

**Beiträge des Instituts für Umweltsystemforschung
der Universität Osnabrück**

Herausgeber: Prof. Dr. Michael Matthies

Beitrag Nr. 52

**Bodenwasserhaushalt unter Gras und Wald –
Numerische Simulation der Wasserbewegung im
Großlysimeter St. Arnold mittels Bromidtracer**

Irina Prinz-Tran

Mai 2010



ISSN-Nr. 1433-3805

**Beiträge des Instituts für Umweltsystemforschung
der Universität Osnabrück**

ISSN 1433-3805

Herausgeber

Prof. Dr. Michael Matthies
Universität Osnabrück
Institut für Umweltsystemforschung
Barbarastr. 12

D-49076 Osnabrück

Tel. 0541/969-2575

Fax. 0541/969-2599

E-Mail: matthies@uos.de

<http://www.usf.uni-osnabrueck.de>

© USF – Institut für Umweltsystemforschung, Universität Osnabrück

Universität Osnabrück
FB Mathematik/Informatik
Angewandte Systemwissenschaft

Diplomarbeit

Bodenwasserhaushalt unter Gras und Wald

—

Numerische Simulation der
Wasserbewegung im Großlysimeter
St.Arnold mittels Bromidtracer

Eingereicht von:

Irina Prinz-Tran
Hackländerstr. 29
49074 Osnabrück

April 2010

Betreut von:

Prof. Dr. Michael Matthies
Dr. Jörg Klasmeier

FB Mathematik/Informatik
Universität Osnabrück

Danksagung

Für das Ermöglichen dieser Arbeit am Institut für Umweltsystemforschung und für die vielen Anregungen und Diskussionen bedanke ich mich bei Prof. Dr. Michael Matthies. Für die vertrauensvolle Betreuung dieser Arbeit gilt mein besonderer Dank Dr. Jörg Klasmeier.

Auch ganz herzlich möchte ich allen Mitarbeitern des Instituts danken, die mir Einblick in ihre Forschungsarbeit und ihren Forschungsalltag gegeben haben. Insbesondere bei Dr. Andreas Focks, der mir sowohl mit fachlichen Beiträgen als auch mit moralischer Unterstützung zur Seite stand. Tanja Müller möchte ich für den Einblick in ihre erweiterte Materialsammlung im Bereich der Bodenhydrologie danken. Für vertiefte bilinguale und teils trilinguale Diskussionen, die deutlich über die „tea time“ hinausgingen, bedanke ich mich bei Dr. Olga Aleksandrova.

Auch bedanke ich mich bei Prof. Dr. Jirka Šimůnek für die schnell und offen beantworteten Forumsbeiträge und bei Dr. Roy Kasteel, Prof. Dr. Otto Klemm und Nina Harsch für einen hilfreichen Austausch. Für die Bereitstellung der Daten gilt mein Dank dem Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen (vormals Staatliches Umweltamt Münster), insbesondere Herrn Brandenburg.

Danke, Ba Kien und Fiona, für so Vieles, dass der Platz hier einfach nicht reicht.

Zusammenfassung

Die Großlysimeteranlage St. Arnold in Norddeutschland stellt mit drei 400 m² großen Lysimeterbecken mit unterschiedlichen Vegetationen — Gras, Weymouth-Kiefern und Rotbuchen/Stieleichen — einen naturnahen Untersuchungsstandort dar. Die kontinuierlich erfassten klimatischen Daten sowie die langjährigen Sickerwasserdaten bieten eine hervorragende Grundlage für Untersuchungen des Wasserhaushaltes unter Gras- und Waldbewuchs. In diesem Lysimeter wurde im Zeitraum von 1998 bis 2004 ein Durchbruchversuch mit dem konservativen Tracer Bromid durchgeführt, anhand dessen die vertikale Wasserbewegung in natürlich bewachsenen Böden analysiert werden kann.

Auf dieser Datengrundlage werden in der vorliegenden Arbeit Berechnungen des Wasserhaushaltes, insbesondere durch numerische Simulationen der vertikalen Bodenwasserbewegung mithilfe der Richardsgleichung vorgenommen. Unter Annahme eines konvektiv-dispersiven Stofftransportes werden die Bromiddurchbruchdaten mit der Methode der Momente analysiert. Die mit Hilfe von HYDRUS-1D unter transienten Randbedingungen simulierte Bromidverlagerung liefert hierbei Aussagen bezüglich der hydraulischen Verhältnisse im Boden.

Unter den natürlichen klimatischen Bedingungen wird das Sickerwasserverhalten in den Lysimeterbecken für die drei Vegetationen gut wiedergegeben. Die Güte der berechneten Wasserhaushaltsgrößen fällt unter Gras- und Kiefernbebewuchs vorteilhafter aus als unter Laubbäumen, die durch jahreszeitliche Veränderung beeinträchtigt wird. Die Durchwurzelung der Bäume in den Lysimeterbecken zeigte sich im Vergleich einzelner Wasserhaushaltsgrößen als unsichere Informationsquelle für die Ermittlung des Wasserverlustes durch Wurzelaufnahme. Als Ergebnis für den konvektiv-dispersiven Bromidtransport wird für die Transporttiefe von 350 cm eine Dispersionslänge ermittelt, die für alle drei Lysimeterversuche im Mittel 28.6 cm beträgt. Die gemessenen Bromidkonzentrationen und die entsprechenden Simulationen zeigen in der kumulierten Darstellung eine akzeptable Übereinstimmung. In der zeitlichen Darstellung beobachtet man jedoch in den Simulationen einen verfrühten Durchbruch des Bromids. Durch Simulationen unter Variation der Dispersionslänge konnte diese Größe als Ursache für den verfrühten Durchbruch ausgeschlossen werden.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	ix
Tabellenverzeichnis	xi
1 Einleitung	1
2 Material und Methoden	5
2.1 Lysimeteranlage St. Arnold	5
2.2 Meteorologische und lysimeterbezogene Daten	8
2.3 Bodenbeschaffenheit und hydraulische Eigenschaften	9
2.4 Das Bromid-Tracer Experiment	10
3 Theoretische Grundlagen	13
3.1 Wasserbewegung in der ungesättigten Zone	13
3.2 Evapotranspiration	14
3.3 Blatt- und Streuinterzeption	17
3.4 Transpiration und Wurzelaufnahme	19
3.5 Stofftransport: Konvektions-Dispersions-Gleichung	20
3.6 <i>Transfer Function Model</i> und Methode der Momente	22
4 Ergebnisse und Diskussion	25
4.1 Einstellungen und Ergebnisse der Wasserhaushaltssimulationen	25
4.1.1 Simulationseinstellungen	25
4.1.2 Ergebnisse Graslysimeter	29
4.1.3 Ergebnisse Kiefernlysimeter	32
4.1.4 Ergebnisse Eichen/Buchenlysimeter	34
4.2 Ergebnisse der Bromidversuche und Anwendung der Modelle	38
4.2.1 Quantitative Auswertung der Versuchsdaten für alle drei Lysimeter	38
4.2.2 Charakterisierung der Bromid-Durchbruchskurven mit der Methode der Momente	40
4.2.3 Simulationsergebnisse der Konvektions-Dispersions-Gleichung	43
5 Zusammenfassende Diskussion und Ausblick	53
5.1 Wasserhaushalt	53
5.2 Bromidtransport	54
Literaturverzeichnis	57

Abbildungsverzeichnis

2.1	Grundriss der Lysimeteranlage St.Arnold.	6
2.2	Entwicklung der Stammzahl der Rotbuchen/Stieleichen (a) und der Weymouth-Kiefer (b), mittlerer Stammdurchmesser und mittlere Baumhöhe, sowie abgeschätzter LAI nach Deblonde et al. (1994); Klein (2000). (bearb., nach Harsch et al., 2008)	7
2.3	Bromid-Durchbruchskurven, gemessene Bromid-Konzentrationen im Sickerwasserfluss des Gras-, Eichen/Buchen- und Kiefernlysimeters.	11
3.1	Struktur des Evapotranspirations-Interzeptions-Submodells in LYFE.	17
3.2	Wasseraufnahmefähigkeitsfunktion.	20
4.1	Retentionsfunktionen nach van Genuchten (a,b) und Leitfähigkeitsfunktionen in Abhängigkeit der Saugspannung (c,d) und der effektiven Sättigung (e,f) für die drei Horizonte im Gras- und Laub/Nadel-Lysimeter.	26
4.2	Normierte Wurzelverteilungsfunktionen für Gras-, Laub- und Kiefernbestand.	28
4.3	Gemessene und simulierte Sickerwasserraten im Gras-Lysimeter und Niederschlagswerte im hydrologischen Jahr 1999.	30
4.4	Gemessene und simulierte Sickerwasserraten im Gras-Lysimeter und Niederschlagswerte im hydrologischen Jahr 2000.	30
4.5	Gemessene und simulierte Sickerwasserraten im Nadel-Lysimeter und Niederschlagswerte im hydrologischen Jahr 1999.	32
4.6	Gemessene Niederschlagswerte und berechnete aktuelle Transpiration, Laub- und Streuinterzeptionsverluste im Nadel-Lysimeter im hydrologischen Jahr 1999.	33
4.7	Gemessene und simulierte Sickerwasserraten im Laub-Lysimeter und Niederschlagswerte im hydrologischen Jahr 1999.	35
4.8	Gemessene Niederschlagswerte und berechnete aktuelle Transpiration, Laub- und Streuinterzeptionsverluste im Laub-Lysimeter im hydrologischen Jahr 1999.	35
4.9	(a) Kumulierte Bromidmasse im Sickerwasser und prozentuale Wiederfindungsrate (WFR) (b) Bromidbilanz in der zeitlosen Darstellung, kumulierte Bromidmasse aufgetragen gegen kumuliertes Sickerwasser, anfallend ab dem Applikationszeitpunkt im Gras-, Eichen/Buchen- und Kiefernlysimeter.	39

4.10	Mit der Methode der Momente angepasste <i>Fickian pdf</i> (Gl. 3.20) an die Bromid-Konzentrationen im Sickerwasser der jeweiligen Lysimeter.	42
4.11	Gemessene und simulierte Bromid-Durchbruchskurven im Graslysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse an Bromid mit geschätzter Dispersivität von $\lambda^{(l)} = 26.8$ cm und Variation von λ .	44
4.12	(a) Zeitlose Darstellung der gemessenen und simulierten Bromidmasse pro m^2 im Graslysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse an Bromid unter Variation von λ ; (b) die kumulierte Sickerwassermenge über die Zeit.	45
4.13	Gemessene und simulierte Bromid-Durchbruchskurven im Nadellysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse an Bromid mit geschätzter Dispersivität von $\lambda^{(l)} = 27.3$ cm und Variation von λ .	47
4.14	(a) Zeitlose Darstellung der gemessenen und simulierten Bromidmasse pro m^2 im Nadellysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse unter Variation von λ ; (b) die kumulierte Sickerwassermenge über die Zeit.	48
4.15	Gemessene und simulierte Bromid-Durchbruchskurven im Laublysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse an Bromid mit geschätzter Dispersivität von $\lambda^{(l)} = 31.6$ cm und Variation von λ .	50
4.16	(a) Zeitlose Darstellung der gemessenen und simulierten Bromidmasse pro m^2 im Laublysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse unter Variation von λ ; (b) die kumulierte Sickerwassermenge über die Zeit.	51

Tabellenverzeichnis

2.1	Korngrößenanalyse und Lagerungsdichte der Bodenproben.	9
2.2	Hydraulische Parameter, ermittelt aus dem Verdunstungsversuch. . .	10
4.1	Vegetationsspezifische Eingabeparameter.	27
4.2	Gemessene und berechnete Wasserhaushaltsgrößen im Graslysimeter.	31
4.3	Gemessene und berechnete Wasserhaushaltsgrößen im Nadellysimeter.	34
4.4	Gemessene und berechnete Wasserhaushaltsgrößen im Laublysimeter.	36
4.5	Übersicht der quantitativen Ergebnisse aus Bromidversuchen in den Lysimetern.	38
4.6	Momente und Parameter der <i>Fickian pdf</i> , ermittelt mit der Methode der Momente.	41
4.7	Vergleich der Parameter der <i>pdf</i> , die anhand der Messungen und an- hand der numerischen Ergebnisse der Durchbruchkurven im Grasly- simeter ermittelt wurden.	46
4.8	Vergleich der Parameter der <i>pdf</i> , die anhand der Messungen und an- hand der numerischen Ergebnisse der Durchbruchkurven im Nadelly- simeter ermittelt wurden.	49
4.9	Vergleich der Parameter der <i>pdf</i> , die anhand der Messungen und an- hand der numerischen Ergebnisse der Durchbruchkurven im Laubly- simeter ermittelt wurden.	50

1 Einleitung

Dem Wasserkreislauf auf der Erde kommt eine lebensnotwendige Rolle zu. Die Wasserknappheit und die zunehmende Verschmutzung ober- und unterirdischer Wasserressourcen sind Hauptgründe für das Voranschreiten der Erforschung der Wasserhaushaltsprozesse und des Verbleibs von Substanzen in der Umwelt. Im Bereich der Hydrologie widmen sich die Forschungsaktivitäten unter anderem der Frage, wie aus Niederschlag und Verdunstungsverlusten resultierendes Bodenwasser zur Grundwasserneubildung beiträgt. Weiterführend befassen sich umweltorientierte Problemstellungen mit dem Verbleib und den damit verbundenen Prozessen von Schadstoffen, die mit dem Wasser in den Boden gelangen. Anhand von physikalischen Zusammenhängen und mathematischen Modellen werden die natürlichen Wasserhaushaltsprozesse und die Transportprozesse von Substanzen im Boden beschrieben. Mit Hilfe von experimentellen Zeitreihen können diese Modelle validiert und kalibriert werden.

Um solche Messzeitreihen zu gewinnen, bedient man sich häufig Lysimeteranlagen. „Lysimeter sind Messanlagen zur Bestimmung des Wasserhaushalts eines Bodenkörpers mit bekannten Abmessungen, Eigenschaften und Vegetationsverhältnissen.“ (DVWK, 1996, S.12) Die Großlysimeteranlage St. Arnold bei Rheine stellt solch eine Messanlage mit drei 400 m² großen und 3.50 m tiefen, nicht wägbaren Lysimeterbecken dar. Die Besonderheit der Anlage besteht nicht nur in der Größe sondern auch in drei unterschiedlichen Bepflanzungsarten auf den einzelnen Becken sowie einer seit 1966 geführten Datenerfassung zu Witterungsverhältnissen, Versickerung und Vegetationsentwicklung. Im Übergang von der Labor- zur Feldskala bieten diese Daten die Möglichkeit zur Analyse der ungesättigten Bodenwasserbewegung in einem geschichteten Boden unter natürlichen klimatischen Bedingungen.

Das Verständnis des Transportverhaltens eingetragener Substanzen mit dem Bodenwasser bildet eine weiterführende Motivation für das Betreiben von Lysimeteranlagen und für entsprechende Versuche. Ein an der Anlage St. Arnold im November 1998 durchgeführter Versuch mit dem konservativen Tracer Bromid (Br^-) sollte wie in diversen anderen auf Labor- bis Feldskala durchgeführten Studien Aufschluss über wichtige Prozesse und beeinflussende Parameter des Wasser- und Stoffhaushalts geben. Beim Transport wassergelöster Stoffe sind vor allem zwei physikalische Prozesse relevant: (i) die durch die Bewegung des Bodenwassers auftretende Konvektion und (ii) die zusammengesetzte Dispersion aus der hydrodynamischen Dispersion und der molekularen Diffusion in der Wasserphase.

Dieses oft angewendete einfache Ein-Region-Modell wird durch die Konvektions-Dispersions-Gleichung (*convection-dispersion equation, CDE*) beschrieben. Es wurde unter Berücksichtigung präferenzialer Flüsse und eines physikalischen Ungleich-

gewichts in der Verteilung des Bodenwassers in Makro- und Mikrostrukturen der Bodenmatrix und der damit entstehenden Wirkung auf den Transport zum Zwei-Regionen-Modell weiterentwickelt (van Genuchten & Wierenga, 1976; Šimůnek & van Genuchten, 2008).

Der Umfang der teils kommerziellen Modellierungssoftware im hydrologischen Bereich, die mit numerischen Lösungen der entwickelten Modelle arbeitet, wurde diesbezüglich erweitert. Das zeigt beispielhaft der Modellüberblick der frei verfügbaren Software HYDRUS-1D von Šimůnek & van Genuchten (2008). Mit der Komplexität der Modelle steigt auch die benötigte Parameterzahl, deren Anpassung durch genaue Messungen der hydraulischen Zustände im Boden und den Substanzverteilungen vor allem unter kontrollierten Laborbedingungen möglich ist. So findet sich beispielhaft im Review von Vanderborght & Vereecken (2007) zur Dispersivität bei Transport-Modellierung im Boden eine Spannweite des sensitiven Parameters Dispersionslänge von 0.1 cm bis 481 cm.

Auf Basis der Daten von St. Arnold wurden mehrere Forschungsarbeiten durchgeführt. Zahlreiche Veröffentlichungen sind von Schroeder (1988, 1989, 1992) verfasst worden und befassen sich mit der Dokumentation zur Anlage und mit unterschiedlichen Aspekten des Wasserhaushaltes, wie z.B. Niederschlag, Interzeptions- und Evapotranspirationsverluste, Sickerwasserraten und Grundwasserneubildung. Eine Trendanalyse über die 40-jährige Datenreihe hat Harsch et al. (2008) veröffentlicht. Klein (2000) und Grobe (2003) haben sich mit der Entwicklung des Modells LYFE (LYsimeter outFlow and Evapotranspiration model) zur Modellierung der Wasserhaushaltsprozesse beschäftigt. Die Kalibrierung von LYFE wurde anhand der Lysimeterdaten aus den Jahren 1966 bis 1999 durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Arbeiten bilden die Grundlage für die eindimensionale Modellierung der vertikalen Wasserbewegung und des Bromidtransports in der ungesättigten Zone mit der Software HYDRUS-1D.

In dieser Arbeit wird das Ziel verfolgt, das Verlagerungsverhalten von Bromid unter natürlichen klimatischen Versuchsbedingungen am Großlysimeter St. Arnold unter verschiedenen Vegetationen mit Hilfe des Konvektions-Dispersions-Modells wiederzugeben.

Aus diesem übergeordnetem Ziel der Arbeit leiten sich folgende einzelne Aufgabenstellungen ab:

- a) Bilanzorientierte Analyse und statistische Auswertung der Ergebnisse aus den Bromidversuchen in den drei Lysimeter-Becken
- b) Simulation der Sickerwasserbewegung unter Abschätzung der Interzeptions- und Evapotranspirationsverluste unter Berücksichtigung der Vegetation
- c) Simulation des Bromid-Transports mittels der Konvektions-Dispersions-Gleichung.

In diesem Rahmen sollen zwei wesentliche Fragestellungen geklärt werden: Wie ist der Einfluss der Vegetation auf die Bromidverlagerung zu bewerten und inwiefern lassen sich sinnvolle Parameter für die Modellierungen ableiten?

Zur Simulation der Bodenwasserbewegung und des Transports wird die Software HYDRUS-1D Version 4.12 Šimůnek et al. (2009) verwendet. Dabei werden auch die Möglichkeiten und Grenzen der mit der Software zur Verfügung gestellten Funktionalitäten speziell unter diesen natürlichen klimatischen Versuchsbedingungen und Vegetationsständen beleuchtet.

In der Arbeit wird im Kapitel 2 eine Beschreibung der Lysimeteranlage und der Versuchsdurchführung, sowie ein Überblick der zur Verfügung stehender Daten gegeben. Im Kapitel 3 werden die mathematischen Modellierungskonzepte für Bodenwasserbewegung sowie für Stofftransport im Boden erläutert. Anschließend werden im Kapitel 4 die Ergebnisse aus den Bromid-Versuchen und aus den Simulationen für alle drei Lysimeter präsentiert. Die Simulationsergebnisse werden unter Berücksichtigung der Aufgabenstellung dieser Arbeit diskutiert und im Kapitel 5 zusammengefasst.

2 Material und Methoden

2.1 Lysimeteranlage St. Arnold

Die Großlysimeteranlage wurde im Jahr 1965 vom Staatlichen Umweltamt (STUA) Münster (ehemals: Wasserwirtschaftsamt) in Betrieb genommen. Seitdem werden meteorologische und lysimeterbezogene Daten auf täglicher Basis erfasst. Der Standort der Lysimeteranlage befindet sich in der Gemeinde St. Arnold bei Rheine in Nordrhein-Westfalen ($52^{\circ}13' \text{ N}$, $7^{\circ}24' \text{ E}$). Der Standort gehört geologisch zum „münsterländischen Kiessandzug“ und liegt auf einer Höhe von 52 m über N.N. Der höchstmögliche Grundwasserstand liegt bei 3.75 m. Der Boden wird als Podsol klassifiziert, wobei Sand eine dominante Fraktion von über 80 % des Gewichts aufweist.

Auf dem Gelände befinden sich drei $20 \text{ m} \times 20 \text{ m}$ große, nicht wägbare Becken mit einer Tiefe von 3.50 m (siehe Abb. 2.1). Die Wände und die Lysimeterbasis der einzelnen Becken sind in Beton gegossen und mit einem doppelten Bitumenanstrich versehen worden, so dass der Bodenmonolith von der Umgebung isoliert ist. Die leicht geneigte Lysimeterbasis ist mit Drainagerohren ausgelegt, die das Bodenwasser in einen Auffangkessel ableiten. Bei der Errichtung der Anlage wurden die drei Horizonte des mittelsandigen Podsols getrennt entnommen und in die Becken so gut wie möglich in gleicher Lagerungsweise wieder eingefüllt. Detaillierte Aufzeichnungen zur Errichtung der Anlage geben Prenk & Flender (1965), weiterführend wurde die Wartung und Datenerfassung auf dem Gelände von Schroeder (1975, 1988, 1989, 1992) dokumentiert.

Nach einer Konsolidierungszeit kann angenommen werden, dass sich das Bodengefüge und das Strömungsverhalten in den Becken sich zunehmend den ungestörten Verhältnissen wieder angeglichen haben. An die Drainagerohre ist keine Saugspannung angelegt, das heißt, das Bodenwasser staut sich am unteren Beckenrand bis zur Sättigung, somit herrscht unten eine „*zero-tension*“-Randbedingung. Da oberflächlicher und seitlicher Abfluss baulich verhindert werden, erfüllt ein Lysimeter die Massenbilanz in Form der Wasserhaushaltsgleichung:

$$N = aET + I + Q + \Delta\theta \quad (2.1)$$

N Niederschlag [$L \Delta T^{-1}$]

aET tatsächliche Verdunstung (*actual evapotranspiration*) [$L \Delta T^{-1}$]

I Interzeptionsverlust [$L \Delta T^{-1}$]

Q aufgefangener Sickerwasserfluss [$L \Delta T^{-1}$]

$\Delta\theta$ Änderung des Bodenwassergehalts [$L \Delta T^{-1}$].

