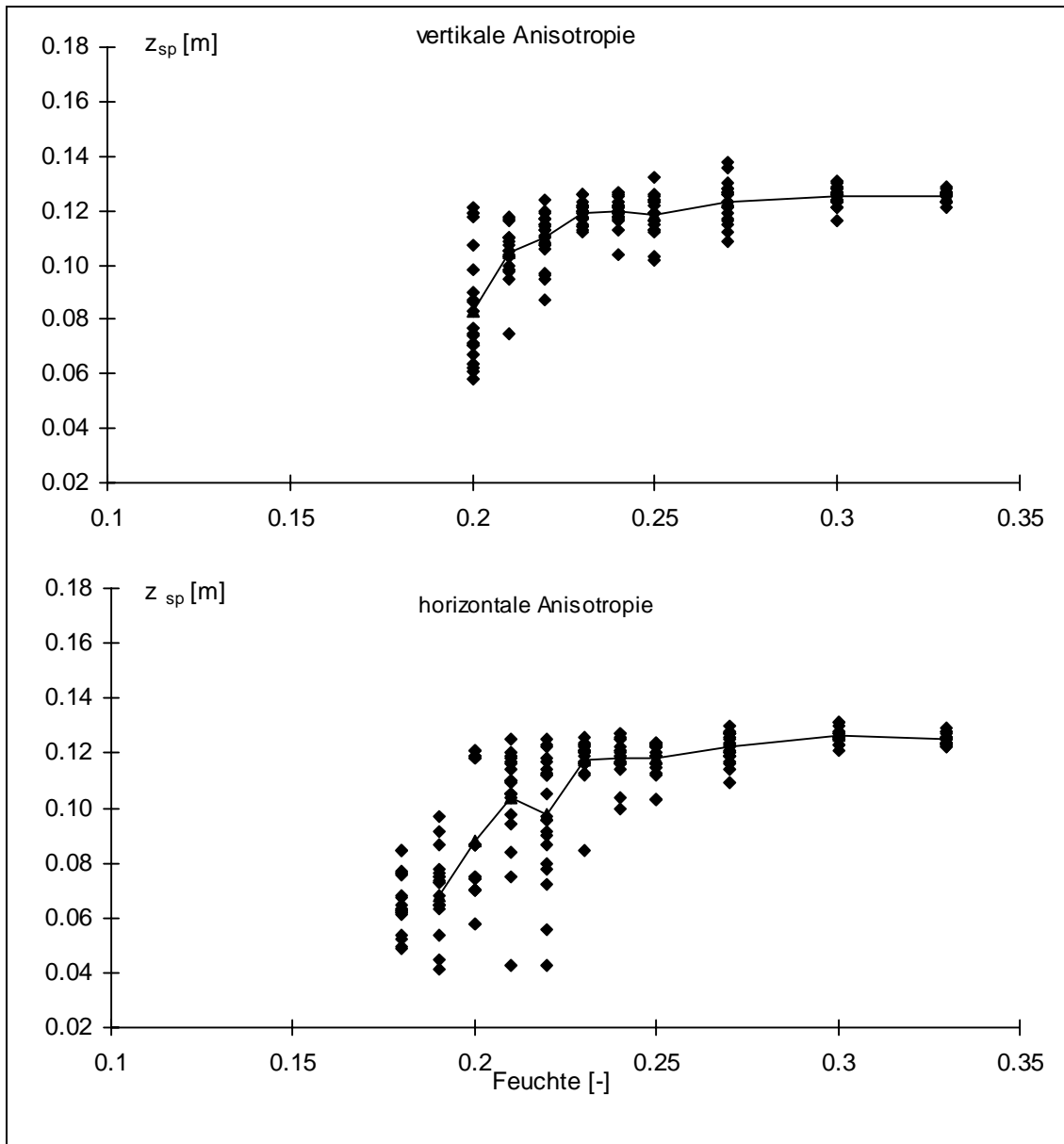


Abb. 7.18: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung von Parzelle B mit einer Intensität von 2.2 mm/h, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Der Schwellenwert liegt bei $S_0 = 0.6$.

Im Falle vertikaler Anisotropie der Anfangsfeuchten, dargestellt im oberen Graphen, liegt der Bereich maximaler Streubreite bei 20% mittlerer Feuchte. Bei horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchten erreicht die Streuung bereits bei 22% ihr Maximum. Die entsprechende Abbildung für die Simulation bei hohem Schwellenwert von $S_0 = 0.8$ in Anhang A5 verläuft ähnlich, jedoch sind die Streubreiten nicht ganz so groß wie in Abbildung 7.18. Ein Vergleich der über alle Wiederholungen gemittelten Schwerpunktstiefen im unteren Graphen der Abbildung 7.18 mit denjenigen aus Abbildung 7.17 zeigt, daß die mittlere Tiefenverlagerung im vorliegenden Fall ca. um den Faktor 1.2 bis 1.5 größer ist als bei der Beregnung der gleichen Parzelle mit hoher Intensität. Eine erhöhter Randfluß hat aufgrund der nichtlinearen

Systemdynamik also **nicht** unbedingt eine Vergrößerung der mittleren Schwerpunktstiefe zur Folge.

Abbildung 7.19 zeigt den Verlauf des Variationskoeffizienten Var1 und der skalierten Streubreite Var2. Im Fall horizontaler Anisotropie, dargestellt im unteren Graphen, nehmen beide Variationsmaße im Bereich zwischen 20 und 18% mittlerer Anfangsfeuchte ab. Zur Erinnerung sei bemerkt, daß die Standardabweichung der Anfangsfeuchtefelder in allen Fällen mit $\sigma_\theta = 2\%$ volumetrischer Feuchte konstant war.

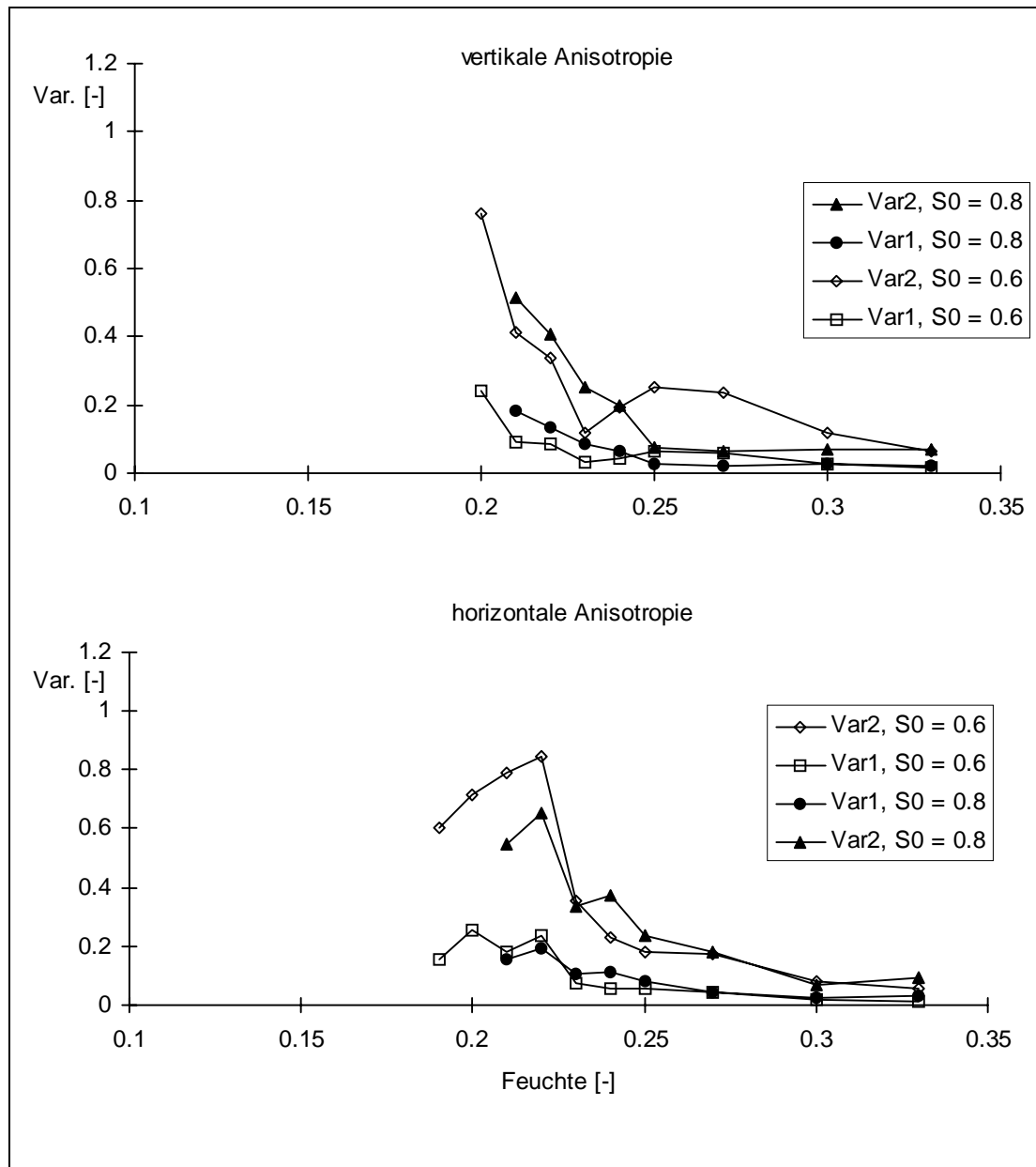


Abb. 7.19: Variationskoeffizient Var1 und skalierte Streubreite Var2 für die Beregnung der Parzelle B bei niedriger Intensität $I = 2.2 \text{ mm/h}$, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte.

Obwohl die relative Inputvariabilität der Anfangszustände mit abnehmender mittlerer Feuchte stetig steigt, sinkt die relative und die absolute Streuung der Schwerpunktstiefen im Bereich

zwischen 20 und 18% mittlerer Anfangsfeuchte. Das ist offensichtlich eine Folge der nichtlinearen Systemdynamik.

Die Ergebnisse des vorliegenden und letzten Abschnitts zeigen, daß in den untersuchten Anfangszuständen beider Modellparzellen Instabilitätsbereiche existierten, in denen das Transportgeschehen sehr empfindlich von der Realisierung des Anfangszustands abhängt. Die simulierte Wiederholung von Transportversuchen unter makroskopisch identischen Anfangs-Randbedingungen führt in diesem Bereich zu einer wesentlich höheren Variation der Ergebnisse als im restlichen Bereich der untersuchten Anfangsfeuchten. Bevor in Abschnitt 7.4.4 eine weitergehende Untersuchung und Diskussion dieses Sachverhalts erfolgt, werden im nächsten Abschnitt die Simulationsergebnisse mit gemessenen Fließmustern verglichen.

7.4.3 Vergleich zwischen Simulation und Messung

Der vorliegende Abschnitt soll prüfen, ob das Prozeßmodell, insbesondere der Ansatz zur effektiven Beschreibung von präferentieller Fließaktivität, das kleinskalige Transportgeschehen im Vergleich zur Messung realistisch beschreibt. Ziel des Vergleichs ist nicht, zu prüfen, ob die Modellrechnungen die Messungen möglichst exakt approximieren. Das ist angesichts der unterschiedlichen Bereiche, über die Modell und Messung in der dritten Dimension mitteln, auch nicht zu erwarten. Die gemessenen Fließmuster aus Kapitel 3 repräsentieren den Bromidgehalt eines 4 cm mächtigen – das entspricht der Höhe der Stechzylinder – Vertikalprofils der Fläche 1 m². Die Simulationsergebnisse stellen hingegen die mittleren Verhältnisse in einem 1 m mächtigen Vertikalprofil dar, dies entspricht der Ausdehnung der Parzelle in y-Richtung.

Der Vergleich soll prüfen, ob die Schwerpunktparameter der simulierten Fließmuster im Vergleich zu den entsprechenden Parametern der realen, aggregierten Fließmuster in einer vernünftigen Größenordnung liegen. Des weiteren soll geklärt werden, ob das Modell Tendenzen, die sich durch eine Veränderung der Makroporosität oder der Anfangsfeuchte im Transportgeschehen ergeben, richtig wiedergibt. Insofern wurden zu dem Vergleich auch Versuche herangezogen, deren Anfangs-Randwerte nur ungefähr mit denen der Simulationen übereinstimmen.

Ein direkter Vergleich ist nur zwischen der simulierten Berechnung der Modellparzelle Mp 97 bei hoher Intensität $I = 11$ mm/h und mittlerer Anfangsfeuchte von 27.8% und dem real durchgeführten Transportversuch an der Intensivparzelle Mp 97³⁸ möglich, im folgenden wird auch vom Kontrollfall gesprochen. In Tabelle 7.13 sind die Anfangsfeuchte θ , die Beregnungsintensität I , die kumulative Beregnungsmenge CI , das Makroporenvolumen V_{mak} sowie die Wiederfindungsrate der Beregnungsversuche aufgeführt, die für eine Prüfung der Modell-

³⁸ Zur Erinnerung: Der Kontrollfall 1 orientiert gerade an der 1997 durchgeführten Beregnung der Parzelle Mp 97.

ergebnisse benutzt werden. Für die Berechnung der Parzelle Mp 97 bei reduzierter Anfangsfeuchte sind das die Versuche an den Standorten Mp 3 und Mp 5. An beiden Standorten steht ebenfalls ein Kolluvium an, jedoch stimmen weder die Makroporenvolumina noch die kumulativen Berechnungsmengen exakt mit den Daten der Simulation überein. Darüber hinaus ist die minimale mittlere Anfangsfeuchte, für die die Berechnung der Parzelle Mp 97 mit hoher Intensität simuliert wurde, mit 21% noch immer um 3% größer als bei den genannten Versuchen. Die simulierte Berechnung der Modellparzelle B bei hoher Intensität wird mit dem Versuch am Standort Mp 23 verglichen. Dies ist zwar der Versuchsstandort mit dem geringsten Makroporenvolumen, trotzdem besteht auch hier keine exakte Übereinstimmung zwischen der Makroporosität der Modellparzelle B und des Meßstandortes.

Tabelle 7.14: Anfangs-Randbedingungen der Berechnungsversuche und der Simulationsvarianten, die zur Prüfung der Modellergebnisse benutzt werden.

| Vergleich | | Standort | θ [%] | I [mm/h] | CI [mm] | V_{mak} [10^{-3} m^3] | Wiederfindungsrate [%] |
|--|------------|------------|-----------------|-------------|------------|---|---------------------------|
| Kontrollfall Mp 97 | Messung | Mp 97 | 27.8 | 11 | 25.3 | 0.54 | 95.0 ± 9.8 |
| | Simulation | Mp 97 | 28 | 11 | 25.3 | 0.54 | 100 |
| reduzierte Anfangs- feuchte Mp 97 | Messung | Mp 3 | 18 | 11 | 23.8 | 0.72 | 75.0 ± 11.5 |
| | Messung | Mp 5 | 18 | 10 | 21.9 | 0.74 | 78.4 ± 14.4 |
| | Simulation | Mp 97 | 21 | 11 | 25.3 | 0.54 | 100 |
| reduzierte Makro- porosität | Messung | Mp 23 | 23.4 | 11 | 23.7 | 0.14 | 74.0 ± 6.3 |
| | Simulation | Parzelle B | 23 | 11 | 25.3 | 0.054 | 100 |

In Tabelle 7.15 werden die über alle Realisierungen gemittelten Schwerpunktparameter der simulierten Fließmuster mit den Schwerpunktparametern der aggregierten Fließmuster der Messungen verglichen. Strenggenommen beträgt der Fehler bei Berechnung der Schwerpunkttiefe $\langle z_{\text{sp}} \rangle$ der Meßprofile 5 cm – das entspricht der halben Zellenhöhe im Beprobungsgitter (siehe auch Abschnitt 3.4.1). Eine Diskussion im Rahmen dieser enormen Unschärfe erscheint unsinnig, da im Rahmen dieses Fehlers die Übereinstimmung zwischen den simulierten und den gemessenen mittleren Schwerpunkttiefen in allen Fällen perfekt wäre. Deshalb wurde angesichts des relativen Fehlers von 5.5% bei der Konzentrationsbestimmung der Bodenproben (Abschnitt 3.5.2) der relative Gesamtfehler der Schwerpunktparameter auf 10% geschätzt. Als Unsicherheitsmaß für die Simulationsergebnisse dienen die Standardabweichungen der Schwerpunktparameter, die im Rahmen der 40 simulierten Wiederholungen bei fester mittlerer Anfangsfeuchte aufgetreten sind.

Unter Berücksichtigung der Unsicherheitsmaße ist die Übereinstimmung zwischen den mittleren Schwerpunkttiefen der gemessenen und simulierten Bromidprofile für Parzelle Mp 97 im

Kontrollfall gut. Die Variabilität der Schwerpunktstiefen wird etwas unterschätzt, das Schiefe-
maß hingegen im Rahmen der Unschärfe ebenfalls gut getroffen. Darüber hinaus liefert das
Modell sowohl bei reduzierter Anfangsfeuchte für Modellparzelle Mp 97 als auch bei redu-
zierter Makroporosität, d.h. für Parzelle B, die richtige Tendenz und die richtige Größenord-
nung für Veränderungen des Transportgeschehens, wenn auch die Übereinstimmung im Rah-
men der Unsicherheit nicht vollständig ist.

Tabelle 7.15: Vergleich der Schwerpunktparameter gemessener und simulierter Fließmuster für
Beregnung der Parzelle Mp 97 im Kontrollfall, bei Reduzierung der Anfangsfeuchte (und ähnlicher
Makroporosität der Versuchsstandorte) sowie zwischen Parzelle B und Parzelle Mp 23

| Vergleichsziel | Standort | $\langle z_{sp} \rangle$ [m] | σ [m] | σ_3 [m ³] |
|--|------------|------------------------------|------------------|------------------------------|
| Kontrollfall Mp 97 | Messung | 0.17 ± 0.017 | 0.07 ± 0.007 | $-(2.9 \pm 0.2) 10^{-5}$ |
| | Simulation | 0.16 ± 0.01 | 0.04 ± 0.01 | $-(4.1 \pm 2.3) 10^{-5}$ |
| reduzierte Anfangsfeuchte Mp 97 | Mp 3 | 0.07 ± 0.007 | 0.02 ± 0.002 | $(3.5 \pm 0.4) 10^{-6}$ |
| | Mp 5 | 0.07 ± 0.007 | 0.02 ± 0.002 | $(4.6 \pm 0.5) 10^{-6}$ |
| | Simulation | 0.10 ± 0.014 | 0.02 ± 0.007 | $-(3.2 \pm 0.3) 10^{-6}$ |
| reduzierte Makroporosität Parzelle B | Mp 23 | 0.06 ± 0.006 | 0.01 ± 0.001 | $(1.6 \pm 0.2) 10^{-6}$ |
| | Simulation | 0.08 ± 0.003 | 0.02 ± 0.001 | $-(1.0 \pm 0.7) 10^{-6}$ |

Das Modell und insbesondere die effektive Beschreibung von präferentiellem Tracertransport
(siehe Abschnitt 6.2.2 und 6.5.1) liefern somit im Rahmen der Unschärfen gute Ergebnisse für
das makroskopische Transportgeschehen. Die Tendenzen und die Größenordnung des verän-
derten Transportgeschehens bei Änderung der Anfangs-Randbedingungen werden ebenfalls
realistisch eingeschätzt. Allerdings sollen die obigen Ergebnisse nicht darüber hinwegtäu-
schen, daß simulierte und gemessene Fließmuster im Detail sehr unterschiedlich aussehen
können.

7.4.4 Der Instabilitätsbereich möglicher Anfangszustände

Die Ergebnisse des Vergleichs zwischen Simulation und Messung stützten die Hypothese, daß
die in den Abschnitten 7.4.1 und 7.4.2 vorgestellten nichtlinearen Effekte auch bei der Bereg-
nung realer Böden³⁹ auftreten würden. Besonders hervorzuheben ist, daß im Raum der mögli-
chen Anfangszustände beider untersuchter Modellparzellen ein instabiler Bereich existiert, in
dem die gleiche Unschärfe im Anfangszustand im Rahmen der simulierten Wiederholungen
zu einer wesentlich höheren Streuung der Versuchsergebnisse führt als im restlichen Bereich
der untersuchten Anfangsfeuchten.

³⁹ Nur ist die Wiederholung solch einer Beregnung im Feld aufgrund der Tatsache, daß nicht zerstörungsfrei
beprobt wird, leider bisher noch nicht möglich.

In Abschnitt 7.4.2 wurde bereits angedeutet, daß eine erhöhte Beregnungsintensität diesen Effekt dämpft. Um diesen Sachverhalt näher zu untersuchen, wurde zusätzlich die Beregnung beider Parzellen mit einer mittleren Intensität von $I = 5.5 \text{ mm/h}$ simuliert. Die zugehörigen Darstellungen der Schwerpunktstiefen und der Variationsmaße finden sich in Anhang A5. Abbildung 7.20 zeigt das Maximum der skalierten Streubreite $\text{Var}2$, aufgetragen gegen die Beregnungsintensität für die Modellparzellen Mp 97 und Modellparzelle B bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$. Für beide Parzellen nimmt das Maximum der skalierten Streubreite mit zunehmender Beregnungsintensität stark ab. Auch hier spielt die Anisotropiehaupttrichtung der Anfangsfeuchte nur eine graduelle Rolle. Offensichtlich reduziert die stärkere Störung des Systems durch eine hohe Beregnungsintensität den Einfluß von Meßunscharfe und nichtlinearer Systemdynamik auf den Transportprozeß. Der Grad der Wiederholbarkeit der Versuche wird mit zunehmender Beregnungsintensität größer.

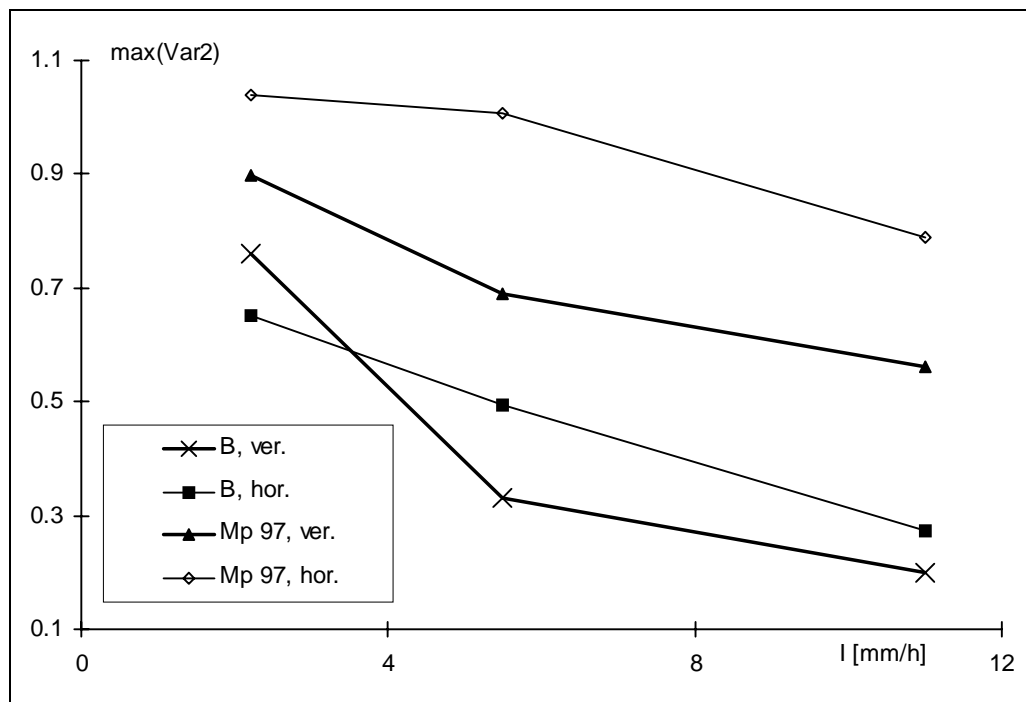


Abb. 7.20: Maximum des normierten Variationsmasses $\text{Var}2$ als Funktion der Beregnungsintensität

Im Rahmen simulierten Beregnung der Modellparzelle B bei einer Intensität von $I = 2.2 \text{ mm/h}$ hat sich in Abbildung 7.19 (Abschnitt 7.4.2) im Bereich zwischen 20 und 18% mittlerer Anfangsfeuchte eine Abnahme beider Variationsmaße angedeutet. Um diesem Trend nachzugehen, wurde abschließend die wiederholte Beregnung beider Modellparzellen für mittlere Anfangsfeuchten zwischen 18 und 12% mit niedriger Intensität $I = 2.2 \text{ mm/h}$ und einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$ simuliert. Abbildung 7.21 zeigt im oberen Graphen die Schwerpunktstiefen der Fließmuster für die simulierte Beregnung der Parzelle Mp 97, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte bei horizontaler Anisotropie. Im unteren Graphen ist der Verlauf des Variationskoeffizienten $\text{Var}1$ und der skalierten Streubreite $\text{Var}2$ dargestellt. Abbildung 7.22 zeigt die entsprechenden Ergebnisse für die simulierte Beregnung von Parzel-

le B. Bei der Berechnung beider Modellparzellen nimmt, trotz der stetig steigenden relativen Inputvariabilität, die Streuung der Ergebnisse im Bereich zwischen 18 und 12% kontinuierlich ab. Das zusätzliche Diagramm im oberen Graphen der Abbildung 7.21 zeigt die Schwerpunkstiefen, die sich bei der simulierten Wiederholung des gleichen Berechnungsversuchs ergeben, falls der Boden keine Makroporen enthält, d.h. $f_{\text{mak}} = 0$. In diesem Fall erzeugt die Unschärfe der Anfangsfeuchte fast keine Variation der simulierten Versuchsergebnisse.

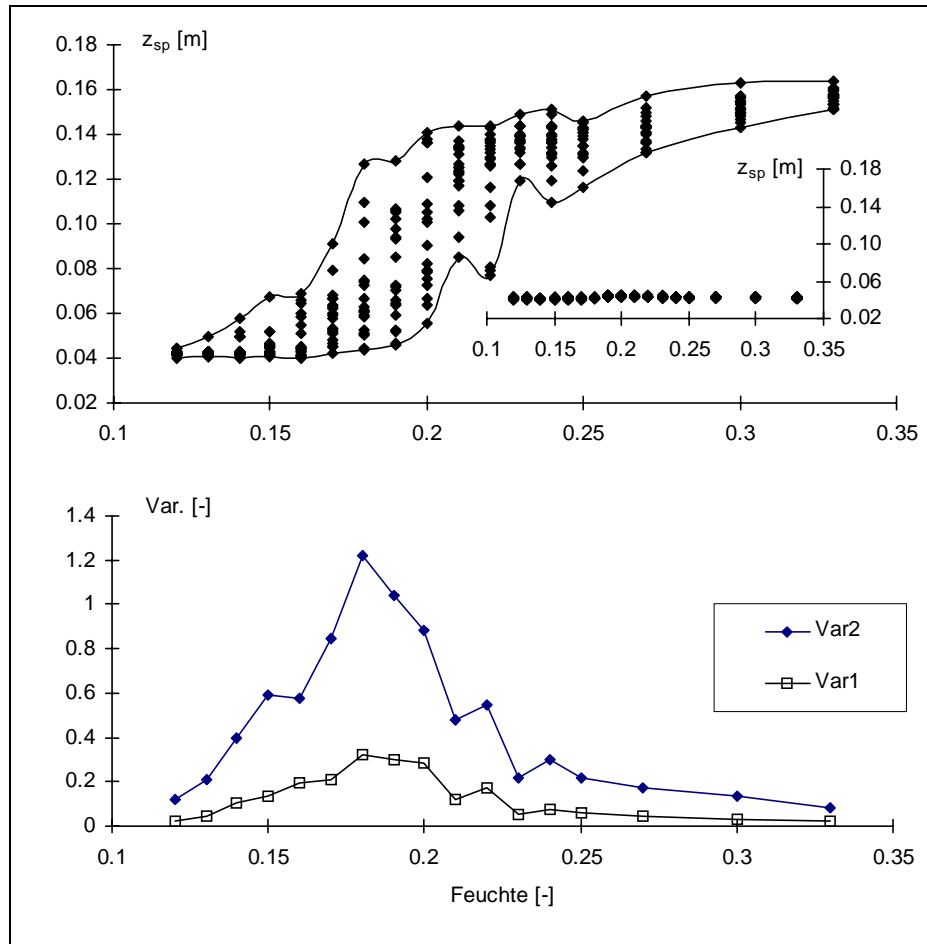


Abb. 7.21: Schwerpunkstiefen der simulierten Fließmuster und deren Einhüllende (oberer Graph) sowie normierte Variationsmaße (unterer Graph) für die Berechnung der Parzelle Mp 97 mit einer Intensität von $I = 2.2 \text{ mm/h}$, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Die Hauptrichtung der Anisotropie der Anfangsfeuchtefelder ist die Horizontale, der Schwellenwert für das Initiieren präferentiellen Fließens beträgt 0.6. Das zusätzliche Diagramm im oberen Graphen zeigt die Schwerpunkstiefen, die sich bei simulierter Wiederholung des gleichen Transportversuchs ergeben, falls der Boden keine Makroporen enthält, d.h. $f_{\text{mak}} = 0$.

In den möglichen Anfangszuständen beider Parzellen existiert offenbar ein Bereich, indem die gleiche Unschärfe des Anfangszustands im Rahmen der simulierten Wiederholungen zu einer extremen Variation der Schwerpunkstiefen führt. Diese Zone wird im folgenden als Instabilitätsbereich im Raum der möglichen Anfangszustände angesprochen. Die Verläufe der skalierten Streubreite Var2 in den Abbildungen 7.21 und 7.22 erinnern an eine Resonanzkurve. Befindet sich das System im instabilen Bereich der möglichen Anfangszustände, so schaukeln

sich die Anfangsunschärfen im Rahmen der Wiederholungen zu maximaler Streuung der simulierten Versuchsergebnisse auf.

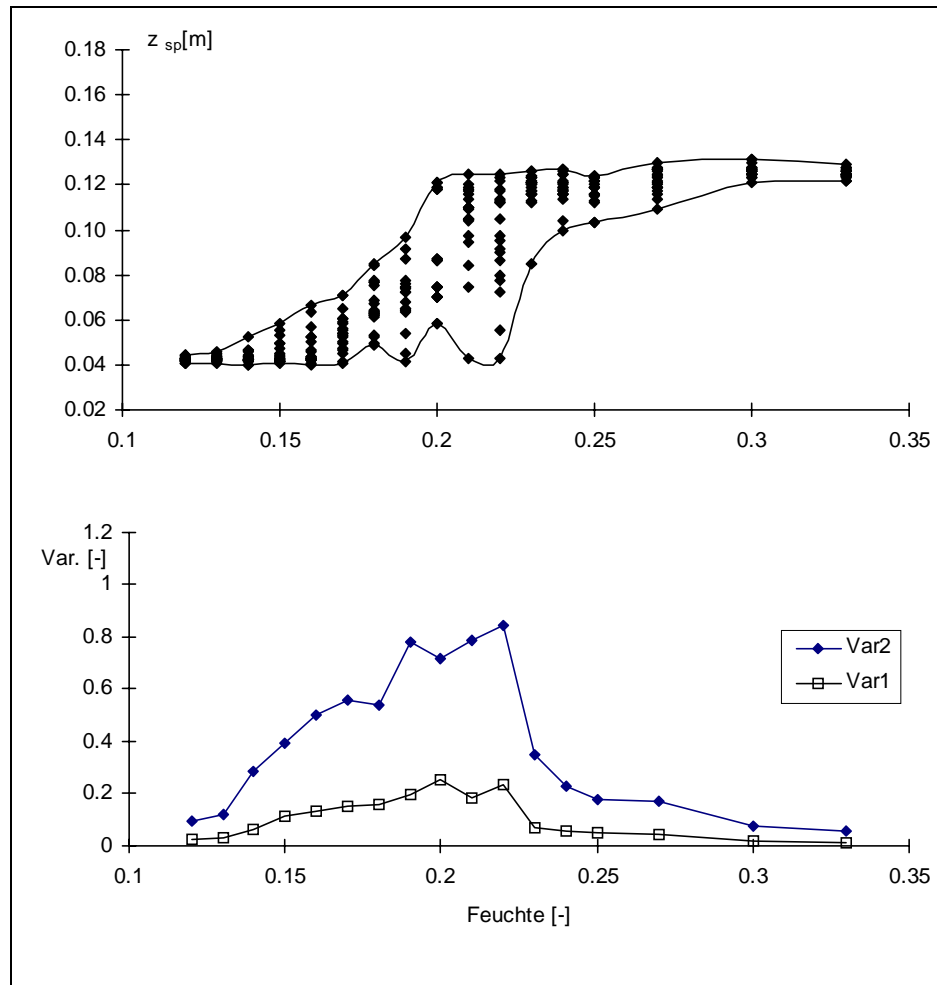


Abb. 7.22: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster und deren Einhüllende (oberer Graph) sowie normierte Variationsmaße für die Berechnung der Parzelle B mit niedriger Intensität von $I = 2.2 \text{ mm/h}$, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Die Hauptrichtung der Anisotropie der Anfangsfeuchtefelder ist die Horizontale, der Schwellenwert für das Initiieren präferentiellen Fließens liegt bei 0.6.

