

## Raum-Zeitmuster von Stoffflüssen im Boden: Verbindung von Sickerwasserchemie und Bodenfestphase

*Spatio-temporal patterns of matter fluxes in soils: linkage between soil solution and soil solid phase*

Dietmar Zirlewagen, Klaus von Wilpert

### Abstract

*Time and space dependent maps of cation concentrations of the soil solution have been derived from seasonally adjusted time series data of the soil solution chemistry and regionalized exchangeable cation percentages. For this analysis we used both, statistical methods (ordinary least square regression and validation techniques) and process-oriented methods (Gapon equations). The methods tested at watershed scale showed steady functions of selectivity coefficients and should also be suitable for ICP Forest evaluations (Level I/II). But they are restricted more or less to acidic soils and should not be used in soil layers rich in humus, since adsorption to C-compounds differs from adsorption to clay minerals. The time increments of the models should be not shorter than yearly in order to suppress annual periodicity.*

*Keywords: Upscaling, regionalization, soil chemistry, Gapon coefficient*

### Zusammenfassung

Raum-Zeitmuster von Kationenkonzentrationen in der Bodenlösung wurden durch Verknüpfung von Zeitreihendaten der Bodenlösungsschemie und regionalisierten Kationensättigungen der Bodenfestphase berechnet. Hierfür wurden statistische Verfahren (Regression, Zeitreihenanalyse) und prozessorientierte Methoden (Gapon-Funktionen) eingesetzt. Die auf der Skala eines Kleineinzugsgebietes getesteten Methoden ergaben stabile Funktionen der Selektivitätskoeffizienten und sollten sich auch für Auswertungen im Rahmen des ICP Forest (Level I/II) sinnvoll einsetzen lassen. Die verwendeten QI-Beziehungen beschränken deren Anwendung allerdings auf den Mineralboden, und dort auch nur auf Bereiche mehr oder weniger stark saurer Bodenreaktion. Dabei sollte die zeitliche Auflösung der Modelle bei maximal einem Jahr liegen.

Schlüsselwörter: Upscaling, Regionalisierung, Bodenchemie, Gapon-Koeffizient

### 1. Einleitung

Daten im forstlichen Umweltmonitoring werden in unterschiedlichen Raum- und Zeitdimensionen erhoben. Von grundsätz-

licher Bedeutung für die Entwicklung von Problemlösungen bei der Interpretation und Modellierung dieser Daten ist es, die vielfältigen Verknüpfungen zur Raum- und Zeitskala in Betracht zu ziehen und ein Verständnis für stochastische Prozesse in Raum und Zeit zu entwickeln. Da gerade Wald-ökosysteme sowohl zeitlich als auch räumlich sehr heterogen sind, ist der Zugang zu einem vertiefenden System- und Modellverständnis erschwert. Bisherige Konzepte für die Regionalisierung von Bodeneigenschaften in Wäldern waren im Wesentlichen auf die Punkt-/Flächenübertragung des Ist-Zustandes zum Zeitpunkt der Bodeninventur ausgerichtet. Dies trifft auch auf die mithilfe von multiplen Regressionsmodellen mögliche Berechnung von Landschaftsszenarien zu, wie sie bei der Regionalisierung bodenchemischer Daten z. B. für den Schwarzwald und Sachsen vorgestellt wurden (ZIRLEWAGEN 2003, ZIRLEWAGEN & VON WILPERT 2004, ZIRLEWAGEN et al. 2007). Die Gültigkeit solcher Szenarien ist durch den Zeithorizont der Bodeninventur bestimmt und die Umweltfaktoren, die zum Zeitpunkt der Bodeninventur die Bodeneigenschaften beeinflussten. Es handelt sich also um statische, auf den Zustand zum Zeitpunkt der Inventur abzielende Konzepte.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, für bodenchemische Kenngrößen Methoden zur Erweiterung der bestehenden statischen Regionalisierungskonzepte um eine zeitlich-dynamische Dimension zu entwickeln. Dieses Vorhaben kann nicht mit Standardlösungen der Statistik bearbeitet werden. Ein Problem grundsätzlicher Art, das schon bei Modellen mit raum-zeitlich getrenntem Skalenbezug auftritt, zeigt sich um so mehr bei raum-zeitlich kombinierten Modellen: Welche räumlichen und zeitlichen Details werden in Modellen zur Beschreibung raum-zeitlich heterogener Systeme überhaupt benötigt? Trotz der Existenz räumlicher und zeitlicher Heterogenität in Waldökosystemen ist es nicht immer notwendig, diese Heterogenität auch in hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung in systembeschreibende Modelle aufzunehmen. Häufig lassen sich auch mit einfachen Modellen räumlich und zeitlich komplexe Systeme adäquat darstellen, z. B., wenn Heterogenität im Vergleich zur Messskala v. a. auf Skalen höherer Auflösung auftritt, eine geringe Modellpräzision ausreichend ist oder empirische Ansätze zur Anpassung von Funktionen angewandt werden (STRAYER et al. 2003). Die im folgenden beschriebenen Methoden basieren auf einer Kombination von statistischen und prozessorien-