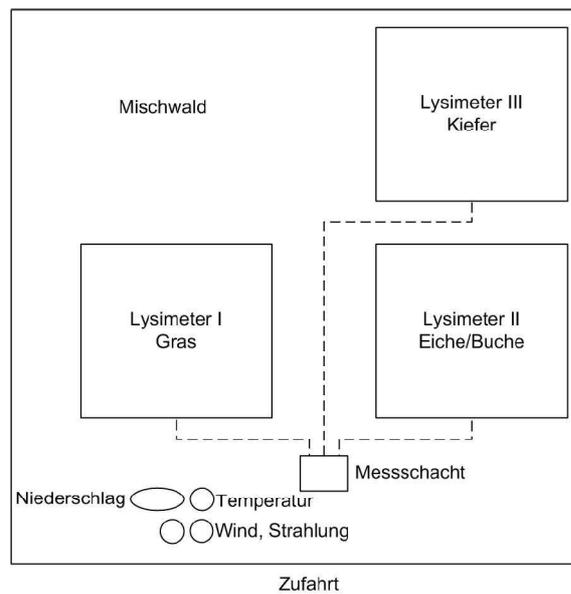


Abbildung 2.1: Grundriss der Lysimeteranlage St. Arnold.
(Quelle: www.staatliches-umweltamt-muenster.de)

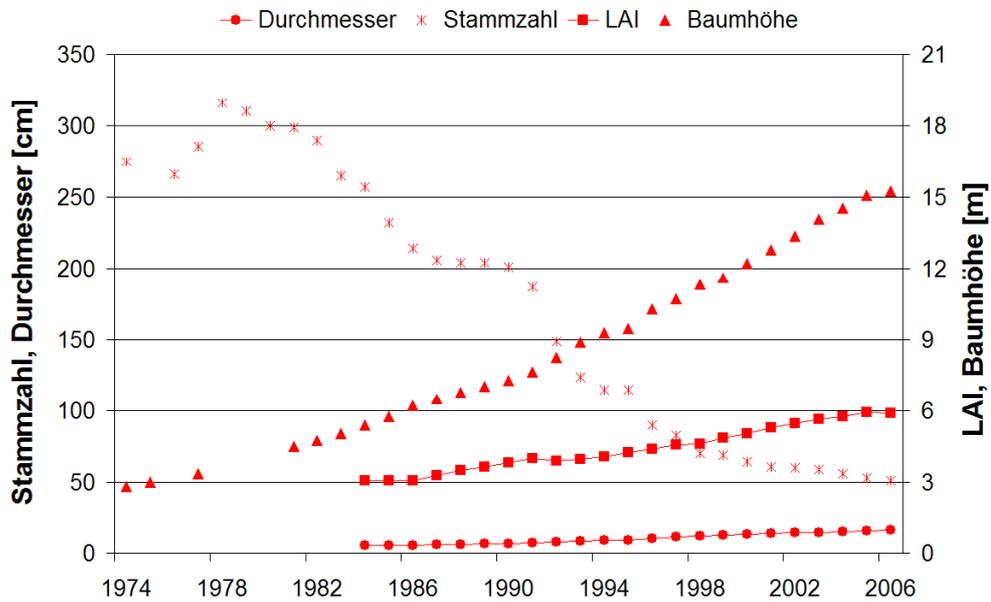
Die drei Becken wurden verschieden bepflanzt, um einen Vergleich der Wasserbilanz und der Grundwasserneubildung unter einer Grasvegetation, einer Nadel- und einer Laubwaldvegetation zu ermöglichen. Die natürliche und aufgeforstete Entwicklung der Vegetationsbestände wird von Schroeder (1975, 1992) und Klein (2000) dokumentiert.

L1 (Gras): Die Lysimeterfläche L1 ist seit September 1965 mit Gras bepflanzt. Die Grasdecke wird einmal jährlich vertikutiert und einige Male gemäht, so dass vorwiegend eine Höhe von 0.12 m vorzufinden ist.

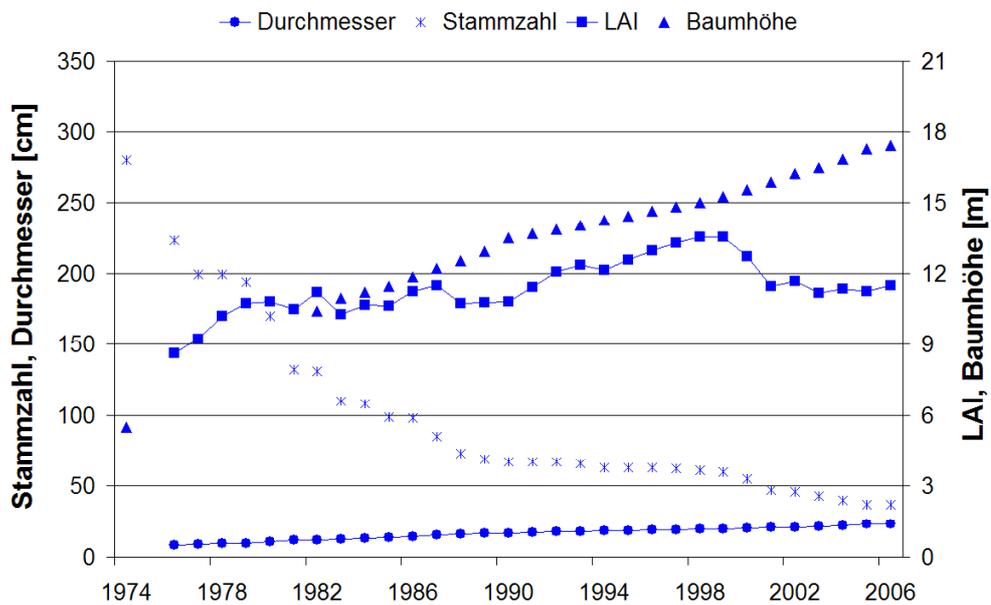
L2 (Eiche/Buche): Auf dem Lysimeter L2 wurde der ehemals angelegte Mischlaubbestand seit 1970 zu Stieleichen-Rotbuchen-Bestand (*Quercus robur*, *Fagus sylvatica*) vereinheitlicht. Die anfängliche Stückzahl von 275 jungen Bäumen reduzierte sich auf 83 Bäume im Jahr 1997, die mit 30 Jahren eine mittlere Höhe über 11 m erreichten. Die Entwicklung der Laubbäume zeigt die Abbildung 2.2a.

L3 (Kiefer): Auch auf der Lysimeterfläche L3 wurde zwischen 1965 und 1972 der vorerst angelegte Kiefern-Mischbestand zu einem Weymouth-Kiefern-Bestand (*Pinus strobus*, Strobe) normiert. Hier sank die anfängliche Zahl an Bäumen von 280 im jungen Bestand auf 62 ausgewachsene Kiefern im Jahr 1997 mit einer Bestandshöhe von fast 15 m. Die Entwicklung der Kiefern wird in Abbildung 2.2b dargestellt.

Als abkürzende Schreibweise werden im folgenden die Bezeichnungen Gras (G), Laub (L) und Nadel (N) repräsentativ für die entsprechend bepflanzten Lysimeterbecken verwendet.



(a) Rotbuche/Stieleiche



(b) Weymouth-Kiefer

Abbildung 2.2: Entwicklung der Stammzahl der Rotbuchen/Stieleichen (a) und der Weymouth-Kiefer (b), mittlerer Stammdurchmesser und mittlere Baumhöhe, sowie abgeschätzter LAI nach Deblonde et al. (1994); Klein (2000). (bearb., nach Harsch et al., 2008)

2.2 Meteorologische und lysimeterbezogene Daten

Die meteorologischen Daten werden seit der Inbetriebnahme 1965 in hydrologischen Jahreszyklen (vom 01. November bis 31. Oktober) vom STUA aufgezeichnet. Dazu werden täglich in der Wetterstation am Graslysimeter folgende Werte erfasst:

- Freilandniederschlag [mm]
- Mittlere Lufttemperatur [$^{\circ}C$]
- Mittlere Luftfeuchte [%]
- Sonnenscheindauer [h]
- Windgeschwindigkeit in 3, 6 und 9 m Höhe [$m s^{-1}$].

In St. Arnold sind mehrere Hellmann-Niederschlagsmesser in 1 m Höhe und eine Messgrube in Bodenniveau installiert. Der durch den Regenschirm erfasste Niederschlag ist aufgrund der Windverluste, Benetzungseffekte und Verdunstung fehlerbehaftet und weicht vom tatsächlichen Niederschlag ab. Die systematischen Messfehler und Korrekturmöglichkeiten des Hellmann-Niederschlagsmessers werden von Sevruk (1981) und Richter (1995) erörtert, bleiben hier aber wegen der Unsicherheiten in den Korrekturannahmen unberücksichtigt. Um Fehler durch Windverluste auszublenden, werden die in Bodenniveau gemessenen Niederschlagswerte verwendet. Im Vergleich zu den Messungen in 1 m Höhe dokumentiert Klein (2000) 2.3 % mehr Niederschlag. Die mittlere jährliche Niederschlagsmenge von 1965 bis 2006 liegt bei 792 mm/a. Dabei reicht die Spanne von 552 mm im Jahr 1976 bis 1140 mm im Jahr 1966.

Die Lufttemperatur wird in 2 m Höhe mit einem Thermographen erfasst und als mittlerer Tageswert dokumentiert. Mit einem Campbell-Stokes-Schreiber wird die Sonnenscheindauer in Stunden in 6 m Höhe gemessen. Die Windgeschwindigkeit wird in 3, 6 und 9 Meter Höhe bestimmt, wobei die Anlage St. Arnold sehr windgeschützt gelegen ist. In einzelnen Zeiträumen (Sommerperioden 1997, 1998 und 2003) fehlen Windgeschwindigkeitsmessungen; diese wurden durch mittlere Monatswerte aus den Jahren 1991-1999 ersetzt. Damit soll eine Unterschätzung der Verdunstungsverluste bei der Modellierung vermieden werden.

In den Jahren 1977-1980 wurden auf den Eichen/Buchen- und Kiefernlysimetern Interzeptionsverluste als Differenz von Freilandniederschlag und durchtropfendem Niederschlag sowie Stammablauf untersucht. Der Interzeptionsverlust beträgt bei den Kiefern 37 % in Winter- und 34 % in Sommermonaten, bei Eichen/Buchen 11 % bzw. 17 % vom Freilandniederschlag (Schroeder, 1989; DVWK, 1996). Aktuellere Interzeptionsmessungen seit 1990 liegen nicht vor, so dass ein Vergleich der Interzeptionsabschätzungen nicht möglich ist.

Das Sickerwasser der drei Lysimeterbecken wird in Auffangkesseln gesammelt, aus dem Messschrieb wird seit 1966 ein kontinuierlicher täglicher Sickerwasserablauf dokumentiert. Da es sich um über die Fläche gemittelte Sickerwasserraten handelt, kommt auch nur eine eindimensionale Modellierung der Bodenwasserbewegung in Frage.

2.3 Bodenbeschaffenheit und hydraulische Eigenschaften

Da die der Lysimeterböden unversehrt bleiben mussten, nahm Klein (2000) in der unmittelbaren Umgebung des Gras- und Kiefernlysimeters Stechzylinderproben für die Analysen vor. Das Pürckhauer-Bohrstock-Profil im Graslysimeter weist einen Ah-Horizont bis ca. 30-35 cm Tiefe, einen Bs-Horizont bis 60-65 cm und einen ausgeprägten C-Horizont ab 60 cm. Wie man der Tabelle 2.1 zur Korngrößenanalyse entnehmen kann, wird in allen drei Horizonten ein hoher Sandanteil vorgefunden, mit gelegentlichem Vorkommen von Mittelkies und Flintsteinen.

Tabelle 2.1: Korngrößenanalyse und Lagerungsdichte der Bodenproben am Graslysimeter. (bearb., nach Klein, 2000)

	A-Horizont	B-Horizont	C-Horizont
Tiefe [cm]	0 - 35	35 - 60	60 - 350
Ton-Fraktion [%]	0.0	3.7	4.0
Schluff-Fraktion [%]	16.1	11.7	2.3
Sand-Fraktion [%]	83.9	84.6	93.7
Lagerungsdichte [g cm ⁻³]	1.543	1.650	1.477

Die Bestimmung der hydraulischen Eigenschaften des Bodens stellte ein ausführliches Thema in der Arbeit von Klein (2000) dar. Um die Beschreibung und Simulation der ungesättigten Bodenwasserbewegungen zu ermöglichen, wurden drei unterschiedliche Verfahrensansätze durchgeführt: zum einem eine Anpassung der van-Genuchten-Retentionsfunktion an die Retentionsmessungen aus dem Jahr 1975 (statisches Verfahren), dann Bestimmung der Retentionsfunktion und Leitfähigkeitsfunktion mittels der Evaporationsmethode (in den Jahren 1997-1998) (dynamisches Verfahren) und zuletzt die Ableitung der Pedotransferfunktionen unter Verwendung von statistischen Methoden. Die Kalibrierung der van-Genuchten-Retentionsfunktion für die drei Schichten der Gras- und Kiefern-Lysimeterbodenproben ergab keine eindeutigen Ergebnisse bezüglich der verschiedenen Verfahren. Jedoch approximierten die mit der Evaporationsmethode angepassten Parameter in Simulationen gut die gemessenen Sickerwasserraten. Neben den van-Genuchten-Parametern spielt auch der Mualem-Parameter l in der Leitfähigkeitsfunktion eine Rolle. Mit den gefitteten Werten wurden bessere Übereinstimmungen mit den Messwerten erreicht als mit dem empfohlenen Standardwert von $l=0.5$. Der negative Wert $l=-1$ im B-Horizont ist ein artifiziereller Wert, der bei der Anpassung die kleinste Abweichung von den Messwerten erzielt. In diesem Fall kann die Leitfähigkeitsfunktion mit dem Parameter für den A-Horizont verwendet werden.

Tabelle 2.2: Aus dem Verdunstungsversuch ermittelte hydraulische Parameter für die jeweiligen Horizonte der Probenahmestellen am Gras- und Kiefernlysimeter. (bearb., nach Klein, 2000)

	Horizont	θ_s [$cm^3 cm^{-3}$]	θ_r [$cm^3 cm^{-3}$]	α [cm^{-1}]	n [-]	K_s [$cm d^{-1}$]	l [-]
Gras	A	0.340	0.040	0.0236	1.64	95	0.3
	B	0.289	0.033	0.0313	1.86	95	-1.0(0.3)
	C	0.273	0.013	0.0321	3.53	1022	1.4
Kiefer	A	0.320	0.011	0.0287	1.70	95	0.4
	B	0.360	0.025	0.0530	2.73	95	-1.0(0.3)
	C	0.340	0.013	0.0277	3.97	1022	1.7

Die hydraulischen Parameter aus Tabelle 2.2 werden in dieser Arbeit zur Simulation der Wasserbewegung im Lysimeter herangezogen. Es sei allerdings darauf hingewiesen, dass der Boden der Lysimeteranlage äußeren Umweltbedingungen ausgesetzt ist und somit ein in Bodenbeschaffenheit und hydraulischen Eigenschaften dynamisches Medium darstellt.

2.4 Das Bromid-Tracer Experiment

Im Rahmen eines Tracer-Experiments wird mit einer Tracersubstanz, die sich neutral mit dem Wasser bewegt, das infiltrierende Wasser markiert. Anschließend werden die Konzentrationen des Tracers im Abfluss gemessen. Anhand der experimentellen Ergebnisse kann der Transport im Boden überprüft und darüber das Bewegungsverhalten des Bodenwassers analysiert werden. Auf der Lysimeteranlage kommt Bromid als Tracer zum Einsatz. Er wird als konservative Substanz gehandhabt, d.h. er wird weder abgebaut noch an der festen Substanz adsorbiert (Levy & Chambers, 1987). Jedoch wurde in Tracer- Experimenten eine Akkumulation von Bromid in der Biomasse beobachtet, die vorwiegend durch Wurzelaufnahme der Pflanzen erfolgte. Eine mittlere Akkumulation in der Biomasse von 32 % der applizierten Bromidmasse stellte Schnabel et al. (1995) bei Experimenten mit Weidelgras fest, bei Zuckerrüben wird von 50 % Akkumulation berichtet (Kohler et al., 2005).

In St. Arnold wurden zum Ende der Vegetationszeit am 15.11.1998 auf jeder der drei Lysimeterflächen ($400 m^2$) jeweils 900 g Kaliumbromid (KBr , $604 g Br^-$) gelöst in 200 l Wasser verteilt. Das entspricht einer Konzentration von $3.02 g l^{-1}$ bei einem Wasserauftrag von $5 \cdot 10^{-4} m^3 m^{-2}$. Das Aufbringen der Lösung erfolgte innerhalb von 2 bis 4 Stunden direkt auf die Grasfläche bzw. auf den Boden unter den Baumkronen.

Das in die Auffangkessel tropfende Sickerwasser wurde über mehrere Jahre bis Februar 2004 täglich auf allen drei Flächen beprobt. Die Bromid-Konzentration wurde in 50–100 ml Einzelproben sowie zum Teil in Mischproben über mehrere Tage mithilfe des Ionenchromatographieverfahrens am Institut für Umweltsystemforschung Osnabrück bestimmt. Zum Einsatz kam das Gerät der Firma *Dionex*, das die Methode des Ionenaustauschs als Trennverfahren verwendet.

Der Verlauf der gemessenen Durchbruchkurven der drei Lysimeter ist in der Abbildung 2.3 dargestellt. Die Konzentration im Graslysimeter sank im Juli 2001 unter die Nachweisgrenze von $70 \mu\text{g l}^{-1}$. Beim Kiefern- und beim Laublysimeter ist in den letzten Proben vom 08.02.2004 mit $131 \mu\text{g l}^{-1}$ und $86 \mu\text{g l}^{-1}$ die Nachweisgrenze noch nicht ganz erreicht worden.

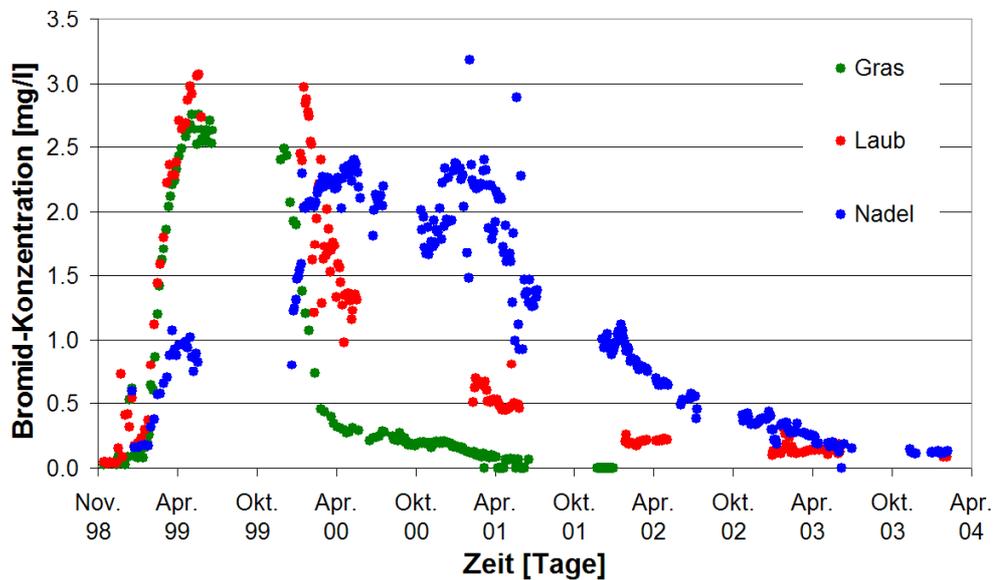


Abbildung 2.3: Bromid-Durchbruchkurven, gemessene Bromid-Konzentrationen im Sickerwasserfluss des Gras-, Eichen/Buchen- und Kiefernlysimeters.

3 Theoretische Grundlagen

3.1 Wasserbewegung in der ungesättigten Zone

Im Porenraum des Bodens findet aufgrund der Potentialdifferenzen die Versickerung des Wassers statt. Für die physikalische Beschreibung einer eindimensionalen vertikalen Wasserbewegung im ungesättigten porösen Medium Boden wird die Richards-Gleichung zugrunde gelegt. Diese partielle Differenzialgleichung resultiert aus dem Buckingham-Darcy-Gesetz und der Kontinuitätsgleichung für Massenerhaltung des Wassers im Bodenkompartment (Richards, 1931; Jury et al., 1991). In Abhängigkeit von der Saugspannung hat die Richards-Gleichung folgende Darstellung:

$$\frac{\partial \theta(h(x, t))}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [K(h(x, t)) \left(\frac{\partial h(x, t)}{\partial x} + 1 \right)] - R(x, t). \quad (3.1)$$

θ	volumetrischer Wassergehalt [$L^3 L^{-3}$]
$h(x, t)$	Saugspannung [L]
$K(\theta(h))$	Leitfähigkeit [$L T^{-1}$]
$R(x, t)$	Senkenterm für Verlust durch Wurzelaufnahme [T^{-1}]
t	Zeit [T]
x	Tiefe [L]

Die Anwendung der Richards-Gleichung setzt die Kenntnis der Leitfähigkeitsfunktion und Retentionsfunktion, die die hydraulischen Eigenschaften in ungesättigtem Boden beschreiben, voraus. Diese Funktionen werden in der Größe der effektiven Sättigung angegeben:

$$\Theta = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}. \quad (3.2)$$

θ_r	residualer Wassergehalt [$L^3 L^{-3}$]
θ_s	Sättigungswassergehalt [$L^3 L^{-3}$]

Zur Beschreibung der Bodenwassercharakteristik wird die Retentionsfunktion von van Genuchten (1980) zugrunde gelegt. Sie stellt den Zusammenhang zwischen dem im Boden vorherrschenden Wassergehalt und der dadurch auftretenden Saugspannung dar:

$$\Theta(h) = [1 + (\alpha h)^n]^{-m}, \quad \alpha > 0, n > 0, m = 1 - \frac{1}{n}. \quad (3.3)$$

Anhand des residualen Wassergehaltes und des Sättigungswassergehaltes sowie der einheitslosen Parameter α und n wird die Funktion an Retentionsmessungen einer Bodenprobe angepasst.

Die Leitfähigkeit in einem gesättigtem Boden ist $K_s [L T^{-1}]$. Sie wird bei ungesättigten Verhältnissen durch einen Reduktionsterm in Abhängigkeit vom Wassergehalt verringert. Der Ansatz für die verwendete Leitfähigkeitsfunktion bei ungesättigtem Boden geht auf Mualem (1976) zurück. In Kombination mit der Retentionsfunktion nach van Genuchten (Gl. (3.3)) stellen beide stetige, differenzierbare Funktionen dar:

$$K(\Theta) = K_s \Theta^l [1 - (1 - \Theta^{\frac{1}{m}})^m]^2. \quad (3.4)$$

Zur Parametrisierung der Bodenwasserbewegung einer homogenen Bodenschicht werden damit 6 Kenngrößen θ_s , θ_r , α , n , K_s und l benötigt.

Da es sich bei der Richards-Gleichung um eine quasilineare partielle Differenzialgleichung 2. Ordnung handelt, kann sie nur unter eingeschränkten Annahmen (*steady state*, θ konstant) analytisch gelöst werden. Bei transienten Flussbedingungen, die unter natürlichen klimatischen Bedingungen vorliegen, müssen unter Vorgabe von Anfangs- und Randbedingungen numerische Lösungsverfahren angewendet werden. In der Software HYDRUS-1D wird die numerische Lösung unter Verwendung der Methode der finiten Elemente vom Galerkin-Typ erzeugt (Šimůnek et al., 2009).

3.2 Evapotranspiration

Als physikalischer Prozess des Übergangs von Wasser aus dem flüssigen in den gasförmigen Zustand zählt die Verdunstung zu den wichtigsten meteorologischen Vorgängen an der Erdoberfläche. Evaporation bezeichnet die Verdunstung von Wasser der unbewachsenen Erdoberfläche, von auf Pflanzenoberflächen zurückgehaltenem Niederschlag, so wie von freien Wasserflächen. Die Transpiration kennzeichnet die Verdunstung von Pflanzenoberflächen aufgrund biotischer Prozesse, d.h. das durch die Wurzeln aufgenommene Wasser wird durch die Spaltöffnungen, die Stomata, und durch die Epidermis der Blätter in die umgebende Luft abgegeben. Beide Prozesse gehen als summierte Verlustgröße, Evapotranspiration, in die klimatische Wasserbilanz ein (Gl. 2.1). Dabei gibt pET die potentielle (mögliche) Verdunstung bei gegebenen meteorologischen Bedingungen und unbegrenzt verfügbarem Bodenwasser an (DVWK, 1996).