Die mittlere Bodenfeuchte des Anfangszustands spielt im vorliegenden Fall die Rolle eines Kontrollparameters (Schuster, 1994), der die qualitative Systemdynamik und damit den makroskopischen Verlauf des Transportprozesses stark bestimmt. Im Fall vertikal anisotroper Anfangsfeuchten ist die Breite des Instabilitätsbereichs für beide Parzellen geringer, die entsprechenden Darstellungen finden sich in Anhang A5.

In Tabelle 7.16 sind für beide Parzellen, die minimale und die maximale Schwerpunktstiefe, die im Bereich maximaler Streubreite bei der Wiederholung auftreten, und der Kreuzkorrelationskoeffizient in Horizontalrichtung zwischen den entsprechenden Anfangsfeuchten und dem Gesamtleitfähigkeitsfeld gegenübergestellt. Offensichtlich wird die Unsicherheit des mittleren Transportgeschehens durch Unterschiede in der Kreuzkorrelation $C(k_s^B, \theta)$ zwischen Anfangsfeuchte und Gesamtleitfähigkeitsfeld hervorgerufen, große Transportdistanzen treten

bei positiven Werten, geringe Transportdistanzen bei negativen Werten auf. Die geringen Beträge der Kreuzkorrelationskoeffizienten in Tabelle 7.16 deuten statistisch gesehen auf schwache räumliche Zusammenhänge. Es sind also in der Tat nur geringe mikroskopische Unterschiede im Anfangszustand, die bei der simulierten Wiederholung der Berechnungsversuche unter makroskopisch identischen Anfangs-Randbedingungen zu einer enormen Streuung der Ergebnisse im Instabilitätsbereich führen.

Tabelle 7.16: Minimale und maximale Schwerpunkstiefe der simulierten Fließmuster sowie der Kreuzkorrelationskoeffizient zwischen den entsprechenden Anfangsfeuchten und dem Gesamtleitfähigkeitsfeld $C(k_s^B, \theta)$ für beide Parzellen

| | Schwerpunkstiefe [m] | $C(k_s^B, \theta)$ [-] | mittlere Anfangsfeuchte [%] | Hauptrichtung der Anisotropie |
|----------------|----------------------|------------------------|-----------------------------|-------------------------------|
| Parzelle Mp 97 | 0.046 | -0.31 | 19 | horizontal |
| Parzelle Mp 97 | 0.128 | 0.24 | 19 | horizontal |
| Parzelle Mp 97 | 0.056 | -0.28 | 20 | vertikal |
| Parzelle Mp 97 | 0.122 | 0.26 | 20 | vertikal |
| Parzelle B | 0.046 | -0.39 | 22 | horizontal |
| Parzelle B | 0.122 | 0.28 | 22 | horizontal |
| Parzelle B | 0.060 | -0.14 | 20 | vertikal |
| Parzelle B | 0.107 | 0.21 | 20 | vertikal |

7.5 Die Reproduzierbarkeit eines kleinskaligen Transportexperiments: Diskussion und Deutung der Ergebnisse

7.5.1 Voraussetzungen für die Gültigkeit der Untersuchungsergebnisse für reale Böden

An dieser Stelle seien die wesentlichen Ergebnisse der numerischen Untersuchung zur Reproduzierbarkeit eines typischen Berechnungsversuchs kurz zusammengefasst. Im Raum der untersuchten Anfangszustände beider Parzellen existiert ein Bereich, in dem geringe Unterschiede in der räumlichen Kreuzkorrelation zwischen Anfangsfeuchte- und Gesamtleitfähigkeitsfeld zu großen Unterschieden im mittleren Transportgeschehen führen können. Im Rahmen der simulierten Wiederholung der Berechnungsversuche unter makroskopisch identischen Anfangs-Randbedingungen tritt in diesem Instabilitätsbereich eine extreme Streuung der Versuchsergebnisse auf. Die Streubreite in diesem Instabilitätsbereich wird durch eine hohe Berechnungsintensität reduziert.

Die Existenz dieses Instabilitätsbereichs im Raum der möglichen Anfangszustände eines heterogenen Bodens ergibt sich nahezu zwingend, falls die folgenden Voraussetzungen zutreffen:

- Die Dynamik von Wasser in strukturierten Böden ist nichtlinear.
- Es existieren zwei makroskopisch klar abgrenzbare, extreme Verläufe für Infiltration in heterogenen Böden, präferentielles Fließen und klassisches Infiltrieren in Form einer Front.
- Der Übergang zwischen den verschiedenen Fließregimes läßt sich effektiv durch eine Schwellensättigung für das lokale Initiieren präferentieller Strukturen beschreiben.

Die beiden ersten Punkte sind mit Sicherheit unstrittig, die Wasserdynamik in Böden ist nichtlinear und die Existenz beider Extreme ist hinreichend dokumentiert (Flury et al., 1995a und 1994a; Flury, 1996; Beven & Germann; 1982, Jury; 1986b; Rao et al., 1974; Stamm; 1997; Schmidt, 1996; Stenger, 1998). Das lokale Initiieren präferentieller Strukturen mittels einer Schwellensättigung ist ein konzeptionelles Konstrukt. Trotzdem liefert das Modell auf Basis dieses Idee, wie der Vergleich mit Meßdaten in Abschnitt 7.4.3 zeigt, eine gute Einschätzung des kleinskaligen Transportgeschehens in Form realistischer Schwerpunktparameter der simulierten Fließmuster. Daher sei an dieser Stelle die Hypothese noch einmal wiederholt, daß der oben beschriebene Instabilitätsbereich auch im Raum der Anfangsfeuchten realer, heterogener Böden existiert.

7.5.2 Der instabile Bereich schlechter Vorhersagbarkeit

Die wesentliche Motivation für die vorliegende Untersuchung ist, Information über den Grad der Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportversuche zu liefern. Die Ergebnisse solcher Versuche bilden die Datenbasis des in Kapitel 5 entwickelten Verfahrens zur Ausgliederung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens. Abbildung 7.23 zeigt exemplarisch ein Stabilitätsdiagramm für die simulierte Beregnung der Modellparzelle B. Im oberen Graphen sind der Variationskoeffizient $Var1$ und die skalierte Streubreite $Var2$ der Schwerpunktstiefen aufgetragen. Im vorliegende Fall wird die Grenze für eine gute Vorhersagbarkeit des Ergebnisses bei einem Variationskoeffizient von $Var1 = 15\%$ angesetzt. Das entspricht der typischen Größenordnung der relativen Meßfehler, die im Rahmen der in den Kapitel 3 vorgestellten Transportexperimente aufgetreten sind.

Die Reproduzierbarkeit und damit Vorhersagbarkeit des Versuchsergebnisses ist nicht für alle betrachteten mittleren Anfangsfeuchten gleich gut. Bereiche guter Vorhersagbarkeit liegen bei mittleren Anfangsfeuchten, die kleiner als 16 und größer als 23% sind. Die relative Variation der Ergebnisse, die bei einer identischen Wiederholungen in diesen Bereichen auftritt, ist mit maximal 15% von der Größenordnung der relativer Meßfehler. Im schraffierten Instabilitätsbereich liegt die normierte, mittlere Streuung der Ergebnisse hingegen zwischen 15 und 30%, das Transportgeschehen ist im Mittel wesentlich schlechter vorherzusagen. Im Extremfall kann der Unterschied zwischen den Ergebnissen zweier Wiederholungen mehr als 100% betragen.

Im unteren Graphen der Abbildung 7.23 sind die Variationsparameter der Fließmuster⁴⁰ gegen die zugehörigen Schwerpunkstiefen für alle Wiederholungen bei den mittleren Anfangsfeuchten 12, 22 und 33% aufgetragen. Am Punkt schlechtester Vorhersagbarkeit - bei 22% mittlerer Anfangsfeuchte - streuen die Parameter der Fließmuster nahezu über den ganzen Bereich zwischen den beiden stabilen Fällen bei 12 und 33% mittlerer Anfangsfeuchte. Diese enorme Streuung wird, wie in Abschnitt 7.4.4 belegt wurde, durch geringe Unterschiede in der Kreuzkorrelation zwischen Anfangsfeuchtefeld und Gesamtleitfähigkeitsfeld verursacht.

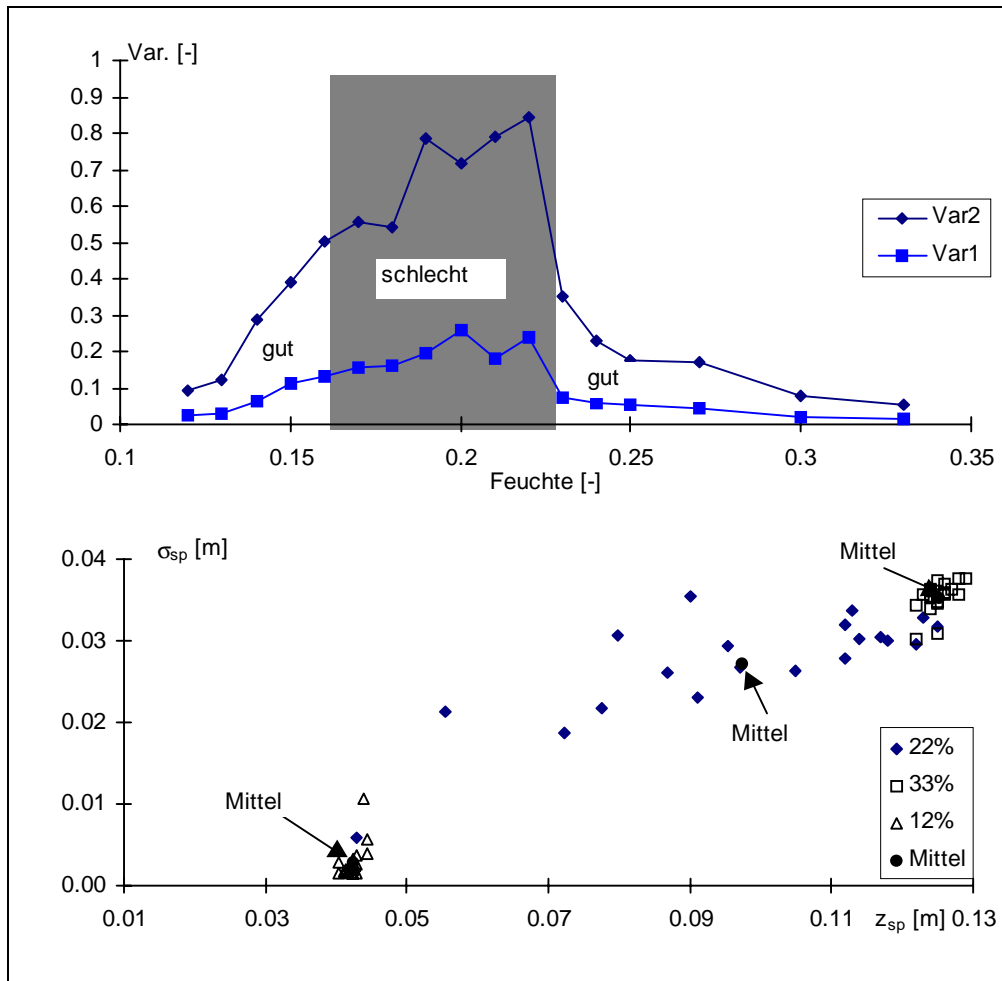


Abb. 7.23: Stabilitätsdiagramm für die simulierte Beregnung der Parzelle B; im oberen Graphen sind Bereiche guter und schlechter Vorhersagbarkeit durch den Verlauf des Variationsmaßes Var1 markiert. Im unteren Graphen sind der Variationsparameter gegen die Schwerpunkstiefen der Fließmuster sowie deren Mittelwerte über alle Wiederholungen bei 12, 22 und 33% mittlerer Anfangsfeuchte aufgetragen.

Im Rahmen der Wiederholungen des Versuchs führen positive Korrelationen in einigen Fällen zu präferentieller Fließaktivität, in anderen Fällen dämpft eine negative Korrelation den Infiltrationsverlauf zu einer klassischen Front. Wie bereits mehrfach betont wurde, sind diese mikroskopischen Unterschiede der Anfangs-Randbedingungen mit der in Abschnitt 2.4.2 vorge-

⁴⁰ Damit ist die Standardabweichung der Schwerpunktsverteilung der jeweiligen Fließmuster gemeint (siehe auch Abschnitt 5.2.1)

stellten Meßstrategie nicht zu erfassen. Die Wiederholung der Transportversuchs bei 22% mittlerer Anfangsfeuchte liefert daher als Ergebnisse Fließmuster aus nahezu der gesamten Bandbreite des möglichen Transportgeschehens⁴¹, obwohl die zugehörigen Anfangs-Randbedingungen im Rahmen der Meßgenauigkeit identisch sind. Diese äußerst empfindliche Abhängigkeit des Transportgeschehens im Instabilitätsbereich von nicht meßbaren Feinheiten der Anfangs-Randwerte wird im folgenden als quasichaotisches Verhalten angesprochen. Ein zu Abbildung 7.23 analoges Stabilitätsdiagramm für Parzelle Mp 97 findet sich in Anhang A5.

7.5.3 Die Folgen einer quasichaotischen Dynamik des kleinskaligen Transportprozesses in heterogenen Böden

Die Ursache für die schlechte Vorhersagbarkeit des simulierten Transportgeschehens im instabilen Bereich der untersuchten Anfangsfeuchten liegt im Zusammenspiel von nichtlinearer Dynamik und Meßunschärfe. Falls die im Rahmen der vorliegenden numerischen Untersuchung präsentierten Ergebnisse die Dynamik des kleinskaligen Transportprozesses in realen heterogenen Böden näherungsweise richtig beschreiben – die Ausführungen in Abschnitt 7.5.1 sprechen dafür – so könnte auch in deren möglichen Anfangszuständen ein Instabilitätsbereich existieren, in dem sich das kleinskalige Transportgeschehen immanent schlechter prognostizieren läßt als im restlichen Anfangszustandsraum. Falls dem so wäre, stellt sich die Frage, wieso diese chaotische Abhängigkeit von Anfangsbedingungen bisher noch nicht experimentell beobachtet wurde. Die experimentelle Beobachtung der oben vorgestellten quasichaotischen Dynamik des kleinskaligen Transportprozesses im Feld ist aufwendig. Dazu benötigt man makroskopisch identische Wiederholungen des gleichen Beregnungsexperiments, tatsächlich wird meist nur eine einzige Realisierung durchgeführt. Daher trifft man entweder auf einen mehr oder weniger präferentiellen Ablauf des Transportgeschehens, nie aber auf eine Streuung der Ergebnisse wie in Abbildung 7.23.

Betrachtet man die Probleme, die die Vorhersage der Wasser- und Stoffdynamik in der ungesättigten Bodenzone bereiten, unter dem Blickwinkel, daß die Dynamik im nichtlinearen System Boden möglicherweise chaotisches Verhalten im oben beschriebenen Sinne zeigen könnte, so wird folgendes klar. Zur Schätzung von Transportparametern mit Hilfe inverser Modellierung benötigt man mehrere Realisierungen eines Transportexperiments. Nur dann kann entschieden werden, ob das Experiment nicht im instabilen Bereich der Anfangszustände durchgeführt wurde und eine möglichst gute Annäherung des Versuchsergebnisses auch zu einer guten Schätzung von Transportparametern führt. Auch wenn Transportparameter auf Basis einer ausreichenden Anzahl von Versuchswiederholungen geschätzt werden, trifft eine Vorhersage auf Basis dieser Parameter das Transportgeschehen im instabilen Bereich der

⁴¹ Die absolute Streubreite der Schwerpunkstiefen der simulierten Fließmuster im Instabilitätsbereich und der in Kapitel 5 vorgestellten realen Fließmuster sind von gleicher Größenordnung (vergleiche Tabelle 7.16 und Tabelle A 4.1 in Anhang A4).

Anfangsfeuchten unter Umständen sehr schlecht. Wie Abbildung 7.23 zeigt, kann das Ergebnis eines erneuten, identischen Berechnungsversuchs um mehr als 50% von dem vorhergesagten, mittleren Transportgeschehen abweichen, ohne daß diese Abweichung durch unterschiedliche Anfangs-Randbedingungen erklärt werden kann.

Um die Güte der Ergebnisse kleinskaliger Transportversuche zu erhöhen, werden verbesserte Meßmethoden benötigt, die zerstörungsfrei und räumlich aufgelöst direkt auf der Berechnungsparzelle den Anfangszustand sowie die Randbedingungsparameter messen können. Durch die verbesserte Genauigkeit der Anfangs-Randbedingungen ließe sich der instabile Bereich im Raum der Anfangszustände stärker eingrenzen. Da aber jede noch so genaue Messung Fehler birgt, ließe sich dieser Bereich im Raum der möglichen Anfangszustände nie ganz beseitigen, er wäre systemimmanent.

Anläßlich der Tagung zum fünfzigjährigen Bestehen der Bundesanstalt für Gewässerkunde in Koblenz im Jahr 1998 präsentierten Lischeid und Hauhs (Lischeid, et al. 1999) die Ergebnisse eines Experiments, in dem die Reproduzierbarkeit eines Tracerdurchbruchs unter stationären Bedingungen untersucht wurde. Die dabei ermittelten Durchbruchgeschwindigkeiten streuten zwischen 10.6 und 30.6 m/d, obwohl keinerlei Unterschiede in den zugehörigen Randbedingungen gemessen wurden. Da im stationären Fall die Abhängigkeit der Durchbruchzeit vom Anfangszustand des Systems verschwindet, lieferten die Wiederholungen des Versuch sehr unterschiedliche Ergebnisse bei makroskopisch identischen (Anfangs-)Randbedingungen. Die im Rahmen dieser Untersuchung durchgeführte Modellierung der Versuche mit Hilfe eines Konvektions-Dispensions-Modells auf Basis mittlerer, effektiver Transportparameter ermöglichte wie erwartet nur eine schlechte Vorhersage der einzelnen Durchbruchgeschwindigkeiten. Die von Lischeid et al. (1999) beobachtete Streuung und die schlechte Vorhersagbarkeit der Versuchsergebnisse ließe sich in Anbetracht des oben Gesagten erklären. Falls die Wiederholung dieser Durchbruchversuche im Instabilitätsbereich des untersuchten Systems stattgefunden hat, ist die Streubreite der Ergebnisse durchaus mit der (potentiell) chaotischen Dynamik des Transportgeschehens in einem heterogenen Boden vereinbar.

Abschließend zeigt diese Betrachtung, daß zumindest ein Teil der Probleme, die die Vorhersage des kleinskaligen Transportgeschehens in heterogenen Böden bereitet, nicht nur an unzulänglichen theoretischen Konzepten liegen muß. Sie liegt vielleicht auch daran, daß man die Reproduzierbarkeit der experimentellen Datengrundlage und damit die Grundlage für die Prüfung theoretischer Konzepte falsch einschätzt und somit eine Übereinstimmung zwischen Simulation und Beobachtung erwartet, die der Dynamik nichtlinearer natürlicher Systeme unangemessen ist.

8 Zusammenführung und Ausblick

Zur Erweiterung des von Maurer (1997) entwickelten Modellsystems CATFLOW 1.0 durch ein Modul zur physikalisch basierten Beschreibung der Stoffdynamik in ungesättigten Böden, wurde in der vorliegenden Untersuchung ein iterativer Weg beschritten. Zunächst sollten experimentelle Untersuchungen das notwendige Prozeßverständnis für den Aufbau einer adäquaten Prozeßbeschreibung präferentieller Fließaktivität liefern, um dann mit Hilfe des erweiterten Modells CATFLOW 2.0 u.a. Information über Güte von Felddaten zu liefern sowie Ideen zur Verbesserung von Meßkonzepten abzuleiten. Der Abschnitt 8.1 faßt die gewählte Vorgehensweise und die erzielten Ergebnisse zusammen.

8.1 Zusammenfassung der erzielten Ergebnisse

Ziel der in Kapitel 3 vorgestellten kleinskaligen Transportexperimente mit den Tracern Brilliant Blau und Bromid war es, Aufschluß über die Art des präferentiellen Fließprozesses in den Lößböden des Weiherbachgebiets und über wesentliche Einflußgrößen zu geben. Zu diesem Zweck wurde in Kapitel 5 ein Verfahren vorgestellt, welches die Infiltrationsvariabilität auf der Hangskale auf Basis der räumlichen Verteilung der gewonnenen Fließmuster und der Anfangs-Randbedingungen der zugehörigen Transportversuche analysiert.

Dazu wird die am Standort beobachtete Variabilität der vertikalen Transportdistanz des Tracerschwerpunkts durch die Schwerpunktparameter der (aggregierten) Fließmuster in statistischer Form quantifiziert. Somit können Ähnlichkeiten zwischen dem an verschiedenen Standorten beobachteten Infiltrationsgeschehen mittels einer Clusteranalyse quantifiziert und die Versuchsstandorte in Gruppen eingeteilt werden, an denen ähnliches Infiltrationsgeschehen beobachtet wurde. Die Gruppencentroide spiegeln das mittlere Transportgeschehen in den Gruppen in Form gemittelter Schwerpunktparameter wider, sie entsprechen "makroskopischen Infiltrationstypen". Eine Diskriminanzanalyse der resultierenden Standorteinteilung ermöglicht z.T. die Erklärung der Gruppenzugehörigkeit eines Standorts durch die Anfangs-Randbedingungen des durchgeführten Transportexperiments und die Identifizierung der Größen mit dem größten Anteil an dieser Erklärung. Zum anderen läßt sich die Gruppenzugehörigkeit des zu erwartenden Infiltrationsprozesses für ein Transportexperiment an einem neuen Standort als Funktion der Anfangs-Randbedingungen vorhersagen. Die Schwerpunktparameter des Centroiden der vorhergesagten Gruppe liefern eine quantitative Einschätzung

des zu erwartenden Transportgeschehens in statistischer Form: den Mittelwert, die Standardabweichung und die Schiefe der vertikalen Transportdistanz des Tracerschwerpunkts. Die Analyse der durchgeführten Experimente mit diesem Verfahren zeigt, daß die Fließmuster beider Tracer im wesentlichen auf die gleiche Standorteinteilung und auf die gleichen Einflußgrößen zur Erklärung dieser Standorteinteilung führen. Die großskalige Variabilität des beobachteten Transportgeschehens läßt sich zum größten Teil durch das Zusammenwirken der Vorfeuchte und die lokale Ausprägung des Makroporensystems am Standort erklären. In Abschnitt 8.3.2 wird dieser Sachverhalt weiter diskutiert.

In Kapitel 6 wird der Aufbau des erweiterten Modellsystems CATFLOW 2.0 sowie die aus den theoretischen Untersuchungszielen erwachsenden Anforderungen an das erweiterte Modellsystem erläutert. Zentral ist dabei der vorgestellte Ansatz zur gemeinsamen Beschreibung des Transports in präferentiellen Fließwegen **und** in der Bodenmatrix in einem effektiven Medium mit Hilfe des Makroporositätsfaktors f_{mak} . Dieser Ansatz, der sich direkt aus Feld- und Labormessungen parametrisieren läßt, basiert zum einen auf der in Kapitel 5 bestätigten Annahme, daß die lokale Sättigung im Bereich der Makroporen das Auftreten präferentieller Fließaktivität maßgeblich steuert. Die zweite Grundlage bilden die Ergebnisse den aus Begleituntersuchungen zum Makroporensystem im Boden der Intensivmeßparzelle Mp 97 und zur gesättigten Wasserflußrate in Makroporen verschiedener Radien aus Kapitel 4. Die heterogenen Randbedingungen für die Wasserbewegung in natürlichen Böden werden auf Basis dieses Ansatzes als gesättigtes Gesamtleitfähigkeitsfeld beschrieben, wobei das Initiieren präferentieller Fließaktivität lokal über die Schwellensättigung S_0 gesteuert wird.

Die im Modell implementierten Prozeßansätze werden in Kapitel 7 im Rahmen einer unabhängigen Langzeitsimulation des von Delbrück (1997) am IUP-Hang untersuchten Bromidtransports geprüft. Angesichts der Restriktionen eines zweidimensionalen Modells und der in Abschnitt 7.1.1 aufgezählten Unschärfen der Datengrundlage ist die Übereinstimmung zwischen dem simulierten und beobachteten mittleren Transportgeschehen gut. Trotzdem kann im Rahmen der Datengüte die Tauglichkeit des Modells zur Vorhersage der Mengenanteile eines oberflächlich applizierten Tracers, die im Oberboden verbleiben bzw. in den Unterboden transportiert werden, nicht geprüft werden. Die Prozeßansätze lassen sich allenfalls plausibilisieren, Abschnitt 8.3.3 greift dieses Problem nochmals auf.

Abschließend wird in Kapitel 7 ein sinnvolles Einsatzfeld für das weiterentwickelte Modellsystem CATFLOW 2.0 vorgestellt. Da die im experimentellen Teil der vorliegenden Untersuchung angewendete Beprobungsmethode nicht zerstörungsfrei arbeitet, war eine identische Wiederholung der durchgeführten Transportexperimente nicht möglich. Die numerische Untersuchung der Reproduzierbarkeit kleinskaliger Transportexperimente mit der Monte-Carlo-Methode liefert wesentliche Information über mögliche Unschärfen in den Ergebnissen solcher Experimente, die durch die Fortpflanzung der Meßfehler der Anfangs-Randwerte verursacht werden könnten. Im Raum der untersuchten Anfangsfeuchten der Modellparzellen zeigt sich dabei ein instabiler Bereich, in dem die gleiche Ungenauigkeit des Anfangsfeuchtefeldes

zu einer wesentlich höheren Variation der Versuchsergebnisse führt als bei der simulierten Versuchswiederholung in den restlichen, stabilen Bereichen.

8.2 Kritik und mögliche Verbesserung der angewandten Methoden und Ansätze

8.2.1 Ausgliederung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens

Die bereits in Abschnitt 5.6 diskutierten methodischen Schwächen des entwickelten Verfahrens zur Ausgliederung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens seien an dieser Stelle kurz wiederholt und ergänzt. Das im Rahmen dieser Untersuchung verwandte Schwellenwertverfahren zur Übersetzung der Farbmuster in Grauwertmatrizen führt zu einer systematischen Überschätzung der Grauwerte im unteren Bildbereich und damit auch zu einer Überschätzung der Schwerpunktstiefen präferentieller Farbmuster. Wesentlich genauer sind die Methoden der modernen Bildanalyse, die am Institut für Terrestrische Ökologie der ETH Zürich angewendet werden, um die spektrale Information der Farbmuster in eine echte Konzentration zu übersetzen (Flühler, mündliche Mitteilung, 1998). Die Tauglichkeit der Farbmuster für die Ausweisung von Flächen ähnlichen Infiltrationsverhaltens ließe sich durch solch ein Verfahren erheblich verbessern.

Bei der Diskriminanzanalyse der Standorteinteilungen wurde die Landnutzung als nominal skaliertes Parameter aus formalen Gründen nicht berücksichtigt, obwohl sie sicherlich großen Einfluß auf die lokale Ausprägung des Makroporensystems im Boden und damit auch auf das Auftreten präferentieller Fließaktivität hat. Eine umfassende Diskriminanzanalyse der Standorteinteilung sollte mit einer Methode für gemischte Variablen durchgeführt werden, um den Landnutzungseinfluß auf die Infiltrationsvariabilität zu berücksichtigen.

8.2.2 Prozeßbeschreibung im Modellsystem CATFLOW 2.0

Vom Standpunkt der "prozeßnahen" Modellierung erscheinen die Ansätze, die zur Beschreibung der Sorption und des Abbaus nicht konservativer Stoffe verwendet werden, unbefriedigend. Beide Ansätze liefern nur in den einfachsten Fällen brauchbare Ergebnisse und wurden im Rahmen der vorliegenden Untersuchung nicht getestet. Eine weiterführende Untersuchung sollte diesen Modellteil prüfen und gegebenenfalls realistischere Prozeßansätze zur Beschreibung von Sorption und Abbau wie z.B. die Freundlich-Isotherme und die Michaelis-Menten-Kinetik (Kinzelbach, 1992; Zurmühl, 1994) in das Modell integrieren. Allerdings ist die Berücksichtigung nichtlinearer Sorption bei der Lösung der Random-Walk-Gleichung mit Schwierigkeiten verbunden, da der Retardationskoeffizient in diesem Fall von der Stoffkon-

zentration und damit von der Anzahl der Partikel in einem Modellelement bestimmt wird (Kinzelbach, 1992).

Die vorgestellte, gemeinsame Beschreibung von Makroporen- und Matrixfluß in einem effektiven Medium ist eine stark vereinfachte Näherung. Eine wirklich prozeßnahe Beschreibung präferentiellen Fließens müßte explizit den lokalen Einfluß von Größen wie Bodenfeuchte, Benetzbarkeit, Porosität und Zusammensetzung der Makroporenwand auf den Austausch von Wasser zwischen Bodenmatrix und Makroporen auf einer wesentlich feineren Modellskaale erfassen. Daraus könnte eine angemessenere Beschreibung für die räumliche Modellskaale der in Kapitel 7 vorgestellten Monte-Carlo-Simulation von $5 \times 5 \times 100 \text{ cm}^3$ abgeleitet werden, die beispielsweise den Austausch von Wasser zwischen Matrix und Makroporen geeignet parametrisiert.

Allerdings erkaufen sich Prozeßmodelle wie das in Abschnitt 2.1.3 vorgestellte Modell der kinematischen Welle (Beven & Germann, 1981), die den Austausch zwischen Matrix und Makroporen auf einem teilweise noch gröberen "model scale" explizit beschreiben, ihre größere Prozeßnähe durch zusätzliche Parameter, die einer direkten Messung nicht zugänglich sind. Hingegen sind die Parameter des hier vorgestellten Ansatzes direkt aus einfachen Feld- und Labormessungen ableitbar.

Wie bereits erwähnt wurde, ist laut Geib (mündliche Mitteilung, 1998) das Transportgeschehen im östlichen Teil des IUP-Hangs sehr unterschiedlich vom Transportgeschehen im westlichen Teil. Durch die zweidimensionale Modellkonzeption von CATFLOW 2.0 ist eine direkte Berücksichtigung dieser Variabilität "quer zum Hang" nicht möglich. Auch auf der Kleinskaale wird die zweidimensionale Beschreibung dem lokalen Charakter präferentieller Fließaktivität nicht gerecht. Die in Kapitel 7 simulierten kleinskaligen Fließmuster stellen das über 1 m in y-Richtung gemittelte Transportgeschehen dar. Um trotzdem zu einer realistischen Einschätzung der Abstandsgeschwindigkeiten und damit der Transportdistanzen im Falle von präferentieller Fließaktivität zu kommen, wird der reduzierte Transportquerschnitt mit Hilfe des Flächenanteils aller Makroporen in einem Modellelement abgeschätzt (siehe Abschnitt 6.3.5). Trotzdem kann das Modell bestenfalls Fließmuster simulieren, die den beobachteten Fließmustern makroskopisch, d.h. im Bezug auf die Schwerpunktparameter ähnlich sind.

Ein dreidimensionales Modell wäre sowohl in der Lage, die Variabilität des Transports quer zum Hang als auch präferentielle Fließaktivität lokal zu simulieren. Jedoch ist das in der Einleitung angesprochene Problem, wie man an Modellparameter mit ausreichender räumlicher Auflösung und Güte gelangt, für ein dreidimensionales Modellsystem noch größer als für ein zweidimensionales (Maurer, 1997).

8.3 Bewertung der gewonnenen Ergebnisse

8.3.1 Folgerungen für Forschung und Praxis aus den Ergebnissen zum Herbizidtransport

Wie die in den Abschnitten 4.3 und 4.5 vorgestellten experimentellen Ergebnisse zu präferentiellem Herbizidtransport nahelegen, ruht eine nachhaltige landwirtschaftliche Strategie zumindest auf zwei Säulen. Zum einen muß bereits bei der Applikation der Einfluß typischer Landschaftsfaktoren auf das Auftreten schneller Transportprozesse beachtet werden. Für den untersuchten Standort ließe sich beispielsweise die Prozeßkette, die bei dem Beregnungsversuch zu einer Belastung des Weiherbachs geführt hat, sehr einfach durch eine Applikation von Herbiziden nach vorherigem Pflügen (im Nachauflauf) unterbrechen (Flury, 1996). Die Verbindung des Makroporensystems zur Oberfläche würde dadurch unterbrochen und eine wesentliche Voraussetzung für schnellen Stofftransport bereits vor der Applikation beseitigt.