tierten Ansätzen, wobei bekanntes Wissen aus dem Bereich der Quantitäts-Intensitätsbeziehungen (QI) austauschbarer Kationen (Gapon 1933) eingesetzt wird. Da hierfür eine möglichst breite Datenbasis zur Bodenfest- und Bodenlösungsphase Voraussetzung ist und die Fragestellung Pilotcharakter hat, wurden die Methoden anhand von Daten der Ökosystemfallstudie Conventwald entwickelt und getestet. Hier sind sowohl auf der Zeit- als auch Raumskala umfangreiche bodenchemische Datensätze vorhanden.

Die hier vorgestellte Studie zielt darauf ab, den Nutzen von Kationen-Austauschkoeffizienten für die Übertragung von Zeittrends der im Feldversuch gemessenen Bodenlösungschemie auf flächenrepräsentative Daten der Bodenfestphase zu untersuchen. Im Gegensatz zur traditionellen Vorgehensweise wurden nur Koeffizienten verwendet, die an Felddaten angepasst wurden, also auf Ungleichgewichts-Beziehungen basierten. Bisherige Studien verwendeten Austauschlösungen im Quasi-Gleichgewicht des Sorptionsprozesses zwischen Kationen in gelöster und sorbierter Phase, was nur unter Laborbedingungen erreichbar ist. Eine wichtige Fragestellung dieser Arbeit war daher, ob die berechneten Austauschoeffizienten dennoch stabil genug sein würden, um verwertbare Modellergebnisse über Raum-Zeitmuster von Stoffflüssen im Boden zu liefern.

## 2. Modellentwicklungen

### Untersuchungsgebiet

Das Gebiet der Ökosystemfallstudie Conventwald liegt in Baden-Württemberg (48°1' N, 7°58' W, 700–860 m N. N., Jahresniederschlag 1400 mm, Jahresmitteltemperatur 6,6°C, Ausgangsgestein dunkler Paragneis, Böden mit tiefgründig verwitterten und mäßig versauerten Braunerden). Die Studie wurde in dem 9,3 ha großen Wassereinzugsgebiet durchgeführt, in dem ein 160 Jahre alter Buchen-Tannen-Fichten-Mischbestand aufstockt (Abb. 1a). Andere Untersuchungsvarianten (v. a. Fichten- und Buchen-Reinbestände) weisen vergleichbare Standortbedingungen auf. Zur Instrumentierung, Messeinrichtung und Berechnung von Wasserhaushaltsmodellen siehe von WILPERT et al. (2000) und ZIRLEWAGEN & VON WILPERT (2001).