Zur Berechnung der Evapotranspiration einer beliebigen Vegetationsfläche wird verbreitet das Kombinationsmodell von Penman-Monteith angewendet (Monteith, 1981; Allen et al., 1998). Es stellt eine Weiterentwicklung des klassischen Penman-Verfahrens dar, welches auf der Energiebilanz für die Grenze Atmosphäre – Erdoberfläche basiert und den Verdunstungswärmestrom (latenter Wärmestrom) angibt. Die Evapotranspiration wird mit Hilfe der effektiven Strahlungsbilanz und des Sättigungsdefizits, in die meteorologische Daten eingehen, sowie unter Berücksichtigung

zweier Verdunstungswiderstände berechnet.

$$\lambda ET = \frac{\Delta(R_n - G) + \rho_l c_p \frac{(e_s(T) - e)}{r_a}}{\Delta + \gamma(1 + \frac{r_s}{r_a})} \quad (3.5)$$

λ	spezifische Verdunstungswärme [$J kg^{-1}$] bei 20 °C pro 1 mm Wasser, $\lambda = 2450000 [\frac{J m^{-2}}{mm}]$
ET	Verdunstung [$kg m^{-2} d^{-1}$] oder als Verdunstungshöhe [$mm d^{-1}$]
Δ	Steigung der Sättigungsdampfdruckkurve [$hPa K^{-1}$]
R_n	Strahlungsbilanz [$J m^{-2} d^{-1}$]
G	Bodenwärmestrom [$J m^{-2} d^{-1}$] (in LYFE $G = 0$)
ρ_l	Luftdichte bei 20 °C und 1013 hPa, $\rho_l = 1.2 [kg m^{-3}]$
c_p	spezifische Wärme der Luft bei konstantem Druck, $c_p = 1005 [J kg^{-1} K^{-1}]$
$e_s(T) - e$	Sättigungsdefizit, abhängig von Lufttemperatur T und Dampfdruck e [hPa]
γ	Psychrometerkonstante, $\gamma = 0.65 [hPa K^{-1}]$
r_s	Verdunstungswiderstand des Bestandes, mittl. Stomatawiderstand [$s m^{-1}$]
r_a	aerodynamischer Verdunstungswiderstand [$s m^{-1}$]

Der aerodynamische Widerstand r_a (Gl. 3.6) hängt von der Windgeschwindigkeit, Messhöhe und Höhe des Pflanzenbestandes ab. Der mittlere Stomatawiderstand des Bestandes r_s ist für die Wasserversorgung der Pflanzen kennzeichnend. In HYDRUS-1D ist der Widerstand eines einzelnen Blattes auf $r_l = 200 s m^{-1}$ festgesetzt, so dass r_s nur durch den Blattflächenindex (LAI) variiert werden kann (Gl. 3.7). In LYFE ist der stomatäre Widerstand eines Blattes variabel, wodurch eine der jahreszeitlichen Pflanzenentwicklung entsprechende Berechnung ermöglicht wird.

$$r_a = f(z_w, z_h, h_c) \frac{1}{u_z} \quad (3.6)$$

$$r_s = \frac{r_l}{LAI} \quad (3.7)$$

$f(z_w, z_h, h_c)$	Bestandsfaktor [–], abhängig von der Messhöhe des Windes z_w , der Luftfeuchte und Temperatur z_h , und der Höhe der Vegetation h_c [m]
u_z	Windgeschwindigkeit in Höhe z [$m s^{-1}$]
r_l	pflanzenspezifischer stomatärer Widerstand eines einzelnen Blattes [$s m^{-1}$]
LAI	Blattflächenindex, Leaf Area Index [$m^2 m^{-2}$, –]

Die zeitunabhängigen Parameter für die Berechnung der Evapotranspiration sind die geographischen Längen- und Breitengrade zur Berechnung der Strahlungsbilanz sowie die Höhe der Wind-, Temperatur- und Feuchtigkeitsmessungen für den aerodynamischen Widerstand. Zeitlich variable Eingabewerte sind die mittlere Temperatur, Luftfeuchte, Windgeschwindigkeit und Sonnenscheindauer. Weiterhin werden konstante oder zeitlich variable Werte der Vegetationshöhe und Albedowerte, die das

Maß für das Rückstrahlvermögen einer Pflanzen- oder Bodenoberfläche angeben, benötigt. Die genauen Berechnungsschritte der Penman-Monteith-Evapotranspiration sind in den Anleitungen von HYDRUS-1D und LYFE aufgeführt.

Die maximale (potentielle) Verdunstung eines Bestandes erhält man, wenn in der Penman-Monteith-Berechnung ein minimaler Stomatawiderstand von $30 - 90 \text{ sm}^{-1}$ je nach Bestand verwendet wird (DVWK, 1996). Erst durch Verwendung von am Pflanzenbestand orientierten Widerstandswerten errechnet man eine potentielle Evapotranspiration pET für die vorhandene Vegetationsschicht unter der Annahme der Wassersättigung. Für die Berechnung der potentiellen Verdunstung des Interzeptionswassers wird Penman-Monteith ohne stomatären Widerstand verwendet ($r_s = 0$, pET^*). In diesem Fall erfolgt keine stomatäre Verdunstung, sondern nur die Verdunstung der Wasserschicht auf der Pflanzenoberfläche.

Die Aufteilung der für die potentielle Verdunstung verfügbaren Energie erfolgt in LYFE bei jedem Zeitschritt auf die drei Kompartimente Blattspeicher pEI , Streuspeicher pEL und die Transpiration der Pflanze pT . Die Anteile w_I , w_L und w_T addieren sich zu 1. Dabei wird die Evaporation des Blattspeichers durch die aktuelle Blattinterzeptionshöhe S beschränkt und die des Streuspeichers durch die aktuelle Streuinterzeptionshöhe L , mit der Einschränkung von maximal 50% der Gesamtverdunstung. Dadurch nicht verbrauchte Anteile von w_I werden an w_L und anschließend an w_T weitergegeben.

$$w_I = \frac{S}{S_{max}} ; w_L = \min \left\{ \frac{L}{2L_{max}} ; 1 - w_I \right\} ; w_T = 1 - w_I - w_L \quad (3.8)$$

$$aEI = \min \left\{ w_I pET^* ; \frac{S}{\Delta t} \right\} ; aEL = \min \left\{ w_L pET^* ; \frac{L}{\Delta t} \right\} \quad (3.9)$$

In früheren Versionen von HYDRUS-1D bestand nur die Möglichkeit, die Evaporation und Transpirationsdaten als Inputgrößen für die Simulation zur Verfügung zu stellen. Erst seit der Version 3.0 können in HYDRUS-1D die Evapotranspiration und Interzeption aus meteorologischen Daten berechnet werden. Dabei orientiert sich die Berechnung an Gras- und Getreidebeständen und ist teilweise durch konstante Parameterwahl eingeschränkt. Für Waldbestände bietet LYFE ein ausgefeilteres Submodell, vor allem bei der Aufteilung der Evapotranspiration und bei der Berechnung der Interzeptionsverluste, wie im Kapitel 3.3 gezeigt wird. Daher wird für die vollständige Simulation im Graslysimeter die Software HYDRUS-1D verwendet. Für die Laub- und Nadellysimeter wird die Berechnung der Evapotranspiration und Interzeption mit LYFE durchgeführt. Diese Größen werden dann als Input für die Bodenwasserbewegung- und Bromidtransport-Simulationen in HYDRUS-1D verwendet.

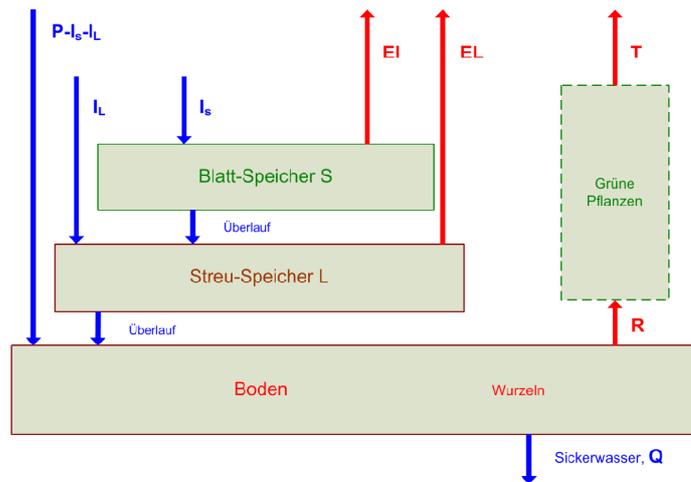


Abbildung 3.1: Struktur des Evapotranspirations-Interzeptions-Submodells in LYFE. (bearb., nach Klein, 2000)

3.3 Blatt- und Streuinterzeption

Die Interzeption bezeichnet den Prozess des vorübergehenden Speicherns von abgesetztem Niederschlag an Pflanzenoberflächen. Blätter und andere Pflanzenteile werden benetzt und nur ein Teil des Niederschlags erreicht, durch- und abtropfend oder als Stammabfluss, den Boden.

Bei dem Interzeptionsmodell in LYFE, welches speziell für den Waldbestand entwickelt wurde, wird zwischen der Benetzung der Blätter und der Streudecke eines Baumbestandes differenziert. Die Struktur des Interzeptionsmodells wird in der Abbildung 3.1 verdeutlicht. Bei der Berechnung der Interzeptionshöhe auf der Pflanzenoberfläche geht man von einem maximalen Blattspeicher S_{max} aus, so dass der Überlauf in die Streuinterzeption mündet. Diese maximale Speicherhöhe kann aus dem Blattflächenindex (LAI) abgeschätzt werden:

$$S_{max} = S_w + S_l LAI. \quad (3.10)$$

- S_w Speicherkapazität des Stammes [mm]
- S_l Speicherkapazität eines Blattes [mm]

Die tägliche Interzeptionsrate der Blätter und Stämme, I_s , die den Speicher S befüllt (solange $S < S_{max}$), kann über ein lineares (Bouten & Jansson, 1995) oder

exponentielles Gesetz (Liu, 1997) berechnet werden.

$$I_S = \frac{1}{\Delta t} \min \begin{cases} P\Delta t \\ S_1 + S_2(P\Delta t - S_1) \\ S_{max} \end{cases} \quad (3.11a)$$

oder

$$I_S = \frac{1}{\Delta t} \min \begin{cases} P\Delta t \\ S_{max}(1 - e^{-\gamma P}) \end{cases} \quad (3.11b)$$

- P Freilandniederschlag [$mm\ d^{-1}$]
- S_1 relativer Zuwachs der Interzeptionsrate bei mäßigem Niederschlag [–]
- S_2 Niederschlagsmenge, bei der das Abtropfen von den Blättern einsetzt [mm]
- γ exponentieller Koeffizient, $\gamma > 0$

Die Berechnung der Interzeptionsrate der Streudecke, I_L , ist analog zur linearen Blattinterzeptionsrate konzipiert, wobei der Freilandniederschlag P um I_S reduziert wird.

$$I_L = \frac{1}{\Delta t} \min \begin{cases} (P - I_S)\Delta t \\ L_1 + L_2[(P - I_S)\Delta t - L_1] \\ L_{max} \end{cases} \quad (3.12)$$

Der Überlauf des aktuellen Streuspeichers $L_{drip} = L + I_L\Delta t - L_{max}$ infiltriert in den Boden zusätzlich zu dem um die Interzeptionsverluste bereinigten Freilandniederschlag. Der vereinfachte lineare Ansatz der Interzeptionsrate ohne Berücksichtigung der Streuauflage mit $L_{max} = 0$ in Gleichung 3.12 und $S_w = 0$ in Gleichung 3.10 ist ebenfalls zur Berechnung der Interzeption eines Grasbestandes anwendbar.

Im Vergleich dazu wird in HYDRUS-1D die aktuelle Interzeptionsrate nicht differenziert für einen Baumbestand berechnet. Sie wird ebenfalls durch eine maximale Kapazität in Abhängigkeit von LAI limitiert und in Abhängigkeit von der Niederschlagsmenge reduziert (Šimůnek et al., 2009). Hier wird angenommen, dass die überschüssige Interzeptionsmenge, die durch die potentielle Transpiration im selben Zeitschritt nicht abgedeckt ist, auf die nächste Interzeptionsrate übertragen wird. Der konstante Parameter a_I kann wie die Speicherkapazität eines einzelnen Blattes S_l in Gleichung 3.10 interpretiert werden.

$$I = \min \begin{cases} a_I * LAI(1 - \frac{1}{1 + \frac{SCF * P}{a_I * LAI}}) + ExInterc \\ a_I * LAI \end{cases} \quad (3.13)$$

a_I	konstanter Interzeptionsparameter [mm]
SCF	Surface Cover Fraction [-]
$ExInterc$	überschüssige Interzeption vom vorherigen Zeitschritt, d.h. $(I - pT)$ [$mm d^{-1}$]

Für die Berechnung der Interzeptionsrate einer Grasdecke reicht der einfache Ansatz der Interzeption in HYDRUS-1D aus. Für die Laub- und Nadelvegetation bietet das Blatt- und Streuinterzeptionsmodell in LYFE einen ausgereiften Ansatz und eine flexiblere Parametereingabe, so dass auch die saisonale Variabilität des Baumbestandes berücksichtigt werden kann.

3.4 Transpiration und Wurzelaufnahme

Die potentielle Transpiration wird als Anteil der Evapotranspiration in Abhängigkeit von der aktuellen Saugspannung in die tatsächliche Evapotranspiration aET (*actual evapotranspiration*) überführt. Die aktuelle Transpirationsrate $aT(t)$ lässt sich in der gesamten Wurzeltiefe x_r anhand einer Wasseraufnahmefähigkeitsfunktion und einer normierten Wurzelverteilungsfunktion $b_n(x)$, berechnen:

$$aT(t) = \int_0^{x_r} R(h, x, t) dx = \int_0^{x_r} pT(t) \alpha(h) b_n(x) dx. \quad (3.14)$$

x_r	Wurzeltiefe [L]
$b_n(x)$	normierte Wurzelverteilungsfunktion [L^{-1}], $\int_0^{x_r} b_n(x) dx = 1$
$\alpha(h)$	Wasseraufnahmefähigkeit [-]

Das Tiefenprofil der Wurzeln jeder Pflanze hängt von unterschiedlichen Faktoren ab: Boden, Klima, Pflanzendichte und Wassergehalt im Boden. Durch die Informationen $b(x)$ über die Anzahl der Feinwurzeln oder über Dichte der Wurzel-Biomasse in einer bestimmten Tiefe wird dem Tiefenprofil eine normierte Wurzelverteilungsfunktion zugeordnet, $b_n(x) = \frac{b(x)}{\int_0^{x_r} b(x) dx}$. Die Verteilung gibt vor, in welchem Anteil in der jeweiligen Tiefe die Wasseraufnahme bestimmt wird.

Zusätzlich erfolgt die Reduktion der Wasseraufnahme über die von der aktuellen Saugspannung abhängige Wasseraufnahmefähigkeit, der eine klassische trapezförmige Funktion nach Feddes et al. (1978) zugrunde liegt (Abb. 3.2). Sie wird über vier charakteristische Saugspannungswerte definiert und zwischen diesen linear interpoliert. Damit werden fünf Bereiche für Wasseraufnahme abgesteckt. Bei Überwässerung liegt eine geringe Saugspannung $[0, h_1]$ im Boden vor und die Wurzeln nehmen aufgrund von Sauerstoffmangel kein Wasser auf. Nimmt die Saugspannung zu, stellt sich eine optimale Versorgung $\alpha(h) = 1$ im Bereich von $[h_2, h_3]$ ein. Bei der Überschreitung des permanenten Welkepunktes (PWP) bei h_4 liegt eine Unterversorgung der Wurzeln vor, da die Wasseraufnahme bei zu hoher Saugspannung komplett eingeschränkt ist. Der permanente Welkepunkt liegt bei einer Saugspannung von 15500 cmWS.

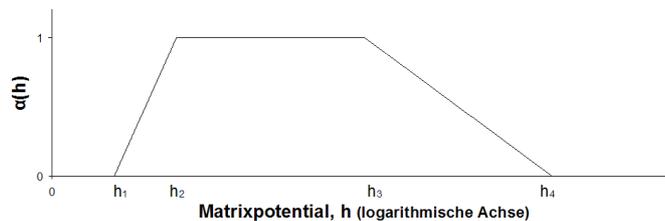


Abbildung 3.2: Wasseraufnahmefähigkeitsfunktion $\alpha(h)$.

Die charakteristischen Stützstellen für die Graswurzeln und die Baumbestände hat Klein (2000) aus Literaturwerten abgeleitet. Bei Gras setzt die Wasseraufnahme bei $h_1 = 1 \text{ cmWS}$ ein. Im Bereich $[h_2 = 10 \text{ cmWS}, h_3 = 1000 \text{ cmWS}]$ findet optimale Wasserversorgung statt. Bei Baumwurzeln setzt dagegen die Wasseraufnahme bei $h_1 = 1.1 \text{ cmWS}$ ein.

3.5 Stofftransport: Konvektions-Dispersions-Gleichung

Konservative Substanzen, die gelöst im Bodenwasser vorliegen, werden zusammen mit dem Sickerwasser transportiert. Zwei wesentliche physikalische Ausbreitungsprozesse sind hier entscheidend. Zum einen wird die Substanz mit dem Fluss des Wassers mittransportiert (Konvektion) und zum anderen findet aufgrund variierender Geschwindigkeit entlang des Stömungsfeldes und aufgrund der Diffusion innerhalb des Strömungsfeldes ein Verschmierungsprozess (Dispersion) statt.

Die Konzentration in der mobilen Phase des Bodenkompartiments ist beschrieben als Stoffmasse pro Volumen Bodenwasser, $c = \frac{M}{\theta V_b}$, mit V_b für Bodenvolumen. Für die Beschreibung der Verlagerung konservativer Substanzen genügt die Konvektions-Dispersions-Gleichung (CDE) (Jury et al., 1991).

$$\frac{\partial}{\partial t}[\theta c] = \frac{\partial}{\partial x}[\theta D \frac{\partial c}{\partial x}] - \frac{\partial}{\partial x}[qc] \quad (3.15)$$

- $\theta(x, t)$ volumetrischer Wassergehalt [$L^3 L^{-3}$]
- $c(x, t)$ Konzentration in der flüssigen Phase [$M L^{-3}$]
- $D(x, t)$ Dispersionskoeffizient [$L^2 T^{-1}$]
- $q(x, t)$ Volumenfluss (Abstandsgeschwindigkeit, Darcy-Fluss (auch j_w)) [$L^3 L^{-2} T^{-1}$]

Der effektive Dispersionskoeffizient $D_{eff} = \theta D$ [$L^2 T^{-1}$] fasst die hydrodynamische Dispersion D_{hydr} und die molekulare Diffusion D_{mol} der Substanz innerhalb der Wasserphase zusammen.

$$D(x, t) = D_{hydr} + D_{mol} = \lambda \frac{q(x, t)}{\theta(x, t)} + D_w \tau \quad (3.16a)$$

$$\tau = \frac{\theta(x, t)^{\frac{7}{3}}}{\theta_s^2}. \quad (3.16b)$$

- λ longitudinale Dispersivität, Dispersionslänge [L]
- D_w molekularer Diffusionskoeffizient [$L^2 T^{-1}$]
- τ Tortuosität [-]

Die hydrodynamische Dispersion ist ein Durchmischungsprozess, der durch die Variation der Geschwindigkeit im porösen Medium entlang der Fließrichtung verursacht wird. Auf der Experimentskala tiefer als 1 m und für Strömungsgeschwindigkeiten größer 100 mm a^{-1} ist er der dominierende Mechanismus im Vergleich zur wesentlich langsameren Diffusion (Flühler & Roth, 2003). Dabei ist die Dispersivität λ (auch bezeichnet als Dispersionslänge) ein empirischer Parameter, der als Eigenschaft des porösen Mediums betrachtet wird. Sie wird durch die Strömung effektiv beeinflusst und wird experimentell in Studien mit Tracerversuchen bestimmt, wobei die experimentellen Bedingungen wie Fließgeschwindigkeit, Randbedingungen, Bodentextur, Transporttiefe in die Bewertung eingehen.

Im Gegensatz dazu ist der Diffusionskoeffizient im Wasser für Bromid eine Stoffkonstante. Er ist bekannt und liegt bei $1.77 \text{ cm}^2 \text{ d}^{-1}$ (Lide, 1999). Mit dem Tortuositätsfaktor wird die Geometrie der Porenstruktur bei wassergehaltsabhängigen Verteilung des Bodenwassers berücksichtigt und damit die Diffusion effektiv verändert (Millington & Quirk, 1961; Trapp & Matthies, 1996).

Für die numerische Lösung werden Anfangsbedingung und Randbedingungen in folgender Weise gewählt. Da zu Beginn des Versuchs kein Bromid im Bodenwasser vorhanden ist, wird als Anfangsbedingung eine Konzentration von Null in der gesamten Tiefe vorgegeben:

$$c(x, 0) = 0, \quad t = 0, 0 \leq x \leq l. \quad (3.17)$$

Am oberen Rand findet im Zeitraum von t_{inf} am 15. November 1998 ein Infiltrationsfluss mit der Kontaminationslösung statt. Der Infiltrationsfluss $q(0, t) = 0.05 \text{ cm/d}$ ergibt sich aus der Versuchsdurchführung, beschrieben im Kapitel 2.4. Diese Randbedingung vom Cauchy-Typ wird in HYDRUS-1D als „*concentration flux boundary condition*“ bezeichnet:

$$\theta D \frac{\partial c}{\partial x} - qc = q(0, t)c_{inf}(0, t), \quad x = 0, 0 < t \leq t_{inf}. \quad (3.18)$$

Am unteren Rand wird der Diffusionsprozess durch folgende Bedingung (Neumann-Typ) unterbunden, so dass das Bromid nur mit dem Konvektionsfluss das Lysimeter verlassen kann („*zero concentration gradient*“):

$$\theta D \frac{\partial c}{\partial x} = 0, \quad x = l, t > 0. \quad (3.19)$$

3.6 Transfer Function Model und Methode der Momente

Die Bromid-Durchbruchskurven der drei Lysimeter können mithilfe der Methode der Momente analysiert werden. Bei der Methode der Momente handelt es sich um ein statistisches Verfahren zur Charakterisierung der Konzentrationskurven. Die ideale Anwendung erfolgt in einem homogenen Boden unter quasi-stationären Bedingungen, d.h. konstantem Wasserfluss. Unter transienter Bodenwasserbewegung, wie sie unter atmosphärischen Randbedingungen vorliegen, und in einem geschichteten Boden kann sie als grobe Abschätzung der Dispersion und damit der Dispersivität verwendet werden (Jury & Roth, 1990).

Im Gegensatz zum physikalisch prozessorientierten Ansatz der Konvektions-Dispersions-Gleichung verfolgt das *Transfer Function Model* einen Black-Box Ansatz, in dem das System als Modell interner Prozesse betrachtet wird. Die Charakterisierung eines solchen Systems erfolgt mittels Transferfunktionen, mit denen der Output-Fluss als Funktion des Input-Flusses beschrieben wird. Mathematisch handelt es sich um eine Gauss'sche Wahrscheinlichkeitsverteilung (*probability density function, pdf*) für die Transportzeit in einer bestimmten Tiefe oder Transportdistanz nach einer bestimmten Zeit.

Zur Beschreibung der flussgemittelten Konzentration im Lysimeter St. Arnold wird eine Dichte der Wahrscheinlichkeitsverteilung angewendet, die als *Fickian pdf* bezeichnet wird. Sie stellt im quasi-stationären Fall, wenn der Wasserfluss (j_w oder q , Abstandsgeschwindigkeit) konstant ist, eine Lösung der Konvektions-Dispersions-Gleichung dar. Für einen kurzen Stoffimpuls eines konservativen Tracers wird die *Fickian pdf* für die Transporttiefe z in Abhängigkeit vom in einer Zeitperiode aufgetretenen Sickerwasser $I(t) = \int_0^t j_w(\dot{t}) dt$, gegeben durch (Jury et al., 1991):

$$C^f(z, I) = M_0 f^f(z, I) = M_0 \frac{z}{2\sqrt{\pi DI^3}} \exp \frac{-(z - VI)^2}{4DI} \quad (3.20)$$

- C^f flussgemittelte Konzentration [$M L^{-3}$]
- I Sickerwasser(-höhe) [$L^3 L^{-2}$]
- M_0 Masse gelösten Stoffes pro Flächeneinheit [$M L^{-2}$]
- f^f Fickian pdf [L^{-1}]
- V Porenwassergeschwindigkeit [$L L^{-1}$]
- D Dispersionskoeffizient [$L^2 L^{-1}$].

Die zeitlose Transformation über das Sickerwasser schließt die Transformation der Dimensionen der Parameter $V^{(I)}$ und $D^{(I)}$ mit ein. Die Geschwindigkeit $V^{(I)}$ stellt

somit die Distanz, mit der die Substanz pro Einheit Sickerwasserhöhe zurücklegt, und $D^{(I)}$ die Dispersion dar, bezogen auf die Einheit der Sickerwasserhöhe.

Anhand der hiermit zugrundeliegenden Dichtefunktion können die Momente der Verteilung bestimmt werden. Das N-Fache Moment ist definiert als:

$$\mathbf{T}_N = \frac{T_N}{T_0} = \frac{\int_0^\infty I^N C^f dI}{\int_0^\infty C^f dI}. \quad (3.21)$$

Die Masse der konservativen Substanz transportiert mit dem Wasservolumenfluss pro Flächeneinheit wird durch das im Nenner stehende Integral bestimmt $M_0 = \int_0^\infty C^f dI$. Das erste normalisierte Moment, der Erwartungswert $\mu_I = \mathbf{T}_1$, bestimmt die Menge des Wassers, mit dem die Hälfte der Substanz die beobachtete Tiefe erreicht hat. Er wird auch als Durchbruchzeit bezeichnet, in der zeitlosen Variante als Durchbruchmenge. Zu diesem Zeitpunkt ist die entsprechende Sickerwasserhöhe in der Tiefe durchgesickert. Das zweite Moment $\sigma_I^2 = \mathbf{T}_2 - \mathbf{T}_1^2$ stellt die Streuung relativ zur Durchbruchmenge dar. Zwischen den beiden Momenten und den Parametern der *pdf* besteht folgender Zusammenhang:

$$\mu_I = \frac{z}{V^{(I)}} \quad (3.22a)$$

$$\sigma_I^2 = \frac{2D^{(I)}z}{V^{(I)^3}} \quad (3.22b)$$

Bei Vernachlässigung der molekularen Diffusion (Gl. 3.16a) kann die Dispersivität aus dem Zusammenhang $\lambda^{(I)} = \frac{D^{(I)}}{V^{(I)}}$ abgeschätzt werden. Dabei kann unter der Einschränkung der transienten Fließbedingungen nur eine grobe Abschätzung des Parameters erfolgen, man erhält aber dadurch eine Größenordnung als Richtwert.