Die zweite Säule ist ein umfassendes Verständnis der am Stoffhaushalt beteiligten Prozesse (Plate, 1994; Plate 1992b). Die Prozeßvorstellung, daß Herbizide im ungesättigten Boden ausschließlich in gelöster Form transportiert werden, wird der Komplexität dieses Prozesses und der Mannigfaltigkeit der möglichen Einflußfaktoren augenscheinlich nicht gerecht. Weder der am Standort Mp 97 ermittelte Retardationskoeffizient von $R = 0.7$ (siehe Abschnitt 4.5.1), noch die hohe IPU-Fracht im Bodenwasser, die in der Frühphase des Durchbruchversuches am Spechtacker das Löslichkeitsprodukt L von IPU in Wasser bis zum Faktor 10 übertroffen hat (siehe Abschnitt 4.5.2), sind mit dieser Prozeßvorstellung zu verstehen. Eine mögliche, mit den angewendeten Meßmethoden vereinbare Erklärung beider Sachverhalte wäre, daß Isoproturon zumindest teilweise an Ton- oder Humuspartikel adsorbiert in Makroporen transportiert wurde. Ob es in schwach sauren Böden tatsächlich zu dieser Art von Transport kommt, läßt sich in der Retrospektive nicht beantworten. Falls dem aber so wäre, ist eine hohe Sorptivität nicht mehr zwangsläufig ein Garant für eine geringe Mobilität von Herbiziden, sondern würde unter Umständen einen schnellen Transportpfad in den Unterboden eröffnen. Zur künftigen Entwicklung besserer Konzepte zum Schutz vor schnellem Transport von Herbiziden in den Unterboden wird ein umfassenderes Prozeßverständnis benötigt. Dies kann nur aus einer Zusammenarbeit zwischen Ökologen, Natur- und Agrarwissenschaftlern erwachsen und hat immer nur für die untersuchte Landschaftsform Gültigkeit.

8.3.2 Variabilität von Infiltration und Stofftransport auf der Hangskale

Die Analyse der im Weiherbachgebiet durchgeführten kleinskaligen Transportexperimente mit dem vorgestellten Verfahren zur Ausweisung von Standorten ähnlicher Infiltrationsneigung erbrachte Hinweise auf eine strukturierte Variabilität des Infiltrationsprozesses auf

der Hangskale. Einfach gesprochen, war die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten präferentieller Fließaktivität in den Kolluvien der Auenbereiche größer als an den Standorten an Hangtop und Hangmitte. Diese Systematik läßt sich vor allem durch die erosionsbedingte Verteilung der Bodentypen an einem typischen Hang des Weiherbachgebiets **und** dem Einfluß des Bodentyps auf die Aktivität von Regenwürmern und damit auf die lokale Ausprägung des Makroporensystems erklären. Es wurde bereits erwähnt, daß der Stichprobenumfang von 11 Versuchen an 10 Standorten bei weitem zu gering ist, um alle Einflußfaktoren des Infiltrationsprozesses mit Hilfe einer Diskriminanzanalyse herauszustellen. Dementsprechend liefert in Kapitel 7 die Simulationsvariante 4, die auf der oben genannten einfachen Systematik mittels einer Regression aufbaut, die schlechteste Übereinstimmung mit dem von Delbrück (1997) untersuchten Bromidtransport am IUP-Hang. Des weiteren zeigen die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation, daß die Fließmuster das Infiltrationsgeschehen möglicherweise nicht an allen Standorte repräsentativ beschrieben haben. Daher stellt die oben genannte Systematik bestenfalls eine Tendenz in der großskaligen Variabilität der Infiltration in einem Lößgebiet dar. Trotzdem birgt das entwickelte Verfahren zur Ausweisung von Flächen ähnlicher Infiltrationsneigung die Möglichkeit auf Basis einer repräsentativen Stichprobe von simulierten **und** beobachteten Fließmustern, sehr nützliche Information für eine Verbesserung landwirtschaftlicher Strategien zu liefern. Abschnitt 8.3.1 führt die mögliche Vorgehensweise näher aus.

Gesetzt den Fall, die oben beschriebene Systematik im Infiltrationsgeschehen stellt trotz der Unzulänglichkeit des Datensatzes ein fundamentales Merkmal des Weiherbachgebiets dar, wie steht es dann mit der Übertragbarkeit dieser Systematik auf andere Lößlandschaften? Unterstellt man, daß Gleichgewichtszustände für eine Landschaft existieren, in denen das Zusammenspiel typischer Landschaftsfaktoren eine Ordnung im Ablauf von Geoprozessen hervorbringt, und ferner, daß die oben beschriebene strukturierte Variabilität solch ein Ordnungselement einer Lößlandschaft im Gleichgewicht darstellt, so muß sich diese Tatsache bei einer Untersuchung in einem anderen Gebiet nicht sofort bestätigen. Der starke Einfluß der Fruchtfolge, der Oberflächenbearbeitung und der verwendeten Spritzmittel auf die Aktivität und die Population tief grabender Regenwürmer wurde mehrfach betont (Ehrmann, 1996). Ein Gebiet, das aufgrund anthropogener Einflüsse weit von diesem asymptotischen Gleichgewichtszustand entfernt ist, braucht Jahre, bis sich diese Ordnung erneut einstellt. Die oben beschriebene Systematik ist eine "asymptotische" Aussage über die Art der Variabilität der Infiltration in einem potentiellen Gleichgewichtszustand, in den sich das System "Lößlandschaft" für große Zeiten und ohne starke Störung entwickelt. Aufgrund der großen Relaxationszeit einer Landschaft bzw. eines Ökosystems muß die Übertragbarkeit dieser und ähnlicher Aussagen auf einer angemessenen Zeitskale bewertet werden. Diese Zeitskale geht weit über die Dauer von Großprojekten wie z.B. dem Weiherbachprojekt hinaus (Plate, 1992c) und ist damit wesentlich größer als der "human time scale", an dem der Mensch laut Klemes (1983) die meisten Dinge mißt und bewertet.

8.3.3 Langzeitsimulation des Stoffhaushalts auf der Hangskale

Im Rahmen der Simulationsvariante 3 gelingt mit denen in CATFLOW 2.0 implementierten Prozeßansätzen, trotz der Restriktionen der zweidimensionalen Beschreibung, eine gute Prognose des am IUP-Hang durch Delbrück (1997) beobachteten Bromidtransports. Die mittlere Transportdistanz der Bromidschwerpunkte und auch deren räumliche Verteilung am Hang werden über zwei Jahre hinweg im Rahmen der Meßfehler gut getroffen. Auch die Form der simulierten Bromidprofile in verschiedenen Teilen des Hangs stimmt zum Teil gut mit der Beobachtung überein. Allerdings ist eine Prozeßidentifikation mittels des Modells aufgrund der Ungenauigkeit der Bromiddaten nicht möglich. Beispielsweise folgt aus einer erneuten Simulation mit veränderten Parametern, die die Form der beobachteten Bromidprofile besser trifft **nicht unbedingt**, daß die neuen Parameter besser zur Beschreibung der "Realität" geeignet sind als die unabhängig gewählten Werte. Denn dieser Schluß setzt voraus, daß die beobachtete Peakform an den Meßpunkten repräsentativ für einen Bereich von mehr als 100m² wäre. Das ist jedoch aufgrund der enormen kleinskaligen Variabilität des Transportgeschehens und dem beschränkten Integrationsvolumen der Bohrstockproben sehr unwahrscheinlich.

Langfristiges Ziel des Weiherbachprojekts ist u.a. die Entwicklung eines physikalisch basierten Modellsystems, daß zumindest auf der Hangskale zur Bilanzierung des Gehalts an Nitrat, Phosphat oder an Herbiziden in den Böden landwirtschaftlich genutzter Gebiete eingesetzt werden kann (Plate, 1992c). Da Herbizide in verschiedenen Bodenhorizonten auf sehr unterschiedlichen Zeitskalen abgebaut werden, muß ein solches Modell eine realistische Einschätzung liefern, welcher Anteil eines Herbizids durch präferentiellen Transport in den mikrobiell wenig aktiven Unterboden gelangt und welcher Anteil im oberen Bodenhorizont verbleibt und dort relativ schnell abgebaut wird. Dazu müssen die im Modell implementierten Ansätze zur Beschreibung des Transports, insbesondere derjenige zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität, eine korrekte Massenbilanz am Punkt und eine gute Einschätzung der Massenverteilung in der vertikalen z-Richtung ermöglichen⁴². Durch die enorme räumliche Variabilität der Bromidapplikation und die geringe Repräsentativität der Meßprofile läßt sich im Rahmen der Datengenauigkeit nicht prüfen, ob die im Modell implementierten Ansätze diesen Anforderungen gerecht werden. Die Prozeßbeschreibung des Modells liefert zwar eine plausible Prognose des beobachteten Transportgeschehens, für eine Falsifikation der implementierten Ansätze sind die Daten jedoch zu ungenau. Das gilt auch für den entwickelten Ansatz zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität, der nur eine simple Näherung des tatsächlichen Geschehens darstellt.

Dieses Problem, das aus der Unschärfe hydrologischer Daten für die Prozeßidentifizierung mit Hilfe physikalisch basierter Modelle erwächst, wurde bereits in der Einführung angesprochen.

⁴² Wenn das gelingt, ist das Problem noch nicht gelöst, da auch die Sorption und Abbau von Herbiziden angemessen beschrieben werden müssen.

Aufgrund der enormen Variabilität der Wasser- und Stoffdynamik in natürlichen Böden sind die meisten Meßmethoden zu ungenau, um Daten zu liefern, die im Rahmen der Fehler eine Unterscheidung zwischen guten von schlechten Prozeßansätzen ermöglichen. Nur wenn dies künftig besser gelingt, können Modelle entstehen, die z.B. den Herbizidgehalt eines Bodens hinreichend genau prognostizieren, so daß aus diesen Prognosen Schlüsse für nachhaltige landwirtschaftliche Strategien gezogen werden können. Für das Erreichen dieses Ziels bedeutet daher die Entwicklung von detaillierteren Prozeßmodellen nur in dem Maße einen wirklichen Fortschritt, wie auch hinreichend genaue Feldmeßmethoden zur deren Prüfung zur Verfügung stehen bzw. entwickelt werden (Maurer, 1997; Beven, 1998).

8.3.4 Die Reproduzierbarkeit von Transportexperimenten auf der Kleinskala

Im Rahmen der Monte-Carlo-Simulation des kleinskaligen Transportexperiments am Standort Mp 97 zeigte sich eine chaotische Dynamik des simulierten Transportgeschehens. Die untersuchten Anfangszustände beider Modellparzellen zerfallen in stabile und instabile Bereiche. Im instabilen Bereich führt die simulierte Wiederholung der Beregnungsversuche zu einer wesentlich größeren Variation der Ergebnisse als in den restlichen Bereichen der untersuchten Anfangsfeuchten. Wesentliche Ursache für diese Variation sind Unterschiede in der horizontalen Kreuzkorrelation zwischen Anfangsfeuchte und Gesamtleitfähigkeit, die mit der in Abschnitt 2.4.2 vorgestellten Meßstrategie nicht erfaßt werden können. Daher liefert die simulierte Wiederholung des Transportversuchs im instabilen Bereich der Anfangsfeuchten fast die gesamte Breite des beobachteten Transportgeschehens als Antwort auf eine **makroskopisch identische** Anfangs-Randbedingung. Diese empfindliche Abhängigkeit der simulierten Versuchsergebnisse von den Anfangs-Randbedingungen wird durch eine Verringerung der Beregnungsintensität bei gleicher Beregnungsmenge verstärkt.

Falls die in CATFLOW 2.0 implementierten Prozeßansätze die makroskopische Dynamik des kleinskaligen Transportprozesses in realen heterogenen Böden näherungsweise richtig beschreiben – der Vergleich zwischen den Schwerpunktparametern simulierter und gemessener Fließmustern in Abschnitt 7.4.3 spricht dafür – so besteht zumindest die Möglichkeit, daß diese chaotische Dynamik auch beim Stofftransport in realen Böden auftreten kann. Zur experimentelle Beobachtung dieses Phänomens müssen mehrere Realisierungen eines Transportversuchs unter identischen Anfangs-Randbedingungen durchgeführt werden. Im Rahmen der einzig bekannten Untersuchung dieser Art von Lischeid et al. (1999) trat eine Variation der Versuchsergebnissen auf, die der oben beschriebenen Variation der simulierten Versuchsergebnisse im Instabilitätsbereich der Anfangsfeuchten sehr ähnlich ist (Abschnitt 7.5.3).

Betrachtet man die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation unter der Prämisse der "Richtigkeit" der verwendeten Prozeßansätze, so wird klar, daß selbst das "richtige" Prozeßmodell zu einer unbefriedigenden Prognose führt, wenn die Reproduzierbarkeit der Datengrundlage falsch eingestuft wird. Die unbefriedigenden Ergebnisse, die die gängigen Ansätze

zur Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik in natürlichen Böden in vielen Fällen liefern (Matheron & de Marsily, 1980; Simmons, 1982; Jury et al. 1986; Dagan, 1989; Smith & Schwartz, 1980a und b; Roth et al. 1996), liegen gewiß teilweise an der Unzulänglichkeit der Prozeßbeschreibung. Eine weitere Ursache ist mit Sicherheit jedoch auch, daß eine Übereinstimmung zwischen Vorhersage und Messung erwartet wird, die der nichtlinearen – vielleicht sogar chaotischen – Wasser- und Stoffdynamik in natürlichen Böden unangemessen ist.

Eine gängige Methode zur Parameteridentifikation ist die inverse Modellierung (Zurmühl, 1994), in der beispielsweise Transportparameter solange variiert werden bis das Modellergebnis einen Datensatz so gut wie möglich approximiert. Die Durchführung dieser Parameterschätzung auf Basis einer einzelnen Realisierung eines Durchbruchversuchs ist nur unter der Annahme sinnvoll, daß die hypothetische Wiederholung des Versuchs unter makroskopisch identischen Anfangs-Randbedingungen im Rahmen der Meßfehler das gleiche Ergebnis liefert. Die Ergebnisse der vorliegenden Untersuchung und der von Lischeid et al. (1999) zeigen, daß es Systemzustände geben kann, in denen diese Annahme nicht zutrifft⁴³. Die erfolgreiche Suche nach besseren Prozeßansätzen setzt daher, neben der bereits geforderten Verbesserung von Meßmethoden, die Entwicklung einer adäquaten Strategie zur Identifizierung von Parametern und zum Vergleich zwischen Messung und Simulation voraus (Gupta et al., 1998).

8.4 Verbesserte Vorgehensweise bei künftigen Untersuchungen

8.4.1 Kombination von Monte-Carlo-Simulation und Experiment zur Generierung einer repräsentativen Fließmuster-Stichprobe

Das in Kapitel 5 vorgestellte Verfahren erlaubt die Einteilung von Standorten in Gruppen ähnlichen Infiltrationsgeschehens mittels der Clusteranalyse sowie die Erklärung dieser Standorteinteilung als Funktion der Anfangs-Randbedingungen und die Vorhersage des zu erwarteten Infiltrationsgeschehens als Funktion der Anfangs-Randbedingungen auf Basis der abgeleiteten Diskriminanzfunktion. Formal ausgedrückt handelt es sich bei diesem diskriminatorischen Modell um ein effizientes Mittel zur Datenreduktion, das empirisches Wissen über den Einfluß der Anfangs-Randbedingungen auf den makroskopischen Verlauf der Infiltration formalisiert und schnelle, "halb-quantitative" Prognosen ermöglicht. Um aus diesem Verfahren wirklich Nutzen zu ziehen, wird jedoch eine Fließmuster-Stichprobe ausreichender Diversität benötigt. Eine rein experimentelle Beschaffung solch einer Datenbasis ist in Anbetracht des enormen Aufwands weder möglich noch sinnvoll. Das Zusammentragen der vorge-

⁴³ Darüber hinaus birgt die inverse Modellierung natürlich auch numerische Probleme, z.B. Parameterinteraktion und mehrere Optima des Gütekriteriums (Zurmühl, 1994).

stellten Stichprobe von knapp dreißig Fließmustern dauerte bereits mehrere Personenjahre. Trotzdem deckt diese nur einen Bruchteil des möglichen Infiltrationsgeschehens und das auch nur in **einer** ausgewählten Landschaftsform ab.

Im Rahmen der Monte-Carlo-Simulation in Kapitel 7 hat sich gezeigt, daß CATFLOW 2.0 sowohl die Schwerpunktparameter des beobachteten aggregierten Fließmusters am Standort Mp 97 im Kontrollfall sehr gut trifft als auch Tendenzen, die durch eine Erniedrigung der Makroporosität bzw. der mittleren Vorfeuchte im Transportgeschehen beobachtet wurden, richtig einschätzt. Somit könnte dieses oder ein ähnliches Modellsystem eingesetzt werden, um die bereits bestehende Datenbasis durch Monte-Carlo-Simulationen systematisch zu erweitern. Die neu gewonnene Information über den Einfluß verschiedener Größen wie Makroporosität, Bodenart, Beregnungsintensität usw. auf den Verlauf von Infiltration und Stofftransport in heterogenen Böden ließe sich in dem diskriminatorischen Modell effizient speichern und für schnelle Prognosen nutzen. Die Variation, die aufgrund typischer Meßunschärfen im Ergebnis eines Transportversuches im nichtlinearen System Boden entsteht, läßt sich im Rahmen der Monte-Carlo-Simulation einfach durch die Variationskoeffizienten der Schwerpunktparameter über alle simulierten Wiederholungen abschätzen. Daher bietet diese Vorgehensweise die Möglichkeit, solche Unsicherheiten bei der Vorhersage des Infiltrationsgeschehens durch entsprechende Schwankungsbreiten der Schwerpunktparameter der Gruppencentroide zu berücksichtigen. Die Güte der resultierenden Diskriminanzfunktion ließe sich testen, indem stichprobenartig für ausgewählte Standorte das zu erwartende Transportgeschehen bei bestimmten Anfangs-Randbedingungen prognostiziert und diese Prognose dann experimentell im Rahmen der Unsicherheiten der Vorhersage geprüft würde. Darüber hinaus ist das Verfahren nicht an die Schwerpunktparameter zur Charakterisierung der makroskopischen Ähnlichkeiten von Fließmustern gebunden. Würden die Fließmuster anhand des prozentualen Anteils des applizierten Tracers, der durch den Pflughorizont in den Unterboden durchbricht, charakterisiert, so erbrächte die Anwendung aus Cluster- und Diskriminanzanalyse eine Ausweisung von Flächen, die sich bezüglich dieses sehr praxisnahen Kriteriums ähneln.

Falls es mit der skizzierten Vorgehensweise gelänge, eine hinreichend diverse Stichprobe zu generieren, stünde im entsprechenden diskriminatorischen Modell die gesamte Fülle dieser Information für Prognosen des makroskopischen Infiltrationsverlaufs zur Verfügung. Auf Basis dieses Wissens wäre eine Prognose des zu erwartenden Transportprozesses oder des zu erwartenden Anteils eines applizierten Herbizids, der in den Unterboden durchbricht, für eine interessierende Fläche möglich. Aussagen solcher Art könnten als Entscheidungshilfe dafür dienen, ob die Applikation eines Pflanzenschutzmittels zeitlich verschoben werden sollte, weil mit hoher Wahrscheinlichkeit ein präferentielles Fließereignis zu erwarten ist, oder nicht.

8.4.2 Zweieinhalbdimensionale, "genestete" Simulation von Szenarien

Für homogene Standorte, in deren Böden das Auftreten von Wasser- und Stofftransport in horizontaler Richtung unwahrscheinlich ist, ließe sich die Variabilität des Transportgeschehens quer zur Hangfalllinie durch eine zweieinhalbdimensionale Simulation berücksichtigen. Im vorliegenden Fall würden der Ost- und Westteil des IUP-Hangs jeweils durch einen separaten Modellhang beschrieben, in dem die Wasser- und Stoffdynamik gesondert simuliert wird. So ließe sich beispielsweise die unterschiedliche Bodenartenverteilung am Ost- und Westteil des IUP-Hangs und deren Einfluß auf den Transport berücksichtigen. Um einen Austausch zwischen beiden Hangteilen zu berücksichtigen, wird allerdings ein echt dreidimensionales Modellsystem benötigt.

Um den Anteil eines Stoffes (z.B. eines Herbizids) abzuschätzen, der in der Frühphase nach der Applikation in den mikrobiell wenig aktiven Unterboden durchbricht, wäre der folgende, "genestete" Modellansatz denkbar. Bei dieser Vorgehensweise wird der IUP-Hang in Richtung der Hangfalllinie weiterhin mit der in Kapitel 7 vorgestellten, groben Auflösung diskretisiert. Innerhalb jeder am Hang anstehenden Bodenart werden jedoch ein oder mehrere Modellknoten als Schnittstelle benutzt, um den mittleren Input in eine feiner aufgelöste Modelldomäne zu liefern. Die Werte der Zustandsgrößen und der Randflüsse an den Modellknoten des gröberen Gitters stellen die mittleren Zustandsgrößen und Randflüsse im feiner aufgelösten Modellgitter dar. An jedem dieser Knoten wird der Einfluß der lokalen Variabilität der Zustandsgrößen und des Makroporensystems auf den Anteil eines Stoffes, der schnell durch den Pflughorizont in den Unterboden durchbricht, mit der Monte-Carlo-Methode simuliert und auf den Gesamthang entsprechend der Bodenartenverteilung extrapoliert. Die Unsicherheiten dieser Abschätzung am jeweiligen Knoten ergibt sich durch die Variation der simulierten Ergebnisse über alle Realisierungen. Auf Basis dieser Unsicherheiten läßt sich die Wahrscheinlichkeit für den Durchbruch eines vorgegebenen Anteils (z.B. 20%) der applizierten Gesamtmenge eines Stoffes in den Unterboden abschätzen. Auf diese Weise wäre es möglich, neben dem Einfluß der kleinskaligen Variabilität von Zustandsgrößen und Makroporensystem auch den Einfluß einer räumlich variablen Stoffapplikation auf das Transportgeschehen zu berücksichtigen.

Das soeben skizzierte Vorgehen ermöglicht die physikalisch basierte Abschätzung der Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines Szenarios, z.B. daß mehr 20% eines applizierten Herbizids innerhalb einer kurzen Zeitspanne in den Unterboden durchbrechen. Der Abbau des Herbizids in den verschiedenen Bodenhorizonten und dessen weiterer Transport in tiefere Bodenschichten ließen sich für jedes Szenario mit einer Modellrechnung auf dem gröberen Gitter deterministisch ermitteln. Im Rahmen jedes Szenarios wäre für einen Hang somit eine langfristige Bilanz des Herbizidgehalts im Boden bis zum völligen Abbau oder zum Eintritt ins Grundwasser auf Basis des aktuellen Prozeßverständnisses möglich. Letztlich könnten so für einen Hang Belastungsszenarien und deren Eintrittswahrscheinlichkeiten unter Berück-

sichtigung der kleinskaligen Variabilität und der potentiell chaotischen Dynamik berechnet werden.

8.4.3 Mögliche Verbesserung von Meßmethoden

Was sollen die in Abschnitt 8.3.3 geforderten verbesserten Meßmethoden leisten? Idealerweise ermöglichen sie die räumlich aufgelöste, zerstörungsfreie Messung von Zustandsgrößen und Parametern im Boden. Zum einen würde dadurch die identische Wiederholung von Feldexperimenten sehr erleichtert. Zum anderen beinhalten solche Meßdaten wichtige Information über die räumliche Struktur der Felder der interessierenden Zustandsgrößen und damit auch über die Kreuzkorrelation zwischen den Feldern unterschiedlicher Größen auf einer Versuchsfläche. Die Genauigkeit der zu einem Transportversuch experimentell ermittelten Anfangs-Randbedingungen würde somit erheblich gesteigert, was natürlich eine höhere Güte der resultierenden Versuchsergebnisse zur Folge hätte. Die Anwendung gängiger geophysikalischer Meßmethoden für hydrologische Zwecke stellt einen Schritt in Richtung des oben beschriebenen Idealzustands dar.

Auch die Weiterentwicklung des in Abschnitt 3.3.2 vorgestellten TDR-Verfahrens könnte wertvolle Information liefern. Neben der Laufzeit beinhaltet auch die Form eines TDR-Signals Information, die genutzt werden könnte, um Aussagen über das Feuchteprofil im Boden abzuleiten (Becker, mündliche Mitteilung, 1999). Würden mehrere solcher verbesserten TDR-Sonden in einem Cluster zusammengefaßt, in dem die Einzelsonden feste Abstände zueinander hätten, so könnte diese Apparatur zum einen Profilinformation an mehreren Punkten liefern. Zum zweiten ließe sich ein Variogramm an die Punktmessungen des Clusters anpassen, um Aufschluß über die kleinräumige Struktur des Bodenfeuchtefeldes in der Horizontalen zu gewinnen. Das Resultat wäre eine echt dreidimensionale Information über die Bodenfeuchte.

8.5 Der Boden – ein chaotisches System?

In Abschnitt 8.3.4 wurde bereits der Gedanke geäußert, daß die empfindliche Abhängigkeit des Transportprozesses von den Anfangs-Randbedingungen, wie sie bei der Monte-Carlo-Simulation im instabilen Bereich der untersuchten Anfangsfeuchten auftrat, auch für reale heterogene Böden existieren könnte. Abbildung 8.2 zeigt schematisch ein Stabilitätsdiagramm für ein nichtlineares System, in dessen Phasenraum zwei Bereiche makroskopisch unterschiedlicher, stabiler Dynamik existieren. Welche Form makroskopischer Dynamik sich in solch einem System einstellt, wird durch den Wert von Kontrollparametern bestimmt (Schuster, 1994). Im gegenwärtigen Kontext, d.h. für die Wasser- und Stoffdynamik in natürlichen Böden, sind die beiden stabilen Formen makroskopischer Dynamik das geschichtete Infiltrieren und das präferentielle Fließen. Zumindest für die bei der Monte-Carlo-Simulation untersuchten Modellsysteme spielt die mittlere Anfangsfeuchte die Rolle des Kontroll-

parameters. Das Zusammenspiel zwischen den Meßunsicherheiten im Anfangszustand und der nichtlinearen Systemdynamik bewirkt, daß das Modellsystem im Instabilitätsbereich gleichermaßen zu beiden, stabilen Fließregimen tendiert. Welche Form makroskopischer Dynamik sich im Verlauf der simulierten Versuche einstellt, ist in diesem Bereich aufgrund der Ungenauigkeit des Anfangszustands nicht vorhersagbar.

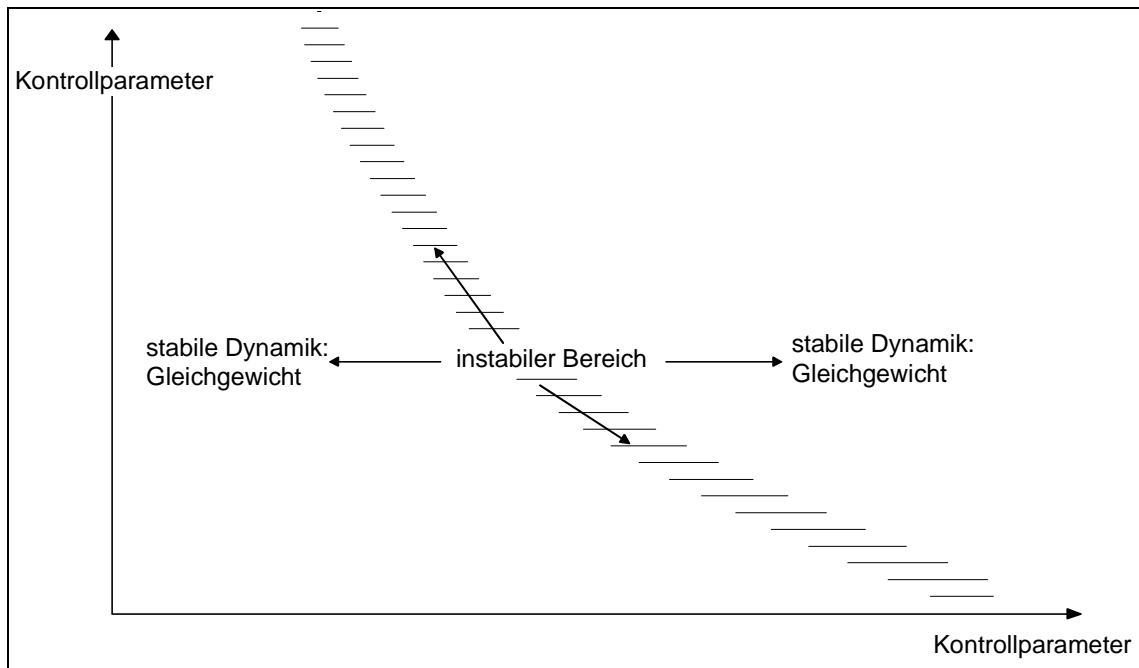


Abb. 8.1: Schema eines Diagramms zur qualitativen Beschreibung der Dynamik nichtlinearer Systeme mit mehreren stabilen dynamischen Regimen

Seit den Arbeiten von Lorenz (1963) ist das in Abbildung 8.2 skizzierte dynamische Verhalten bestimmter chaotischer Systeme⁴⁴ bekannt und seither knüpft die Meteorologie konstruktiv daran an (Schuster, 1994). Falls die kleinskalige Wasser- und Stoffdynamik in natürlichen Böden chaotische Züge im oben beschriebenen Sinne aufweisen würde, wäre das keineswegs Grund für eine Stagnation im Fortschritt der hydrologischen Forschung. In diesem Fall würden die Bereiche makroskopisch stabiler Dynamik durch die Werte von Kontrollparametern bestimmt. Eine vorrangige Aufgabe hydrologischer Forschung wäre weiterhin die Identifizierung dieser Schlüsselparameter für bestimmte Prozesse wie die Infiltration. Mit Hilfe dieser Kontrollparameter könnten zumindest im Prinzip die stabilen Bereiche im Zustandsraum eines Bodens, in denen die Wasser- und Stoffdynamik immanent besser vorherzusagen ist, von den instabilen Bereichen abgetrennt werden. Insofern würde sich nur der Akzent der Untersuchungen verschieben, da man von vornherein akzeptieren würde, daß selbst ein gutes Prozeßmodell in den instabilen Zuständen des Systems sehr ungenaue Prognosen liefern kann.

⁴⁴ Neben dieser existieren noch andere "Routen" ins Chaos (Schuster, 1994).

Das wichtigste Ergebnis der vorliegenden Untersuchung ist, daß die nichtlineare, rückgekoppelte Dynamik eines Bodens der Beschreibung der Wasser- und Stoffdynamik bereits auf der Kleinskale immanente Genauigkeitsgrenzen setzen könnte. Solche Grenzen der deterministischen Beschreibung existieren auch für die Dynamik eines Ökosystems als Ganzes, denn die Komplexität einer Landschaft ist aufgrund der mannigfaltigen Rückkopplungen zwischen belebten und nicht belebten Bestandteilen wesentlich größer. Daher existieren vermutlich auch Instabilitätsbereiche im "Phasenraum" eines Ökosystems, in denen "kleine" Ursachen enorme "Wirkungen" hervorrufen können. Der Schlüssel zu nachhaltigem Wirtschaften ist somit in erster Linie ein bewußter Umgang mit der Natur, der Belastungen der Umwelt so gering wie möglich hält.