4 Ergebnisse und Diskussion

4.1 Einstellungen und Ergebnisse der Wasserhaushaltssimulationen

4.1.1 Simulationseinstellungen

Die Simulationen werden für insgesamt acht hydrologische Jahre durchgeführt (November 1996 bis Oktober 2004). Dabei kann das Jahr 1997 als Vorlaufjahr betrachtet werden, in dem sich die hydraulischen Bedingungen entsprechend der atmosphärischen Randbedingungen und der verwendeten Parametrisierung aus den vorgegebenen Anfangsbedingungen einstellen. Für die numerischen Berechnungen des Wasserhaushalts werden für jedes der drei Lysimeter bodenhydraulische Parameter für die Bodenwasserbewegung und vegetationspezifische Kenngrößen für die Evapotranspiration und Interzeption benötigt.

Die räumliche Diskretisierung der 3.50 m tiefen Bodenmonolithe wird auf 1 cm gesetzt. Die Unterteilung des Bodenhorizonts in drei Schichttiefen erfolgt wie in Tabelle 2.1 dargestellt, dabei werden für die bodenhydraulischen Eigenschaften aus dem Verdunstungsversuch gewonnene Parameter (Tab. 2.2) herangezogen. Die Bodenwasserdynamik des Gras-Lysimeters wird durch die van-Genuchten- Bodenwassercharakteristik und Leitfähigkeitsfunktion beschrieben (Abb. 4.1a,c,e). Im Laub- und Nadel-Lysimeter werden zur Parametrisierung dieser Funktionen Ergebnisse aus Versuchen in der Nähe des Kiefernlysimeters entsprechend der Tabelle 2.2 verwendet (Abb. 4.1b,d,f). Grundlegende Unterschiede zwischen den einzelnen Lysimetern zeigen sich bei den Retentionskurven vor allem in den gesättigten Wassergehalten. Die Leitfähigkeitsfunktionen zeigen im Vergleich zwischen Gras- und Laub/Nadellysimeter einen ähnlichen Verlauf, der in der Steigung marginal durch den Mualem-Parameter variiert wird.

In der Tabelle 4.1 sind vegetationspezifische Parameter für die Berechnung der Evapotranspiration und der Interzeptionsverluste zusammengefasst. Für das Graslysimeter werden diese Werte für die Kalkulation mit HYDRUS-1D und für die Laub- und Nadel-Lysimeter für die Kalkulation mit LYFE verwendet. Für letztere orientiert sich die detaillierte Parametrisierung an den Referenzszenarien, deren genaue Beschreibung aus Klein (2000) entnommen werden kann.

Für die Berechnung der Evapotranspiration mit dem Penman-Monteith-Verfahren wird eine Grasdeckenhöhe von 0.12 m und ein Albedo-Wert von 0.23 verwendet. Diese Kenngrößen werden von der *Food and Agriculture Organisation of United Nations* (FAO, Allen et al. (1998)) für eine grasbewachsene Oberfläche als Referenzoberflä-

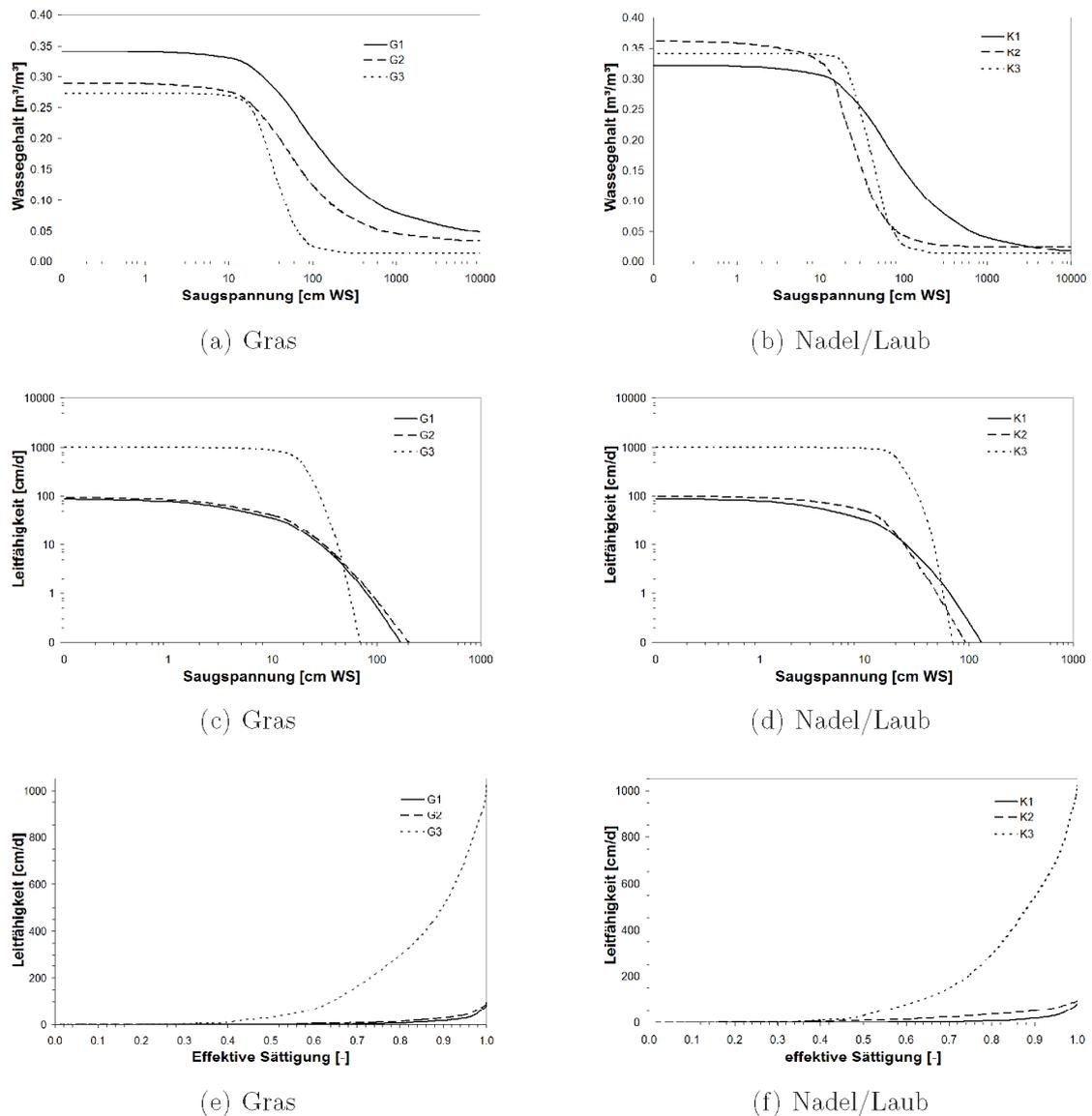


Abbildung 4.1: Retentionsfunktionen nach van Genuchten (a,b) und Leitfähigkeitsfunktionen in Abhängigkeit der Saugspannung (c,d) und der effektiven Sättigung (e,f) für die drei Horizonte im Gras- und Laub/Nadel-Lysimeter.

Tabelle 4.1: Vegetationsspezifische Eingabeparameter für die Berechnung der Evapotranspiration und Interzeptionsverluste. Zum stomatären Widerstand eines einzelnen Blattes wird in Klammern der mittlere stomatäre Bestandswiderstand angegeben. Für Laublysimeter werden die jahreszeitlich variablen Werte im Intervall vom Sommer- bis Winterwert zusammengefasst, der LAI und die Baumhöhe entspricht dem Stand von 1997 (siehe Abb. 2.1).

Lysimeter	$Albedo$ [–]	LAI [–]	h_c [m]	$r_l(r_s)$ [sm ⁻¹]	S_w [mm]	S_l [mm]	L_{max} [mm]
Gras	0.23	2.85	0.12	200 (70)	–	$a_I = 0.1$	–
Nadel	0.15	13.29	14.84	1200 (91)	0.5	0.3	0.5
Laub	0.15	4.56 - 1	10.7	360(78 – 360)	1	0.35	0.2 – 1.6

che empfohlen. Mit dem konstanten Blattflächenindex von 2.85 wird der empfohlene Stomatawiderstand von $r_s = 70 \text{ sm}^{-1}$ angesetzt und der aerodynamische Widerstand wird anhand der vorgegebenen täglichen Windmessungen in 3 m Höhe berechnet. Bei der Interzeptionsberechnung in HYDRUS-1D wird mit dem Interzeptionsparameter $a_I = 0.1 \text{ mm}$ beim Gras eine ganzjährig maximale Benetzungskapazität von 0.285 mm am Tag verwendet, im Gegensatz zur Anwendung in LYFE, wo zwischen Sommer- und Winterwerten unterschieden werden kann.

Für den immergrünen Weymouth-Kiefernbestand werden eine konstante Speicherkapazität des Stammes und der Blätter sowie die maximale Streuspeicherkapazität und der maximale Albedowert angesetzt. Die mittlere Höhe der Bäume und der Blattflächenindex werden jährlich aus den Messdaten entnommen (Abb. 2.1b). Der Blattflächenindex LAI wurde nach Deblonde et al. (1994) aus dem Stammdurchmesser in Brusthöhe und der Stammdichte abgeschätzt (Klein, 2000). Mit dem so berechneten LAI wird zum einen der stomatäre Widerstand und zum anderen die maximale Blattspeicherkapazität aktualisiert. In der Tabelle 4.1 werden die Werte beispielhaft für das Jahr 1997 aufgelistet, hier ergibt sich nach Gleichung 3.10 eine maximale Blattspeicherkapazität $S_{max} = 4.5 \text{ mm}$, die deutlich höher ist als beim Gras.

Wie beim Kiefernbestand gehen bei Rotbuchen und Stieleichen die gemessenen jährlichen Werte für die Baumhöhe und der geschätzte LAI (Abb. 2.1a) in die Berechnungen ein. Beim Rotbuchen- und Stieleichenbestand muss unter anderem die jahreszeitliche Laubentwicklung mitberücksichtigt werden. Das kann durch den variierenden Blattflächenindex geschehen: In den Monaten Juni bis Oktober nimmt der LAI den maximalen, aus den Bestandsdaten geschätzten Wert an, bis er in den Wintermonaten wegen vollständiger Entlaubung auf 1.0 reduziert wird, mit einem

Übergangswert von 2.0 im Frühjahr und Spätherbst. Durch die Variation des LAI findet die Anpassung des stomatären Widerstands entsprechend der saisonalen Laubentwicklung und auch der Blattspeicherkapazität statt, die bei voller Laubentwicklung im Jahr 1997 einen Wert $S_{max} = 2.61$ mm erreicht. Die Streuspeicherkapazität hat antizyklisch der Laubentwicklung einen maximalen Wert von 1.6 mm im Winter, wenn die Bäume ihr Laub verlieren, und einen minimalen Wert im Sommer von 0.2 mm.

Für die Berechnung der Wasseraufnahme durch die Wurzeln des Bestandes wird neben der Wasseraufnahmefunktion die Wurzelverteilung im Bodenprofil benötigt. Darüber sind in den Lysimeterbecken leider keine Informationen vorhanden, da die Bodenmonolithe und Baumbestände unversehrt bleiben sollen. Daher wurde bereits bei der Kalibrierung von LYFE auf Literaturwerte zurückgegriffen (Klein, 2000).

Die normierten Wurzelverteilungsfunktionen werden für alle drei Pflanzenbestände entsprechend der Abbildung 4.2 eingestellt. Beim Gras wird angenommen, dass die Graswurzeln bis zu einer Tiefe von $x_r = 30$ cm gleichmäßig verteilt sind, somit ist die Wurzelverteilungsfunktion bis zu dieser Tiefe konstant. Bei den Weymouth-Kiefern bildet sich im Alter von 30 bis 40 Jahren ein Senkenwurzelsystem in 100 bis 120 cm Tiefe aus, das später auch in Tiefen von 150 bis 200 cm vordringen kann (Bibelriether et al., 1968). Im Kiefernbestand von St. Arnold wird eine maximale Wurzeltiefe von 200 cm und eine Verteilung entsprechend Klein (2000) angenommen. In dem gemischt bepflanzten Laublysimeter kann die Wurzelverteilung stark heterogen ausgeprägt sein. Bei Stieleichen wird eine anfängliche Pfahlwurzel durch ein Herzwurzelsystem abgelöst und erreicht mit 30 Jahren durchschnittlich eine Tiefe von 150 cm, deren Senker in der Altersphase bis in Tiefen von 150-200 cm vordringen. Die Rotbuche entwickelt von Anfang an ein Herzwurzelsystem, welches sich nach 20 bis 30 Jahren in der Tiefe von 120 bis 140 cm ausbildet, vereinzelt wurden in sandigen

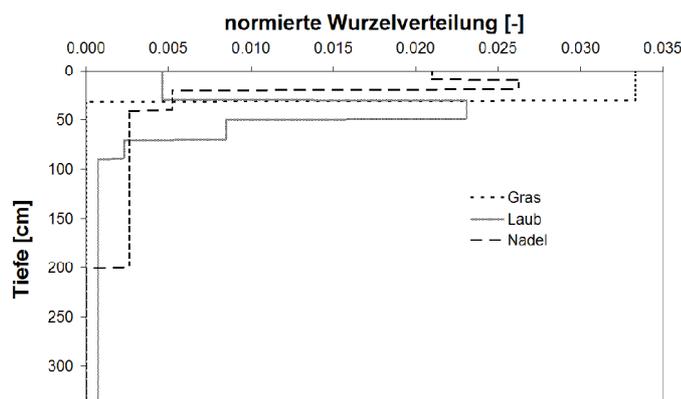


Abbildung 4.2: Normierte Wurzelverteilungsfunktionen für Gras-, Laub- und Kiefernbestand.

Böden deutlich tiefere Wurzeln bis 3 m Tiefe beobachtet (Bibelriether et al., 1968). Für das Laublysimeter wurde im Simulationszeitraum eine maximale Wurzeltiefe von 340 cm angesetzt.

Die Güte der Anpassung der in den Simulationen erzielten Ergebnisse kann anhand der täglich gemessenen Sickerwasserraten Q_{mess} beurteilt werden. Zur Bewertung der Simulationsergebnisse wird das Gütemaß „root-mean-squared-error“ $RMSE$ verwendet und auf ein Jahr (mit $n = 365$) bezogen:

$$RMSE = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Q_{mess}(i) - Q_{sim}(i; P))^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.1)$$

Die jährlichen Wasserhaushaltsbilanzen geben vor allem Aufschluss über die Aufteilung des Niederschlags in einzelne Wasserhaushaltsgrößen, sie bieten auf jährlicher Zeitskala eine gute Orientierung. Mit einer relativen Abweichung der berechneten zur gemessenen jährlichen Sickerwassermenge in der Form $\Delta Q = \frac{(Q_{mess} - Q_{sim})}{Q_{mess}}$ wird eine Unter- oder Überschätzung dieser Wasserhaushaltsgröße angegeben.

4.1.2 Ergebnisse Graslysimeter

Im hydrologischen Jahr 1999, in dem das Bromid-Experiment startete, tritt für das Areal eine durchschnittliche Niederschlagsmenge von 780 mm/a (Tab. 4.2) auf. In diesem Jahr wird die gemessene Sickerwassermenge von 493 mm/a mit 418 mm/a in der Simulation unterschätzt. Der Sickerwasserverlauf (Abb. 4.3) zeigt, dass in den Sommermonaten eine geringere Sickerwasserrate errechnet wird, in den Wintermonaten wird relativ gut, mit abweichenden Schwankungen, der Trend des Sickerwassers wiedergegeben. Auffallend ist das rasche Abfallen der Sickerwasserrate nach den Regenperioden, wie Mitte Dezember oder April.

Im darauffolgenden Jahr 2000 (Abb. 4.4) setzt der simulierte Sickerwasserfluss am Anfang der Winterperiode 16 Tage zu früh ein und liefert zu hohe Werte. Dieses Phänomen tritt in mehreren simulierten Jahren auf. Diese Ergebnisse spiegeln zwei wesentliche Restriktionen der Simulation wider. Zum einen gehen die in dieser Region sporadisch auftretenden Schneeniederschläge als Regen in die Simulation ein. Damit wird der Prozess der Schneeschmelze, die zur Verzögerung der Infiltration und Bodenwasserbewegung beiträgt, vernachlässigt. Zum anderen wird die Bodentemperatur bei Simulationen außer Acht gelassen. Die Abflüsse aus einem Einzugsgebiet werden durch wechselnde Frostbedingungen massiv verändert, weil die Fließwege des Schmelz- und Regenwassers je nach Frost- und Bodenbedingungen völlig verschieden sein können (Flühler & Roth, 2003, S.161).

Die jährlichen Wasserhaushaltsgrößen in Tabelle 4.2 zeigen unter Berücksichtigung der Wassergehaltsänderungen eine übereinstimmende Wasserbilanz. Die simulierten Sickerwasserraten zeigen eine Unterschätzung der Messwerte von durchschnittlich 6.85 % bzw. 29 mm jährlich. Dabei liegt die maximale Unterschätzung im Jahr 1999

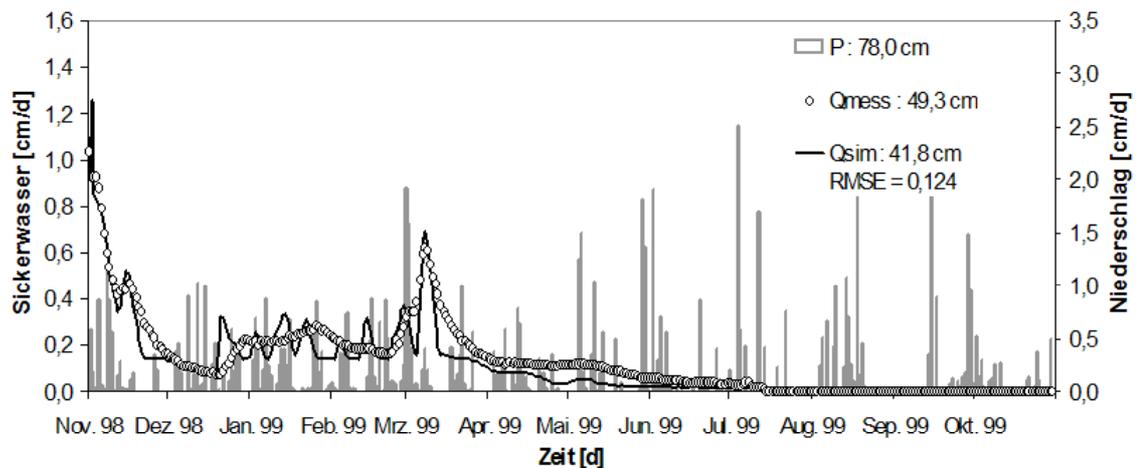


Abbildung 4.3: Gemessene und simulierte Sickerwasserraten im Gras-Lysimeter und Niederschlagswerte im hydrologischen Jahr 1999.

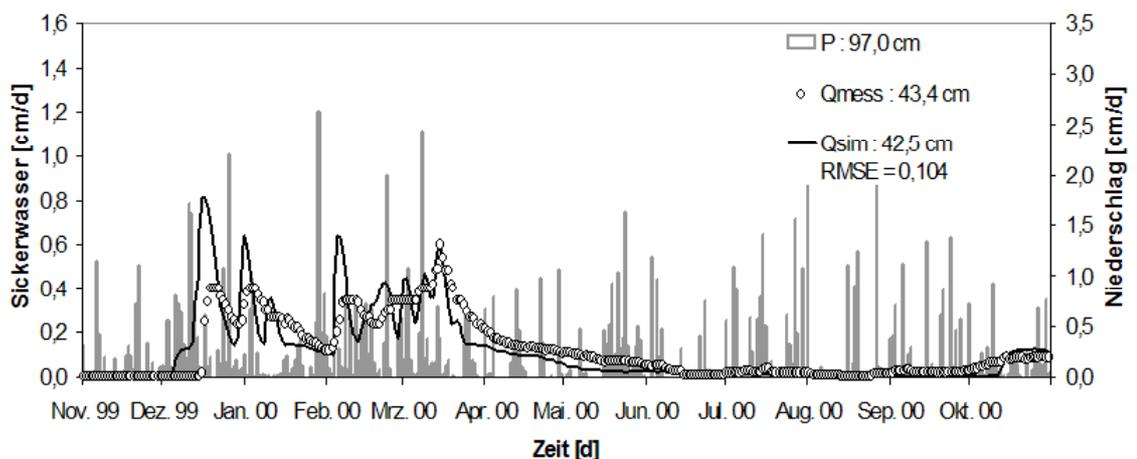


Abbildung 4.4: Gemessene und simulierte Sickerwasserraten im Gras-Lysimeter und Niederschlagswerte im hydrologischen Jahr 2000.

bei 15.3%. Im Jahr 2004 tritt bei höheren Niederschlägen eine Überschätzung von 4.68% ein, wobei diese Abweichung absolut gesehen 16 mm Bodenwasser entspricht. Aus den Messungen geht hervor, dass durchschnittlich 48.7% des Niederschlags als Sickerwasser aus dem Lysimeter entweicht, in der Simulation sind es 45.3%.

Die berechneten jährlichen Werte der aktuellen Evaporation, Transpiration und Interzeptionsverdunstung variieren im Vergleich zu den Durchschnittswerten nur minimal im Bereich zwischen 7 bis 20 mm. Diese drei Wasserhaushaltsgrößen zeigen für

Tabelle 4.2: Gemessene Niederschlags- und Sickerwasserwerte sowie berechnete jährliche Wasserhaushaltsgrößen im Graslysimeter mit der relativen Abweichung ΔQ des berechneten Sickerwassers vom gemessenen.

hydr. Jahr	P [cm]	Q_{mess} [cm]	Q_{sim} [cm]	aE [cm]	aT [cm]	I [cm]	ΔQ %
1998	101.0	48.8	42.8	11.3	28.4	5.4	-12.22
1999	78.0	49.3	41.8	12.0	31.2	5.1	-15.30
2000	97.0	43.4	42.4	12.5	31.1	5.9	-2.28
2001	79.2	39.8	35.1	11.2	29.9	5.2	-11.86
2002	95.8	43.1	42.4	12.1	30.3	5.3	-1.52
2003	76.4	39.3	37.0	11.0	30.9	4.0	-5.80
2004	87.0	35.4	37.0	12.1	31.4	4.7	4.68
1998-2004	614.4	299.0	278.5	82.2	213.0	35.6	
Durchschnitt	87.8	42.7	39.8	11.7	30.4	5.1	-6.85

den Zeitraum 1998-2004 Anteile von 13.4 %, 34.7 % bzw. 5.8 % N¹. Die Abschätzung der Transpiration mit HYDRUS-1D erreicht vergleichbare 36.9 % der durchschnittlich für 1966-1998 mit LYFE berechneten Menge, was auf eine langfristig konstante Wurzeltiefe im Gras zurückzuführen ist, die begrenzt wachstumsbedingten Schwankungen unterliegt. Die in HYDRUS-1D geschätzten Werte für Evaporation und Interzeptionsverdunstung liegen deutlich höher als die mit LYFE geschätzten. Hierbei ist zum einen zu berücksichtigen, dass sich die Schätzungen mit LYFE auf die zurückliegenden Jahre 1966-1998 beziehen, in denen auch höhere durchschnittliche Sickerwassermengen von 54 % des Niederschlags im Graslysimeter auftraten. Zum anderen liegen grundsätzliche Unterschiede bei der Berechnung und Parametrisierung der Interzeptionsverluste für Graslysimeter in LYFE und HYDRUS-1D vor (Kapitel 3.3).

Es zeigt sich in HYDRUS-1D, dass Simulationen ohne Berücksichtigung der Interzeption eine gleichbleibende Wasserbilanz aufweisen. In diesem Fall steht das nicht interzeptierte Wasser der potentiellen Transpiration zur Verfügung, damit erhöht sich zum Teil die aktuelle Wurzelaufnahme und zum Teil die Sickerwassermenge, wodurch sich die Wasserbilanz vergleichbar gut schließt. In diesem Fall werden etwas höhere Sickerwasserraten errechnet, wodurch die jährliche Sickerwasserbilanz minimal um 1 bis 2 % verbessert wird.

Die in HYDRUS-1D getroffene Annahme, dass, wenn interzeptiertes Wasser auf den Blättern liegt, die stomatäre Verdunstung der Blätter und damit direkt das Wasser zur Wurzelaufnahme um diese Menge eingeschränkt wird (siehe Gl. 3.13),

¹% N = % des Freilandniederschlags

ist diskutabel. Hier kann die für die Evaporation zur Verfügung stehende Energie auch anteilig zur Interzeptionsverdunstung beitragen, so wie es in LYFE umgesetzt wird. Der Vorteil der in HYDRUS-1D implementierten Lösung liegt in der einfachen Parametrisierung der Berechnung im Fall einer einfachen Vegetation wie Gras, die zu vergleichbar guten Ergebnissen führt.

4.1.3 Ergebnisse Kiefernlysimeter

Im hydrologischen Jahr 1999, in dem für das Areal eine durchschnittliche Niederschlagsmenge von 780 mm/a auftritt, wird die gemessene jährliche Sickerwassermenge im Kiefernlysimeter von 291 mm/a mit 321 mm/a in der Simulation überschätzt. Der Sickerwasserverlauf (Abb. 4.5) zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten, abgesehen vom November 1998. Die gemessene Sickerwasserrate ist hier deutlich niedriger, was zum einen auf eine Unterschätzung der Wasserverluste durch Interzeption und Transpiration und zum anderen auf nicht berücksichtigte Schneeniederschläge oder Frostbedingungen zurückgeführt werden kann.

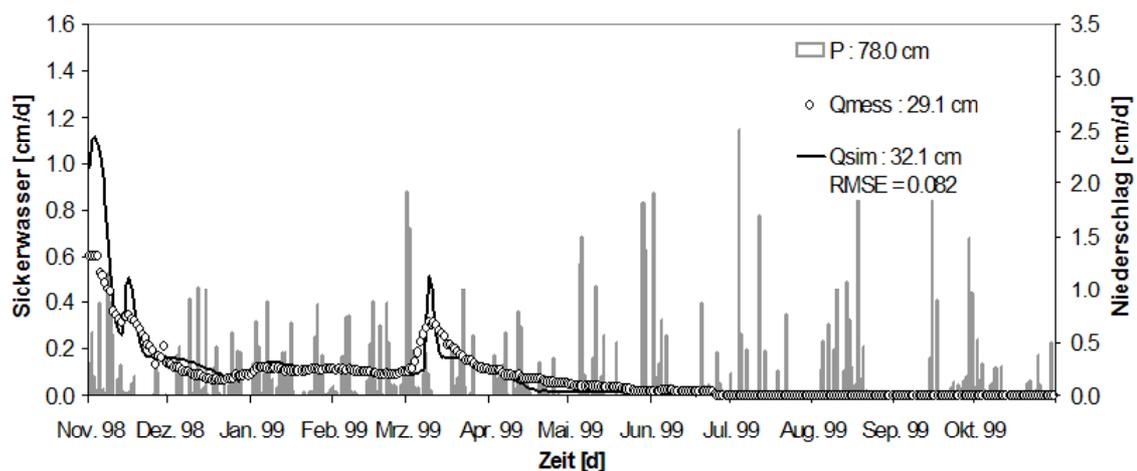


Abbildung 4.5: Gemessene und simulierte Sickerwasserraten im Nadel-Lysimeter und Niederschlagswerte im hydrologischen Jahr 1999.

In dem Monat November 1998 treten fast durchgehend Niederschläge auf, der Laubinterzeptionsverlust steigt dementsprechend an und der Streuinterzeptionsverlust, die Wurzel Aufnahme fällt aber gering aus (Abb. 4.6). Die Wurzel Aufnahme wird in dem LYFE-Submodell in den Herbst/Wintermonaten auf 50 % eingeschränkt, daher weist die aktuelle Transpiration im Gegensatz zu den Sommermonaten niedrigere Werte auf. Eine später einsetzende Einschränkung der Transpiration könnte zur Verbesserung der Berechnungen beitragen.

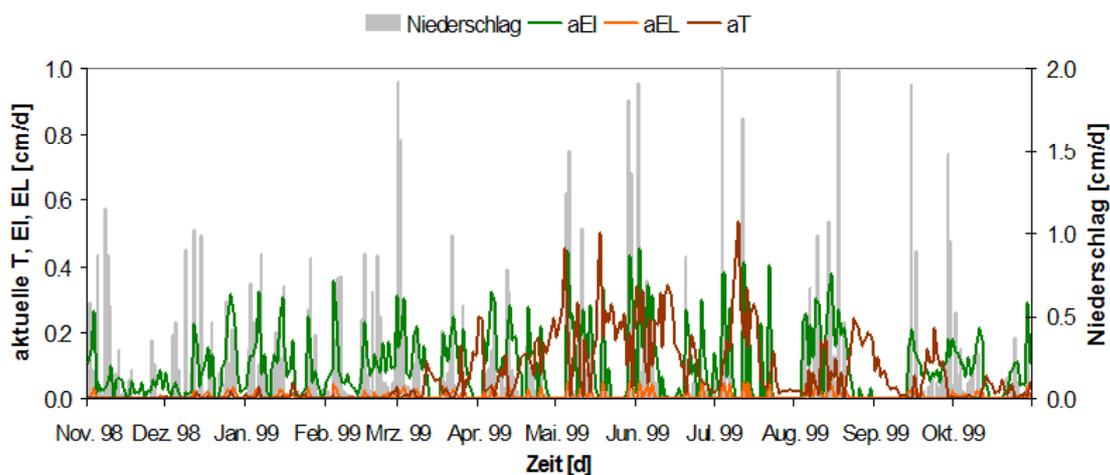


Abbildung 4.6: Gemessene Niederschlagswerte und berechnete aktuelle Transpiration, Laub- und Streuinterzeptionsverluste im Nadel-Lysimeter im hydrologischen Jahr 1999.

Die Wasserbilanz in der Tabelle 4.4 zeigt, dass durchschnittlich 20.3% vom Niederschlag das Lysimeter als Sickerwasser verlassen. Damit entsteht von 1998-2004 beim Kiefernbestand ein Verlust von 80% des Niederschlags durch Interzeptionsverdunstung und Transpiration. Im Zeitraum 1974-1998 war der durchschnittliche Verlust des Niederschlags mit 76.1% um fast 4% wegen wachsendem Bestand niedriger. Die gemessene durchschnittliche Sickerwassermenge wird in den Simulationen im Zeitraum 1998-2004 um 6.6% überschätzt, wobei die simulierte Sickerwassermenge 22.1% vom Niederschlag ausmacht.

Die Aufteilung der Verlustgrößen im Wasserhaushalt erfordert einen hohen Parametrisierungsaufwand. Mit dieser Voraussetzung zeigt die Wasserbilanz, bezogen auf die simulierten Jahre 1998-2004, eine gute Übereinstimmung. Zur Berechnung der jährlichen Wasserbilanz muss die Änderung des Bodenwasserspeichers mitberücksichtigt werden. Mit den aktuellen Bestandsdaten der oberirdischen Entwicklung der Weymouth-Kiefern lässt sich die Blattspeicher- und Streuspeicherinterzeption anpassen. Die Laubinterzeptionsverdunstung aEI mit 41.2% N zeichnet sich als deutliche Verlustgröße im Vergleich zur Streuinterzeption aEL mit 4.3% N aus. Messungen des durchtropfenden Niederschlags und des Stammablaufs in den Jahren 1977-1980 weisen bei einem damals 20 Jahre jüngeren Bestand einen durchschnittlichen Benetzungsverlust in den Baumkronen von 32% N (Schroeder, 1989) auf. Es ist plausibel, dass bei einem wachsendem Bestand nach 20 Jahren der Verlust durch die Benetzung der Baumkronen ebenfalls steigt, da die durchschnittliche Baumhöhe von 1977 bis 1997 um rund 7.5 Meter und bis 2004 zusätzlich um 2 Meter zunahm.

Aufgrund der fehlenden Informationen zur unterirdischen Entwicklung der Bäu-

Tabelle 4.3: Gemessene Niederschlags- und Sickerwasserwerte sowie berechnete jährliche Wasserhaushaltsgrößen im Nadellysimeter mit der relativen Abweichung ΔQ des berechneten vom gemessenen Sickerwasser.

hydr. Jahr	P [cm]	Q_{mess} [cm]	Q_{sim} [cm]	aEI [cm]	aT [cm]	aEL [cm]	ΔQ %
1998	101.0	12.6	13.0	40.3	24.2	3.6	3.10
1999	78.0	29.1	32.1	35.7	26.4	3.1	10.30
2000	97.0	15.4	19.2	43.3	35.6	4.1	24.86
2001	79.2	11.2	12.7	37.0	28.4	3.9	13.92
2002	95.8	17.1	18.1	36.6	32.7	4.4	6.05
2003	76.4	21.2	23.1	25.7	30.7	2.9	9.42
2004	87.0	18.3	17.8	34.5	29.9	4.1	-2.98
1998-2004	614.4	124.8	136.0	253.0	193.8	26.1	
Durchschnitt	87.8	17.8	19.4	36.1	27.7	3.7	6.60

me ist es sehr schwierig, die Wurzelaufnahme anzupassen. Ausschlaggebend für die Berechnung der aktuellen Werte ist die vorgegebene Wurzelverteilung im Bodenprofil (Klein, 2000). Die aktuelle Transpiration macht in den Simulationen 31.5 % des Niederschlags aus. Dabei wurde im Vergleich zu den Simulationen von 1974-1998 die Wurzeltiefe für den Zeitraum 1997-2004 auf 200 cm angehoben, da sonst der Verlust durch die Wurzelaufnahme noch weiter unterschätzt worden wäre.

4.1.4 Ergebnisse Eichen/Buchenlysimeter

Wie im Kiefernlysimeter findet auch im Laublysimeter der Sickerwasserausfluss fast ausschließlich in den Wintermonaten statt, während in den Sommermonaten fast kein Bodenwasser die Lysimeterbasis verlässt. Das hydrologische Jahr 1999 zeigt beim Nadel- und beim Laublysimeter einen recht frühen Einsatz des Sickerwasserflusses im Monat November 1998, was auf das regenreiche Vorjahr mit niedrigem Sickerwasser zurückzuführen ist (Abb. 4.7). Im Oktober 1998 sind 196 mm Niederschlag gefallen, das sind knapp 20 % des Jahresniederschlags (siehe Tab. 4.4). Dadurch ist es plausibel dass im November 1998 ein hoher Wassergehalt im Lysimeter vorhanden war.

Die kumulierten Wasserhaushaltsgrößen in der Tabelle 4.4 zeigen bei den Messungen, dass nur durchschnittlich 22.1 % N als Sickerwasser das Lysimeter verlassen. Damit entsteht 1998-2004 im Laublysimeter ein Verlust von 77.9 % N durch Interzeption und Transpiration. Im Zeitraum 1974-1998 war der durchschnittliche Verlust des Niederschlags über diese Pfade mit 64.6 % um 13.3 % niedriger. Die gemessene durchschnittliche Sickerwassermenge wird im Zeitraum 1998-2004 überschätzt, wobei

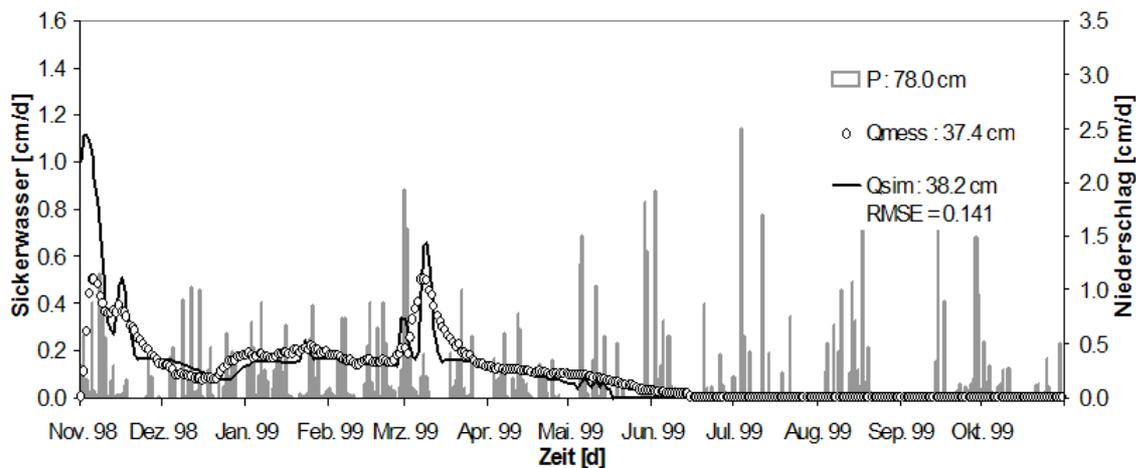


Abbildung 4.7: Gemessene und simulierte Sickerwasserraten im Laub-Lysimeter und Niederschlagswerte im hydrologischen Jahr 1999.

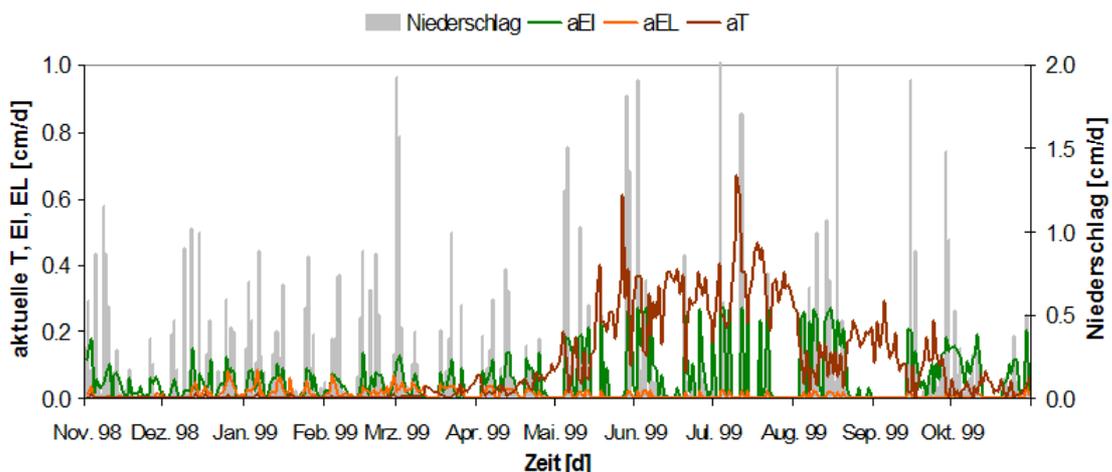


Abbildung 4.8: Gemessene Niederschlagswerte und berechnete aktuelle Transpiration, Laub- und Streuinterzeptionsverluste im Laub-Lysimeter im hydrologischen Jahr 1999.

sie 27.6 % vom Niederschlag ausmacht.

Im Laublysimeter bestehen die größten Diskrepanzen zwischen Simulationsergebnissen und Sickerwassermessungen. Die Simulationen überschätzen die Messungen durchschnittlich um 20.01 %. Bezogen auf die einzelnen Jahreswerte, ist sie 1999 mit 2.04 % Abweichung am geringsten und 2003 mit 59.01 % am höchsten. Anhand der kumulierten simulierten Wasserhaushaltsgrößen geht die Bilanz auf, in Bezug auf die

Tabelle 4.4: Gemessene Niederschlags- und Sickerwasserwerte sowie berechnete jährliche Wasserhaushaltsgrößen im Laublysimeter mit der relativen Abweichung ΔQ des berechneten Sickerwassers vom gemessenen.

hydr. Jahr	P [cm]	Q_{mess} [cm]	Q_{sim} [cm]	aEI [cm]	aT [cm]	aEL [cm]	ΔQ % Q_{mess}
1998	101.0	13.4	18.7	25.4	31.1	4.8	39.10
1999	78.0	37.4	38.2	21.3	36.2	4.1	2.04
2000	97.0	21.2	24.6	26.5	37.4	5.2	16.12
2001	79.2	14.0	20.6	23.4	35.9	4.6	47.08
2002	95.8	17.4	22.1	25.3	36.2	4.9	27.39
2003	76.4	15.9	25.3	18.8	38.7	3.0	59.01
2004	87.0	16.5	20.2	25.1	35.2	4.0	22.62
1998-2004	614.4	135.8	169.7	165.9	244.9	35.6	
Durchschnitt	87.8	19.4	24.2	23.7	35.0	4.4	20.01

gemessene Sickerwassermenge ist in den Simulationen der Verlust durch Interzeption und Wurzelaufnahme als zu niedrig zu betrachten.

Die Laubinterzeptionsverdunstung mit 27 %N zeichnet sich im Vergleich zur Streuinterzeption mit ca. 5 %N als deutliche Verlustgröße aus. Messungen des durchtropfenden Niederschlags in den Jahren 1977-1980 ergaben bei einem damals 20 Jahre jüngeren Bestand einen durchschnittlichen Benetzungsverlust in den Baumkronen von 12 % des Freilandniederschlags (Schroeder, 1989). Die Laubbäume sind in den 20 Jahren um durchschnittliche 7.3 Meter bis 1997 und bis 2004 um zusätzliche 3.8 Meter gewachsen. Es ist, wie bei den Kiefern, plausibel, dass bei einem wachsenden Bestand der Laubinterzeptionsverlust ebenfalls ansteigt.

Bei der Berechnung der Interzeptionsverdunstung für Baumbestände in LYFE wird die Entwicklung der Blattspeicherkapazität S_{max} über den LAI berücksichtigt, während durch die aktuellen Baumhöhen der aerodynamische Widerstand und damit die potentielle Evapotranspiration an die Bestandsentwicklung angepasst wird. Im Gegensatz dazu wird die Streuspeicherkapazität L_{max} bei Kiefern ganzjährig konstant und bei Laubbäumen jahreszyklisch konstant gehalten. Da die Kiefern keinem Nadelwechsel unterliegen, wird die Annahme der Benetzung einer kontinuierlich vorhandenen Streudecke mit einer konstanten Streuspeicherkapazität gerecht. Bei Laubbäumen findet ein jährlicher Wechsel der gesamten Laubmenge statt, hier wird der jährliche Zuwachs an abfallender Laubmenge in der konstant gehaltenen Streuspeicherkapazität nicht mitberücksichtigt. Das wirkt sich direkt in der Unterschätzung der Interzeptionsverluste vor allem in den Monaten November und Dezember aus, in

dem durch den Laubabwurf die Streudecke zunimmt.

Auch für die Laubbäume sind keine Informationen zur unterirdischen Entwicklung der Bäume vorhanden. Damit kann die Wurzelaufnahme nur durch die Annahme fiktiver Wurzelverteilungen im Bodenprofil angepasst werden. Die aktuelle Transpiration macht in den Simulationen 31.5 % des Niederschlags aus, wenn die Wurzeltiefe von 140 cm (1974-1998) auf 340 cm (1998-2004) angehoben wird. Ansonsten würde der Verlust durch die Wurzelaufnahme noch weiter unterschätzt werden. Die Annahme einer so gravierenden Erhöhung der maximalen Wurzeltiefe zeigt sich notwendig, da die Wurzelaufnahme entsprechend der normierten Wurzelverteilung nur in den Tiefen stattfinden kann, in denen der Boden auch einen höheren Wassergehalt aufweist. In den Lysimetern unterliegt der Wassergehalt großen Schwankungen in den oberen 150 cm, während er sich im unteren Bereich ab 300 cm der gesättigten Randbedingung annähert. In den Tiefen dazwischen zeigen Simulationen einen recht niedrigen Wassergehalt, was auf der hohen Leitfähigkeit der Sandschicht beruht, in der das Wasser schnell abfließt.

4.2 Ergebnisse der Bromidversuche und Anwendung der Modelle

4.2.1 Quantitative Auswertung der Versuchsdaten für alle drei Lysimeter

Die aus den Bromid-Versuchen (siehe Kap. 2.4) gewonnenen Daten wurden für den Beprobungszeitraum vom 15. November 1998 bis Februar 2004 analysiert, wobei im Graslysimeter der Beprobungszeitraum bereits im Juli 2001 endet, da die Bromidkonzentrationen im Sickerwasser die Nachweisgrenze unterschritten. In der Tabelle 4.5 sind bilanzierte Ergebnisse aus dem Bromidversuch zusammengefasst. In allen drei Lysimeter sind in dem Beprobungszeitraum etwa 340 g Bromid mit dem Sickerwasser ausgetreten. Die Wiederfindungsraten liegen, ausgehend von der Auftragsmenge von 604 g bei etwa 56.5 %, somit berechnen sich auf allen drei Versuchsflächen Bromid-Verluste von über 40 %. Im Graslysimeter ist in einer halb so langen Periode (962 Tage) die gleiche Masse an Bromid transportiert worden wie in den baumbewachsenen Lysimetern (1911 Tage).

Tabelle 4.5: Übersicht der quantitativen Ergebnisse aus Bromidversuchen in den Gras-, Kiefern-, Eichen/Buchen-Lysimeter.

Lysimeter	Aufenthaltszeit ¹ [d]	kum. Bromidmasse ² [g]	Bromid-Wiederfindungsrate ³ [%]	kum. Sickerwasser ⁴ [mm]	mittlerer Wasserfluss (\bar{j}_w) [mm d ⁻¹]
Gras	962	340.73	56.41	1230	1.28
Laub	1911	339.70	56.24	1024	0.54
Nadel	1911	331.40	54.87	927	0.49

¹ zeitlicher Abstand zwischen Perkolatation und letzter Probe mit nachweisbaren Konzentrationen

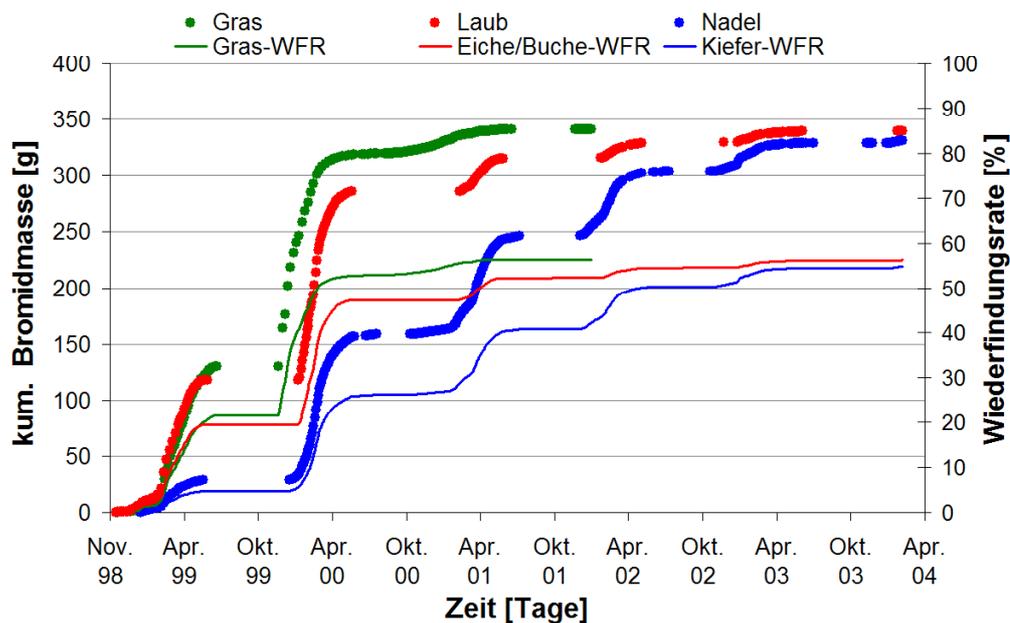
² kumulierte Bromidmasse, ausgetragen mit dem Sickerwasser über die gesamte Lysimeterfläche (400 m²)

³ prozentualer Anteil an der aufgetragenen Bromidmasse von 604 g

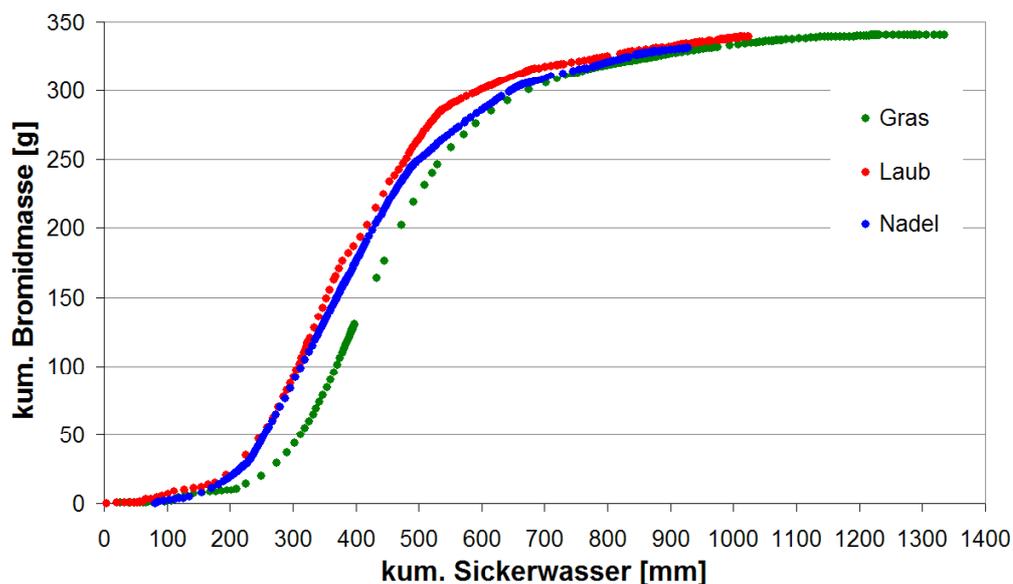
⁴ im Aufenthaltszeitraum durchgesickertes Wasservolumen bezogen auf 1 mm² Fläche

Die kumulierten Sickerwasserhöhen liegen mit Werten um 1000 mm in allen drei Fällen auf den ersten Blick nicht weit auseinander. Allerdings sind bei gleichen Witterungsbedingungen im Graslysimeter etwa 25 % mehr Sickerwasser in 2.6 Jahren durchgesickert als in den Eichen/Buchen- und Kiefernlysimeter in 5.2 Jahren. Damit fand während der Versuchsperiode im Graslysimeter ein mittlerer Wasserfluss (Darcy-Fluss) von $\bar{j}_w = 1.28 \text{ mm d}^{-1}$ und in den bewaldeten Lysimetern von 0.54 bzw. 0.49 mm d⁻¹ statt. Das Verhältnis der mittleren Abstandsgeschwindigkeit von Gras- zu den von Waldlysimeter liegt somit etwa bei 2.5 zu 1.