Literaturverzeichnis

- ACKERMANN, M. (1998): Hydrogeologische Systemanalyse und Grundwasserhaushalt des Weiherbach-Einzugsgebiets. Universität Karlsruhe, Schriftenreihe Angewandte Geologie, Heft 53, Dissertation
- ANDERBERG, M. R. (1973): Cluster Analysis for Applications. Academic Press
- BACKHAUS, K. (1990): Multivariate Analysemethoden. 6. Aufl. Springer
- BARDOSSY, A. (1994): Geostatistische Methoden. Universität Karlsruhe, Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft (Manuskript, unveröffentlicht)
- BÄRLUND, I. (1998): Simulation des Transportes und der Transformationen von Herbiziden in der ungesättigten Zone des Bodens. Universität Karlsruhe, Mitteilungen des Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Heft 63, Dissertation
- BARNER, M., FLOHR, F. (1987): Analysis I. 3. Aufl. De Gruyter
- BEAR, J. (1972): Dynamics of Fluids in Porous Media. Elsevier
- BEVEN, K. AND GERMANN, P. (1981): Water flow in soil macropores II. A combined flow model. J. Soil Sci., 32, 15 - 29
- BEVEN, K. AND GERMANN, P. (1981): Water flow in soil macropores III. A statistical approach. J. Soil Sci., 32, 31 - 39
- BEVEN, K. AND GERMANN, P. (1982): Macropores and water flow in soils. Water Resources Res., Vol. 18, 5, 1311 - 1325
- BEVEN, K. AND CLARKE, R. (1986): On the variation of infiltration into a soil matrix containing a population of macropores. Water Resources Res., Vol. 22, 3, 383 – 385
- BEVEN, K. (1998): Model identifiability and constraining process representations in modeling runoff production. Ann. Geophys., 16, Suppl. II Hydrology, Oceans and Atmospheres, C496, oral presentation at EGS XXII General Assembly, Nice, April 1998
- BLÖSCHL, G. AND SIVAPALAN, M. (1995): Scale issues in hydrological modelling: a review. Hydrological Processes, 9, 251 - 290
- BLÖSCHL, G. (1996): Scale and Scaling in Hydrology. Wiener Mitteilungen, Wasser-Abwasser-Gewässer, Band 132, Habilitationsschrift, TU Wien
- BOHLEBER, A. (1992): Quantifizierung von Bodenwasserbewegung unter kombiniertem Einsatz von Neutronen- und Gamma-Gamma-Sonde. Untersuchungen am Beispiel des

- Standorts Weiherbachtal im Kraichgau (Baden-Württemberg). Universität Karlsruhe, Schriftenreihe Angewandte Geologie, Heft 18
- BOLDUAN, R. (1998): Untersuchung des Abbaus von Isoproturon im Unterboden unter besonderer Berücksichtigung der Makroporen. Universität Karlsruhe, Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Diplomarbeit
- BRAS, R. L. AND RODRIGUEZ-ITURBE, I. (1985): Random Functions and Hydrology. Addison-Wesley
- BROOKER, I. (1985): Two-dimensional simulation by turning bands. *Mathematical Geology*, Vol. 17, No.1, 81 - 90
- BRONSTERT, A. (1994): Modellierung der Abflußdynamik und der Bodenwasserdynamik von Hängen. Universität Karlsruhe, Mitteilungen des Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Heft 46, Dissertation
- BUCKLEY, K. M. (1993): A Derivation of the Random Walk Step Equation. Centre for Research on Environmental Systems, Lancaster University, Lancaster. LAI 4YQ. England
- CELIA, M. A. AND BOULOUTAS, E. T. (1990): A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Res.*, Vol. 26, 7, 1483 - 1496
- CHILDS, E. C. (1969): An Introduction to the physical Basis of Soil Water Phenomena. Wiley, London
- COURANT, R. UND HILBERT, C. (1993): Methoden der mathematischen Physik. 4. Aufl., Springer
- DAGAN, G. (1984): Solute transport in heterogenous porous formations. *J. Fluid. Mech.*, Vol. 145, 152 - 177
- DAGAN, G. (1986): Statistical theory of groundwater flow and transport: pore to laboratory, laboratory to formation and formation to regional scale. *Water Resources Res.*, Vol. 22, 9, 120 - 134
- DAGAN, G. (1989): Flow and Transport in Porous Formations. Springer
- DELBRÜCK, M. (1997): Großflächiges Bromidtracereperiment zur räumlichen und zeitlichen Variabilität des Wassertransports an einem Lößhang. Universität Heidelberg, Institut für Umweltphysik, Dissertation
- DOOGE, J. C. I. (1959): A general theory of the unit hydrograph. *Journal of Geophys. Res.*, Vol. 64, 2, 241 - 256
- DOOGE, J. C. I. (1986): Looking for hydrologic laws. *Water Resources Res.*, Vol 22, 9, 46S - 58S
- DUFNER, J., JENSEN, V., SCHUMACHER, E. (1992): Statistik mit SAS. Teubner
- EAGLESON, P.S. (1970): Dynamic Hydrology. Mc Graw-Hill

- EDWARDS, W. M., VAN DER PLOEG, R. R., EHLERS, W. (1979): A numerical study of the effects of non-cappillary sized pores upon infiltration. *Soil Science Soc. Am. Jour.*, Vol. 43, 851 - 855
- ELLIS, T. M. (1990): FORTRAN 77 programming. 2nd ed., Addison-Wesley
- EHRMANN, O. (1996): Regenwürmer in einigen südwestdeutschen Agrarlandschaften: Vorkommen, Entwicklung bei Nutzungsänderung und Auswirkung auf das Bodengefüge. Dissertation Universität Hohenheim, Hohenheimer Bodenkundliche Hefte, Nr. 35
- FAHRMEIR, L. (1984): Multivariate statistische Verfahren. De Gruyter
- FLURY, M., FLÜHLER, H. LEUENBERGER, J., JURY, W. A. (1994A): Susceptibility of soils to preferential flow of water: A field study. *Water Resources Res.*, Vol. 30, 7, 1945 - 1954
- FLURY, M. AND FLÜHLER, H (1994B): Brilliant Blue FCF as a dye tracer for solute transport studies, a toxicological overview. *Jour. of Environm. Quality*, Vol. 23, 5, 1108 - 1112
- FLURY, M., LEUENBERGER, J., STUDER, B., FLÜHLER, H. (1995A): Transport of anions and herbicides in a loamy and a sandy soil. *Water Resources Res.*, Vol. 31, 4, 823 - 835
- FLURY, M. AND FLÜHLER, H. (1995B): Tracer characteristics of Brilliant Blue FCF. *Soil Science Soc. Am, Jour.*, Vol. 59, 1, 22 - 27
- FLURY, M. AND FLÜHLER, H. (1995C): Modelling solute leaching in soils by diffusion-limited aggregation. *Water Resources Res.*, Vol. 31, 10, 2443 - 2452
- FLURY, M. (1996): Experimental evidence of transport of pesticides through field soils - a review. *Jour. of Environm. Quality*, Vol. 25, 1, 25 - 45
- GARDINER, C. W. (1985): Handbook of Stochastic Methods: for Physics, Chemistry and the Natural Sciences. 2nd ed., Springer
- GERMANN, P. AND BEVEN, K. (1985): Kinematic wave approximation to infiltration into soils with sorbing macropores. *Water Resources Res.*, Vol. 21, 7, 990 - 996
- GERMANN, P. F. (1990): Macropores and hydrologic hillslope processes. In: Anderson, M. G. and Burt, T. P. (1990): *Process Studies in Hillslope Hydrology*. Wiley
- GUPTA, V. H., SOROOSHIAN, S., YAPO, P. O. (1998): Towards improved calibration of hydrological models: multiple and noncommensurable measures of information. *Water Resources Res.*, Vol. 34, 4, 751 - 763
- GELHAR, L. W. AND AXNESS, C. (1983): Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Res.*, Vol. 19, 1, 161 - 180
- VAN GENUCHTEN, M. T. (1980): A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. Jour.*, Vol. 44, 892 - 898

- VAN GENUCHTEN, M. T., TANG, D. H., GUENNELON, R. (1984): Some exact solutions for solute transport through soils containing large cylindrical macropores. *Water Resources Res.*, Vol. 20, 3, 335 -346
- GERLINGER, K. (1997): Erosionsprozesse auf Lössböden: Experimente und Modellierung. Universität Karlsruhe, Mitteilungen des Instituts für Wasserbau und Kulturtechnik, Heft 194, Dissertation
- HAKEN, H. (1990): Synergetik: eine Einführung. 3. Aufl., Springer
- HOECHST AG (1992): Isoproturon. Information zum Wirkstoff. Frankfurt
- HONERKAMP, J. UND ROEMER, H. (1986): Grundlagen der klassischen theoretischen Physik. Springer
- HOOGMOED, W. B. AND BOUMA, J. (1980): A simulation model for predicting infiltration into a cracked clay soil. *Soil Science Soc. Am. Jour.*, Vol. 44, 458 -461
- HORNUNG, U. UND MESSING W. (1984): Poröse Medien - Methoden und Simulation. Verlag Beiträge zur Hydrologie, Kirchzarten
- JÄNICH, K. (1990): Topologie. Springer
- JOANNY, J. F. AND DE GENNES, P.-G. (1986): Upward creep of a wetting fluid: a scaling analysis. *J. Physique*, 47, 121 -127
- JURY, W. A. (1982): Simulation of solute transport using a transfer function model. *Water Resources Res.*, Vol. 18, 2, 363 - 368
- JURY, W. A., STOLZY, L H., SHOUSE, P. (1982): A field test of the transfer function model for predicting solute transport. *Water Resources Res.*, Vol. 18, 2, 369 - 375
- JURY, W. A. AND SPOSITO, G (1986A): A transfer function model of solute transport through soil: 1. fundamental concepts. *Water Resources Res.*, Vol. 22, 2, 243 - 247
- JURY, W. A., ELABD, L., RESKETO, M. (1986B): Field study of naporpamide movement through unsaturated soil. *Water Resources Res.*, Vol. 22, 5, 749 - 755
- JURY, W. A., AND ROTH, K. (1990): Transfer Functions and Solute Movement through soil. Theory and Applications. Birkenhäuser
- JURY, W. A., GARDNER, R. W., GARDNER, W. H. (1991): Soil physics. 5th ed., Wiley
- KAUFMAN, L. AND ROUSSEUW, P. J. (1992): Finding Groups in Data. Wiley
- KHAN, A. U. H. AND JURY, W. A. (1990): A laboratory study of the dispersion scale effect in coloumn outflow experiments. *Jour. of Cont. Hydrology*, 5, 119 - 131

- KIEFER, E.-M., LIEDL, R., SCHMITZ, G.H. UND SEUS, G.J. (1990): Konservative Strömungsmodelle auf der Basis krummliniger Koordinaten unter besonderer Berücksichtigung von Wasserbewegungen im ungesättigt-gesättigten Boden. Berichte der Versuchsanstalt Oberrach und des Lehrstuhls für Wasserbau und Wassermengenwirtschaft der Technischen Universität München, Nr. 64
- KINZELBACH, W. AND UFFINK, G. (1991): The random walk method and extensions in groundwater modeling. In: Transport Processes in Porous Media, Bear J. et al. (eds.), Kluwer (NATO ASI series E 202)
- KINZELBACH, W. (1992): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. 2. Aufl., Oldenbourg
- KLEMES, V. (1983): Conceptualization and scale in hydrology. Jour. of Hydrology, 65, 1 - 23
- KOLLE, O. UND FIEDLER, F. (1995): Messung und numerische Simulation der Energie- und Feuchtebilanz der Bodenoberfläche. In: E. J. Plate (Hrsg.) *Zwischenbericht 1995 Weiherbachprojekt*. Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Universität Karlsruhe, 65 - 105
- KOLLE, O. UND FIEDLER, F. (1996): Messung und numerische Simulation der Energie- und Feuchtebilanz der Bodenoberfläche. In: E. J. Plate (Hrsg.) *Zwischenbericht 1996 Weiherbachprojekt*. Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Universität Karlsruhe, 15 - 40
- LABOLLE, E. M., FOGG, G. E. AND TOMPSON, A. F. B. (1996): Random-walk simulation of transport in heterogeneous porous media: local mass-conservation problem and implementation methods. Water Resources Res., Vol. 32, 3, 583 - 593
- LISCHEID, G., H. LANGE, M. HAUHS, N. STURM, W. STICHLER, P. TRIMBORN, M. MÖRTH AND P. TORSSANDER (1999): Reproducibility and identifiability of process parametrization in steady state tracer experiments at the covered catchment at Gårdsjön, Sweden. (submitted to Water Resources Res.)
- LORENZ, E. N.(1963): The mechanics of vacillation. Jour. of Atmospheric Science, Vol. 20, 2, 130 - 141
- MAURER, T. (1997): Physikalisch begründete, zeitkontinuierliche Modellierung des Wassertransports in kleinen ländlichen Einzugsgebieten. Universität Karlsruhe, Mitteilungen des Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Heft 61, Dissertation
- MAURER, T. (1997): CATFLOW: A physically-based and distributed hydrological model for continuous simulation of catchment water dynamics. Universität Karlsruhe, Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft
- MERZ, B. (1996): Modellierung des Niederschlag-Abfluß-Vorgangs in kleinen Einzugsgebieten unter Berücksichtigung der natürlichen Variabilität. Universität Karlsruhe, Mitteilungen des Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Heft 56, Dissertation

- MERZ, B. AND PLATE, E. J. (1997): Analysis of the effect of spatial variability of soil and soil moisture on runoff. *Water Resources Res.*, Vol. 33, 12, 2909 - 2922
- MERZ, R. (1997): Numerical simulation of solute transport in three-dimensional saturated porous media. Universität Karlsruhe, Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Diplomarbeit
- MICHELS, K., LASCHGARI, B., SIEGFRIED, R., MOKRY, M. (1991): Bestimmung von Herbiziden in Böden und Wässern. *Agribiological Research*, 44, 37 -49
- MILLIGAN, G. W. AND COOPER, M. C. (1985): An examination of procedures for determining the number of clusters in a dataset. *Psychometrika*, Vol. 50, 2, 159 - 179
- MOHANTY, B. P., BOWMAN, R. S., HENDRICK, J. M. H., SIMUNEK, J., VAN GENUCHTEN, M.T. (1998): Preferential transport of nitrate in an intermittent-flood-irrigated field: model development and experimental evaluation. *Water Resources Res.*, Vol. 34, 2, 159 -179
- MUALEM, Y. (1976): A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Res.*, 12, 513 -522
- NAGL, W. (1992): *Statistische Datenanalyse mit SAS*. Frankfurt: Campus
- NYHOFF, L. AND LEESTMA, S. (1995): *FORTRAN 77 and Numerical Methods for Engineers and Scientists*. Prentice-Hall
- PAPOULIS, A. (1984): *Probability, Random Variables and Stochastic Processes*. 2nd ed. Mc Graw Hill
- PARKER, J. C. AND VAN GENUCHTEN, M. T. (1984): Flux-averaged and volume-averaged concentrations in continuum approaches to solute transport. *Water Resources Res.*, Vol. 20, 7, 866 - 872
- PHILIP, J.R. AND DE VRIES, D. A. (1957): Moisture movements on porous media under temperature gradients. *Trans. AGU*, 38, 2, 222 -232
- PHILIP, J.R. (1957): The theory of infiltration I: The infiltration equation and its solutions. *Soil Science Soc.*, Vol. 83, 345 - 357
- PHILIP, J.R. (1957): The theory of infiltration II: The profile of infinity. *Soil Science Soc.*, Vol. 83, 435 - 448
- PHILIP, J.R. (1969): Theory of infiltration. In: *Advances in Hydrosience*, Vol. 5, 215 - 291
- PLATE, E. J. (1988): From conceptual models to hydrological fields, towards a basin hydrology of the twenty-first century. *Proceedings of the 6th Congress 20.-22.7.1988*, Vol. 5, IAHR, Asian and Pacific Regional Division, Kyoto, Japan, 23 - 43
- PLATE, E. J. (1992A): Skalen in der Hydrologie. Zur Definition von Begriffen. *Regionalisierung hydrologischer Parameter*, Beitragssammlung Deutsche Forschungsgemeinschaft, Bonn, 33 - 44

- PLATE, E. J. (1992B): Sustainable development of water resources. A challenge to science and engineering. *Proc. 4th Symposium of Water Resources, August 3/4, 1992, Tokyo, Japan*
- PLATE, E. J. (HRSG.) (1992C): *Weierbach-Projekt: "Prognosemodell für die Gewässerbelastung durch Stofftransport aus einem kleinen ländlichen Einzugsgebiet"*. Schlußbericht zur 1. Projektphase des BMFT-Verbundprojekts. Universität Karlsruhe, Mitteilungen des Instituts für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Heft 41
- PLATE, E. J. (1994): Ökohydrologie - ein neues Aufgabengebiet für Hydrologen? In: U. Grünewald (Hrsg.) *Wasserwirtschaft und Ökologie*, Eberhard Plottner Verlag, 11 - 22
- PLATE, E. J. UND DE HAAR, U. (1989): Ingenieurhydrologische Grundlagenforschung in der Bundesrepublik Deutschland. Entwicklung und Tendenzen aufgrund der Arbeiten der Senatskommission für Wasserforschung der Deutschen Forschungsgemeinschaft, *Österreichische Wasserwirtschaft*, 41 (5/6), 106 -114
- POPPER, K. R. (1984): *Objektive Erkenntnis: Ein evolutionärer Entwurf*. Hoffmann und Campe
- PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W.T. FLANNERY, B. P. (1992): *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press
- RAO, P. S. C., GREEN R. E., BALASUBRAMANIAN, V., KANEHIRE, Y. (1974): Field study of solute movement in a highly aggregated oxisol with intermittent flooding. *Jour. Environm. Qual.*, 3, 197 - 202
- REDDI, L:N. (1994): Unsaturated flow modelling, exact solution to approximate problem. *Jour. of Water Resources Planning and Management*, Vol. 120, 2, 186 -198
- RICHTER, O., SÖNDERGERATH, D., DIEKRÜGER, B. (HRSG.) (1996): Sonderforschungsbereich 179 "Wasser- und Stoffdynamik in Agrarökosystemen" - *Abschlußbericht 1986 - 1996, Band 24, 1-3, Landschaftsökologie und Umweltforschung*, Technische Universität Braunschweig, Institut für Geographie und Geoökologie
- RITSEMA, C., DEKKER, L. W. , NIEBER, J. L., STEENHUIS, T.S. (1998): Modeling and field evidence of finger formation and recurrence in a water repellent soil. *Water Resources Res.*, Vol. 34, 4, 555 - 567
- ROTH, K. (1995): *Soil physics lecture notes. Vorlesungsskript in Bodenphysik, Version 3.0*, Institut für Bodenkunde und Standortlehre, Universität Hohenheim
- ROTH, K. AND JURY, W. A. (1993): Linear transport for adsorbing solutes. *Water Resources Res.*, Vol. 29, 4, 1195 - 1203
- ROTH, K. AND HAMMEL, K. (1996): Transport of a conservative chemical through an unsaturated two-dimensional miller-similar medium with steady state flow. *Water Resources Res.*, Vol. 32, 6, 1653 - 1663

- RUBIN, J. (1983): Transport of reacting solutes in porous media: relation between mathematical nature of the problem formulation and chemical nature of reactions. *Water Resources Res.*, Vol. 19, 5, 1231 - 1252
- RUSSO, O (1988): Determining soil hydraulic properties by parameter estimation: on the selection of a model for the hydraulic properties. *Water Resources Res.*, Vol. 24, 3, 453 - 459
- SCHÄFER, D.(1996): Charakterisierung der hydraulischen Eigenschaften der Böden des Weiherbachgebiets. In: E. J. Plate (Hrsg.) *Zwischenbericht 1996 Weiherbachprojekt*. Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Universität Karlsruhe, 48 - 55
- SCHIEFFER; SCHACHTSCHABEL (1992): Lehrbuch der Bodenkunde. 13. Aufl. Stuttgart: Enke
- SCHIERHOLZ, I, BUNTE, D. TIMMERMANN, F. (UNTER MITARBEIT VON MÜLLER, J., ZIMMERMANN, F. UND MOKRY, M.) (1997): Bilanzierung ausgewählter Herbizide landwirtschaftlich genutzter Böden im Untersuchungsgebiet. Karlsruhe, Staatliche Landwirtschaftliche Untersuchungs- und Forschungsanstalt (LUFÄ-Augustenberg)
- SCHLECHTER, R. S., LAM, A. C., WILLIS, M. S. (1991): Capillarity in porous media. In: Perre', G. (eds.), *Capillarity today*. Springer
- SCHMALAND, G. (1996): Geologie des Kompartiments, Makroporen. In: E. J. Plate (Hrsg.) *Zwischenbericht 1996 Weiherbachprojekt*. Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Universität Karlsruhe, 56 - 58,
- SCHMIDT, C. (1996): Untersuchungen zum Einfluß präferentieller Fließwege auf die Verlagerung des Herbizids Isoproturon im Boden. Universität Karlsruhe, Institut für Geographie und Geoökologie, Diplomarbeit
- SCHÖNWIESE, L., D. (1985): *Praktische Statistik für Meteorologen und Geowissenschaftler*. Borntraeger
- SCHUCHARD-FICHER, C. (1980): *Multivariate Analysemethoden*. Springer
- SCHUSTER, H. G. (1994): *Deterministisches Chaos: Eine Einführung*. 3. Aufl., Weinheim
- SHERMAN, L. K. (1932): Streamflow from rainfall by unit graph method. *Engineering News Rec.*, April 7, 501 - 505
- SIMMONS, C. S. (1982): A stochastic-convective transport representation of dispersion in one dimensional porous media systems. *Water Resources Res.*, Vol. 18, 4, 1193 - 1214
- SMITH, L. AND SCHWARTZ, W. (1980): Mass transport 1. A stochastic analysis of macroscopic dispersion. *Water Resources Res.*, Vol. 16, 2, 303 - 313
- SMITH, L. AND SCHWARTZ, F. (1981): Mass transport 2. Analysis of uncertainty in prediction. *Water Resources Res.*, Vol. 17, 2, 351 - 369
- SMITH, L. AND SCHWARTZ, F. (1981): Mass transport 3. Role of hydraulic conductivity data in prediction. *Water Resources Res.*, Vol. 17, 5, 1463 - 1479

- SPÄTH, H. (1975): Cluster-Analyse-Algorithmen zur Objektklassifizierung und Datenreduktion. Oldenbourg
- SPOSITO, G., WHITE, R. E., DARRAH, P. R., JURY, W. A. (1986): A transfer function model of solute through soil: 3. the convection-dispersion equation. *Water Resources Res.*, Vol. 22, 2, 255 - 262
- STAMM, C. H. (1997): Rapid transport of phosphorus in drained grass land. Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Institut für Terrestrische Ökologie, Abteilung Bodenphysik, Dissertation
- STEINHAUSEN, D. UND LANGER, K. (1977): Clusteranalyse, Einführung in Methoden und Verfahren der statistischen Klassifikation. de Gruyter
- STENGER, E. (1998): Berechnungsexperimente zur Untersuchung der präferenziellen Fließaktivität tropischer Böden. Universität Karlsruhe, Institut für Hydrologie und Wasserwirtschaft, Diplomarbeit
- SEYFRIED, M. S. AND WILCOX, B. P. (1996): Scale and nature of spatial variability: field examples having implications for hydrologic modeling. *Water Resources Res.*, Vol. 31, 1, 173 -184
- TANG, D. H., SMITH, L., SCHWARTZ, F. W. (1982): Stochastic modelling of mass transport in a random velocity field. *Water Resources Res.*, Vol. 18, 2, 231 - 244
- TOMPSON, A. F. B. (1987): Numerical Simulation of Solute Transport in Randomly Heterogeneous Porous Media: Motivation, Model Development and Application, Report No. UCID-21281, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore California
- TOMPSON, A. F. B. AND GELHAR, L. N. (1990): Numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media. *Water Resources Res.*, Vol. 26, 10, 2541 - 2562
- UFFINK, G. (1990): Analysis of Dispersion by the Random Walk Method. Technische Universität Delft, Dissertation
- VREUGDENHIL, C. B. AND KOREN, B. (EDS.) (1993): Numerical Methods for Advection Diffusion Problems. *Notes on Numerical Fluid Mechanics*. Vieweg
- WEIZSÄCKER, C. F. (1984): Die Einheit der Natur. DTV
- WEIZSÄCKER, C. F. (1988): Aufbau der Physik. DTV
- WHITE, R. E., DYSON, J. S., HAIGH, R. A., JURY, W. A., SPOSITO, G., (1986): A transfer function model of solute through soil: 2. illustrative applications. *Water Resources Res.*, Vol. 22, 2, 248 - 254
- WÜST, D. (1998): Erprobung eines Regners in Laborversuchen. Institut für Wasserwirtschaft und Kulturtechnik, Vertieferarbeit

- ZEDDIES, J. ET AL. (HRSG.) (1995): Sonderforschungsbereich 183 "Umweltgerechte Nutzung von Agrarlandschaften" Abschlußbericht 1987 - 1994, *Landschaftsökologie und Umweltforschung*, Universität Hohenheim
- ZEHE, E. AND PLATE, E., J. (1998): Tracer experiments and pattern recognition method to investigate the distribution of the susceptibility for preferential flow in the Weiherbach-catchment. *Proc. of the international conference SATHLA, 9 - 13. 3.1998, Rio de Janeiro, Brasilien*
- ZEHE, E. AND PLATE, E., J. (1998): Preferential flow in a small agricultural catchment: field study and upscaling concept. *Ann. Geophys., 16, Suppl. II Hydrology, Oceans and Atmospheres, C482*, oral presentation at EGS XXII General Assembly, Nice, April 1998
- ZURMÜHL, T. (1994): Validierung konvektiv-dispersiver Modelle zur Berechnung des instationären Stofftransports in ungestörten Bodensäulen. Universität Bayreuth, Bayreuther Bodenkundliche Berichte, Band 36, Dissertation

Symbolverzeichnis

- Zur Berechnung der Dimension der jeweiligen Größe dienen folgende Grundgrößen mit den entsprechenden SI-Einheiten:

L: Länge, Meter [m], m: Masse, Kilogramm [kg]; t: Zeit [s]

- Falls Symbole doppelt belegt sind, geht deren Bedeutung aus dem Kontext eindeutig hervor.

| <u>Symbol</u> | <u>Dimension</u> | <u>Einheit</u> | <u>Bedeutung</u> |
|----------------------------|---------------------|----------------------|---|
| a | [-] | [-] | Exponent im Fließgesetz der kinematischen Welle |
| a | [m] | [m] | "range" oder Reichweite eines Variogramms |
| a | [-] | [-] | Diskriminanzkoeffizient |
| a _h | [m] | [m] | horizontaler "range" eines Variogramms |
| a _v | [m] | [m] | vertikaler "range" eines Variogramms |
| A | [L ²] | [m ²] | Fläche eines Modellelements |
| A(x,t) | [L/t] | [m/s] | Driftterm in der Fokker-Planck-Gleichung |
| a _{mak} | [-] | [-] | Makroporenflächenanteil in einem Modellelement |
| a [~] | [-] | [-] | standardisierter Diskriminanzkoeffizient |
| b | [L/t] | [m/s] | maximale Flußdichte im Makroporensystem |
| B | [-] | [-] | Zwischen-Gruppen-Streumatrix |
| B_{ij}(x,t) | [L ² /t] | [m ² /s] | Diffusionstensor in der Fokker-Planck-Gleichung |
| C _b | [m/m] | [g/kg] | Konzentration bezogen auf die Trockenmasse |
| C _s | [m/m] | [kg/kg] | Konzentration adsorbierten Stoffes in der Festphase |
| C _w | [m/L ³] | [kg/m ³] | Konzentration gelösten Stoffes in der Wasserphase |
| \bar{C} | [m/m] | [g/kg] | horizontal gemittelte Konzentration im Boden |
| CI | [L] | [mm] | Kumulative Beregnungsmenge |
| CQ | [L ³] | [m ³] | Kumulative Abflußerhöhung |
| C ₂ | [-] | [-] | Kovarianzfunktion eines 2 d stochastischen Prozeß |
| C ₁ | [-] | [-] | Kovarianzfunktion eines 1 d stochastischen Prozeß |
| c | [L/t] | [m/s] | Phasengeschwindigkeit der kinematischen Welle |
| C | [-] | [-] | Kreuzkorrelationskoeffizient |
| CR | [-] | [-] | kanonischer Korrelationskoeffizient |
| D | [L ² /t] | [m ² /s] | Dispersionskoeffizient |
| D _e | [L ² /t] | [m ² /s] | effektiver Dispersionskoeffizient |
| DF | [-] | [-] | Anzahl der Freiheitsgrade |

| | | | |
|----------------|-----------|------------|---|
| D_w | $[L^2/t]$ | $[m^2/s]$ | Diffusivität des Wassers im Boden |
| D_{mol} | $[L^2/t]$ | $[m^2/s]$ | molekularer Diffusionskoeffizient |
| d | $[L]$ | $[m]$ | Durchmesser |
| ds | $[L]$ | $[m]$ | Wegelement |
| dx | $[L]$ | $[m]$ | Differential in x-Richtung |
| dy | $[L]$ | $[m]$ | Differential in y-Richtung |
| d^2_w | $[-]$ | $[-]$ | Wardsche Metrik bei der Clusteranalyse |
| $\det(.)$ | $[-]$ | $[-]$ | Determinante von |
| $E(.)$ | $[-]$ | $[-]$ | Erwartungswert von |
| $e(.)$ | $[-]$ | $[-]$ | Entscheidungsfunktion |
| F | $[-]$ | $[-]$ | Pseudo-F Wert als Gütemaß bei der Clusteranalyse |
| f_{mak} | $[-]$ | $[-]$ | Makroporositätsfaktor |
| $f(. .)$ | $[-]$ | $[-]$ | bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte |
| $g_{\xi\xi}$ | $[-]$ | $[-]$ | metrischer Koeffizient in ξ -Richtung |
| $g_{\eta\eta}$ | $[-]$ | $[-]$ | metrischer Koeffizient η -Richtung |
| g | $[L/t^2]$ | $[m/s^2]$ | Erdbeschleunigung |
| g | $[-]$ | $[-]$ | Transferfunktion |
| g | $[-]$ | $[-]$ | Anzahl der Gruppen bei der Clusteranalyse |
| H | $[L]$ | $[m]$ | Überstauhöhe bei der Infiltration |
| h | $[L]$ | $[m]$ | "lag"/Abstand zwischen zwei Punkten |
| h | $[L]$ | $[m]$ | lokale, kartesische Höhenkoordinate |
| I | $[L/s]$ | $[mm/h]$ | Beregnungsintensität |
| \mathbf{I} | $[-]$ | $[-]$ | Einheitsmatrix |
| k_s | $[L/s]$ | $[m/s]$ | gesättigte hydraulische Leitfähigkeit der Bodenmatrix |
| k_s^B | $[L/s]$ | $[m/s]$ | gesättigte Gesamtleitfähigkeit des Bodens |
| K_{eff} | $[-]$ | $[-]$ | Faktor zur Berechnung der Abstandsgeschwindigkeit |
| K_d | $[L^3/m]$ | $[m^3/kg]$ | lineare Adsorptionskonstante |
| L | $[m/L^3]$ | $[g/m^3]$ | Löslichkeitsprodukt |
| l | $[L]$ | $[m]$ | Kantenlänge eines Würfels |
| l_{mak} | $[L]$ | $[m]$ | mittlere Länge der Makroporen mit Radius r |
| \mathbf{l} | $[L]$ | $[m]$ | Abstandsvektor zweier Punkte |
| M_{app} | $[m]$ | $[kg]$ | applizierte Masse eines Stoffes |
| M_{IPU} | $[m]$ | $[kg]$ | applizierte IPU-Masse |
| M_{aus} | $[m]$ | $[kg]$ | ausgetragene Masse eines Stoffes |
| m_t | $[m]$ | $[kg]$ | Trockenmasse einer Bodenprobe |
| m_p | $[m]$ | $[kg]$ | Partikelmasse beim Random Walk |
| n_{fl} | $[-]$ | $[-]$ | normierte Fließlänge |
| n_l | $[-]$ | $[-]$ | normierte Hangposition |
| n | $[-]$ | $[-]$ | "nugget" eines Variogramms |
| N | $[-]$ | $[-]$ | Anzahl |
| n_r | $[-]$ | $[-]$ | simulierte Anzahl der Makroporen mit Radius r |