Die kumulierten Bromidmassen und die Wiederfindungsraten der am unteren Lysimeterrand ausgetragenen Masse werden in der zeitlichen Bilanz graphisch dargestellt.



(a) Kumulierte Bromidmasse und Wiederfindungsrate



(b) zeitlose Bilanz

Abbildung 4.9: (a) Kumulierte Bromidmasse im Sickerwasser und prozentuale Wiederfindungsrate (WFR) (b) Bromidbilanz in der zeitlosen Darstellung, kumulierte Bromidmasse aufgetragen gegen kumuliertes Sickerwasser, anfallend ab dem Applikationszeitpunkt im Gras-, Eichen/Buchen- und Kiefernlysimeter.

In Abbildung 4.9a sieht man deutlich die Unterschiede in den Zeitpunkten, zu denen die kumulierte Bromidmasse den maximalen Wert erreicht. Im Graslysimeter wird im Vergleich zum Laub- und Nadellysimeter dieser Zeitpunkt wesentlich früher erreicht. Betrachtet man den Verlauf der bilanzierten Kurve, aber auch dem der Durchbruchkurven (Abb. 2.3), so zeigen sich im Verlauf vor der ersten Sommerperiode im Gras- und Laublysimeter Übereinstimmungen beim Anstieg und bei den maximalen Konzentrationen. Deutlich abweichend davon stellt sich der Bromiddurchbruch im Nadellysimeter dar. Diese Diskrepanz im Durchbruchverhalten weist auf die unterschiedlichen Bodenwasserverhältnisse hin, die sich durch den unterschiedlichen jahreszeitlichen Vegetationszustand in diesem Zeitraum ergeben.

In der zeitlosen Bilanz wird der kumulierte Austrag an Bromid gegen die kumulierte Sickerwasserhöhe aufgetragen. Die Entwicklung der Bilanz zeigt, dass der zu erwartende Restaustrag nach dem Beprobungszeitraum im Nadel- und Laub-Lysimeter vernachlässigbar ist (Abb. 4.9b). Der Verlauf in dieser Darstellung ist ähnlich für alle drei Lysimeter. Damit wird deutlich sichtbar, dass der Transport von Bromid den gleichen Prozessen unterliegt, daher wird er als idealer Tracer eingesetzt. Entscheidend für die Verlagerung von gelöstem Bromid ist die zeitliche Dynamik der Bodenwasserbewegung.

Da alle drei Lysimeterbecken mit gleichem Boden aufgefüllt wurden und daher annähernd gleiche bodenhydraulische Bedingungen vorliegen, kann unter identischen Witterungsbedingungen nur der unterschiedliche Einfluss des Vegetationsbestandes die unterschiedliche Entwicklung der Wasserhaushaltsgrößen erklären. Bei der Waldvegetation wird die Infiltration durch Verluste über Interzeption in größerem Maße als beim Gras verringert. Zusätzlich wird unter Baumbestand durch die Transpiration der Bodenwassergehalt noch weiter verringert, so dass der Boden unter Waldbewuchs insgesamt deutlich weniger Wasser führt. Bei niedrigem Wassergehalt findet ein langsamerer Wasserfluss statt und verursacht damit auch einen längeren Transport einer gelösten Substanz, was sich in der zeitlichen Ausdehnung der Bromiddurchbruchkurven (Abb. 2.3) widerspiegelt.

Wahrscheinlich wird der Wasserhaushalt durch die im Winter und Frühjahr noch nicht entwickelte Laubdecke bei den Stieleichen und Rotbuchen nicht so stark verändert wie bei den ganzjährig grünen Weymouth-Kiefern. Das könnte eine Erklärung für die Übereinstimmung beim Bromiddurchbruch im Gras- und Laublysimeter vor der ersten Sommerperiode sein.

4.2.2 Charakterisierung der Bromid-Durchbruchkurven mit der Methode der Momente

Die Charakterisierung der Bromid-Durchbruchkurven mit der Methode der Momente wird anhand der gemessenen Sickerwasserdaten und der flussgemittelten Konzentrationen vorgenommen, die auf eine Transporttiefe von 3.50 m bezogen werden. Die berechneten Momente und die Parameter für die *probability density function* (*pdf*,

entsprechend Kapitel 3.6) sind in der Tabelle 4.6 zusammengefasst.

Tabelle 4.6: Momente und Parameter der *Fickian pdf*, ermittelt mit der Methode der Momente.

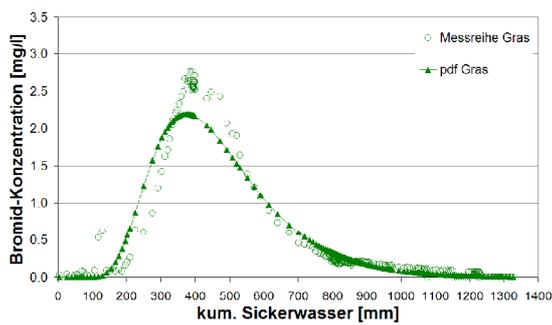
Lysimeter	μ_I [mm]	σ_I^2 [mm ²]	$\lambda^{(I)}$ [mm]	$V^{(I)}$ [mm mm ⁻¹]	$D^{(I)}$ [mm ² mm ⁻¹]	\bar{v} [mm d ⁻¹]
Gras	471	33914	268	7.44	1993	9.51
Laub	404	29527	316	8.66	2738	4.64
Nadel	413	26598	273	8.48	2315	4.11

Das erste Moment μ_I entspricht der Durchbruchmenge Wasser, mit welcher die Hälfte der Masse an Bromid die Transporttiefe erreicht hat. Dieser Parameter kann auch in der zeitlosen Darstellung des kumulierten Bromidaustrags (Abb. 4.9a) abgelesen werden. Die Durchbruchmenge für Nadel und Laub ist mit 404 und 413 mm annähernd gleich, beim Gras ist sie ca. 70 mm höher. Die ermittelte Dispersivität, $\lambda^{(I)} = \frac{D^{(I)}}{V^{(I)}}$, liegt in allen drei Lysimetern im Mittel bei 286 mm mit einer Abweichung von 30 mm, wobei im Gras-Durchbruch die kleinste Dispersivität mit 268 mm und im Laub-Durchbruch der größere Wert 316 mm vorliegt.

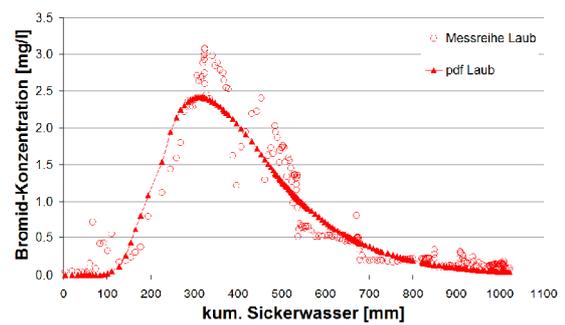
Aus dem Zusammenhang $I(t) = \int_0^t j_w(\dot{t}) dt = \bar{j}_w t$ kann der Bezug zwischen der zeitlosen Porenwassergeschwindigkeit und der zeitbezogenen mittleren Porenwassergeschwindigkeit \bar{v} abgeleitet werden: $\bar{v} = V^{(I)} \bar{j}_w$. Mit den mittleren Wasserflusswerten in der Tabelle 4.5, die aus der Bilanzierung der Bromid-Durchbruchskurve resultieren, wird die mittlere Porenwassergeschwindigkeit in den Durchbruchskurven geschätzt. Die Werte spiegeln die Verhältnisse der mittleren Abstandsgeschwindigkeit in den jeweiligen Lysimetern wider. Die mittlere Porenwassergeschwindigkeit im Graslysimeter liegt bei $\bar{v} = 9.5 \text{ mm d}^{-1}$ und damit 2.3-fach höher als im Laub- und Nadellysimeter mit $\bar{v} = 4.6 \text{ mm d}^{-1}$ und 4.1 mm d^{-1} .

Die Anpassung der flussgemittelten Konzentration mittels der *Fickian pdf* (Gl. 3.20) an die gemessenen Daten kann in der Abbildung 4.10 beurteilt werden. Hier zeigt sich, dass die Anpassung des Konzentrationsverlaufs im Nadellysimeter eine gute Übereinstimmung erreicht. Im Gras- und Laublysimeter wird ein erhöhter Konzentrationsanstieg wiedergegeben, aber die maximal gemessenen Konzentrationen werden nicht erreicht. Der abnehmende Konzentrationsverlauf wird in allen drei Versuchen gut mit der *Fickian pdf* wiedergegeben.

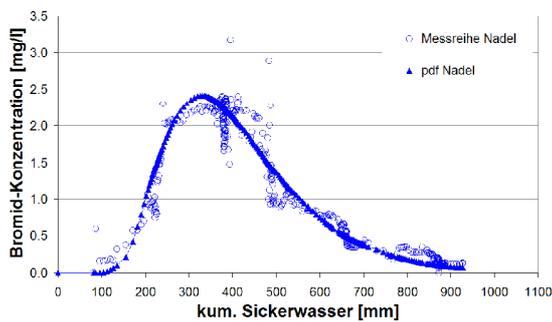
Die mittels der *probability density function* beschriebenen höheren Konzentrationen im Anstieg können durch die Berücksichtigung des kurzzeitigen Konzentrationsanstiegs verursacht worden sein, der bis etwa 100 mm Sickerwasser durch präferenziellen Fluss hervorgerufen wird. Der präferenzielle Fluss entsteht, wenn Makroporen vorliegen, die durch Wurmgänge oder Wurzelpfade entstanden sind und durch die das



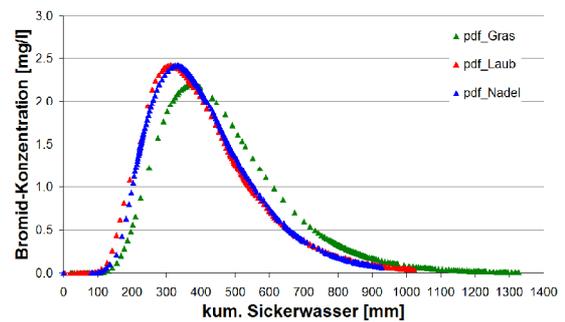
(a) pdf im Graslysimeter



(b) pdf im Laublysimeter



(c) pdf im Nadellysimeter



(d) Im Vergleich

Abbildung 4.10: Mit der Methode der Momente angepasste *Fickian pdf* (Gl. 3.20) an die Bromid-Konzentrationen im Sickerwasser der jeweiligen Lysimeter.

Bodenwasser deutlich schneller gelöste Substanz transportieren kann. Dieser Prozess wird bei der Anwendung der *Fickian pdf* nicht mitberücksichtigt, hier erfolgt die Beschreibung der Wasserbewegung unter der Grundannahme eines konvektiv-dispersiven Transports. Andere Prozesse, die zur Entstehung der Durchbruchkurve beitragen, wie der präferenzielle Fluss, können zu einer verzerrten Anpassung mit der Methode führen.

Für die Auswertung eines Versuches mit so großen Tiefen wären Messungen in verschiedenen Tiefen sehr vorteilhaft. Die dadurch ermittelten *probability density functions* für unterschiedliche Transportdistanzen und Parameter würden die Güte der Anpassung und die Spannweite der Parameterwerte deutlich verbessern.

4.2.3 Simulationsergebnisse der Konvektions-Dispersions-Gleichung

Bromid im Graslysimeter

Die Dispersivität $\lambda^{(l)}$, die durch die Methode der Momente gewonnen werden konnte, kann für die numerische Simulationen der Konvektions-Dispersions-Gleichung unter transienten Flussbedingungen eingesetzt werden. Der Parameter steht repräsentativ als mittlerer Wert für die gesamte Bodensäule von 3.50 m. Die Tatsache, dass in allen drei Lysimetern drei heterogene Bodenhorizonte vorliegen, wird in Hinsicht auf diesen Parameter vernachlässigt. Die Dispersivität wird damit in allen drei Schichten auf den im jeweiligen Lysimeter ermittelten Wert $\lambda^{(l)}$ gesetzt.

In einem Review zu Dispersivitäten bei Transportmodellierung im Boden wird festgestellt, dass höhere Werte eher unter gesättigten als unter ungesättigten Flussbedingungen beobachtet werden (Vanderborght & Vereecken, 2007). Ebenfalls wird eine Erhöhung der Werte bei zunehmender Transporttiefe und experimenteller Skala dokumentiert. Unter den aus 57 Publikationen zusammengetragenen Daten sind nur vier Studien auf einer Feldskala bis 300 cm und maximal bis 532 cm Tiefe durchgeführt worden. Die Spannweite der unter unterschiedlichen experimentellen Bedingungen ermittelten Dispersivitäten reicht dabei von minimal 4.8 cm bis maximal 42.8 cm, damit liegen die in dieser Studie bestimmten $\lambda^{(l)}$ -Werte im oberen Skalenbereich. Vor dem Hintergrund des in der Literatur beschriebenen Wertebereichs erscheint es sinnvoll, Simulationen mit Werten von 10, 20 und 40 cm im Vergleich zur Simulation mit dem ermittelten $\lambda^{(l)} = 26.8$ cm durchzuführen.

Da bei der Modellierung reine Transportprozesse betrachtet werden und keine Senken - weder durch Abbau noch durch Sorption - vorhanden sind, führen die Simulationen mit der gesamten applizierten Bromidmenge zu entsprechend überhöhten Konzentrationen in der Durchbruchkurve. Aufgrund dessen werden die Simulationen mit einer Bromid-Konzentration von $1.706 * 10^3$ mg l⁻¹ im Infiltrationsfluss durchgeführt, die 56.5 % der tatsächlich bei der Versuchsdurchführung applizierten Bromidmasse entspricht. Damit richten sich die Simulationsergebnisse nach der Wiederfindungsrate, die annähernd in allen drei Lysimetern gleich ist.

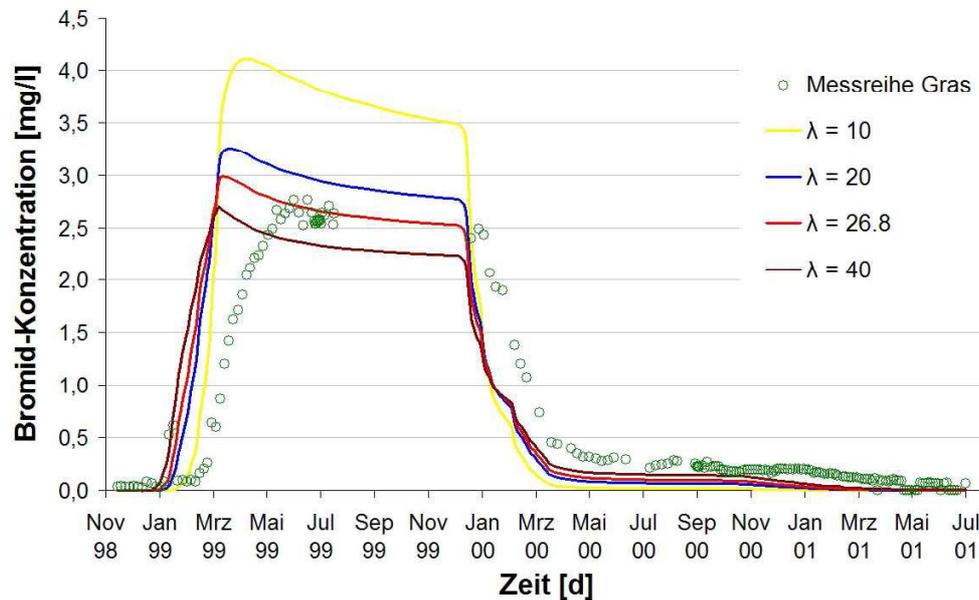
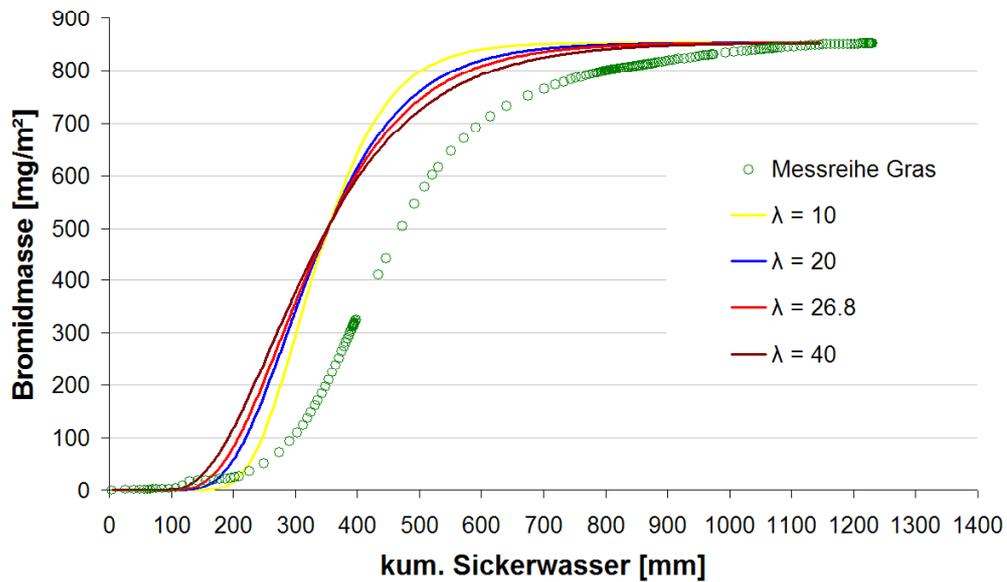


Abbildung 4.11: Gemessene und simulierte Bromid-Durchbruchkurven im Graslysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse an Bromid mit geschätzter Dispersivität von $\lambda^{(I)} = 26.8$ cm und Variation von λ .

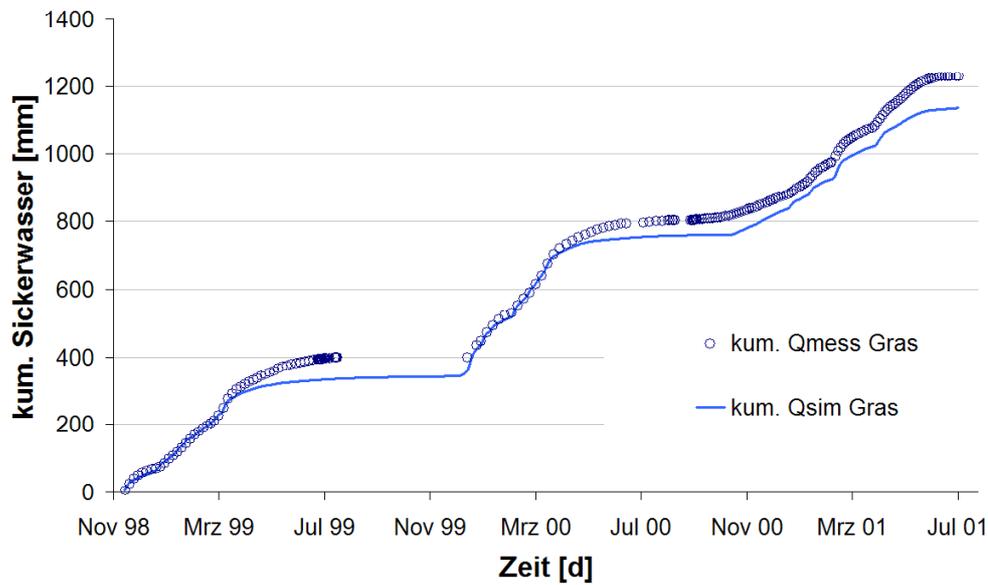
Für das Graslysimeter berechnete Durchbruchkurven sind in Abbildung 4.11 dargestellt. Mit dem abgeschätzten Parameter $\lambda^{(I)}$ erfolgt der Durchbruch im Vergleich zu den Messwerten zu früh, annähernd gut wird die maximale Konzentrationshöhe wiedergegeben. Mit der höheren Dispersivität von $\lambda = 40$ cm erreicht man niedrigere Konzentrationen, jedoch erfolgt der Durchbruch noch frühzeitiger. Eine entgegengesetzte Wirkung resultiert bei kleineren Dispersivitäten, wie mit $\lambda = 10$ cm. Mit allen vier Dispersivitätswerten wird das Tailing unterschätzt, wobei durch die Variation kaum ein Effekt in diesem Teil der Durchbruchkurve erzielt wird.

Die zeitlose Darstellung (Abb. 4.12a) zeigt die kumulierte Bromidmasse, die mit dem kumulierten Sickerwasser die Lysimeterbasis verlässt. Es ist deutlich zu sehen, dass unabhängig von der Wahl der Dispersivität der simulierte Durchbruch zu früh erfolgt. Unter Vernachlässigung dieser Vorverlagerung erzielt der Kurvenverlauf mit dem ermittelten $\lambda^{(I)}$ -Wert eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten. In Abbildung 4.12b gibt die berechnete Sickerwassermenge unter transienten Randbedingungen das gemessene Sickerwasser gut wieder, es zeigt sogar eine geringe Unterschätzung. Damit kann die simulierte Sickerwassermenge an sich nicht zu der Vorverlagerung des Bromiddurchbruchs beigetragen haben, so dass die Bodenwasserbewegung als Ursache für die in den Simulationen beobachtete Vorverlagerung in Frage kommt.

Die berechnete Vorverlagerung in der Durchbruchkurve kann anhand des ersten



(a)



(b)

Abbildung 4.12: (a) Zeitlose Darstellung der gemessenen und simulierten Bromidmasse pro m^2 im Graslysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse an Bromid unter Variation von λ ; (b) die kumulierte Sickerwassermenge über die Zeit.

Moments erörtert werden. In den Simulationen verlässt unter transienten Bedingungen die mittlere Masse an Bromid mit einer Sickerwassermenge von etwa 320 mm das Lysimeter, damit wäre anhand der *probability density function* die Durchbruchmenge $\mu_I = 320$ mm. Aus dem Zusammenhang $\mu_I = \frac{z}{\bar{v}(t)}$ ist bei einer Tiefe von $z = 3.5$ m die mittlere zeitlose Porenwassergeschwindigkeit $V^{(I)} = 10.94$ mm mm⁻¹ deutlich größer als $V^{(I)} = 7.44$ mm mm⁻¹, die aus der Charakterisierung der gemessenen Durchbruchkurve resultiert (Tab. 4.6). Die zeitliche mittlere Porenwassergeschwindigkeit liegt für die Messungen bei $\bar{v} = 9.51$ mm d⁻¹ und für die Simulationen bei $\bar{v} = 12.91$ mm d⁻¹ (Tab. 4.7). Damit herrscht bei der numerischen Berechnung des Bromiddurchbruchs unter transienten Randbedingungen eine um 26 % höhere mittlere Porenwassergeschwindigkeit als bei der Charakterisierung der gemessenen Durchbruchkurve mittels der *pdf*.

Tabelle 4.7: Vergleich der Parameter der *pdf*, die anhand der Messungen und anhand der numerischen Ergebnisse der Durchbruchkurven im Graslysimeter ermittelt wurden.