| | | | |
|--------------------|------------------------|-------------------------|---|
| p_r | [-] | [-] | Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Makropore |
| $p(k \mathbf{x})$ | [-] | [-] | a-posteriori-Wahrscheinlichkeit |
| p | [-] | [-] | a-priori-Wahrscheinlichkeit |
| Pe | [-] | [-] | Gitterpepletzahl |
| Q | [L ³ /t] | [m ³ /s] | Wasserflußrate |
| Q_{in} | [m/t] | [kg/s] | Massenflußrate in eine Bodensäule |
| Q_{out} | [m/t] | [kg/s] | Massenflußrate aus einer Bodensäule |
| Q_{mak} | [L ³ /t] | [m ³ /s] | Wasserflußrate in einer Makropore mit Radius r |
| Q_{mak}^B | [L ³ /t] | [m ³ /s] | Wasserflußrate im gesamten Makroporensystem |
| Q_{mik} | [L ³ /t] | [m ³ /s] | Wasserflußrate in der Bodenmatrix |
| Q | [-] | [-] | Trennungsmaß bei der Diskriminanzanalyse |
| q_{mak} | [L/t] | [m/s] | Wasserflußdichte im Makroporensystem |
| q | [L/t] | [m/s] | Wasserflußdichte im Boden |
| q_{hag} | [L/t] | [m/s] | Wasserflußdichte in Makroporen nach Hagen-Poiseuille |
| q_{exp} | [L/t] | [m/s] | gemessene Wasserflußdichte in Makroporen |
| R | [-] | [-] | Retardationskoeffizient |
| r | [L] | [m] | Radius |
| R_x | [-] | [-] | Zufallszahl für den Diffusionsschritt in x-Richtung |
| R_z | [-] | [-] | Zufallszahl für den Diffusionsschritt in z-Richtung |
| R_ξ | [-] | [-] | Zufallszahl für den Diffusionsschritt in ξ -Richtung |
| R_η | [-] | [-] | Zufallszahl für den Diffusionsschritt in η -Richtung |
| R^2 | [-] | [-] | Anteil erklärter Varianz |
| R | [-] | [-] | Korrelationskoeffizient |
| $\mathbf{r}(x, z)$ | [L] | [m] | zweidimensionaler Ortsvektor |
| r_{ka} | [-] | [-] | relativer Erklärungsanteil einer Diskriminanzfunktion |
| r_{pg} | [-] | [-] | relativer Erklärungsanteil eines Parameters |
| rea | [-] | [-] | relativer Eigenwertanteil einer Diskriminanzfunktion |
| s | [L] | [m] | lokale, kartesische Seitenkoordinate |
| s | [-] | [-] | "sill" eines Variogramms |
| s_a | [m/(L ³ s)] | [kg/(m ³ s)] | Abbauterm in der CD-Gleichung |
| S | [-] | [-] | relative Sättigung des Bodens |
| S_0 | [-] | [-] | Schwellensättigung für Start präferentiellen Fließens |
| $spur(\cdot)$ | [-] | [-] | Spur einer Matrix |
| \mathbf{S} | [-] | [-] | empirische Kovarianzmatrix |
| \mathbf{S}_{tot} | [-] | [-] | gepoolte, empirische Kovarianzmatrix |
| \mathbf{T} | [-] | [-] | totale Streumatrix |
| v_a | [L/t] | [m/s] | Abstandsgeschwindigkeit |
| v_{eff} | [L/t] | [m/s] | Abstandsgeschwindigkeit im effektiven Medium |
| v_{mak} | [L/t] | [m/s] | Abstandsgeschwindigkeit im Makroporensystem |
| v_{mik} | [L/t] | [m/s] | Abstandsgeschwindigkeit in der Bodenmatrix |
| v_x' | [L/t] | [m/s] | verallgemeinerte Geschwindigkeit in x-Richtung |

| | | | |
|----------------------------------|-----------------------|-----------------------|--|
| v_z' | [L/t] | [m/s] | verallgemeinerte Geschwindigkeit in z-Richtung |
| v_ξ' | [L/t] | [m/s] | verallgemeinerte Geschwindigkeit in ξ -Richtung |
| v_η' | [L/t] | [m/s] | verallgemeinerte Geschwindigkeit in η -Richtung |
| W | [-] | [-] | Inner-Gruppen-Streumatrix |
| w | [-] | [-] | Wassergehalt des Makroporensystems |
| X | [-] | [-] | Datenmatrix |
| x | [m] | [m] | kartesische x-Koordinate |
| x | [-] | [-] | Eigenschaftsvektor bei der Diskriminanzanalyse |
| \bar{x}_Q | [-] | [-] | Centroid des Clusters Q |
| $\bar{\mathbf{x}}$ | [-] | [-] | Mittelwert der Eigenschaftsvektoren |
| y_i | [-] | [-] | Diskriminanzfunktion |
| Z_2 | [-] | [-] | 2 d stochastischer Prozeß |
| Z_1 | [-] | [-] | 1 d stochastischer Prozeß |
| $\mathbf{Z}(Z_\xi, Z_\eta)$ | [L] | [m] | zufälliger Anteil beim 2 d Random Walk Schritt |
| $\langle Z_{\text{cfd}} \rangle$ | [L] | [m] | Mittelwert der Transportdistanz-cdf |
| $\langle Z_{\text{sp}} \rangle$ | [L] | [m] | Mittelwert der Schwerpunktsverteilung |
| z_{IPU} | [L] | [m] | Schwerpunktstiefe des IPU im Boden |
| z_{BR} | [L] | [m] | Schwerpunktstiefe des Bromids im Boden |
| z | [L] | [m] | Vertikalkoordinate |
| α | [-] | [-] | Signifikanzniveau |
| θ | [-] | [-] | volumetrische Bodenfeuchte |
| ρ_l | [m/L ³] | [kg/m ³] | Lagerungsdichte des Bodens |
| ρ | [m/L ³] | [kg/m ³] | Dichte |
| ρ_s | [m/L ³] | [kg/m ³] | Dichte der Festphase im Boden |
| λ | [1/t] | [1/s] | Abbaurrate eines Stoffes |
| λ | [-] | [-] | Eigenwert einer Diskriminanzfunktion |
| Λ | [-] | [-] | Wilksches Lambda |
| μ | [-] | [-] | Mittelwert einer Wahrscheinlichkeitsverteilung |
| ϕ | [-] | [-] | bedingte Fehlerrate |
| ε | [-] | [-] | Gesamtfehlerrate |
| ψ | [L] | [m] | Matrixpotential |
| γ | [-] | [-] | Variogramm |
| Δz | [L] | [m] | vertikale Gitterweite der Diskretisierung |
| Δx | [L] | [m] | horizontale Gitterweite der Diskretisierung |
| ΔH | [L] | [m] | Änderung der Überstauhöhe |
| ξ | [L] | [m] | laterale Koordinate im krummlinigen Gitter |
| ξ | [-] | [-] | Pseudozufallszahl |
| η | [L] | [m] | Höhenkoordinate im krummlinigen Gitter |
| η | [m/(L t)] | [kg/(m s)] | dynamische Zähigkeit |
| $\eta(t)$ | [L/t ^{1/2}] | [m/s ^{1/2}] | diffusiver Anteil am Random Walk |

| | | | |
|-----------------|-----|-----|--|
| Σ | [-] | [-] | Kovarianzmatrix |
| σ | [-] | [-] | Standardabweichung |
| σ_3 | [-] | [-] | drittes Zentralmoment |
| σ_{cdf} | [-] | [-] | Standardabweichung der Transportdistanz-cdf |
| σ_{3cdf} | [-] | [-] | drittes Zentralmoment der Transportdistanz-cdf |
| σ_{sp} | [-] | [-] | Standardabweichung der Schwerpunktsverteilung |
| σ_{3sp} | [-] | [-] | drittes Zentralmoment der Schwerpunktsverteilung |
| σ_1 | [-] | [-] | Standardabweichung der Makroporenlängen |
| Ω | [-] | [-] | Grundgesamtheit |

Abbildungsverzeichnis

| | |
|--|----|
| 1.1 Lesehilfe zum Verständnis der iterativen Vorgehensweise der vorliegenden Arbeit | 10 |
| 2.1 Idealisierter Verlauf der Meßwerte der Lagerungsdichte ρ_l in Abhängigkeit vom Meßvo- lumen v_m | 12 |
| 2.2 Drei Transportregimes der Taylordispersion | 15 |
| 2.3 Elementarzelle eines kontinuierlichen Modells in einem makroporösen Boden | 19 |
| 2.4 Typische Bodentypenverteilung an einem Lößhang im Kraichgau | 22 |
| 2.5 Schematische Darstellung der indirekten Methode zur Messung eines repräsentativen Makrozustands | 25 |
| 2.6 Mikroskopische Unterschiede zweier makroskopisch gleichen Anfangs- Randbedingungen | 26 |
| 2.7 Potentielle Einflußgrößen beim Entstehen und beim Ablauf präferentieller Fließaktivität | 28 |
| 2.8 Gegenüberstellung eines präferentiellen und eines klassischen Fließmusters | 28 |
| 3.1 Nördliches Einzugsgebiet des Weiherbachs mit den Standorten der durchgeführten Tra- cerversuche | 32 |
| 3.2 Die Lage des Kraichgaus und des Weiherbachtals in Deutschland | 33 |
| 3.3 Anzahl und Tiefe der Wurmgänge in einem Kolluvium und einer Pararendzina | 34 |
| 3.4 Schematische Darstellung des Düsenregners | 36 |
| 3.5 Schematische Darstellung des Versuchsaufbaus sowie des Bodenaufbaus am Specht- acker | 39 |
| 3.6 Beprobung einer Parzelle | 41 |
| 3.7 Schematische Darstellung des Aufbaus zur Messung des k_s -Werts | 44 |
| 3.8 Darstellung der Schritte zur Übersetzung der Farbmuster in Grauwertmatrizen | 45 |
| 4.1 Lineare Regression des Makroporenvolumens mit der normierten Fließlänge n_{fl} | 49 |
| 4.2 Anzahl der Makroporen des jeweiligen Durchmessers auf den sechs Zählflächen der Testparzelle 1 sowie die über alle Zählflächen gemittelte Makroporenzahl | 51 |
| 4.3 Lineare Regression der gesättigten Leitfähigkeit k_s mit dem Quadrat r^2 des mittleren Ma- kroporenradius sowie die Abnahme des spezifischen Reibungsverlustes mit zuneh- mender, minimaler Querschnittsfläche der Makropore | 54 |
| 4.4 Ganglinien der IPU- bzw. Bromidkonzentration im Dränagewasser sowie des Dränage- abflusses und der Abflußerhöhung | 55 |
| 4.5 Schematische Darstellung des schnellen Stoffdurchbruchs durch einen Wurmgang in das Dränagesystem | 57 |
| 4.6 Zwei unterschiedliche Beispiele für präferentielle Fließmuster | 59 |
| 4.7 Retardation des Isoproturons in den Spalten der Konzentrationsmatrizen der Profile Mp 97 a1 und b1 | 61 |
| 4.8 Ganglinien der IPU-Fracht in der Abflußerhöhung Q_{eff} | 63 |
| 5.1 Natürliche und formale Einflüsse auf den Infiltrationsprozeß | 69 |
| 5.2 Zwei Parametersätze zur Repräsentation der Fließmuster bei der Gruppierung | 72 |
| 5.3 Bromidmuster der Standorte Mp 23 und Mp 33 | 73 |
| 5.4 Klasseneinteilung der Fließmuster auf Basis der Schwerpunktparameter | 75 |

| | |
|---|-----|
| 5.5 Aufteilung der aggregierten Farbmuster auf 3 Gruppen..... | 78 |
| 5.6 Gruppeneinteilung der aggregierten Farbmuster in der $\langle z \rangle$ - σ -Ebene und der $\langle z \rangle$ - σ_3 -Ebene..... | 79 |
| 5.7 Gruppierung der aggregierten Bromidmuster sowie der aggregierten Farbmuster im Raum der Schwerpunktparameter | 82 |
| 5.8 Schematische Darstellung einer Regionalisierung des kleinskaligen Transportgeschehens auf Basis einer repräsentativen Stichprobe von Fließmustern..... | 90 |
| 6.1 Schematische Gegenüberstellung eines bikontinuierlichen und des effektiven Ansatzes zur Beschreibung präferentieller Fließaktivität..... | 99 |
| 6.2 Räumliche Interpolation des Geschwindigkeitsfelds in drei Schritten | 105 |
| 6.3 Berechnung der Konzentration im krummlinigen, orthogonalen Gitter..... | 106 |
| 6.4 Schema der Modellkopplung..... | 109 |
| 6.5 Lösungsschema der Random-Walk-Schrittgleichung | 110 |
| 6.6 Gesättigtes Gesamtleitfähigkeitsfeld der Parzelle Mp 97 und einer Parzelle B mit zehnfach niedrigerer Makroporosität | 111 |
| 6.7 Sphärisches Variogramm für die Bodenfeuchte..... | 113 |
| 6.8 Horizontal und vertikal anisotropes Feuchtefeld als unscharfer Anfangszustand..... | 114 |
| 7.1 Geologischer Schnitt eines nahegelegenen Hangs am "Neubürger Pfad" | 118 |
| 7.2 Verteilung der Bodenarten am Modell-IUP-Hang..... | 118 |
| 7.3 Räumliche Verteilungen der Gesamtleitfähigkeit im makroporösen Oberboden des IUP-Hangs für die Varianten 3 und 4 | 122 |
| 7.4 Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Schwerpunkstiefen am 8.9.1993 und am 23.3.1994 | 125 |
| 7.5 Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Schwerpunkstiefen am 26.7.1994 und am 24.3.1995 | 127 |
| 7.6 Vergleich der gemessenen und mit Variante 3 simulierten Bromidkonzentration im IUP-Hang am Termin bester Korrelation zwischen gemessener und simulierter räumlicher Verteilung der Schwerpunkstiefen | 131 |
| 7.7 Vergleich der gemessenen und mit Variante 3 simulierten Bromidkonzentration im IUP-Hang am Termin schlechtester Korrelation zwischen gemessener und simulierter räumlicher Verteilung der Schwerpunkstiefen | 132 |
| 7.8 Gemessenes und simuliertes Bromidprofil am 24.3.1995 am Hangfuß | 134 |
| 7.9 Gemessenes und simuliertes Bromidprofil vom 8.9.1993 am Hangfuß | 134 |
| 7.10 Unterschiede zwischen den Fällen a und b..... | 137 |
| 7.11 Logarithmisch skalierte Tracerverteilung nach 24 h in den Fällen a und b | 138 |
| 7.12 Gesamtleitfähigkeit der Parzelle Mp 97 und der Parzelle B, dargestellt in der x-z-Ebene..... | 141 |
| 7.13 Schwerpunkstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei hoher Intensität von 11 mm/h und einem Schwellwert von $S_0 = 0.8$ | 143 |
| 7.14 Streumaße Var1 und Var2 für die simulierte Beregnung der Parzelle Mp 97 | 144 |
| 7.15 Schwerpunkstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei niedriger Intensität von 2.2 mm/h und einem Schwellwert von $S_0 = 0.8$ | 145 |
| 7.16 Variationskoeffizient Var1 und skalierte Streubreite Var2 für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei niedriger Intensität von 2.2 mm/h..... | 146 |
| 7.17: Schwerpunkstiefen der Fließmuster für Parzelle B und die Variationsmaße Var1 und Var2 bei einem Schwellwert von $S_0 = 0.6$ und hoher Intensität von 11 mm/h..... | 147 |
| 7.18 Schwerpunkstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung von Parzelle B bei einer Intensität von 2.2 mm/h..... | 148 |
| 7.19 Variationskoeffizient Var1 und skalierte Streubreite Var2 für die Beregnung der Parzelle B bei niedriger Intensität $I = 2.2$ mm/h | 149 |

| | |
|---|-----|
| 7.20 Maximum des normierten Variationsmasses Var2 als Funktion der Beregnungsintensität | 153 |
| 7.21 Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster und deren Einhüllende sowie normierte Variationsmaße für die Beregnung der Parzelle Mp 97 mit einer Intensität von $I = 2.2$ mm/h | 154 |
| 7.22 Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster und deren Einhüllende (oberer Graph) sowie normierte Variationsmaße für die Beregnung der Parzelle B mit niedriger Intensität von $I = 2.2$ mm/h..... | 155 |
| 7.23 Stabilitätsdiagramm für die simulierte Beregnung der Parzelle B | 158 |
| 8.1 Schema eines Diagramms zur qualitativen Beschreibung der Dynamik nichtlinearer Systeme mit mehreren stabilen dynamischen Regimen | 173 |
| A 3.1 Farbmuster sämtlicher Beregnungsversuche | 205 |
| A 3.2 Bromidmuster sämtlicher Standorte..... | 206 |
| A 4.1 Gruppierung der Farbmuster der Standorte, an denen sowohl Bromid als auch Brilliant Blau ausgebracht wurde | 209 |
| A 4.2 Gruppierung der Bromidmuster aller Standorte | 210 |
| A 5.1 Vergleich zwischen simulierter und gemessener Bromidverteilung am 8.9.1993..... | 212 |
| A 5.2 Vergleich zwischen simulierter und gemessener Bromidverteilung am 24.3.1995..... | 213 |
| A 5.3: Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Bromidprofilen am 8.9.1993..... | 214 |
| A 5.4 Vergleich zwischen simulierter und gemessener Bromidverteilung am 24.3.1995..... | 215 |
| A 5.5 Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei einem Schwellwert von $S_0 = 0.6$ und bei hoher Intensität von 11 mm/h..... | 216 |
| A 5.6 Schwerpunktstiefen der Fließmuster für die simulierte Beregnung der Parzelle Mp 97 bei einem Schwellwert von $S_0 = 0.6$ und bei niedriger Intensität von 2.2 mm/h..... | 217 |
| A 5.7 Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei einem Schwellwert von $S_0 = 0.6$ und bei mittlerer Intensität von 5.5 mm/h..... | 218 |
| A 5.8 Streumaße Var1 und Var2 für die simulierte Beregnung der Parzelle Mp 97 bei mittlerer Intensität $I = 5.5$ mm/h und bei einem Schwellwert von $S_0 = 0.6$ | 229 |
| A 5.9 Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle B bei einem Schwellwert von $S_0 = 0.8$ und bei niedriger Intensität von 2.2 mm/h..... | 220 |
| A 5.10 Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle B bei einem Schwellwert von $S_0 = 0.6$ und bei mittlerer Intensität von 5.5 mm/h..... | 221 |
| A 5.11 Streumaße Var1 und Var2 für die simulierte Beregnung der Parzelle B bei mittlerer Beregnungsintensität von $I = 5.5$ mm/h und einem Schwellwert von $S_0 = 0.6$ | 222 |
| A 5.12 Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster und deren Einhüllende für die Beregnung der Parzelle A mit niedriger Intensität von $I = 2.2$ mm/h und bei einem Schwellwert $S_0 = 0.6$ | 223 |
| A 5.13 Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster und deren Einhüllende für die Beregnung der Parzelle B mit niedriger Intensität von $I = 2.2$ mm/h und bei einem Schwellwert $S_0 = 0.6$ | 224 |
| A 5.14 Stabilitätsdiagramm für die simulierten Beregnung der Parzelle A..... | 225 |

Tabellenverzeichnis

| | |
|--|-----|
| 2.1 Halbwertszeiten des Isoproturonabbaus und Dehydrogenaseaktivität in verschiedenen Bereichen eines Kolluviums | 18 |
| 2.2 Dominierende Prozesse und Schlüsselgrößen des Stoffhaushalts auf verschiedenen Raum- Zeitskalen | 23 |
| 3.1 Eckdaten der kleinskaligen Transportversuche | 38 |
| 3.2 Daten zur Durchführung der Kleinberechnungen..... | 40 |
| 3.3 Berechnungsphasen des Durchbruchexperiments | 42 |
| 3.4 Mittlere Lagerungsdichten am IUP-Hang nach Delbrück (1997)..... | 43 |
| 4.1 Daten zur Makroporenkartierung nach Schmaland (1996) | 48 |
| 4.2 Räumlicher Mittelwert und Standardabweichung der Bodenfeuchte für beide Testparzellen | 50 |
| 4.3 Mittlere Zahl und mittlere Tiefe der Makroporen im Boden der Zählparzellen | 52 |
| 4.4 Mittelwert und Standardabweichung der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit k_s und der Porosität θ_s | 52 |
| 4.5 Flußrate und Abstandsgeschwindigkeit in Makroporen verschiedener Radien | 53 |
| 4.6 Retardation des Isoproturons in verschieden Phasen des Versuchs mit absolutem Fehler .. | 56 |
| 4.7 Wiedererhalt des Isoproturons und des Bromids | 56 |
| 4.8 Ausgebrachte Bromidmenge und Wiedererhalt durch die Probennahme | 59 |
| 4.9 Wiedererhalt und Retardation des Isoproturons mit absolutem Fehler | 60 |
| 5.1 Vergleich der Repräsentationsparameter anhand der Fließmuster Mp 33 a1 und Mp 23 b1 | 74 |
| 5.2 Abhängigkeit der Gruppeneinteilung von der "seed"-Auswahl zur Festlegung der Startpartition für beide Parametersätze | 76 |
| 5.3 Mittelwerte und Variationskoeffizienten der Parameter $\langle z \rangle$, σ und σ_3 innerhalb der Gruppen und der ganzen Stichprobe | 80 |
| 5.4 Inner-Gruppen-Mittelwerte und Gesamtmittelwerte der Parameter für beide Gruppierungen | 82 |
| 5.5 Gütekriterien der Diskriminanzanalyse beider Standorteinteilungen..... | 84 |
| 5.6 Relativer Gesamtanteil $r_{pg_{Br}}$ bzw. $r_{pg_{BB}}$ der Variablen an der Erklärung der Streuung der Diskriminanzwerte auf Basis der Bromid- und der Farbmuster | 85 |
| 5.7 Ergebnis des Klassifikationstests auf Basis Standorteinteilung der aggregierten Bromidmuster | 86 |
| 5.8 Ergebnis des Klassifikationstests auf Basis Standorteinteilung der aggregierten Farbmuster | 86 |
| 5.9 Zu erwartende Gesamtfehlerraten bei der Prognose des Fließmustertypus auf Basis der aggregierten Farb- und Bromidmuster sowie bei rein zufälliger Klassifikation | 87 |
| 6.1 Daten für die Simulation der Makroporosität der Parzelle Mp 97 | 100 |
| 7.1 Van Genuchten-Mualem-Parameter der Bodenarten des IUP-Hangs nach Delbrück (1997)..... | 119 |
| 7.2 Direkt gemessene, gesättigte Leitfähigkeiten verschiedener Horizonte unter Einschluß von Makroporeneffekten nach Delbrück (1997)..... | 119 |

| | |
|---|-----|
| 7.3 Regressionsbeziehungen für das Makroporenvolumen V_m , die mittlere Tiefe der Makroporen l_{mak} und den Makroporenflächenanteil a_{mak} | 121 |
| 7.4 Zusammenfassung der Unterschiede zwischen den einzelnen Anpassungsvarianten | 123 |
| 7.5 Vergleichsgrößen für Messung und Simulation am 8. September 93 | 124 |
| 7.6 Vergleichsgrößen für Messung und Simulation am 23. März 94..... | 126 |
| 7.7 Vergleichsgrößen für Messung und Simulation am 26. Juli 94 | 126 |
| 7.8 Vergleichsgrößen für Messung und Simulation am 24. März 95..... | 128 |
| 7.9 Vergleich der Simulationsvarianten mit dem beobachteten Transportgeschehen | 129 |
| 7.10 Vergleich simulierter und beobachteter Peakbreiten..... | 133 |
| 7.11 Gegenüberstellung der Schwerpunktparameter der simulierten Fließmuster für die Fälle a und b | 138 |
| 7.12 Daten zur Simulation der Gesamtleitfähigkeitsfelder im Boden der Parzelle Mp 97 und der Parzelle B..... | 140 |
| 7.13 Unterschiede zwischen den Simulationsvarianten | 141 |
| 7.14 Anfangs-Randbedingungen der Beregnungsversuche und der Simulationsvarianten, die zur Prüfung der Modellergebnisse benutzt werden | 151 |
| 7.15 Vergleich der Schwerpunktparameter gemessener und simulierter Fließmuster..... | 152 |
| 7.16 Minimale und maximale Schwerpunkttiefe der simulierten Fließmuster sowie der Kreuzkorrelationskoeffizient zwischen den entsprechenden Anfangsfeuchten und dem Gesamtleitfähigkeitsfeld | 156 |
| A 2.1 Eigenschaften von Isoproturon (Hoechst AG, 1992, verändert) | 204 |
| A 4.1 Mittelwert, Standardabweichung und drittes Zentralmoment der Schwerpunktsverteilung aller Bromidprofile sowie die entsprechenden Momente der Transportdistanz-cdf .. | 207 |
| A 4.2 Mittelwert, Standardabweichung und drittes Zentralmoment der Schwerpunktsverteilung der aggregierten Farbmuster | 208 |
| A 4.3 Eigenschaftsvektoren der Standorte sowie deren Gruppenzugehörigkeit k auf Basis der aggregierten Bromid- und der Farbtracerdaten | 211 |

Anhang

A1 Ergänzende Grundlagen

In Kapitel 5 dieser Arbeit wird ein Verfahren zur Auswertung von Fließmustern vorgestellt, das die Ähnlichkeiten zwischen Fließmustern quantifiziert, die Fließmuster in Gruppen einteilt und diese Gruppierungen durch die Anfangs-Randbedingungen der zugehörigen Transportversuche erklärt. Dieses Verfahren basiert auf einer Kombination aus Clusteranalyse und Diskriminanzanalyse. Die folgenden Abschnitte geben eine Einführung in die Grundbegriffe dieser beiden multivariaten statistischen Analyseverfahren.

A 1.1 Einige Grundbegriffe der multivariaten Parameterschätzung

Wird ein p -dimensionaler Merkmals- oder Eigenschaftsvektor \mathbf{x} N mal beobachtet, so wird dieses Meßergebnis üblicherweise in einer $N \times p$ Datenmatrix angeordnet:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}'_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}'_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1j} & \dots & x_{1p} \\ \vdots & & & & \vdots \\ x_{i1} & \dots & x_{ij} & \dots & x_{ip} \\ \vdots & & & & \vdots \\ x_{N1} & \dots & x_{Nj} & \dots & x_{Np} \end{pmatrix} \quad (\text{A 1.1})$$

Die unterschiedlichen Eigenschaften sind in den p Spalten angeordnet, jede der N Zeilen steht für eine Beobachtung. Der Wert x_{ij} ist die i 'te Beobachtung der j 'ten Eigenschaft. Entstammen die Beobachtungen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ einer p -dimensionalen Grundgesamtheit mit Erwartungswert $\boldsymbol{\mu}$ und Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}$, kurz einer $p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ -Verteilung, so sind der arithmetische Mittelwert $\bar{\mathbf{x}}$ und die empirische Kovarianzmatrix \mathbf{S} unverzerrte Schätzer für $\boldsymbol{\mu}$ und $\boldsymbol{\Sigma}$ (Fahrmeir, 1984).

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{x}} &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{x}_n \\
\mathbf{S} &= \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}})' (\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}) \\
\mathbf{S} &= \frac{1}{N-1} \begin{pmatrix} \sum_n (\mathbf{x}_{n1} - \bar{\mathbf{x}}_1)^2 & \cdots & \sum_n (\mathbf{x}_{n1} - \bar{\mathbf{x}}_1)' (\mathbf{x}_{np} - \bar{\mathbf{x}}_p) \\ \vdots & & \vdots \\ \sum_n (\mathbf{x}_{n1} - \bar{\mathbf{x}}_p)' (\mathbf{x}_{n1} - \bar{\mathbf{x}}_1) & \cdots & \sum_n (\mathbf{x}_{np} - \bar{\mathbf{x}}_p)^2 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{A 1.2}$$

Entstammen die N Beobachtungen g verschiedenen Teilgrundgesamtheiten (Gruppen oder Klassen) $\Omega_1, \dots, \Omega_g$, so spricht man von einer partitionierten Datenmatrix \mathbf{X} . Sie besteht aus den g Teilmatrixen $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_g$. Jede Matrix \mathbf{X}_k enthält N_k p -dimensionale Beobachtungen aus einer $p(\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$ -verteilten Grundgesamtheit, mit der empirischen Kovarianzmatrix \mathbf{S}_k und dem Mittelwert $\bar{\mathbf{x}}_k$. Die gepoolte, empirische Kovarianzmatrix \mathbf{S}_{tot} ist ein Schätzer für die gemeinsame Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\Sigma}$ der gesamten Stichprobe. Es gilt:

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_{\text{tot}} &= \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^g (N_k - 1) \mathbf{S}_k = \frac{1}{N-g} \mathbf{W} \\
\mathbf{W} &= \sum_{k=1}^g \sum_{n=1}^{N_k} (\mathbf{x}_{kn} - \bar{\mathbf{x}}_k) (\mathbf{x}_{kn} - \bar{\mathbf{x}}_k)' \\
\mathbf{B} &= \sum_{k=1}^g (\bar{\mathbf{x}}_k - \bar{\mathbf{x}}) (\bar{\mathbf{x}}_k - \bar{\mathbf{x}})'
\end{aligned} \tag{A 1.3}$$

\mathbf{W} heißt Inner-Gruppen-Streumatrix und \mathbf{B} Zwischen-Gruppen-Streumatrix. Anhand der gepoolten empirischen Kovarianzmatrix \mathbf{S}_{tot} errechnet sich die Gesamt-Streumatrix \mathbf{T} und es gilt die folgende Zerlegung:

$$\begin{aligned}
\mathbf{T} &= (N-1) \mathbf{S}_{\text{tot}} = \sum_{k=1}^g \sum_{n=1}^{N_k} (\mathbf{x}_{kn} - \bar{\mathbf{x}}) (\mathbf{x}_{kn} - \bar{\mathbf{x}})' \\
\mathbf{T} &= \mathbf{W} + \mathbf{B}
\end{aligned} \tag{A 1.4}$$

Sind die Kovarianzmatrizen der einzelnen Teilgrundgesamtheiten identisch, d.h. $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \boldsymbol{\Sigma}_2 = \dots = \boldsymbol{\Sigma}_g = \boldsymbol{\Sigma}$, so ist die gepoolte empirische Kovarianzmatrix \mathbf{S}_{tot} ein unverzerrter Schätzer für $\boldsymbol{\Sigma}$. Dieser Fall ist in der Diskriminanzanalyse von besonderer Bedeutung, da er zu sehr handlichen Diskriminanzfunktionen führt.

A 1.2 Grundidee und Methoden der Clusteranalyse

Die Clusteranalyse ist ein Standardverfahren zur Bildung von Gruppen oder Clustern ähnlicher Objekte. Die Ähnlichkeit zwischen Objekten bzw. Gruppen von Objekten wird anhand ihres Abstands in einem Parameterraum definiert. Grundsätzlich unterscheidet man in der Clusteranalyse zwischen hierarchischen und partitionierenden Verfahren (Kaufmann & Rousseeuw, 1992; Steinhausen & Langer, 1977; Späth, 1974).

A 1.2.1 Hierarchische Methoden der Clusteranalyse

Die hierarchischen Verfahren der Clusteranalyse zerfallen in agglomerative und divisive Methoden. In Kapitel 5 wird die agglomerative Methode nach Ward verwendet. Ausgehend von der feinsten Einteilung, in der jedes der N Objekte einen eigenen Cluster darstellt, wird die Distanzmatrix berechnet. Die beiden ähnlichsten Cluster, die mit der geringsten Distanz, werden zu einem neuen Cluster zusammengefaßt und die neue Distanzmatrix berechnet. Dies wird solange wiederholt, bis alle Objekte zu einem Cluster gehören (Schuchard-Ficher, 1980). Der wesentliche Unterschied zwischen verschiedenen Methoden der hierarchischen Clusteranalyse liegt in der Art, wie der Abstand zwischen zwei Clustern R und Q zur Aktualisierung der Distanzmatrix berechnet wird (Kaufmann & Rousseeuw, 1992; Anderberg, 1973). Im Rahmen der Ward-Methode wird der Abstand zwischen zwei Clustern R und Q so definiert, daß durch die Vereinigung der beiden ähnlichsten Cluster der Zuwachs zur Inner-Gruppen-Streumatrix \mathbf{W} in jedem Schritt minimiert wird:

$$d_w^2(Q, R) := \frac{2N_Q N_R}{N_Q + N_R} \|\bar{\mathbf{x}}_Q - \bar{\mathbf{x}}_R\|_2^2 = 2\Delta\mathbf{W} \stackrel{!}{=} \min \quad (\text{A 1.5})$$

mit N_R, N_Q = Anzahl der Objekte in den Clustern
 $\bar{\mathbf{x}}_Q$ = Gruppenmittelwert oder Centroid

Aufgrund der Zerlegung $\mathbf{T} = \mathbf{W} + \mathbf{B}$ maximiert die Ward-Methode daher die Zwischen-Gruppen-Streumatrix \mathbf{B} und führt zu sehr homogenen Gruppen.

Besteht der Eigenschaftsvektor eines Objekts aus Parametern verschiedener Dimension wie z.B. Temperatur, Druck und Länge, so fordern strenge Methodiker wie Anderberg (1973) oder Späth (1974) die Standardisierung der Daten, um alle Parameter gleich zu gewichten. Andere Autoren (Kaufmann & Rousseeuw, 1992; Schuchard-Ficher, 1980) sehen in unterschiedlichen Dimensionen oder Skalen natürliche Gewichte der einzelnen Parameter und raten im Einzelfall sogar von der Standardisierung ab.