	μ_I [mm]	$V^{(I)}$ [mm mm ⁻¹]	\bar{j}_w [mm d ⁻¹]	\bar{v} [mm d ⁻¹]
Messungen	471	7.44	1.28	9.51
Simulation	320	10.94	1.18	12.92

Die Porenwassergeschwindigkeit beeinflusst effektiv die Dispersivität in der Konvektions-Dispersions-Gleichung (Gl. 3.16a). Sie steht mit $v(x, t) = \frac{j_w(x, t)}{\theta(x, t)}$ im Zusammenhang mit dem aktuellen Wasserfluss und dem Wassergehalt. Damit kann eine höhere Porenwassergeschwindigkeit einerseits durch einen zu niedrigen Wassergehalt und zum anderen durch eine erhöhte Abstandsgeschwindigkeit hervorgerufen werden. Hier spielt die Parametrisierung der hydraulischen Eigenschaften des Bodens, wie der Retentionsfunktion und der Leitfähigkeitsfunktion, eine entscheidende Rolle.

Bromid im Kiefernlysimeter

Die Wiederfindungsrate lag im Nadellysimeter bei 56.24 %, diese weicht nur gering von 56.5 % der verwendeten Bromidmenge in den Simulationen ab. Die ermittelte Dispersivität $\lambda^{(I)} = 27.3$ cm ist um 1.5 cm höher als beim Gras.

Die unter Variation der Dispersivität berechneten Durchbruchkurven in Abbildung 4.13 zeigen eine Überschätzung der gemessenen Konzentration ab März 1999, die bis nach der Trockenperiode bestehen bleibt. Mit dem geschätzten Parameter $\lambda^{(I)}$ erfolgt der Durchbruch recht zeitnah mit den Messwerten, wobei das Tailing wiederum unterschätzt wird. Mit der höheren Dispersivität erreicht man hier ähnlich wie

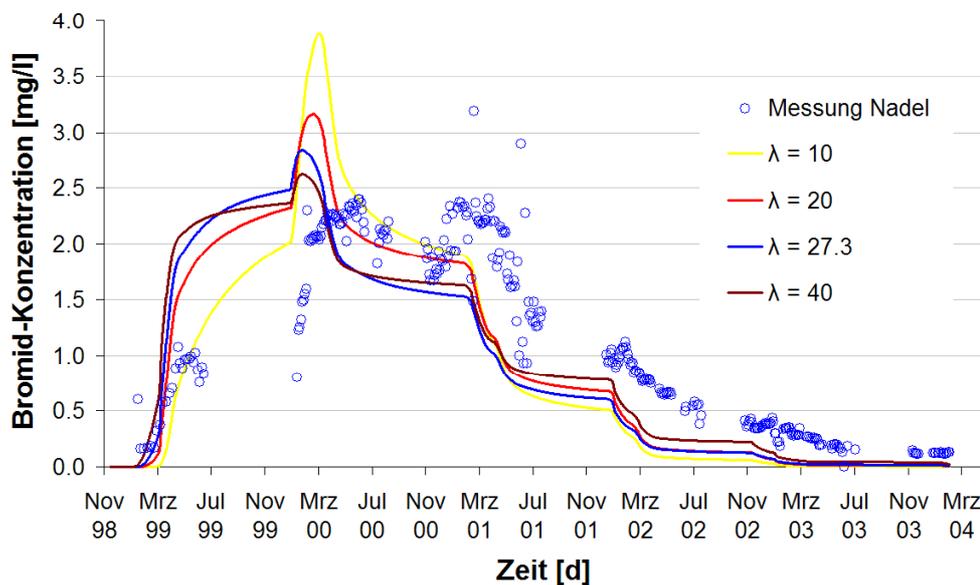
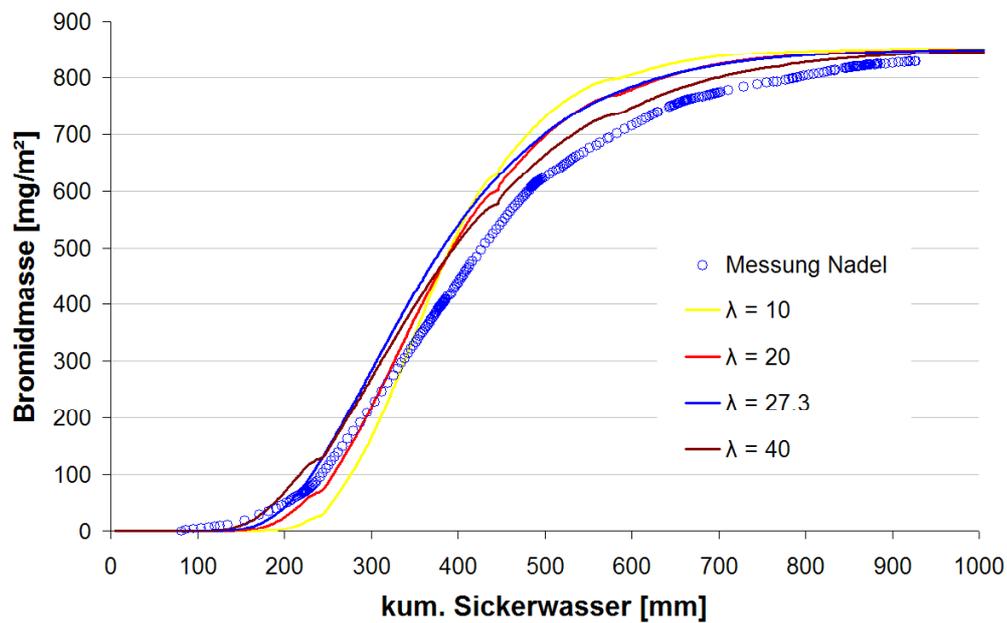


Abbildung 4.13: Gemessene und simulierte Bromid-Durchbruchkurven im Nadellysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse an Bromid mit geschätzter Dispersivität von $\lambda^{(l)} = 27.3$ cm und Variation von λ .

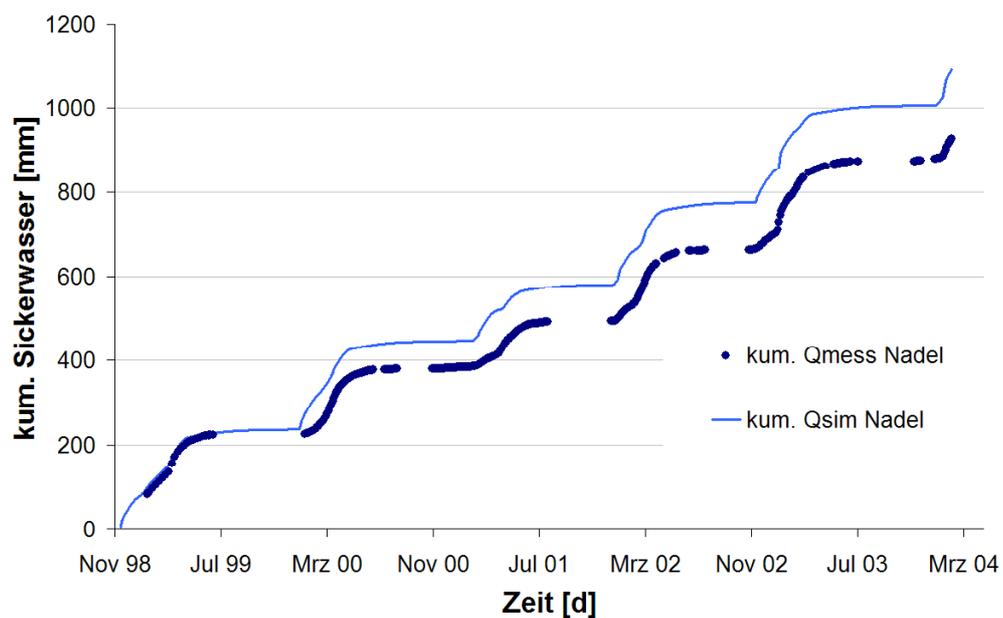
für das Graslysimeter niedrigere Konzentrationen, wobei der Zeitpunkt des Durchbruchs im Vergleich nicht so stark beeinflusst wird. In allen vier Simulationen wird das Tailing unterschätzt. Durch die Variation der Dispersivität wird nur ein geringer Effekt in diesem Teil der Durchbruchkurve erzielt. Mit kleineren Dispersivitäten, wie mit $\lambda = 10$ cm, wird die Konzentration insgesamt nach unten gedrückt, jedoch ein ausgeprägter Konzentrationspeak im März 2000 hervorgerufen, der in diesem Fall auf den dominanten Konvektionsprozess hinweist.

Die zeitlose Darstellung (Abb. 4.14a) zeigt die kumulierte Bromidmasse, die mit dem kumulierten Sickerwasser die Lysimeterbasis verlässt. Hier wird deutlich, dass der simulierte Durchbruch im Nadellysimeter mit den Messungen gut übereinstimmt, vor allem mit der geschätzten Dispersivität $\lambda^{(l)} = 27.3$ cm. Die Berechnungen mit der höheren Dispersivität $\lambda = 40$ cm zeigen eine bessere Annäherung an die Messdaten als mit $\lambda = 10$ cm.

In der Abbildung 4.14b gibt die berechnete Sickerwassermenge annähernd gut das gemessene Sickerwasser wieder. Es zeigt sich aber eine leichte Überschätzung der Messwerte, die bereits in den Ergebnissen zur Simulation des Wasserhaushalts im Nadellysimeter festgestellt wurde. Der Vergleich der mittleren Abstandsgeschwindigkeit (Tab.4.8), die aus den Messdaten und Simulationsergebnissen für den Beprobungszeitraum resultieren, bestätigt diese Beobachtung. Die mittlere Porenwasser-



(a)



(b)

Abbildung 4.14: (a) Zeitlose Darstellung der gemessenen und simulierten Bromidmasse pro m^2 im Nadellysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse unter Variation von λ ; (b) die kumulierte Sickerwassermenge über die Zeit.

geschwindigkeit in den Simulationen ist mit $\bar{v} = 5.68 \text{ mm d}^{-1}$ um annähernd 27 % höher als die aus der Charakterisierung der Messdaten hervorgehende.

Tabelle 4.8: Vergleich der Parameter der *pdf*, die anhand der Messungen und anhand der numerischen Ergebnisse der Durchbruchkurven im Nadellysimeter ermittelt wurden.

	μ_I [mm]	$V^{(I)}$ [mm mm ⁻¹]	\bar{j}_w [mm d ⁻¹]	\bar{v} [mm d ⁻¹]
Messungen	413	8.48	0.49	4.11
Simulation	351	9.97	0.57	5.68

Bromid im Eichen/Buchenlysimeter

Die Wiederfindungsrate ist im Laublysimeter mit 54.87% am niedrigsten im Vergleich zu den beiden anderen Lysimetern, die Simulationen werden zur Vereinheitlichung aber ebenfalls mit 56.5% der applizierten Bromidmasse vorgenommen. Die ermittelte Dispersivität $\lambda^{(I)} = 31.6 \text{ cm}$ ist höher als die aus den Gras- und Nadel-Durchbruchkurven ermittelte.

Die unter Variation der Dispersivität berechneten Durchbruchkurven in Abbildung 4.15 zeigen im Vergleich zu den Ergebnissen der Gras- und Nadellysimeter die beste Übereinstimmung zu Anfang des Bromiddurchbruchs. Eine Überschätzung der gemessenen Konzentration in der Trockenperiode bis zum einsetzenden Wasserfluss in Februar 2000 wird durch den während der Wintermonate in den Simulationen zu früh einsetzenden Sickerwasserfluss erklärbar. Mit dem geschätzten Parameter $\lambda^{(I)}$ erfolgt der simulierte Durchbruch recht zeitnah mit den Messwerten. Mit allen vier Dispersivitätswerten wird auch für dieses Lysimeter das Tailing nicht genau wiedergegeben. Wie schon für die beiden anderen Lysimeter, drückt die kleinere Dispersivität $\lambda = 10 \text{ cm}$ die Konzentration in den An- und Ausläufen der Durchbruchkurve nach unten. Es wird jedoch ein ausgeprägter Konzentrationspeak hervorgerufen, der auch in diesem Fall auf die Konvektion als dominierenden Prozess deutet.

Die zeitlose Darstellung (Abb. 4.16a) zeigt die kumulierte Bromidmasse, die mit dem kumulierten Sickerwasser die Lysimeterbasis verlässt. Unter Verwendung der geschätzten Dispersivität $\lambda^{(I)} = 31.6 \text{ cm}$ stimmt der simulierte Durchbruch im Laublysimeter mit den Messungen gut überein. Die Berechnungen mit der höheren Dispersivität $\lambda = 40 \text{ cm}$ zeigen eine bessere Annäherung an die Messdaten als mit $\lambda = 10 \text{ cm}$.

In Abbildung 4.16b gibt die berechnete Sickerwassermenge vor allem zu Beginn der betrachteten Periode das gemessene Sickerwasser gut wieder. Es zeigt sich jedoch mit

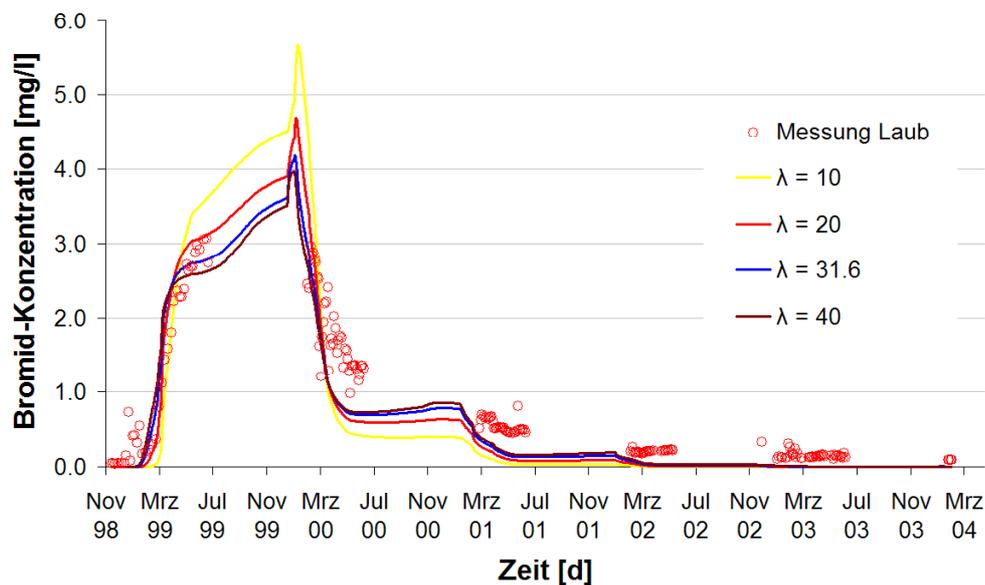


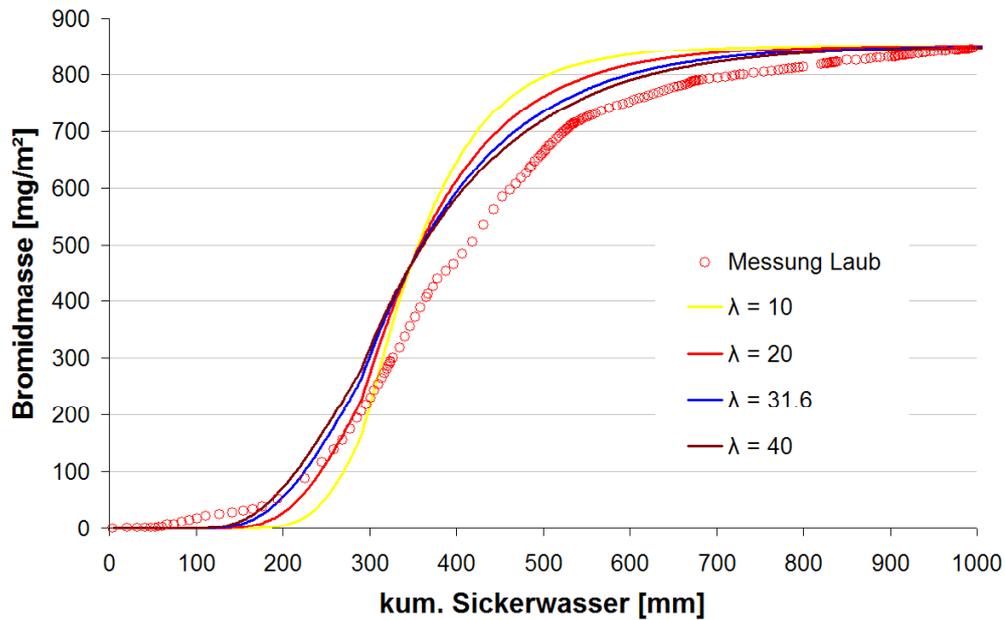
Abbildung 4.15: Gemessene und simulierte Bromid-Durchbruchskurven im Laublysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse an Bromid mit geschätzter Dispersivität von $\lambda^{(I)} = 31.6$ cm und Variation von λ .

fortschreitender Simulationsdauer eine Überschätzung, die bereits ähnlich in den Ergebnissen zur Simulation des Wasserhaushalts im Nadellysimeter festgestellt wurde. Der Vergleich der mittleren Abstandsgeschwindigkeit (Tab.4.9), die aus den Messdaten und Simulationsergebnissen für den Beprobungszeitraum resultieren, bestätigen diese Beobachtung. Die mittlere Porenwassergeschwindigkeit in den Simulationen ist mit $\bar{v} = 6.98 \text{ mm d}^{-1}$ um annähernd 33 % höher als die aus der Charakterisierung der Messdaten hervorgehende.

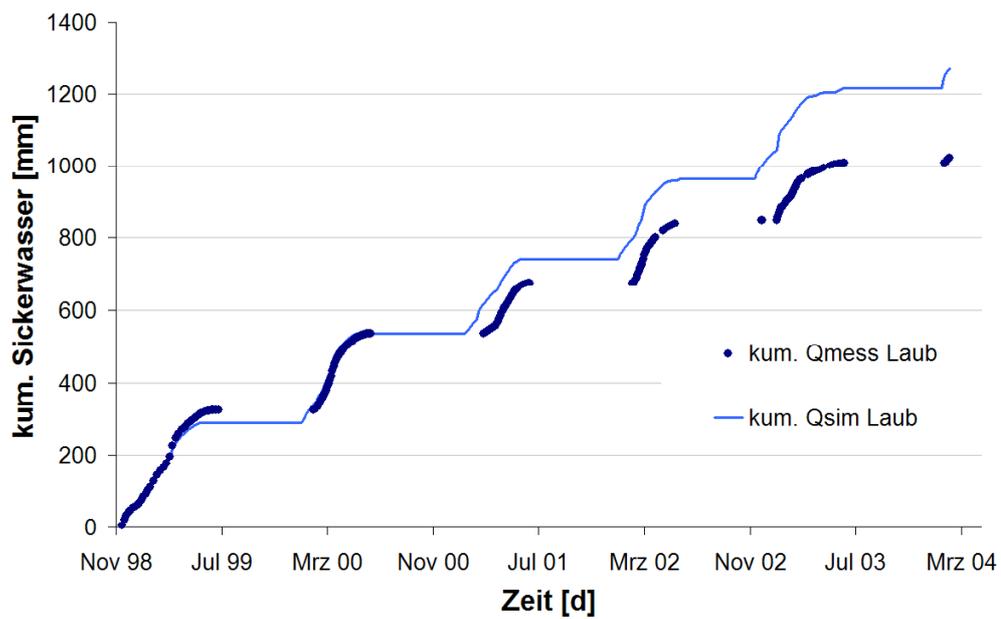
Tabelle 4.9: Vergleich der Parameter der *pdf*, die anhand der Messungen und anhand der numerischen Ergebnisse der Durchbruchskurven im Laublysimeter ermittelt wurden.

	μ_I [mm]	$V^{(I)}$ [mm mm ⁻¹]	\bar{j}_w [mm d ⁻¹]	\bar{v} [mm d ⁻¹]
Messungen	404	8.66	0.54	4.64
Simulation	333	10.51	0.66	6.98

Insgesamt zeigen Simulationen des Bromidtransports unter transienten Randbedin-



(a)



(b)

Abbildung 4.16: (a) Zeitlose Darstellung der gemessenen und simulierten Bromidmasse pro m^2 im Laublysimeter mit 56.5 % der applizierten Masse unter Variation von λ ; (b) die kumulierte Sickerwassermenge über die Zeit.

gungen des Wasserhaushalts, dass die mittlere Porenwassergeschwindigkeit \bar{v} in allen drei Lysimetern höher ausfällt, als sie bei der Auswertung der Messdaten mittels der *pdf* resultiert. Andererseits fällt die damit zusammenhängende mittlere Abstandsgeschwindigkeit im Graslysimeter niedriger aus und im Laublysimeter höher. Diese Geschwindigkeiten bestimmen den konvektiv-dispersiven Transport des gelösten Bromids und sind für den Durchbruchverlauf entscheidend, während der Dispersivitätsparameter λ sich weniger sensitiv auf Variationen im Bereich der geschätzten Werte $\lambda^{(I)}$ zeigt. Im wesentlichen wird die Bodenwasserbewegung durch hydraulische Eigenschaften des Bodens bestimmt. Daher sollte der Spielraum für die Parametrisierung der Retentionsfunktionen und der Leitfähigkeitsfunktionen der Bodenhorizonte untersucht werden, unter dem Vorbehalt einer gleichbleibend guten oder verbesserten Wasserhaushaltsbilanz.

Wurzelaufnahme von Bromid

In den vorherigen Simulationen wurden reine Transportprozesse ohne Senke betrachtet, da für einen konservativen Tracer weder Abbau noch Sorption eine Rolle spielen sollten. Ein Verlust von Bromid könnte aber durch die Aufnahme der Bromidionen durch die Pflanzenwurzeln verursacht werden. Ein einfacher Ansatz zur Modellierung dieser Senke ist die Annahme einer passiven Wurzelaufnahme der lokal vorliegenden Bromidkonzentration mit dem Wurzelwasser.

Simulationen mit 100% der applizierten Masse an Bromid, in denen eine passive Wurzelaufnahme von Bromid mit dem Bodenwasser zugelassen wird, zeigen, dass unter Grasvegetation 9.5% der Bromidmenge aufgenommen wird. Unter Kiefern sind es 28% und unter Laubbäumen 44% an Bromid, die durch die Wurzelaufnahme im Durchbruch verloren gehen. Diese Angaben beziehen sich auf Berechnungen mit der dem jeweiligem Lysimeter entsprechenden Dispersionslänge $\lambda^{(I)}$. Die Wurzelaufnahme von Bromid mit dem Bodenwasser fällt bei tieferen Wurzeln höher aus, denn die Wurzeln haben einen längeren Zugriff auf die lokal hohen Bromidkonzentrationen.

Durch diese Simulationsergebnisse kann der Bromidverlust von 43 – 46% in den Messungen aller drei Lysimeter nicht erklärt werden. Es liegen leider weder Konzentrationsmessungen in der Biomasse der Pflanzenbestände noch im Boden selbst vor, so dass der aus der Versuchsbilanz hervorgehende Verlust nicht mit Daten belegt werden kann. In Bezug auf die bei der Wurzelaufnahme im Wasserhaushalt bereits angesprochenen Unsicherheiten der Wurzelverteilung wird auch die Berechnung der Bromidaufnahme mit dieser Unsicherheit belastet. Aus diesen Gründen können im Rahmen dieser Arbeit keine zuverlässigen und nachweisbaren Aussagen hinsichtlich des Bromidverlustes getroffen werden.

5 Zusammenfassende Diskussion und Ausblick

5.1 Wasserhaushalt

In dieser Arbeit sind numerische Simulationen der Bodenwasserbewegung unter meteorologischen Bedingungen für alle drei Lysimeterflächen durchgeführt worden. Dabei orientiert sich die Kalkulation der Wasserhaushaltsgrößen an den natürlichen Vegetationsbeständen Gras, Weymouth-Kiefern und Rotbuche/Stieleiche der Lysimeterflächen. Der betrachtete Zeitraum 1997-2004 setzt direkt an den Untersuchungszeitraum 1974-1998 von Klein (2000) an. Während die Grasdecke langfristig als konstanter Vegetationsbestand betrachtet werden kann, wurde bei den Kiefern wie auch bei den Laubbäumen innerhalb der Beobachtungszeit eine Entwicklung des Baumbestandes beobachtet. Baumhöhe und Stammdurchmesser vergrößerten sich, während die Anzahl der Bäume insgesamt abnahm. Die oberirdische Entwicklung der Bäume wurde zur Berechnung der aktuellen Interzeptions- und Transpirationsverluste berücksichtigt.

Die Simulationen des Bodenwasserhaushalts zeigen in den Gras- und Nadellysimetern gute Ergebnisse, im Laublysimeter zeigen sich die größten Abweichungen in der Berechnung des Sickerwassers. Während für Gras mit einem standardisierten Verfahren zur Berechnung der Evapotranspiration als Referenzverdunstung in HYDRUS-1D gute Ergebnisse in der Wasserbilanz erzielt werden können, ist dies für den Waldbestand nicht bzw. nur unter großen Einschränkungen anwendbar. Im Baumbestand stellt nicht die Verdunstung von der Bodenoberfläche, sondern die Verdunstung von interzeptierten Niederschlag auf den Baumkronen und dem Stamm sowie auf der Streuschicht einen großen Verlust für den Infiltrationsfluss dar. Hier können mit den in LYFE angewendeten Berechnungsroutinen gute Anpassungen erzielt werden. Im Falle des Laubbestandes kann der vorhandene Spielraum für eine optimale Anpassung genutzt werden, um die Abweichungen in der Wasserbilanz zu minimieren. Insbesondere die Parametrisierung der jahreszyklischen Laubentwicklung und entsprechend der Streuschicht bietet in den entsprechenden Größen der maximalen Laubspeicher- und Streuspeicherkapazität Anpassungsmöglichkeiten.

In den Wasserhaushaltssimulationen zeigt sich, dass die Bodenwasserbewegung mit den hydraulischen Parametern die gemessenen Sickerwasserraten annähernd gut wiedergibt, die quadratische Abweichung von den Messwerten ist gering. Dabei stehen die Retentionsfunktionen und Leitfähigkeitsfunktionen bei der eindimensionalen Berechnung als mittlere Werte für die gesamte 400 m^2 -Fläche jedes einzelnen Lysimeterbeckens, d.h. die räumliche Heterogenität wird ganz vernachlässigt. Die hydraulischen Eigenschaften bestimmen in der numerischen Lösung der Richardsgleichung die

Abstandsgeschwindigkeit und den Wassergehalt und geben damit die Porenwassergeschwindigkeit vor. Diese ist in den Simulationen, wie sich aus den Bromidversuchen zeigt, zu hoch. An dieser Stelle fehlen *in-situ*-Messungen von Wassergehalt und Tensionen, so dass die Bewertung der Simulationen nur anhand der flächengemittelten Sickerwassermenge erfolgen kann.

Aus den Messung der Tensionen und von präzise gemessenen Wasserflüssen am oberen und unteren Rand können durch inverse Modellierung die hydraulischen Eigenschaften von Lysimetern unter natürlichen meteorologischen Bedingungen richtig und mit geringen Unsicherheiten bestimmt werden (Jansen et al., 2007). Leider liegen solche Messungen in dem betrachteten Zeitraum in St. Arnold nicht vor, so dass mit der Anwendung der inversen Modellierung nicht die nötige Sicherheit bezüglich der hydraulischen Eigenschaften gewonnen werden konnte. Mit den Vorwärtssimulationen unter natürlichen Bedingungen in Großlysimetern stößt man auf Probleme, die beispielsweise auf Schnee- und Frostbedingungen, auf Unsicherheiten bezüglich der Wasseraufnahme durch die Wurzeln sowie auf der zeitlichen Variabilität der oberflächennahen hydraulischen Bedingungen beruhen.

Geht man von guten Kalibrierungsergebnissen bezüglich der Interzeptionsverdunstung von LYFE in Bezug auf den zurückliegenden Zeitraum sowie von geeigneter Wahl von hydraulischen Parametern zur Beschreibung der Bodenwasserbewegung aus, so bleibt die aktuelle Wurzelaufnahme als modifizierbare Wasserhaushaltsgröße der größte Unsicherheitsfaktor. Die unbekanntenen Verhältnisse der Wurzelverteilung, -tiefe und -dichte bieten einen großen Spielraum für die Festlegung der Wurzelaufnahme im Bodenprofil. Anhand von möglichen Untersuchungen des unterirdischen Zustands der Vegetation könnte die Festlegung dieser Verhältnisse in Simulationen begründet und die Unsicherheiten bereinigt werden.

Fast ein Drittel der Staatsfläche in Deutschland ist bewaldet, dagegen nur wenige Lysimeteranlagen. Im Waldlysimeter weist der Wasserhaushalt prägnante Unterschiede zu Freilandflächen auf. Der entscheidende Einfluss auf den Wasserhaushalt erfolgt dabei durch die oberirdische und die unterirdische Biomasse. Gleichzeitig ist jedoch über die Durchwurzelung am wenigsten bekannt, weil standortbezogene Informationen über Wurzel Aufbau und -verteilung großen Aufwand erfordern oder ganz unzugänglich sind. Lysimeterböden dürften während des Experiments nicht gestört werden. Für die Zukunft wäre es bedeutungsvoll, sowohl auf der empirischen Seite mehr Information über die Wurzelentwicklung zu erheben als auch auf der Modellierungsebene diese Informationen einzubringen.

5.2 Bromidtransport

In dieser Arbeit wurden Tracerversuche mit Bromid auf allen drei Lysimeterflächen ausgewertet. Die gewonnenen Durchbruchkurven sind zum einen über einen Ansatz des *Transfer Function Model* charakterisiert worden, zum anderen sind numerische

Simulationen unter Annahme des Konvektions-Dispersions-Transports unter transienten Flussbedingungen durchgeführt worden.

Die Abschätzung der Dispersionslänge stellt ein wesentliches Ergebnis bezüglich der Charakterisierung der Durchbruchkurven dar. Sie liegt in allen drei Durchbruchkurven im Mittel bei 28.6 cm. Entsprechend der ähnlichen Beschaffenheit der drei Bodenmonolithe zeigt sich konsequenterweise diese Eigenschaft des porösen Mediums für die drei Lysimeter in gleicher Größenordnung. In drei von vier Studien liegen die Dispersionslängen bei Transporttiefen von etwa 300 cm ebenfalls im Bereich von 24.4 bis 42.8 cm (Vanderborght & Vereecken, 2007), womit die ermittelten Dispersivitäten in diesem Fall plausible Werte aufweisen.

Der Einsatz der ermittelten Dispersionslängen liefert in der numerischen Berechnung des konvektiv-dispersiven Transports unter transienten Bedingungen eine annähernd gute Reproduktion der gemessenen Durchbruchkurven. In Simulationen unter Variation der Dispersionslänge im Bereich von 10-40 cm zeigen sich die Durchbruchkurven als wenig sensitiv gegenüber diesem Parameter. Andere Studien dokumentieren, dass aus dem Durchbruchverhalten in unterschiedlichen Transporttiefen auch unterschiedliche Dispersionslängen ermittelt werden können (Vanderborght & Vereecken, 2007). Leider stehen solche Messdaten hier nicht zur Verfügung.

Zusätzlich kann aus den beiden Modellierungsansätzen eine mittlere Porenwassergeschwindigkeit abgeleitet werden, die unter transienten Bedingungen höher ausfällt. Hier besteht der direkte Bezug dieser Größe zu den hydraulischen Eigenschaften, die die Bodenwasserbewegung prägen und somit den konvektiven und den dispersiven Transportprozess bestimmen. Zum einen kann die Leitfähigkeit zu hoch sein, zum anderen kann der Wassergehalt zu niedrige Werte aufweisen, diese Problemstellung der Parametrisierung der bodenhydraulischen Eigenschaften mit der Verbesserung des simulierten Durchbruchverhaltens kann in weiterführenden Arbeiten verfolgt werden.

Die gemessenen Durchbruchkurven deuten stellenweise auf einen präferenziellen Fluss hin, der bei der Modellierung keine Berücksichtigung findet. Auch das lang gezogene Tailing, das in den Simulationen nicht deckend getroffen wird, ist ein Kennzeichen für ein physikalisches Ungleichgewicht im Sickerungsverhalten. Das Bodengefüge setzt sich aus differenziert ausgeprägten Makro- und Mikroporen zusammen, was in den entsprechenden Modellen berücksichtigt werden kann. In diesem Fall würde sich aber der steigende Parametrisierungsaufwand nicht mit den vorliegenden hydraulischen Informationen decken, was zu einer erhöhten Unsicherheit bezüglich der Aussagekraft solcher Simulationen führen würde.

Die Messergebnisse weisen auf allen drei Flächen eine Wiederfindungsrate von ca. 56.5 % der applizierten Menge an Bromid auf. In der Bilanz wird damit ein Verlust von über 40 % deutlich, der bei einem konservativen Tracer wie Bromid nicht eindeutig zu begründen ist. Dieser gleichbleibende, von der Bewuchsform des Lysimeters unabhängige Verlust deutet einen Verlustprozess wie Sorption oder irreversiblen Einschluss in Mikroporen an, der mit speziellen Bodeneigenschaften zu tun hat. Da alle

drei Lysimeter mit dem gleichen Boden gefüllt wurden, ist es plausibel, dass man in allen drei Lysimetern mit gleichen Verlustmengen zu rechnen hätte. Alle drei Lysimeter sind jedoch auch bepflanzt, so könnte durch eine Aufnahme durch die Wurzeln der Verlust entstanden sein. Die Frage ist, ob es bei einer gravierend unterschiedlichen Wurzel- ausprägung zwischen Gras- und Baumvegetation zur Aufnahme der gleichen Menge an Bromid kommen konnte. Dies lässt sich anhand der Simulationsergebnisse unter Berücksichtigung einer passiven Wurzel-aufnahme nicht bestätigen. Interessant ist jedoch, dass in Studien mit Bromid, in denen durch die Wurzel-aufnahme eine Akkumulation in der unter- und oberirdischen Biomasse stattfindet, durch die Ein- arbeitung der Pflanzenteile beim jahreszeitlichen Welken oder bei der Ernte, das Bromid wieder in den Boden gelangt (Kohler et al., 2005; Schnabel et al., 1995).

Abschließend stellen in dieser Arbeit gewonnene Dispersionslängen und Geschwin- digkeiten notwendige Größen dar, um Transportverhalten von Substanzen im Boden zu beschreiben. Letztere können auch lokal für das Großlysimeter St. Arnold bei langfristigen Analysen der Wasserhaushaltssituation genutzt werden. Angesichts der Tatsache, dass eine Substanz wie Bromid sich über einen langen Zeitraum von fast 4.5 Jahren im Bodenmonolith aufhält, wird deutlich, auf welchen zeitlichen Skalen sich die Transportdynamik von anderen Substanzen abspielt. Solche, beispielswei- se ökotoxikologisch wirksamen Verbindungen, gelangen auf verschiedenen Wegen in die Umwelt und verweilen in der ungesättigten Zone, bis sie ins Grundwasser ge- langen. Damit zeigt sich, wie bedeutungsvoll die Bewertung des Verbleibs kritischer Substanzen in diesem Bereich der Umwelt ist, und dass eine weitere Charakterisie- rung des Einflusses der Vegetation auf den Wasserhaushalt und auf den Verbleib von Substanzen unerlässlich ist.

Literaturverzeichnis

- Allen, R., Pereira, L., Raes, D., & Smith, M. (1998). *Crop evapotranspiration. Guidelines for computing crop water requirements*. FAO-Irrigation and drainage paper 56. Rome, Italy.
- Bibelriether, H., Brueckner, E., & Koestler, J. (1968). *Die Wurzeln der Waldbaeume*. Verlag Paul Parey, Hamburg und Berlin.
- Bouten, W. & Jansson, P. (1995). Water balance of the solling spruce stand as simulated with various forest-soil-atmosphere models. *Ecological Modelling*, 83, 245–253.
- Deblonde, G., Penner, M., & Royer, A. (1994). Measuring leaf area index with the LI-COR LAI 2000 in pine stands. *Ecology*, 75(5), 1507–1511.
- DVWK (1996). *Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen*. Deutscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau e.V. DVWK-Merkblätter zur Wasserwirtschaft, 238.
- Feddes, R., Kowalik, P., & Zaradny, H. (1978). *Simulation of field water use and crop yield*. Wageningen: NL:Pudoc.
- Flühler, H. & Roth, K. (2003). *Physik der ungesättigten Zone*. ETH Zürich.
- Grobe, A. (2003). Entwicklung und Implementation eines Stofftransportmoduls für das Wasserhaushaltsmodell LYFE. Universität Osnabrück.
- Harsch, N., Brandenburg, M., & Klemm, O. (2008). Large-scale lysimeter site St. Arnold, Germany: analysis of 40 years of precipitation, leachate and evapotranspiration. *Hydrology and Earth System Sciences Discussions*, 5, 2623–2656.
- Jansen, U., Durner, W., & Fank, J. (2007). Effektive bodenhydraulische Eigenschaften von Großlysimetern. *Proceedings der 12. Lysimetertagung „Lysimetrie im Konnex zu nationalen und internationalen Regelwerken“*, 47–52.
- Jury, W., Gardner, W. R., & Gardner, W. H. (1991). *Soil Physics*. (5 ed.). John Wiley & Sons, Inc.
- Jury, W. & Roth, K. (1990). *Transfer functions and solute movement through soil: theory and applications*. Birkhäuser Verlag, Basel.

- Klein, M. (2000). *Langjähriger Wasserhaushalt von Gras- und Waldbeständen: Entwicklung, Kalibrierung und Anwendung des Modells LYFE am Großlysimeter St. Arnold*. PhD thesis, Universität Osnabrück.
- Kohler, A., Abbaspour, K., Fritsch, M., & Schulin, R. (2005). Solute recycling by crops and leaching in a drained arable soil. *European Journal of Soil Science*, *56*, 145–153.
- Levy, B. & Chambers, R. (1987). Bromide as a conservative tracer for soil-water studies. *Hydrological Processes*, *1*, 385–389.
- Lide, D. (1999). *Handbook of chemistry and physics*. CRC Press Florida.
- Liu, S. (1997). A new model for the prediction of rainfall interception in forest canopies. *Ecological Modelling*, *99*, 151–159.
- Millington, R. & Quirk, J. (1961). Permeability of porous solids. *Trans. Faraday Soc.*, *57*, 1200–1207.
- Monteith, J. (1981). Evaporation and surface temperature. *Quart. J. R. Met. Soc.*, *107*, 1–27.
- Mualem, Y. (1976). A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resour. Res.*, *12*, 513–522.
- Prenk, J. & Flender, A. (1965). Die Großlysimeteranlage St. Arnold bei Rheine. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, *9(6)*, 132–135.
- Richards, L. A. (1931). Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics*, *1*, 318–333.
- Richter, D. (1995). Ergebnisse methodischer Untersuchungen zur Korrektur des systematischen Messfehlers des Hellmann-Niederschlagsmessers. *Berichte des deutschen Wetterdienstes*, *194*.
- Schnabel, R., Stout, W., & Schaffer, J. (1995). Uptake of hydrologic tracer (bromide) by ryegrass from well and poorly-drained soils. *J. Environ. Qual.*, *24*, 888–892.
- Schroeder, M. (1975). Erste Ergebnisse der Großlysimeteranlage St. Arnold bei Rheine. *Wasserwirtschaft*, *65(11)*, 301–305.
- Schroeder, M. (1988). 15 Jahre Messungen an der Großlysimeteranlage St. Arnold. *LWA-Schriftenreihe* *44*.
- Schroeder, M. (1989). Interzeptionsmessungen an der Großlysimeteranlage St. Arnold in den Jahren 1984 bis 1987 und die Extrapolation mit Hilfe eines Rechenmodells. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, *33(2)*, 56–64.

- Schroeder, M. (1992). 25 Jahre Großlysimeteranlage St.Arnold. *Staatliches Amt für Wasser-und Abfallwirtschaft Münster*.
- Sevruk, B. (1981). Methodische Untersuchungen des systematischen Meßfehlers der Hellmann-Regenmesser im Sommerhalbjahr in der Schweiz. *Mitteilungen der Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie*, 52.
- Trapp, S. & Matthies, M. (1996). *Dynamik von Schadstoffen - Umweltmodellierung mit CemoS*. Springer Verlag.
- van Genuchten, M. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44, 892–898.
- van Genuchten, M. & Wierenga, P. (1976). Mass transfer studies in sorbing porous media. I. Analytical solutions. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 40, 473–481.
- Vanderborght, J. & Vereecken, H. (2007). Review of dispersivities for transport modeling in soils. *Vadose Zone Journal*, 6, 29–52.
- Šimůnek, J. & van Genuchten, M. (2008). Modeling nonequilibrium flow and transport processes using HYDRUS. *Vadose Zone Journal*, 7, 782–797.
- Šimůnek, J., Šejna, M., Saito, H., Sakai, M., & van Genuchten, M. (2009). *The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media. Version 4.08*. Department of Environmental Sciences, University of California Riverside.

Beiträge des Instituts für Umweltsystemforschung der Universität Osnabrück

- Nr. 01 Eberhard Umbach: Umweltverträgliches Wirtschaftssystem in den Bereichen Abfall und Emissionen. März 1997.
- Nr. 02 Stefan Trapp, Bernhard Reiter, Michael Matthies: Überprüfung und Fortentwicklung der Bodenwerte für den Boden-Pflanze-Pfad - Teilprojekt Transferfaktoren Boden-Pflanze. August 1997.
- Nr. 03 Michael Matthies (Hrsg.): Stoffstromanalyse und Bewertung. September 1997.
- Nr. 04 Dirk Melcher: Quantifizierung, Klassifizierung und Modellierung der Phytotoxizität organischer Chemikalien. Oktober 1997.
- Nr. 05 Stefan Schwartz: Organische Schadstoffe in der Nahrungskette - Vorstudie zur Validierung von Expositionsmodellen. November 1997.
- Nr. 06 Volker Berding: Private Hausbrunnen - Vergleichende Bewertung von Maßnahmen zur Verbesserung der Trinkwasserqualität. Oktober 1997.
- Nr. 07 Horst Malchow (Hrsg.): Modellbildung und -anwendung in den Wissenschaften I. Januar 1998.
- Nr. 08 Birgit Radtke: Bifurkationen in einem Modell mariner Planktodynamik. Januar 1998.
- Nr. 09 Werner Berens: Konzeption eines Umweltinformationssystems für die Universität Osnabrück. Juni 1998.
- Nr. 10 Michael Matthies (Hrsg.): Studienprojekte 1998. September 1998.
- Nr. 11 Michael Matthies (Hrsg.): Globaler Wandel. September 1998.
- Nr. 12 Klaus Brauer (Hrsg.): Institutsbericht. September 1998.
- Nr. 13 Klaus Brauer, Horst Malchow, Michael Matthies, Eberhard Umbach (Hrsg.): Materialien des Arbeitstreffens Systemwissenschaft in der Lehre, Universität Osnabrück, 29./30.9.1998. Dezember 1998.
- Nr. 14 Horst Malchow (Hrsg.): Modellbildung und -anwendung in den Wissenschaften II. Dezember 1998.
- Nr. 15 Horst Malchow (Hrsg.): Modellbildung und -anwendung in den Wissenschaften III. August 1999.
- Nr. 16 Michael Matthies (Hrsg.): Regionale Nachhaltigkeit. September 2000.
- Nr. 17 Markus Klein: Langjähriger Wasserhaushalt von Gras- und Waldbeständen. Entwicklung, Kalibrierung und Anwendung des Modells LYFE am Groß-Lysimeter St. Arnold. Juni 2000.
-

-
- Nr. 18 Markus Brune: Multimediale Umweltmodellierung mit Fuzzy-Mengen. Juli 2000.
- Nr. 19 Michael Matthies (Hrsg.): Fraktale in Hydrologie und Biologie. Oktober 2000.
- Nr. 20 Stefan Fuest (Dissertation): Regionale Grundwassergefährdung durch Nitrat. Dezember 2000.
- Nr. 21 Carsten Schulze (Dissertation): Modelling and evaluating the aquatic fate of detergents. Januar 2001.

Die Beiträge können gegen einen Selbstkostenpreis (ca. 10€ pro Exemplar) beim Institut für Umweltsystemforschung, Universität Osnabrück, 49069 Osnabrück bestellt werden.

Alle folgenden Beiträge sind herunterzuladen unter <http://www.usf.uos.de/usf/beitraege/>.

- Nr. 22 Horst Malchow (Hrsg.): Modellbildung und -anwendung in den Wissenschaften IV. Januar 2001.
- Nr. 23 Horst Malchow (Hrsg.): Modellbildung und -anwendung in den Wissenschaften V. August 2001.
- Nr. 24 Kai Lessmann (Diplomarbeit): Probabilistic Exposure Assessment. Parameter Uncertainties and their Effects on Model Output. November 2002.
- Nr. 25 Frank M. Hilker (Diplomarbeit): Parametrisierung von Metapopulationsmodellen. März 2003.
- Nr. 26 Nadja Rüger(Diplomarbeit): Habitat suitability for *Populus euphratica* in the Northern Amudarya delta - a fuzzy approach. Juni 2003.
- Nr. 27 Claudia Pahl-Wostl, Eva Ebenhöf (Hrsg.): Komplexe Adaptive Systeme. Juli 2003.
- Nr. 28 Horst Malchow (Hrsg.): Chaos und Ordnung in Natur und Gesellschaft. Dezember 2004.
- Nr. 29 Andreas Focks (Diplomarbeit): Modeling the transfer of antibiotic drug resistance genes between E. coli strains. Juni 2005.
- Nr. 30 Christiane Zarfl (Diplomarbeit): Modellierung von Arsen in der Mulde. Juni 2005.
- Nr. 31 Sven Lautenbach (Dissertation): Modellintegration zur Entscheidungsunterstützung für die Gewässergütebewirtschaftung im Einzugsgebiet der Elbe. November 2005.
- Nr. 32 Frank M. Hilker and Frank H. Westerhoff: Control of chaotic population dynamics: Ecological and economic considerations. November 2005.
- Nr. 33 Harold Fellermann (Diplomarbeit): Micelles as containers for protocells. Dezember 2005.
- Nr. 34 Jens Newig, Oliver Fritsch (Hrsg.): Effektivität von Entscheidungsprozessen. Mai 2006.
- Nr. 35 Ba Kien Tran (Diplomarbeit): Modellierung biologischer Invasionen mit Reaktions-Diffusionsgleichungen. Juli 2006.
-

-
- Nr. 36 Ivo Siekmann (Diplomarbeit): Agentenbasierte Modellierung von Persönlichkeitsunterschieden auf der Grundlage der PSI-Theorie. Juli 2006.
- Nr. 37 Tobias Ceglarek (Diplomarbeit): Irreguläre Oszillationen in drei- und vierkomponentigen populationsdynamischen Modellen. September 2006.
- Nr. 38 Horst Malchow (Hrsg.): Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik in Natur und Gesellschaft. Dezember 2006.
- Nr. 39 Jens Newig et al.: Partizipative Modellbildung, Akteurs- und Ökosystemanalyse in Agrarintensivregionen. Schlussbericht des deutsch-österreichischen Verbundprojekts. Juli 2007.
- Nr. 40 Bert Wecker, Bakhtiyor Karimov, Bakhtiyar Kamilov, Uwe Waller, Michael Matthies, Helmut Lieth: Sustainable Aquaculture in Recirculating Systems. Feasibility Study for the Catchment Area of the Aral Sea. März 2007.
- Nr. 41 Michael Matthies (Hrsg.): Klimawandel. Oktober 2007.
- Nr. 42 Nina Hüffmeyer (Diplomarbeit): Modellierung von Zink in der Ruhr - Emissionspfade und Belastungsanalyse. August 2006.
- Nr. 43 Jutta Wissing (Diplomarbeit): Georeferenzierte hydromorphologische Charakterisierung von Flussgebieten. November 2006.
- Nr. 44 Jan Priegnitz (Diplomarbeit): Analyse von Koffein als Abwassermarker in Fließgewässern. April 2007.
- Nr. 45 Johannes Witt (Diplomarbeit): Pharmacokinetics of sulfadiazine in pigs. Mai 2006.
- Nr. 46 Wibke Avenhaus (Diplomarbeit): Implementation von GREAT-ER mit ArcGIS und Arc Hydro. August 2007.
- Nr. 47 Horst Malchow (Hrsg.): Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik in Natur und Gesellschaft. Juli 2008.
- Nr. 48 Christian Ehling (Diplomarbeit): Abschätzung des Bioakkumulationspotentials organischer Verbindungen in der menschlichen Nahrungskette. August 2008.
- Nr. 49 Michael Matthies (Hrsg.): Neue Problemstoffe (Emerging Pollutants). Oktober 2008.
- Nr. 50 Christiane Zarfl: Chemical Fate of Sulfadiazine in Soil: Mechanisms and Modelling Approaches. November 2008.
- Nr. 51 Timm Heitmeyer: Untersuchung des Einflusses ausgewählter Wetterprozesse auf den Ferntransport und die Persistenz von Chemikalien mit dem Modell ELPOS. Juli 2008.
- Nr. 52 Irina Prinz-Tran (Diplomarbeit): Mai 2010.
-