A 1.2.2 Partitionierende Methoden der Clusteranalyse

Bei partitionierenden Verfahren wird die Zahl der Gruppen a priori festgelegt. Ausgehend von einer Startpartition, die auch in Form von sogenannten "seeds", d.h. von Clustercentroiden vorgegeben werden kann, wird durch Austausch von Objekten zwischen den Gruppen ein Güte-

kriterium optimiert. Gängige Kriterien sind beispielsweise das Wilkssche Lambda oder die Spur der Inner-Gruppen-Streumatrix \mathbf{W} . Beide Gütemaße werden minimiert. Der Unterschied zwischen einzelnen Methoden der partitionierenden Clusteranalyse liegt vor allem darin, wie oft die Gruppencentroide während eines Clusterschritts neu berechnet werden (Steinhausen & Langer, 1977). Abbildung A 1.1 zeigt das Ablaufschema einer partitionierenden Clusteranalyse nach der "k-means"-Methode. Dabei werden die Gruppencentroide nach jeder einzelnen Objektverschiebung neu errechnet. Da selbst bei kleinen Stichproben eine vollständige Enumeration aller möglicher Gruppierungen viel zu zeitaufwendig ist, werden bei der Suche nach der Minimierung der Gütekriterien Optimierungsverfahren wie das Branch-and-Bound-Verfahren eingesetzt. Daher stellt eine Gruppierung oft nur ein lokales Optimum des Gütekriteriums dar. Das Ergebnis eines partitionierenden Verfahrens sollte deswegen stets auf die Abhängigkeit von der Startpartition bzw. den Clusterseeds und der Reihenfolge der Objekte geprüft werden (Späth, 1974).

A 1.2.3 Kriterien für die Güte einer Gruppeneinteilung

Milligan und Cooper (1985) testeten 19 verschiedene Kriterien für die Güte einer Gruppeneinteilung. Der Pseudo-F-Wert und R^2 wurden als die effizientesten, globalen Kriterien herausgestellt. Der Pseudo-F-Wert ist, analog zum univariaten Fall, proportional zum Verhältnis aus der Spur der Zwischen-Gruppen-Streumatrix \mathbf{B} und der Spur der Inner-Gruppen-Streumatrix \mathbf{W} .

$$F = \frac{\text{spur}(\mathbf{B}) / (g - 1)}{\text{spur}(\mathbf{W}) / (N - g)} \quad (\text{A 1.6})$$

mit g = Anzahl der Gruppen
 N = Anzahl der Beobachtungen

Je größer der Pseudo-F-Wert, desto besser ist die Gruppeneinteilung. Das R^2 entspricht dem Anteil der Gesamtvarianz der durch die Gruppenbildung erklärt wird. Generell steht die Clusteranalyse in dem Ruf, daß sie Strukturen in Daten finden kann, auch wenn sie in Wirklichkeit gar nicht vorhanden sind. Durch "geschickte" Skalierung der Daten und die Wahl geeigneter Methoden und Metriken ist dies mit Sicherheit auch möglich. Nur sind diese Strukturen dann nicht robust, d.h. sie verschwinden bei einem Wechsel der Clusterungsmethode oder bei einer Standardisierung der Daten. Wenn Ergebnisse einer Clusteranalyse vorgestellt werden, sollte daher seriöserweise stets etwas zur Aufbereitung der Daten und zur verwendeten Methode gesagt werden. Sind in einer Stichprobe natürliche Strukturen bzw. Gruppen vorhanden, so werden diese durch die Clusteranalyse gefunden und sind wenig sensitiv für einen Methodenwechsel (Schuchard-Fischer, 1980).

A 1.3 Grundlagen und Idee der Diskriminanzanalyse

Die Diskriminanzanalyse untersucht den Einfluß unabhängiger, metrisch skaliertter Variablen auf eine nominal skalierte Zielgröße. Im vorliegenden Kontext ist die Zielgröße der Gruppenindex der Fließmuster als Ergebnis einer Clusteranalyse. Die unabhängigen Variablen sind die Anfangs-Randbedingungen der zugehörigen Transportexperimente. Ziel ist zu klären, ob bestimmte Klassen bezüglich bestimmter Merkmalskombinationen ausgezeichnet sind, welche Merkmale den größten Anteil an der Erklärung der Gruppeneinteilung haben und welcher Gruppe ein neues Objekt aufgrund seiner Merkmale zugeordnet wird? Formal betrachtet man die Einteilung einer Grundgesamtheit Ω in g disjunkte Teilgrundgesamtheiten (Klassen oder Gruppen) $\Omega_1, \dots, \Omega_g$. Jedem Objekt $\omega \in \Omega$ wird sowohl eine Gruppenzugehörigkeit $k \in \{1, \dots, g\}$ als auch ein p -dimensionaler Eigenschaftsvektor \mathbf{x} zugeordnet. Das Ziel der Diskriminanzanalyse ist das Auffinden einer optimalen Entscheidungsfunktion e auf dem Definitionsbereich oder Merkmalsraum S , die jedem Objekt ω anhand seines Merkmalsvektors eine geschätzte Klassenzugehörigkeit zuordnet.

$$\begin{aligned} e: S &\mapsto \{1, \dots, g\} \\ \mathbf{x} &\mapsto \hat{\mathbf{k}} = e(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (\text{A 1.7})$$

Mithilfe der a-priori-Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Klassenzugehörigkeit $p(k)$ und der Verteilung der Eigenschaftsvektoren innerhalb der Klassen $f(\mathbf{x}|k)$ ergibt sich die a-posteriori-Wahrscheinlichkeit $p(k|\mathbf{x})$, daß ein Objekt mit Eigenschaftsvektor \mathbf{x} zur Gruppe k gehört, als:

$$p(k|\mathbf{x}) = \left(\frac{p(k)f(\mathbf{x}|k)}{\sum_g p(k)f(\mathbf{x}|k)} \right) \quad (\text{A 1.8})$$

Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung bildet die Grundlage für eine empirische Prognose. Meist sind jedoch weder $p(k)$ noch $f(\mathbf{x}|k)$ bekannt, sondern sie müssen anhand einer Lernstichprobe geschätzt werden. Die Fehler, die bei der Klassifikation neuer Objekte auftretenden, lassen sich durch Fehlklassifikationswahrscheinlichkeiten erfassen. Die bedingte Fehler rate $\varepsilon(e|\mathbf{x})$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, daß das Objekt aufgrund des beobachteten Eigenschaftsvektors \mathbf{x} fälschlicher der Klasse l zugeordnet wird, obwohl es zur Klasse k gehört. Die Gesamtfehlerrate ε ergibt sich durch Integration der bedingten Fehlerrate über alle Eigenschaftsvektoren im Merkmalsraum:

$$\varepsilon(e) = \int_S \varepsilon(e|\mathbf{x})f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \quad (\text{A 1.9})$$

Die Bayessche Entscheidungsregel ordnet ein Objekt derjenigen Klasse l zu, für die die a-posteriori-Wahrscheinlichkeit $p(l|\mathbf{x})$ maximal wird. Die Maximum-Likelihood-Regel maximiert die Likelihoodfunktion $L(l|\mathbf{x}) = f(l|\mathbf{x})$. Beide Entscheidungsregeln minimieren die bedingte Fehlerrate (Fahrmeir, 1984), die Bayessche im Falle unterschiedlicher a-priori-Wahrscheinlichkeiten, die ML-Regel für gleiche a-priori-Wahrscheinlichkeiten.

Die eigentliche Zuordnung der Klassenzugehörigkeit zu einem Objekt funktioniert für viele Zuordnungsregeln gleich. Anhand des zugehörigen Merkmalsvektors \mathbf{x} werden g sogenannte Diskriminanzfunktionen $d_i(\mathbf{x})$ ausgewertet und das Objekt wird der Klasse mit dem höchsten Diskriminanzwert zugeordnet. Durch die Diskriminanzfunktionen wird der Merkmalsraum in g disjunkte Klassengebiete D_1, \dots, D_g zerlegt:

$$D_k = \left\{ \mathbf{x} \in S \mid d_k(\mathbf{x}) > d_l(\mathbf{x}), \forall l \neq k \right\} \quad (\text{A 1.10})$$

Dabei werden die Klassengrenzen, auf denen $d_k(\mathbf{x}) = d_l(\mathbf{x})$ gilt, geeignet auf die Gebiete verteilt. Die Einteilung des Merkmalsraums in Klassengebiete erleichtert die Berechnung geschätzter Fehlerraten im Falle geschätzter Zuordnungsregeln.

A 1.3.1 Gütekriterien, Trennschärfe von Parametern und Schätzung der Fehlerrate

Als Kriterium für die Güte der Klasseneinteilung wird getestet, ob sich die einzelnen Klassen wirklich hinsichtlich ihrer Mittelwerte μ der Diskriminanzwerte signifikant unterscheiden:

$$H_0: \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_g \text{ gegen } H_1: \mu_i \neq \mu_j \text{ für mindestens ein Paar } i \neq j$$

Das Wilkssche Lambda Λ ist das multivariate Analogon zu den Fisher-verteiltern Quotienten quadratischer Formen im univariaten Fall und ist Λ -verteilt mit den Parametern p , $N - g$ und $g - 1$.

$$\Lambda = \frac{\det(\mathbf{W})}{\det(\mathbf{W} + \mathbf{B})} = \det(\mathbf{I} + \mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}) = \prod_{k=1}^r (1 + \lambda_k)^{-1} \propto \Lambda(p, N - g, g - 1), \quad r \leq q \quad (\text{A 1.11})$$

- mit
- p = Dimension der Merkmalsvektoren
 - N = Zahl der Beobachtungen
 - g = Zahl der Gruppen bzw. Klassen
 - r, q = Zahl der gebildeten bzw. maximale Zahl der Diskriminanzfunktionen
 - λ_k = Eigenwerte der Matrix $\mathbf{W}^{-1}\mathbf{B}$.

Mit Λ läßt sich eine χ^2 -verteilte Testgröße mit $DF = (p - r)(g - r - 1)$ Freiheitsgraden zum Test der oben genannten Hypothese errechnen (Schuchard-Fischer; 1980). Das setzt normalverteilte Eigenschaftsvektoren innerhalb der Klassen und gleiche Kovarianzmatrizen der Teilgrundgesamtheiten voraus. Trotzdem wird das Wilkssche Λ auch bei verteilungsfreien Verfahren als Gütemaß angewendet (Fahrmeir, 1984).

$$\chi^2 = -\left(N - \frac{p+g}{2} - 1\right) \ln(\Lambda) \quad (\text{A 1.12})$$

Die sogenannte Trennschärfe der einzelnen Diskriminanzfunktionen y_l – als Maß für deren Erklärungsanteil an der Klasseneinteilung – ergibt sich aus deren relativem Eigenwertanteil rea_l . Ebenso läßt sich innerhalb jeder Diskriminanzfunktion y_l der Erklärungsanteil rka_{li} der einzelnen Eigenschaft x_i anhand der standardisierten Diskriminanzkoeffizienten \tilde{a}_{li} bestimmen (Schuchard-Ficher, 1980):

$$\begin{aligned} \text{rea}_l &= \frac{\lambda_{l1}}{\sum_{i=1}^r \lambda_{li}}; \quad \tilde{a}_{li} = \sigma_i a_{li} \\ \text{rka}_{li} &= \frac{|\tilde{a}_{li}|}{\sum_{n=1}^p |\tilde{a}_{ln}|}, \quad \forall l = 1, \dots, r, \quad l = \text{const.} \end{aligned} \quad (\text{A 1.13})$$

mit λ_{l1} = größter Eigenwert der Diskriminanzfunktion y_l

Da auch in Kapitel 5 die Verteilung $f(\mathbf{x}|k)$ der Eigenschaftsvektoren innerhalb der Klassen nur geschätzt werden kann, muß auch die Gesamtfehlerrate geschätzt werden. Große Stichproben werden dazu üblicherweise in eine Lern- und eine Teststichprobe eingeteilt. Der Klassifikationstest nach der "leaving-out-one" Methode liefert auch bei kleinen Stichproben robuste und nahezu unverzerrte Schätzer der Gesamtfehlerrate (Fahrmeir, 1984). Im Rahmen dieses Tests wird zunächst ein Objekt bei der Berechnung der Diskriminanzfunktion nicht berücksichtigt, danach wird die (bekannte) Klassenzugehörigkeit des fehlenden Objekts auf Basis der ermittelten Diskriminanzfunktion vorhergesagt. Dieses Vorgehen wird sukzessive für alle N Objekte der Stichprobe wiederholt. Die geschätzte Gesamtfehlerrate ergibt sich aus dem Verhältnis der Fehlklassifikationen zum Umfang der Stichprobe.

A 1.3.2 Klassische lineare Diskriminanzanalyse: der Ansatz von Fisher

Wie bereits erwähnt, sind in den meisten Fällen weder die a-priori-Wahrscheinlichkeiten $p(k)$ noch die Verteilung der Eigenschaftsvektoren innerhalb der Klassen bekannt, sondern müssen anhand einer Lernstichprobe geschätzt werden. Man unterscheidet zwischen verteilungsfreien Schätzverfahren und solchen, die einen Verteilungstyp für die Klassenverteilung der Eigenschaftsvektoren $f(\mathbf{x}|k)$ voraussetzen. Die klassische, lineare Diskriminanzanalyse nach Fisher geht heuristisch von einem verteilungsfreien Trennkriterium aus, welches im Laufe der Diskriminanzanalyse optimiert wird. Man betrachte zunächst den Fall zweier Gruppen und zweier Eigenschaften mit den zugehörigen Datenmatrizen \mathbf{X}_1 und \mathbf{X}_2 (Schuchard-Ficher, 1980). Durch skalare Multiplikation der Merkmalsvektoren \mathbf{x}_k mit dem Parametervektor \mathbf{a} erhält man die N_k Diskriminanzwerte y_{kn} der N_k Beobachtungen in der Klasse k :

$$y_{kn} = \mathbf{a}' \cdot \mathbf{x}_{kn} \quad (\text{A 1.14})$$

Die Diskriminanzkoeffizienten a_1, \dots, a_p ergeben sich aus der Maximierung folgender Trennfunktion $Q(\mathbf{a})$:

$$Q(\mathbf{a}) = \frac{(\bar{y}_1 - \bar{y}_2)^2}{s_1^2 + s_2^2} = \max$$

$$\bar{y}_k = \mathbf{a}' \bar{\mathbf{x}}_k \quad (\text{A 1.15})$$

$$s_k^2 = \sum_{l=1}^{N_k} (y_{kl} - \bar{y}_k)^2$$

Der Ansatz von Fisher maximiert somit das Abstandsquadrat der y -Schwerpunkte relativ zur Gesamtsumme der quadrierten Abweichungen. Mit der Definition der Inner-Klassen-Streumatrix \mathbf{W} erhält man durch Differenzieren von $Q(\mathbf{a})$ und Nullsetzen der 1. Ableitung die Diskriminanzkoeffizienten \mathbf{a} :

$$s_1^2 + s_2^2 = \mathbf{a}' \mathbf{W} \mathbf{a}$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{W}^{-1} (\bar{\mathbf{x}}_1 - \bar{\mathbf{x}}_2) \quad (\text{A 1.16})$$

Ein zu klassifizierendes Objekt mit Merkmalsvektor \mathbf{x} wird der Klasse 1 zugeordnet, falls $|\mathbf{a}' \mathbf{x} - \bar{y}_1| < |\mathbf{a}' \mathbf{x} - \bar{y}_2|$, sonst wird es Klasse 2 zugeschrieben. Wendet man die Maximum-Likelihood-Regel auf den Zweiklassenfall an und setzt eine Normalverteilung der Merkmalsvektoren voraus, so ergibt sich die gleiche Zuordnungsvorschrift (Fahrmeir, 1984).

Im Mehrklassenfall definiert man $Q(\mathbf{a})$ mit Hilfe der Streumatrizen \mathbf{W} und \mathbf{B} . Die Maximierung von $Q(\mathbf{a})$ führt dann auf folgende Eigenwertgleichung (Steinhausen & Langer, 1977; Fahrmeir, 1984):

$$Q(\mathbf{a}) = \frac{\mathbf{a}' \mathbf{B} \mathbf{a}}{\mathbf{a}' \mathbf{W} \mathbf{a}} \rightarrow$$

$$\mathbf{W}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{a} = \lambda \mathbf{a} \quad (\text{A 1.17})$$

Da der Rang von \mathbf{W} gleich p und der Rang von \mathbf{B} das Minimum aus p und $g-1$ sind, besitzt die Matrix $\mathbf{W}^{-1} \mathbf{B}$ höchstens $q = \min(p, g-1)$ Eigenwerte. Damit ist die Zahl r der Diskriminanzfunktionen y_l auf maximal q beschränkt. Die Zuordnung eines Objekts zu einer Klasse \hat{k} erfolgt so, daß:

$$y_l = \mathbf{a}_l' \cdot \mathbf{x}, \quad l = 1, \dots, r$$

$$\sum_{l=1}^r \mathbf{a}_l' (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_{\hat{k}}) \leq \sum_{l=1}^r \mathbf{a}_l' (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_j), \quad j = 1, \dots, g \quad r \leq q \quad (\text{A 1.18})$$

Anhand der Eigenwerte λ_i der jeweiligen Diskriminanzfunktion y_i läßt sich der zugehörige kanonische Korrelationskoeffizient CR errechnen, das Quadrat dieses kanonischen Korrelationskoeffizient entspricht dem Bestimmtheitsmaß R^2 und mißt den Anteil der Streuung der errechneten Diskriminanzwerte, der sich durch den Gruppenindex erklären läßt. Es gilt:

$$CR_i = \sqrt{\frac{\lambda_i}{1 + \lambda_i}} \quad (A 1.19)$$

A2 Ergänzungen zu Kapitel 3

A 2.1 Das Herbizid Isoproturon

Tabelle A 2.1 zeigt einige Eigenschaften des Herbizids Isoproturon, u.a. auch das in Abschnitt 4.5.2 benutzte Löslichkeitsprodukt.

Tabelle A 2.1: Eigenschaften von Isoproturon (Hoechst AG, 1992, verändert)

| Eigenschaften | |
|---|---|
| Name | Isoproturon |
| Handelsname | Arelon flüssig |
| Hersteller | AgrEvo GmbH |
| Chemische Bezeichnung | N-(4-Isopropyl-phenyl)-N', N'-dimethylharnstoff |
| Klassifikation | Harnstoffderivat |
| Summenformel | $C_{12}H_{18}N_2O$ |
| Molare Masse | 206,32 g/mol |
| Löslichkeit L bei 22 °C | ca. 0.065 g/l |
| Aufwandmenge | 1.0 -2.5 kg/ha |
| erlaubte Höchstmenge in Nahrungsmitteln | 0.2 mg/kg Getreide |
| LD50 (Ratte, oral) | 1826 - 5000 mg/kg Körpergewicht |
| Gefahrensymbol | Xn, mindergiftig |
| Wasserschutzgebiete | keine Auflagen |

A3 Ergänzungen zu Kapitel 4

A 3.1 Farbmuster und Bromidmuster aller Standorte

Die folgenden Abbildungen A 3.1 und A 3.2 zeigen alle Farbmuster bzw. Bromidmuster, die einen Tag nach der Beregnung am jeweiligen Standort aufgenommen wurden. Die Buchstaben Mp gefolgt von einer Zahl bezeichnet die Beregnungsparzelle, die Kennung a1 bzw. b1 bedeutet erstes bzw. zweites Vertikalprofil, beprobt einen Tag nach der Beregnung.

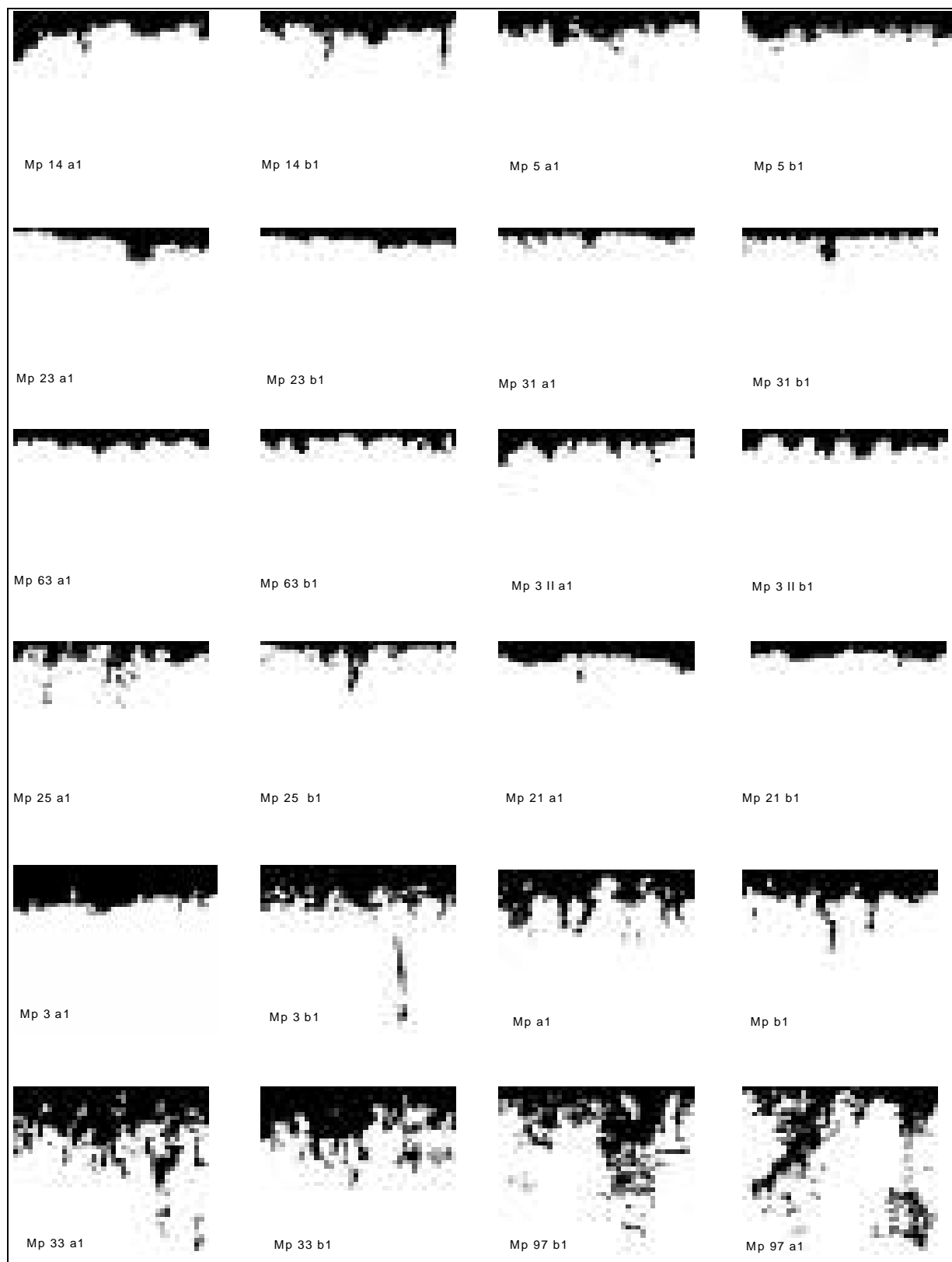


Abb. A 3.1: Farbmuster sämtlicher Beregnungsversuche mit Standortkenung

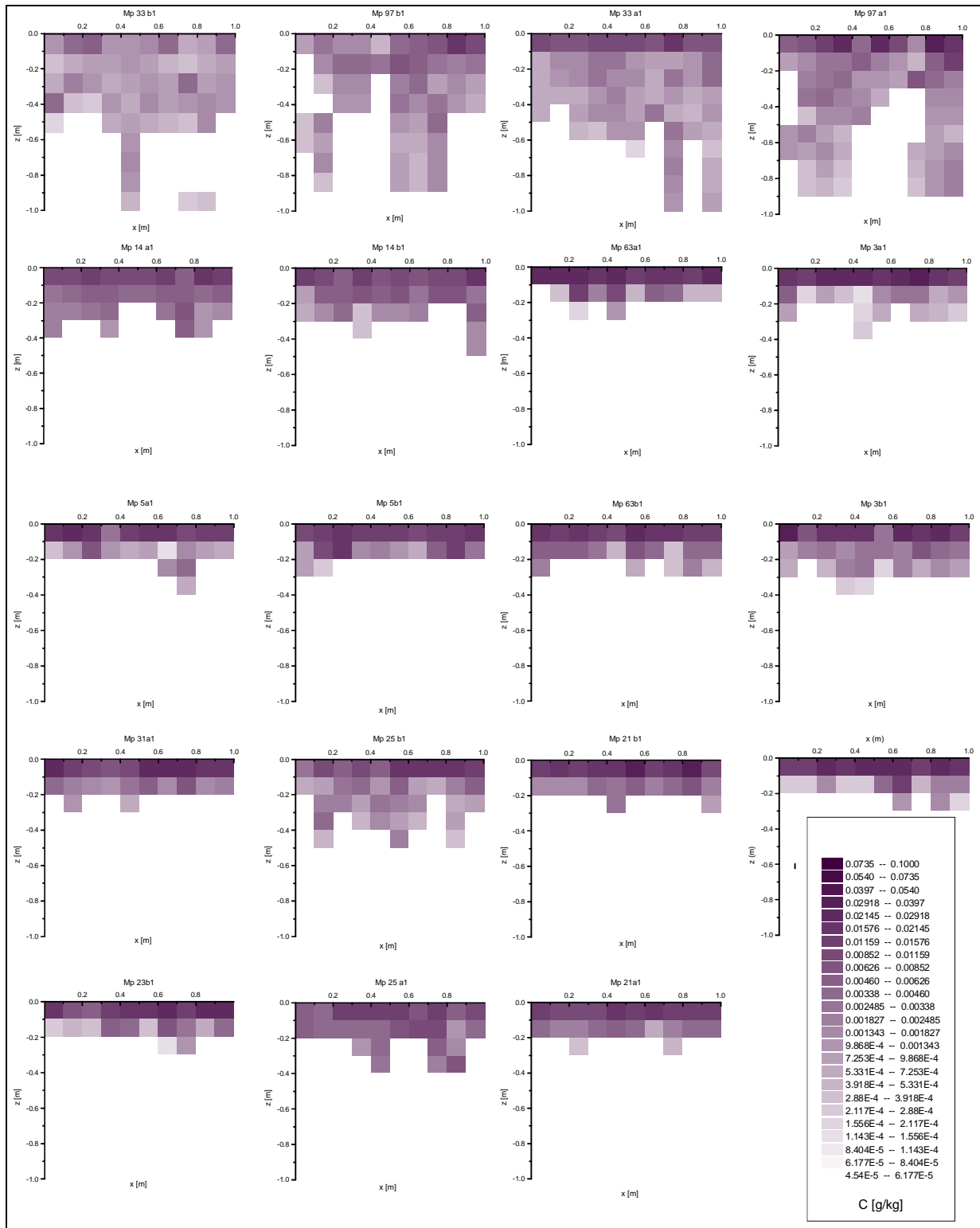


Abb. A 3.2: Bromidmuster aller Standorte

A4 Ergänzungen zu Kapitel 5

A 4.1 Vergleich der Parametersätze zur Fließmusterrepräsentation

In Tabelle A 4.1 sind die Momente der Schwerpunktsverteilung und der Transportdistanz-cdf, deren Tauglichkeit zur Repräsentation der Bromidmuster bei der Clusteranalyse in Abschnitt 5.2.3 verglichen wurde, gegenübergestellt.

Tabelle A 4.1: Mittelwert, Standardabweichung und drittes Zentralmoment der Schwerpunktsverteilung aller Bromidprofile sowie die entsprechenden Momente der Transportdistanz-cdf

| Profil | Schwerpunktsverteilung | | | Transportdistanz-cdf | | |
|------------|--------------------------|---------------|----------------|---------------------------|----------------|-----------------|
| | $\langle Z_{sp} \rangle$ | σ_{sp} | σ_{3sp} | $\langle Z_{cdf} \rangle$ | σ_{cdf} | σ_{3cdf} |
| Mp 14a1 | 0.114 | 0.035 | 6.5E-05 | 0.114 | 0.156 | 2.4E-03 |
| Mp 14b1 | 0.105 | 0.022 | -7.9E-07 | 0.103 | 0.159 | 4.4E-03 |
| Mp 21a1 | 0.073 | 0.007 | -7.3E-07 | 0.071 | 0.148 | 4.9E-03 |
| Mp 21b1 | 0.071 | 0.012 | 2.2E-06 | 0.068 | 0.140 | 4.9E-03 |
| Mp 23a1 | 0.061 | 0.013 | 3.1E-06 | 0.063 | 0.142 | 6.0E-03 |
| Mp 25a1 | 0.113 | 0.041 | 9.2E-05 | 0.112 | 0.160 | 3.8E-03 |
| Mp 23b1 | 0.065 | 0.012 | 4.6E-07 | 0.065 | 0.143 | 5.5E-03 |
| Mp 25b1 | 0.105 | 0.039 | 3.5E-05 | 0.098 | 0.126 | 1.8E-03 |
| Mp 31a1 | 0.066 | 0.008 | 3.3E-07 | 0.064 | 0.142 | 5.5E-03 |
| Mp 33a1 | 0.182 | 0.061 | 1.9E-04 | 0.192 | 0.079 | 7.7E-05 |
| Mp 33b1 | 0.178 | 0.073 | 4.6E-04 | 0.160 | 0.113 | 5.8E-04 |
| Mp 5a1 | 0.063 | 0.012 | 1.4E-06 | 0.061 | 0.143 | 6.5E-03 |
| Mp 5b1 | 0.077 | 0.019 | 3.7E-06 | 0.080 | 0.167 | 6.9E-03 |
| Mp 63a1 | 0.064 | 0.016 | 3.6E-06 | 0.067 | 0.144 | 5.1E-03 |
| Mp 63b1 | 0.075 | 0.014 | -3.0E-08 | 0.075 | 0.142 | 4.2E-03 |
| Mp 97 a1 | 0.191 | 0.071 | -2.0E-04 | 0.176 | 0.081 | -3.5E-04 |
| Mp 97 b1 | 0.155 | 0.071 | 1.5E-04 | 0.148 | 0.091 | 1.2E-04 |
| Mp 3 II a1 | 0.061 | 0.009 | 8.8E-07 | 0.060 | 0.144 | 6.9E-03 |
| Mp 3 II b1 | 0.080 | 0.014 | 1.6E-06 | 0.074 | 0.136 | 4.0E-03 |

A 4.2 Farb- und Bromidmuster nach Gruppen geordnet

Tabelle A 4.2 zeigt die Schwerpunktparameter aller aggregierten Farbmuster. Als Ergänzung zu Unterkapitel 5.4 sind in den Abbildungen A 4.1 und A 4.2 die aggregierten Farb- bzw. der Bromidmuster der Standorte an deren beide Tracer ausgebracht wurden nach Gruppen geordnet dargestellt.

Tabelle A 4.2: Mittelwert, Standardabweichung und drittes Zentralmoment der Schwerpunktsverteilung der aggregierten Farbmuster

| Farbmuster | $\langle z_{sp} \rangle$ | σ_{sp} | σ_{3sp} |
|------------|--------------------------|---------------|----------------|
| Mp 63 | 0.045 | 0.013 | 7.1E-07 |
| Mp 23 | 0.044 | 0.020 | 7.4E-06 |
| Mp 25 | 0.051 | 0.030 | 3.5E-05 |
| Mp 31 | 0.035 | 0.015 | 8.1E-06 |
| Mp 31 | 0.122 | 0.044 | 4.2E-04 |
| Mp 5 | 0.064 | 0.015 | 7.4E-07 |
| Mp 14 | 0.070 | 0.026 | 2.1E-05 |
| Mp 21 | 0.052 | 0.015 | 3.1E-06 |
| Mp 14 | 0.103 | 0.035 | 2.7E-05 |
| Mp 3 II | 0.054 | 0.019 | 3.5E-06 |
| Mp 97 | 0.200 | 0.109 | 6.8E-04 |
| Mp 33 | 0.171 | 0.054 | 2.0E-04 |

Tabelle A 4.3 zeigt die Gruppenzugehörigkeit der Standorte, die sich auf Basis der aggregierten Farb- bzw. Bromidmuster ergibt, sowie die assoziierten Eigenschaftsvektoren.. Die unabhängigen Eigenschaftsvektoren aus Tabelle A 4.3 bilden die Grundlage für die Erklärung der Gruppenzugehörigkeit der Fließmuster auf Basis des jeweiligen Tracers im Rahmen der Diskriminanzanalyse in Abschnitt 5.4.2.

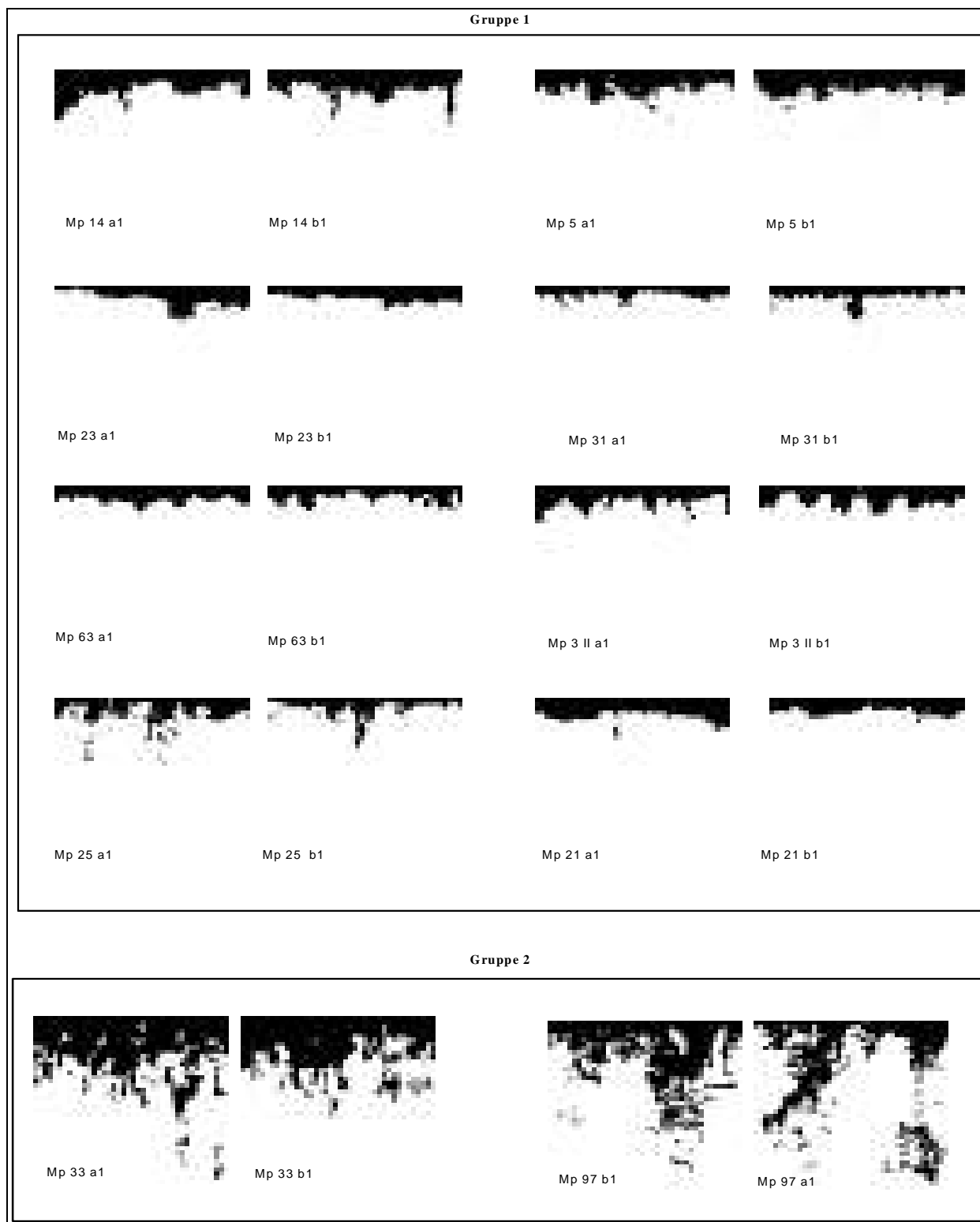


Abb. A 4.1: Gruppierung der aggregierten Farbmuster der Standorte, an denen sowohl Bromid als auch Brilliant Blau ausgebracht wurde

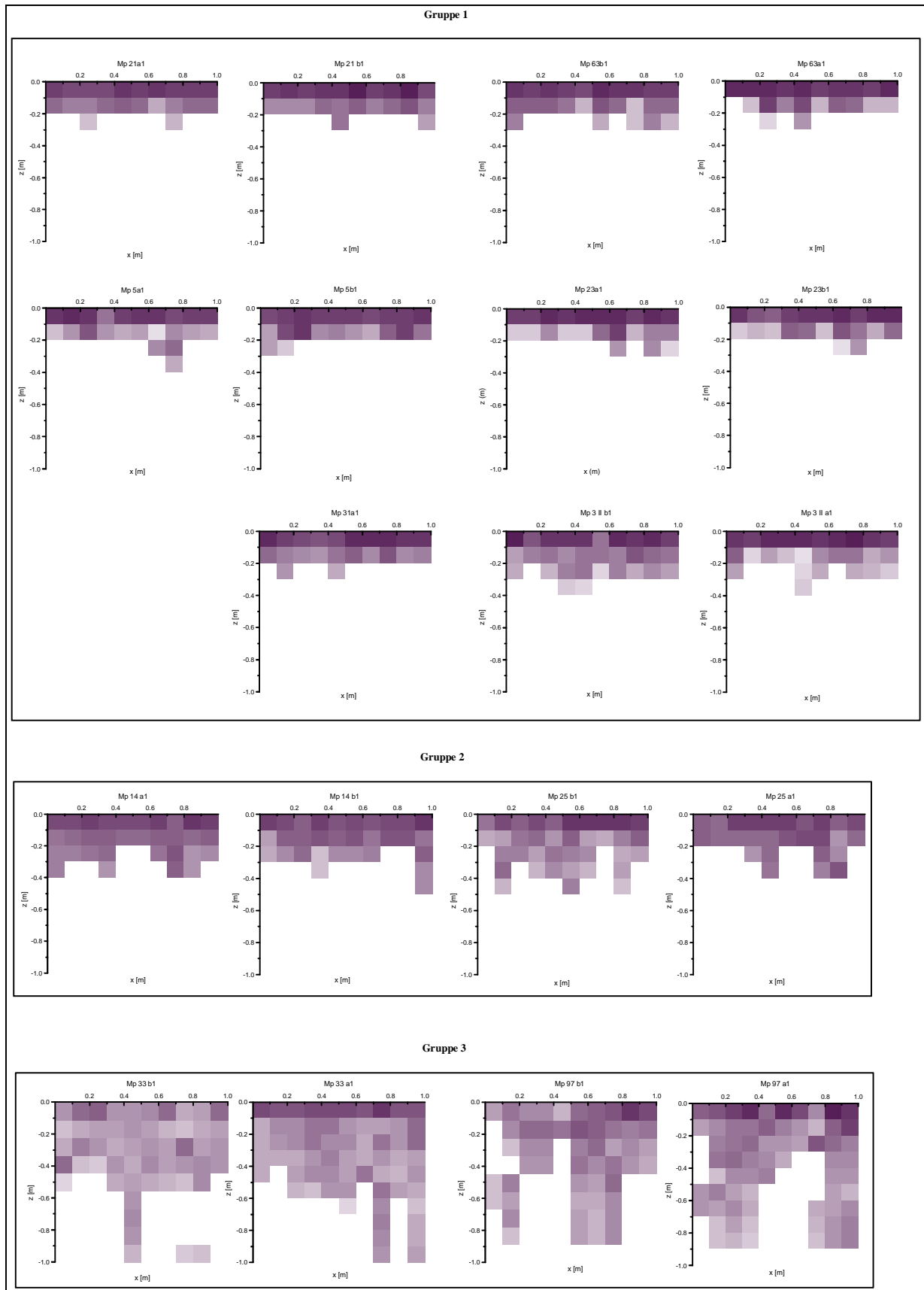


Abb. A 4.2: Gruppierung der Bromidmuster aller Standorte

Tabelle A 4.3: Eigenschaftsvektoren der Standorte sowie deren Gruppenzugehörigkeit k auf Basis der aggregierten Bromid- und der Farbmuster

| Standort | k_{Bromid} | k_{BBlau} | nl [-] | nfl [-] | θ [%] | I [mm/h] | CI [mm] |
|----------|---------------------|--------------------|--------|---------|--------------|----------|---------|
| Mp 21 | 1 | 1 | 0.664 | 0.851 | 16.8 | 10.2 | 22.2 |
| Mp 23 | 1 | 1 | 0.134 | 0.994 | 23.7 | 10.7 | 22.8 |
| Mp 31 | 1 | 1 | 0.044 | 0.988 | 15.9 | 10.9 | 22.9 |
| Mp 63 | 1 | 1 | 0.343 | 0.879 | 20.5 | 10.9 | 21.8 |
| Mp 3 II | 1 | 1 | 0.951 | 0.627 | 17.9 | 10.8 | 23.8 |
| Mp 5 | 1 | 1 | 0.945 | 0.817 | 17.1 | 9.1 | 21.9 |
| Mp 14 | 2 | 1 | 0.794 | 0.206 | 18.0 | 10.7 | 23.4 |
| Mp 25 | 2 | 1 | 0.934 | 0.750 | 25.3 | 10.9 | 22.8 |
| Mp 33 | 3 | 2 | 0.897 | 0.103 | 23.2 | 10.0 | 22.3 |
| Mp 97 | 3 | 2 | 0.996 | 0.004 | 27.8 | 10.6 | 24.4 |

A5 Ergänzungen zu Kapitel 7

A 5.1 Ergänzungen zur Langzeitsimulation

Die Abbildung A 5.1 und A 5.2 zeigen die gemessene und die mit Variante 3 simulierte Bromidverteilung am IUP-Hang am ersten und am letzten Vergleichstermin. In den Abbildungen A 5.3 und A 5.4 sind gemessene und mit Variante 3 simulierte Bromidprofile an Hangtop und Hangmitte für den 8.9.93 und den 24.3.95 gegenübergestellt.

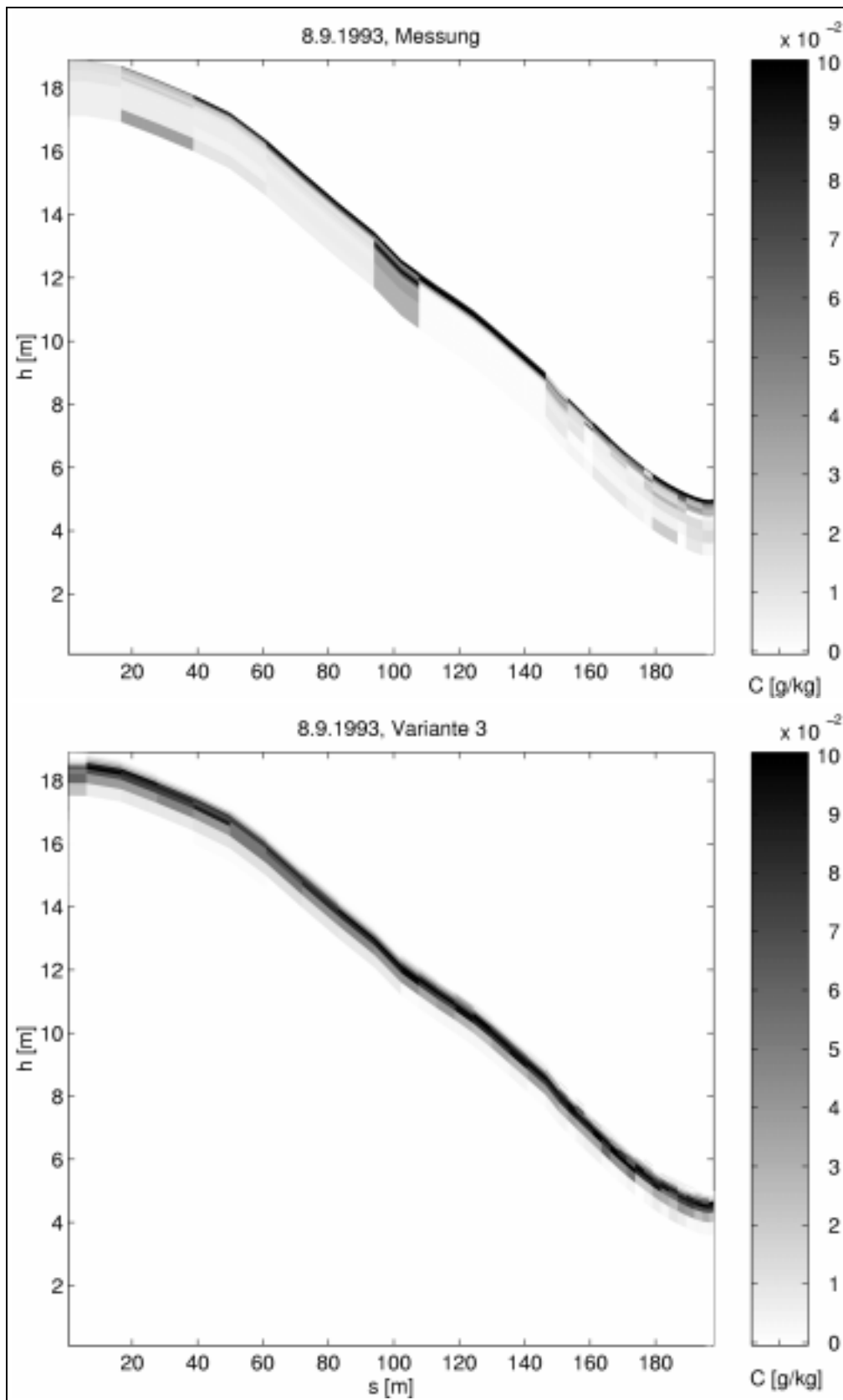


Abb. A 5.1: Vergleich zwischen simulierter und gemessener Bromidverteilung am 8.9.1993

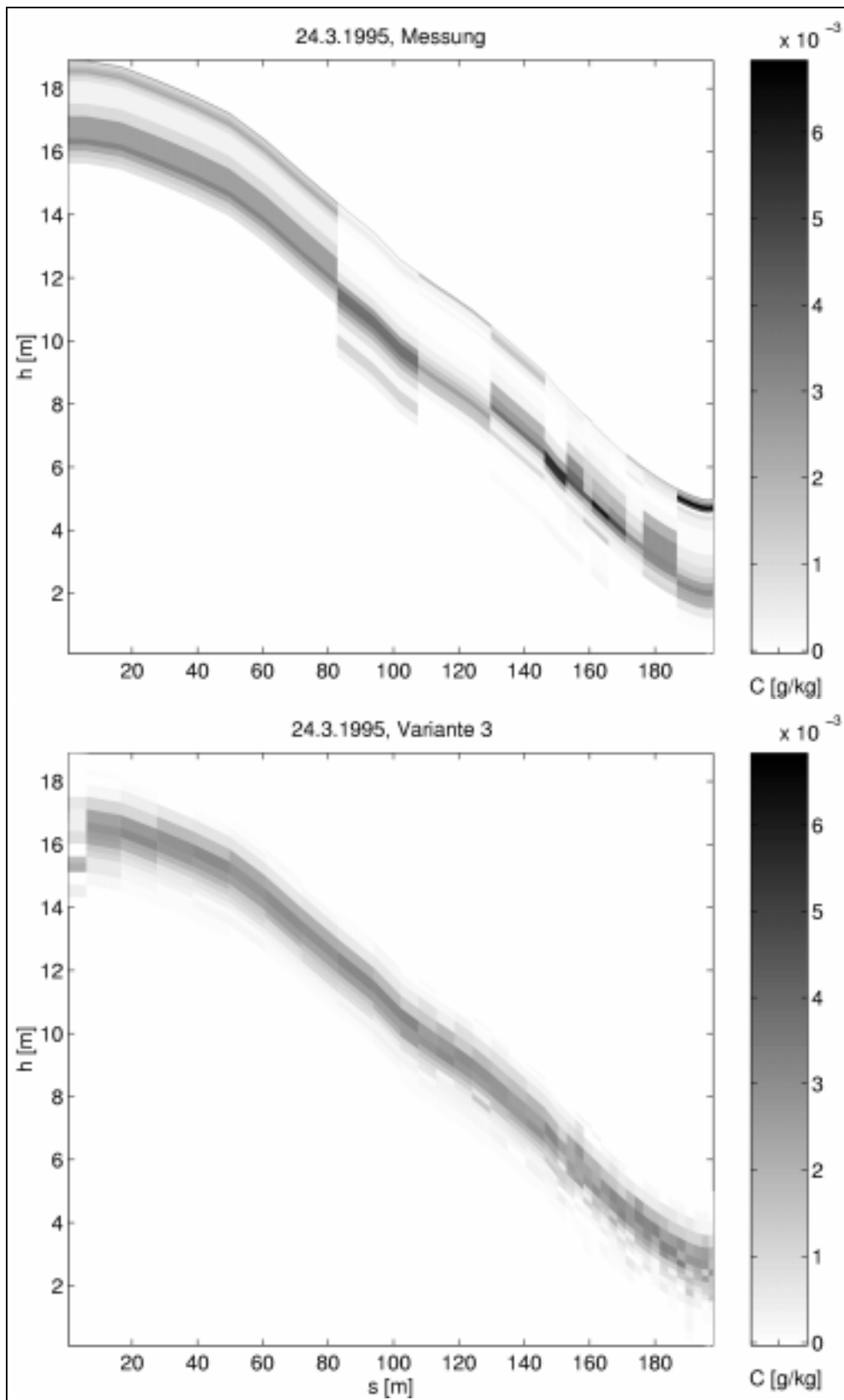


Abb. A 5.2: Vergleich zwischen simulierter und gemessener Bromidverteilung am 24.3.1995

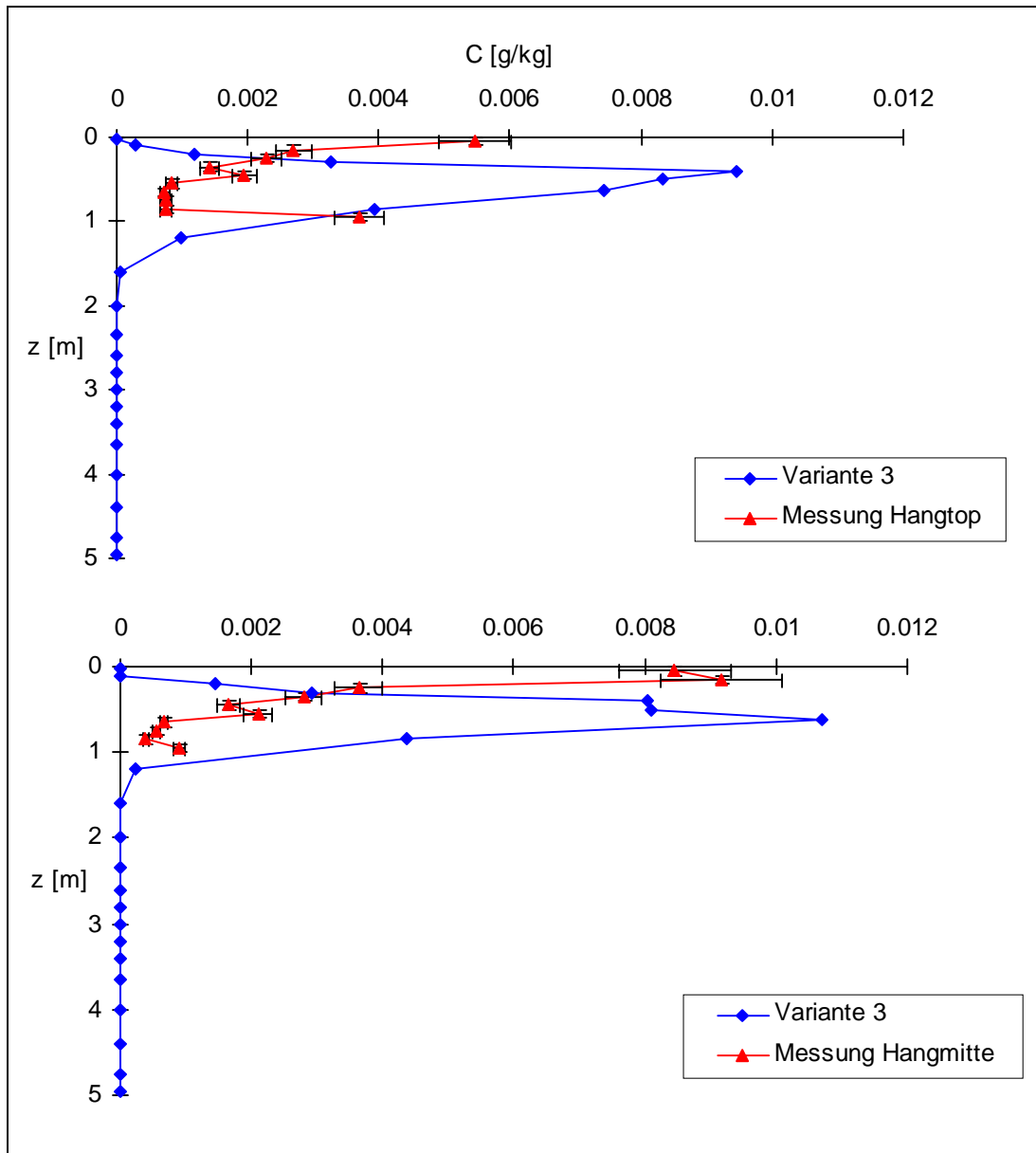


Abb. A 5.3: Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Bromidprofilen am 8.9.1993

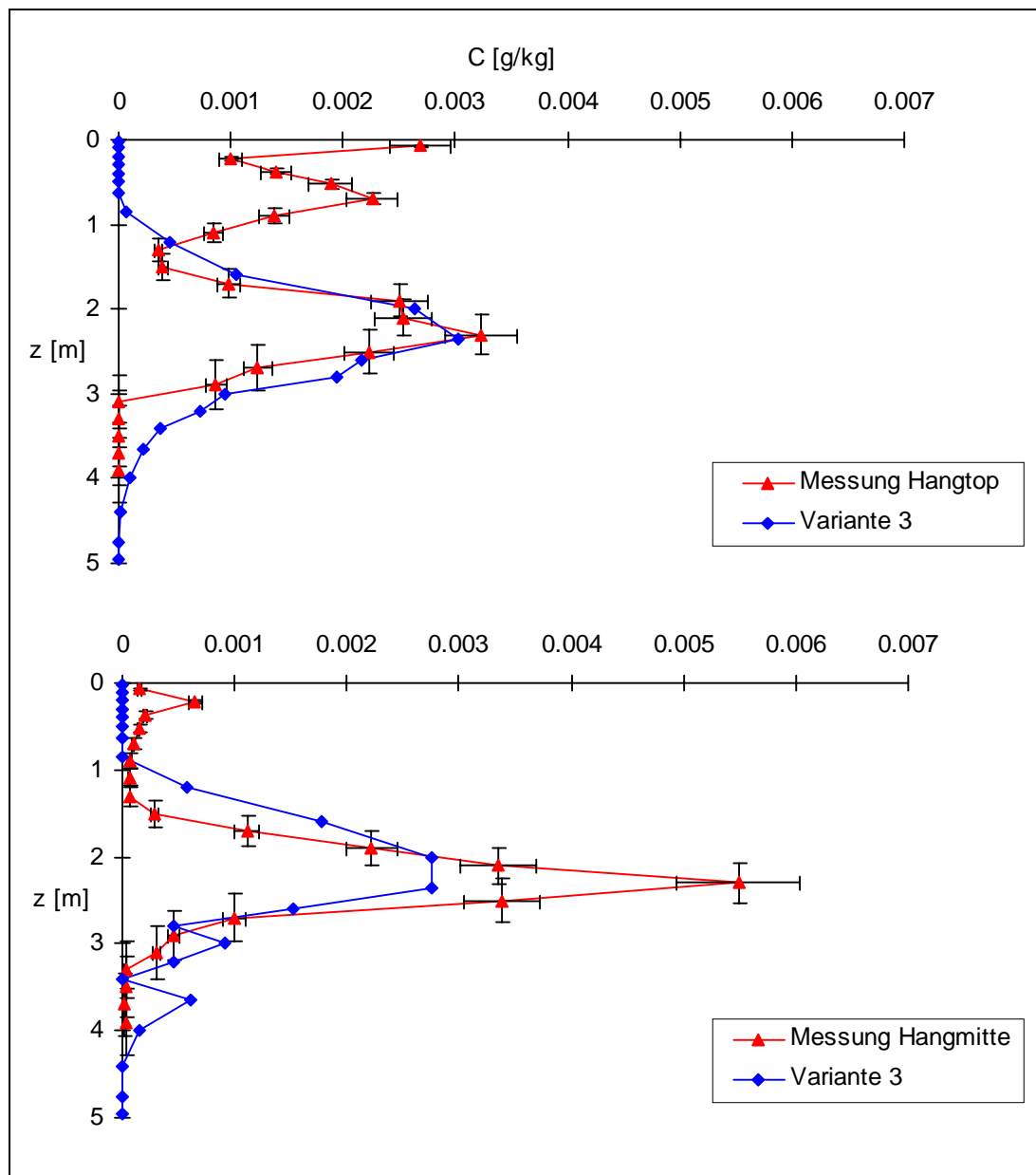


Abb. A 5.4 Vergleich zwischen simulierter und gemessener Bromidverteilung am 24.3.1995

A 5.2 Ergänzungen zur Monte-Carlo-Simulation

A 5.2.1 Ergänzende Abbildungen zur Beregnung der Parzelle Mp 97

Die Abbildungen A 5.5 bis A 5.8 zeigen die Schwerpunktstiefen bzw. Variationsmaße der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp97 bei hoher, niedriger und mittlerer Beregnungsintensität I.

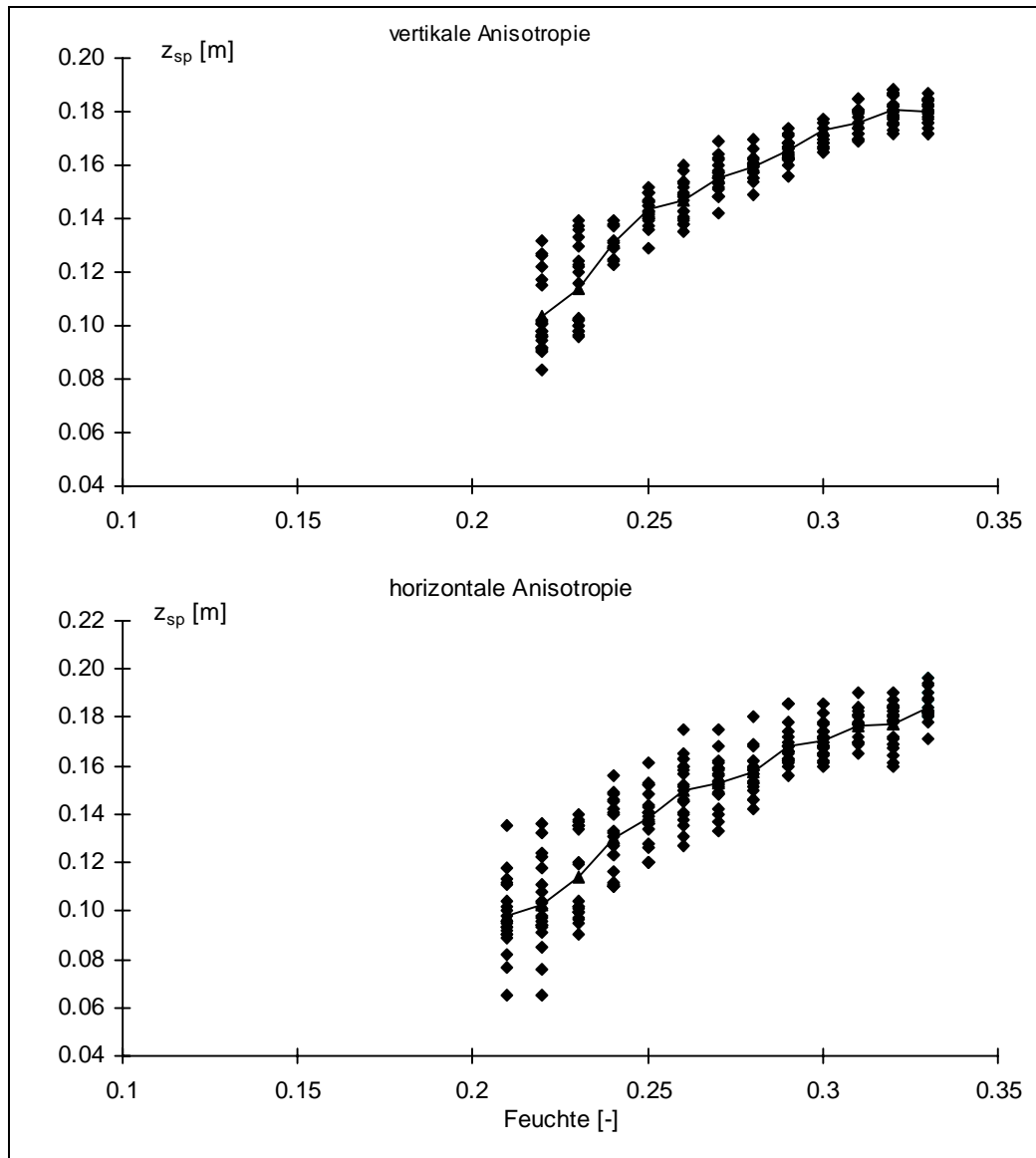


Abb. A 5.5: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$ und bei hoher Intensität von 11 mm/h , aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Der obere Graph zeigt den Fall vertikaler, der untere Graph den Fall horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchten. Die Kurve verbindet die mittleren Schwerpunktstiefen der jeweils 20 Wiederholungen bei fester mittlerer Anfangsfeuchte.

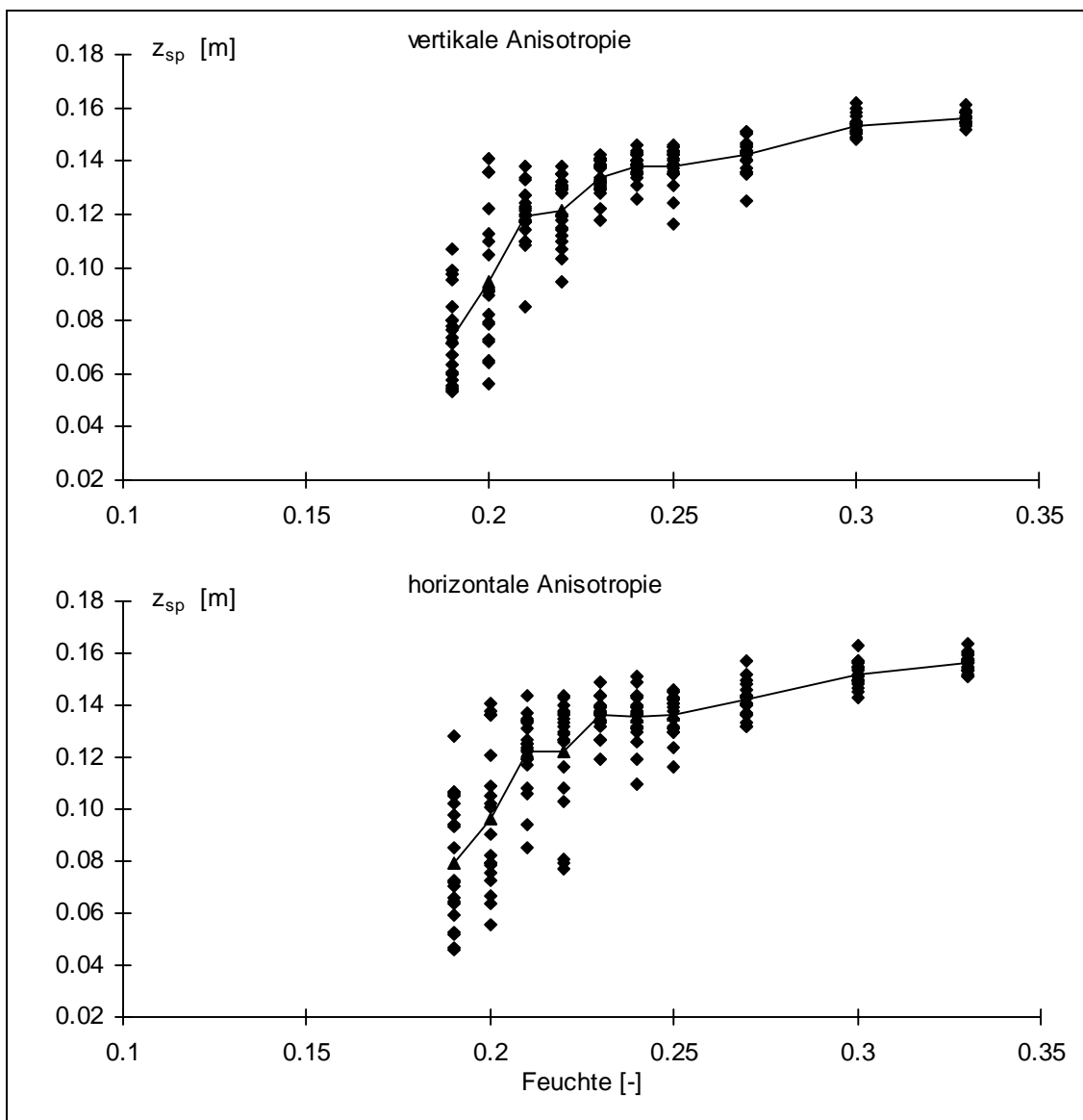


Abb. A 5.6: Schwerpunktstiefen der Fließmuster für die simulierte Berechnung der Parzelle Mp 97 bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$ und bei niedriger Intensität von 2.2 mm/h, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Der obere Graph zeigt den Fall vertikaler, der untere Graph den Fall horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchten. Die Kurve verbindet die mittleren Schwerpunktstiefen der jeweils 20 Wiederholungen bei fester mittlerer Anfangsfeuchte.

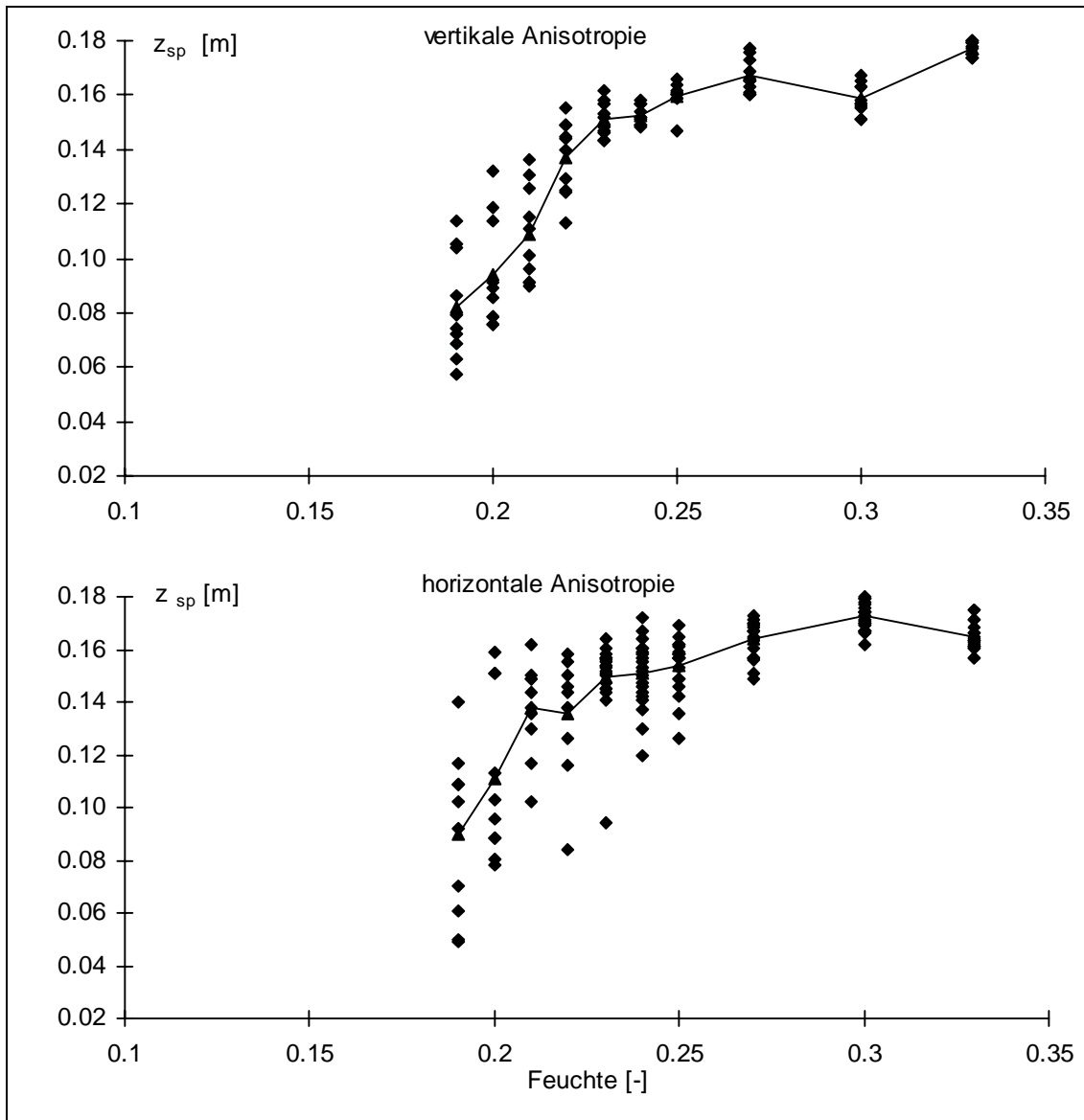


Abb. A 5.7: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle Mp 97 bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$ und bei mittlerer Intensität von 5.5 mm/h , aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Der obere Graph zeigt den Fall vertikaler, der untere Graph den Fall horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchten. Die Kurve verbindet die mittleren Schwerpunktstiefen der jeweils 20 Wiederholungen bei fester mittlerer Anfangsfeuchte.

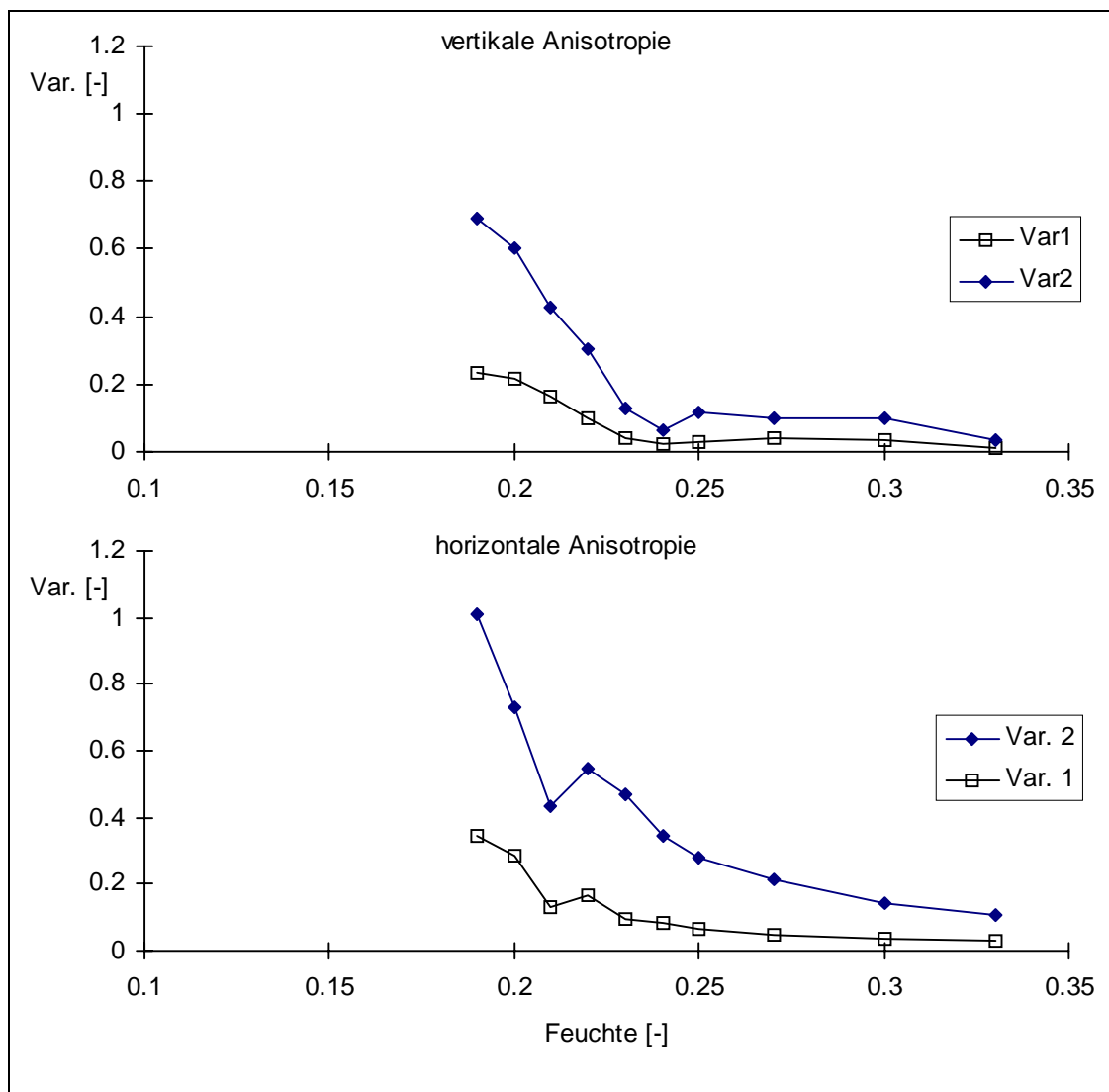


Abb. A 5.8: Streumaße Var1 und Var2 für die simulierte Berechnung der Parzelle Mp 97 bei mittlerer Intensität $I = 5.5 \text{ mm/h}$ und bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Der obere Graph zeigt den Fall vertikaler, der untere Graph den Fall horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchten.

A 5.2.2 Ergänzende Abbildungen zur Beregnung der Parzelle B

Die Abbildungen A 5.9 bis A 5.11 zeigen die Schwerpunktstiefen bzw. Variationsmaße der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle B bei niedriger und mittlerer Beregnungsintensität I.

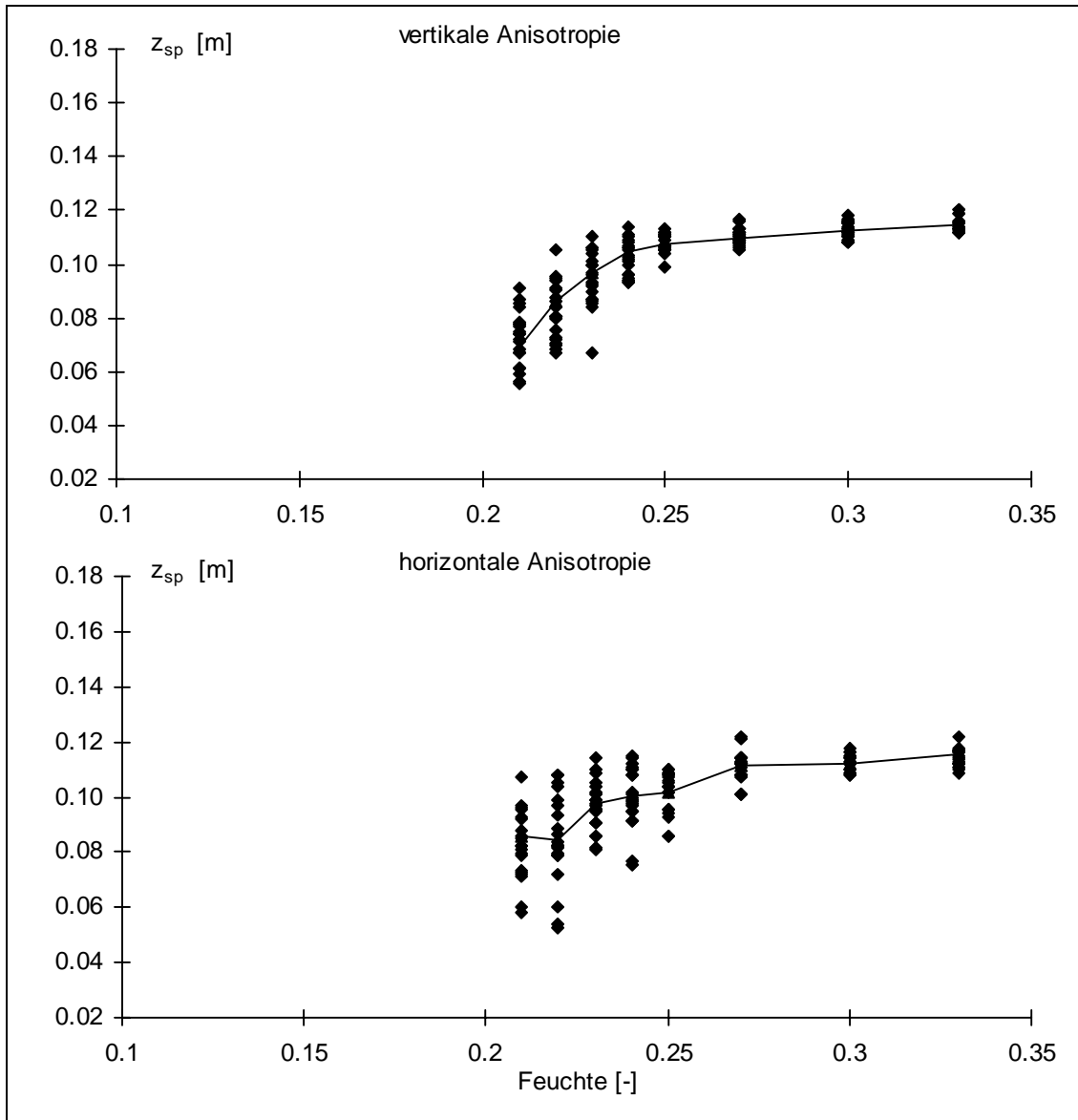


Abb. A 5.9: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Beregnung der Parzelle B bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.8$ und bei niedriger Intensität von 2.2 mm/h , aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Der obere Graph zeigt den Fall vertikaler, der untere Graph den Fall horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchten. Die Kurve verbindet die mittleren Schwerpunktstiefen der jeweils 20 Wiederholungen bei fester mittlerer Anfangsfeuchte.

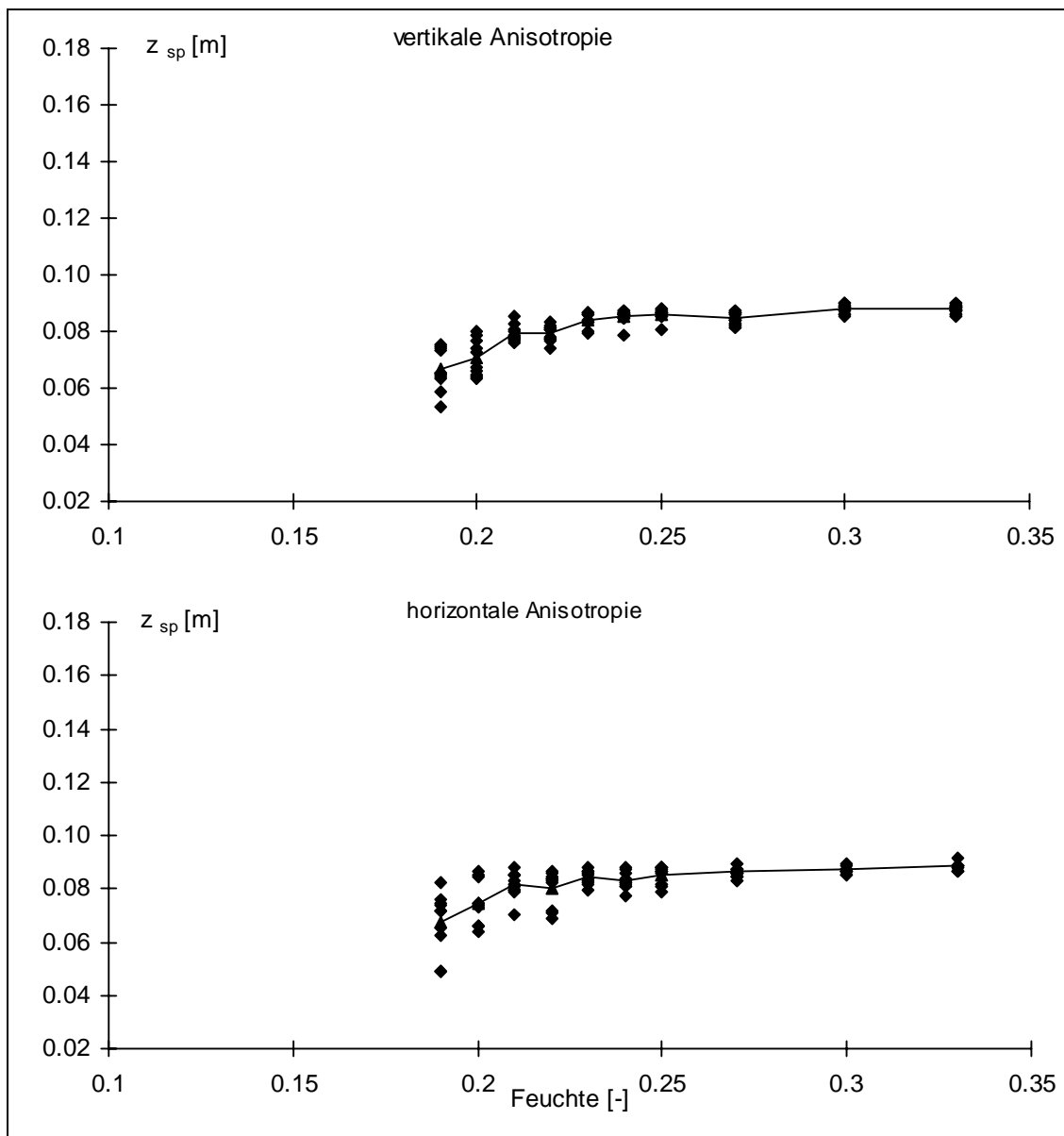


Abb. A 5.10: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster für die Berechnung der Parzelle B bei einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$ und bei mittlerer Intensität von 5.5 mm/h, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Der obere Graph zeigt den Fall vertikaler, der untere Graph den Fall horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchten. Die Kurve verbindet die mittleren Schwerpunktstiefen der jeweils 20 Wiederholungen bei fester mittlerer Anfangsfeuchte.

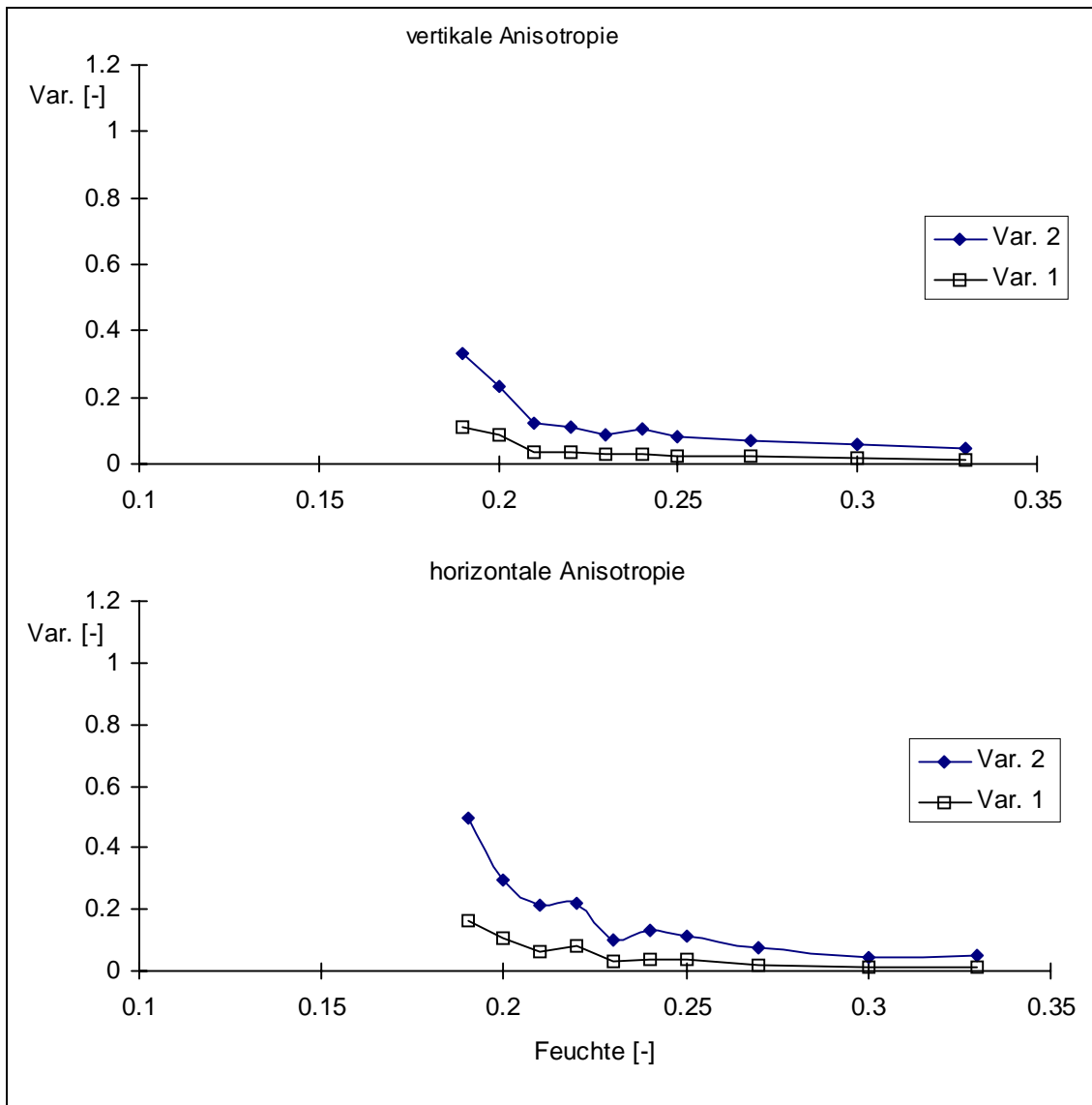


Abb. A 5.11: Streumaße Var1 und Var2 für die simulierte Beregnung der Parzelle B bei mittlerer Beregnungsintensität von $I = 5.5 \text{ mm/h}$ und einem Schwellenwert von $S_0 = 0.6$, aufgetragen gegen die mittlere Anfangsfeuchte. Der obere Graph zeigt den Fall vertikaler, der untere Graph den Fall horizontaler Anisotropie der Anfangsfeuchten.

Abschließend zeigen die Abbildungen A 5.12 und 5.13 die Streuung der Schwerpunktstiefen und den Verlauf der Variationsmaße im gesamten untersuchten Bereich zwischen 12 und 33% mittlerer Anfangsfeuchte für beide Parzellen. Abbildung 5.14 zeigt ein Stabilitätsdiagramm für Parzelle Mp 97.

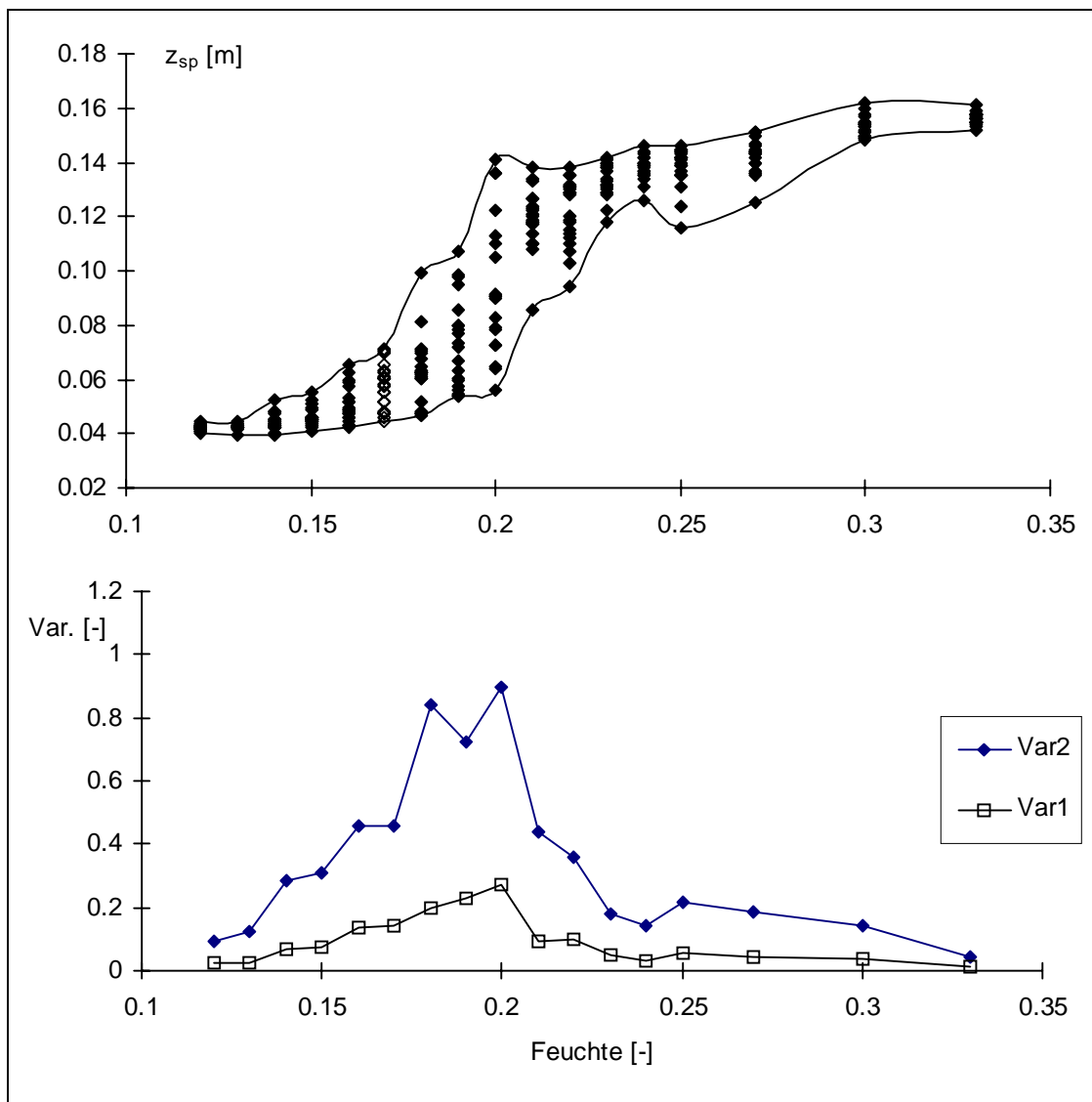


Abb. A 5.12: Schwerpunkstiefen der simulierten Fließmuster und deren Einhüllende für die Beregnung der Parzelle Mp 97 mit niedriger Intensität von $I = 2.2 \text{ mm/h}$ und bei einem Schwellenwert $S_0 = 0.6$ (oberer Graph). Im unteren Graphen sind die entsprechenden Variationsmaße dargestellt, die Anisotropiehaupttrichtung der Anfangsfeuchte ist die Vertikale.

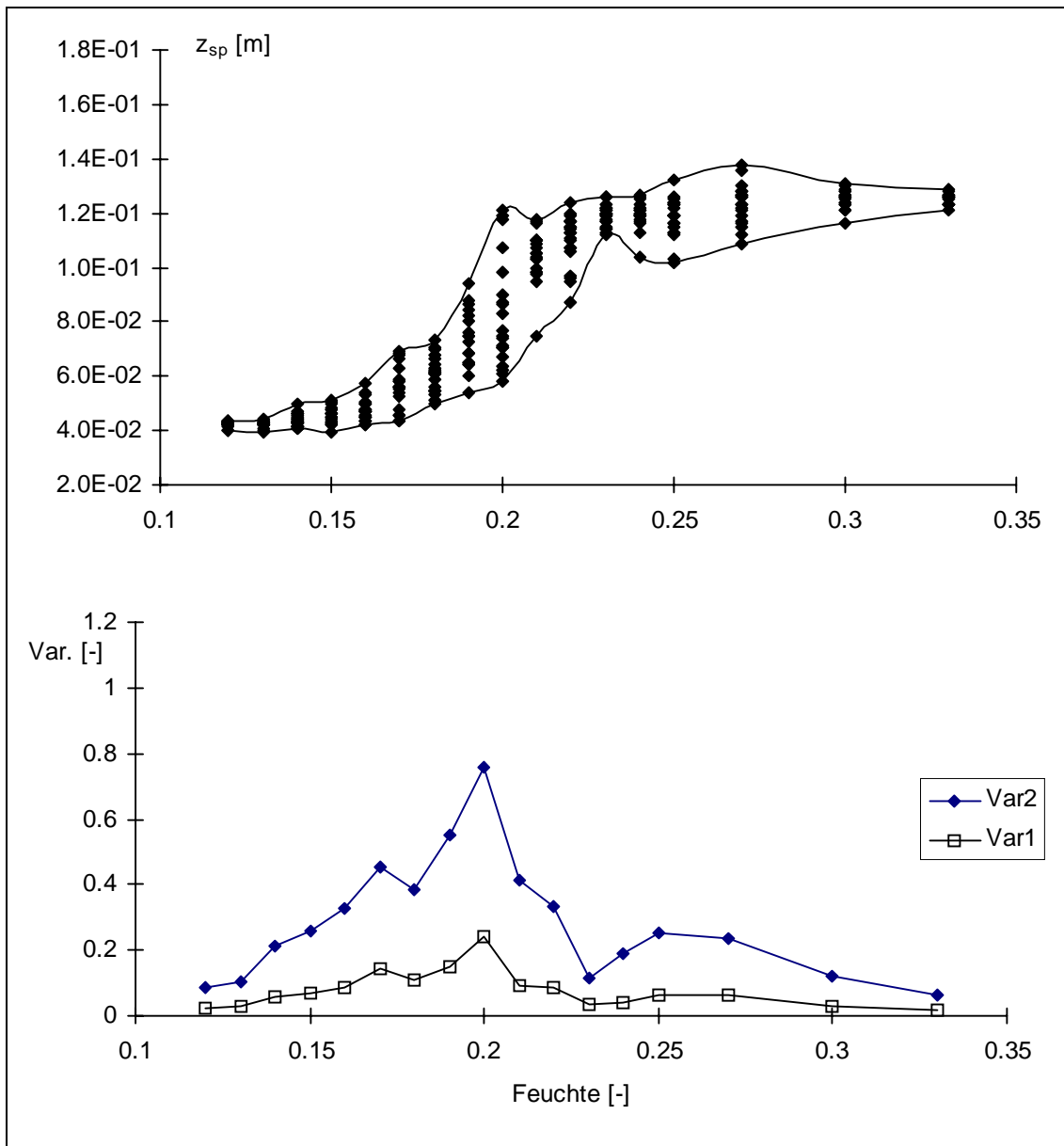


Abb. A 5.13: Schwerpunktstiefen der simulierten Fließmuster und deren Einhüllende für die Berechnung der Parzelle B mit niedriger Intensität von $I = 2.2 \text{ mm/h}$ und bei einem Schwellenwert $S_0 = 0.6$ (oberer Graph). Im unteren Graphen sind die entsprechenden Variationsmaße dargestellt, die Anisotropiehauptrichtung der Anfangsfeuchte ist die Vertikale.

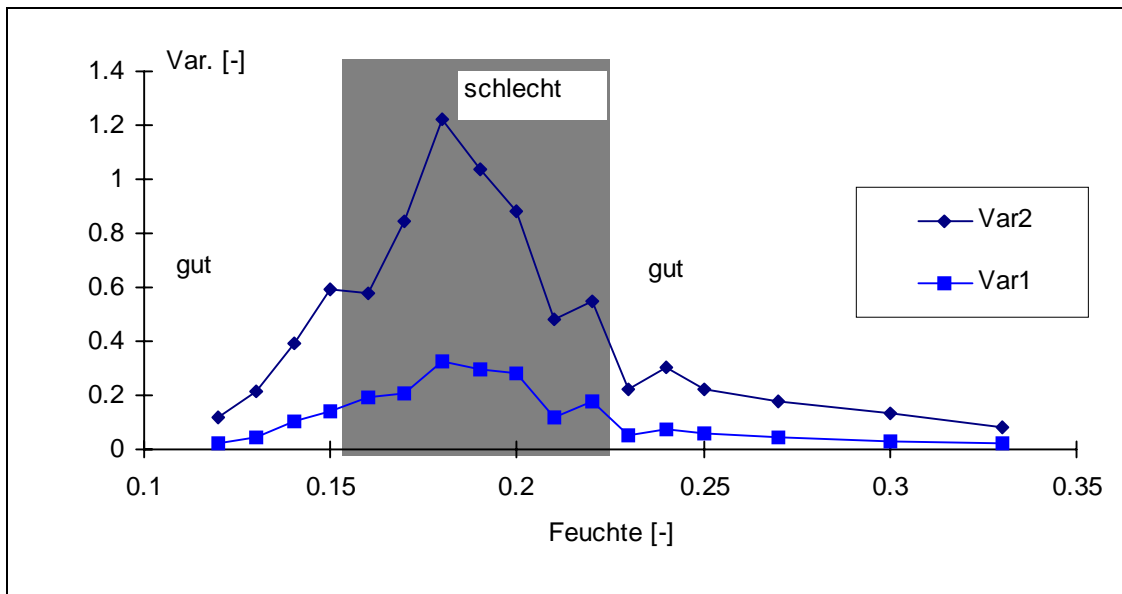


Abb. A 5.14: Stabilitätsdiagramm für die simulierte Berechnung der Parzelle Mp 97, das Variationsmaß Var1 markiert Bereiche guter und schlechter Vorhersagbarkeit.