### Regionalisierung Bodenfestphase

Im Jahr 2006 wurde im Wassereinzugsgebiet die Bodenfestphase in vier Tiefenstufen (0–10 cm, 10–30 cm, 30–60 und 60–90 cm) auf der Basis eines systematischen 40 x 40-m-Rasters mit 56 Stichprobenpunkten (Abb. 2a) und eines vereinfachten Aufnahmeverfahrens nach Standardmethodik des ICP Forest untersucht (BML 1990). Karten der Kationensättigungen (Al, Fe, H, Mn, Mg, Ca, K, Na) und Basensättigungen wurden mit Standard-Regionalisierungsverfahren erstellt (ZIRLEWAGEN & VON WILPERT 2004; ZIRLEWAGEN et al. 2007). Dabei wird in einem ersten Schritt eine Regression zwischen der (in dieser Studie logarithmierten) Zielvariablen und einer oder mehrerer Kovariablen für eine Vorhersage durchgeführt (schrittweise multiple lineare Regressionsana-

lyse). Die räumliche Verteilung der Zielvariablen wird auf die räumliche Verteilung von Prädiktorvariablen zurückgeführt, ohne dass zunächst vorhandene Nachbarschaftsbeziehungen bei der Lage der Messpunkte Berücksichtigung finden würden. Das Ergebnis geht schließlich in das Ordinary Kriging ein, um eine räumliche Abschätzung für die Residuen zu erhalten. Dies ist aber nur dann notwendig, wenn räumliche Beziehungen zwischen den Residuen bestehen, was in dieser Studie aber nicht der Fall war. Dann ist das Ergebnis der Regressionsanalyse bereits das Endergebnis des Regionalisierungsverfahrens (SABOROWSKI & JANSEN 2002). Neben digitalen Reliefattributen, die in hoher räumlicher Auflösung (1 m-Raster) geomorphologische, klimatische und hydrologische Prozesse widerspiegeln, wurden auch Bestandeseinflüsse in den Regressionsmodellen als Hilfsvariablen getestet. Die Analysen wurden mithilfe eines zweistufigen Verfahrens durchgeführt. Zunächst wurden Regressionsmodelle auf der Basis von allen Beobachtungen durchgeführt (einschließlich hydromorpher Stellen entlang des Vorfluters im Einzugsgebiet), dann wurden stratifizierte Modelle für die im Gebiet dominanten terrestrischen Flächen angepasst (vgl. ZIRLEWAGEN et al. 2007).

### Zeitreihendaten

Zur Erfassung der Bodenlösungschemie wurde Unterdruck-Lysimetertechnologie eingesetzt (ICP Forests 1998). Daten aus 14-tägigen Messintervallen, erhoben in 4 Tiefenstufen im Zeitraum 1991–2006, wurden zeitreihenanalytisch aufbereitet. Datenlücken wurden mit autoregressiven Techniken geschlossen (PROC AUTOREG, SAS 2004). Die SAS X-11-Prozedur wurde als autoregressives moving-average (ARIMA)-Verfahren dazu benutzt, Zeitreihen der Bodenlösungschemie um saisonale Effekte zu bereinigen und Zeittrends abzuleiten (Abb. 3). Außerdem wurden die Zeitreihen auf ein Skalenniveau mit niedrigeren Beobachtungsintervallen transformiert. Wasserflüsse wurden mithilfe des eindimensionalen Richard's Model WHNSIM (HUWE & TOTSCHKE 1995) für den Zeitraum 1991–2006 berechnet (Abb. 1b; ZIRLEWAGEN & VON WILPERT 2001).

### Berechnung von Selektivitätskoeffizienten

Kationenaustausch wurde durch die Gapon-Gleichung dargestellt:

$$k_G = \frac{X M_a^{a+} \cdot b \cdot \sqrt{(M b^{b+})}}{X M_b^{b+} \cdot a \cdot \sqrt{(M a^{a+})}} \quad (1)$$

In der Gleichung entspricht X dem äquivalenten Ionenanteil in der Austauschphase, ( ) der Bodenlösungskonzentration,  $M a^{a+}$  Kation a mit der Valenz a,  $M b^{b+}$  Kation b mit der Valenz b, und  $k_G$  entspricht dem Selektivitätskoeffizienten. Zu beachten ist, dass die Ionenkonzentrationen in der Lösung zur reziproken Potenz ihrer Wertigkeit erhoben werden (reduziertes Aktivitätenverhältnis). Gapon-Austauschkoeffizienten wurden hier dazu verwendet, Austausch-Selektivitätskoeffizienten für  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$  und  $Al^{3+}$  aus der Bodensickerwasserchemie (Felddaten) und aus den Mengen austauschbaren



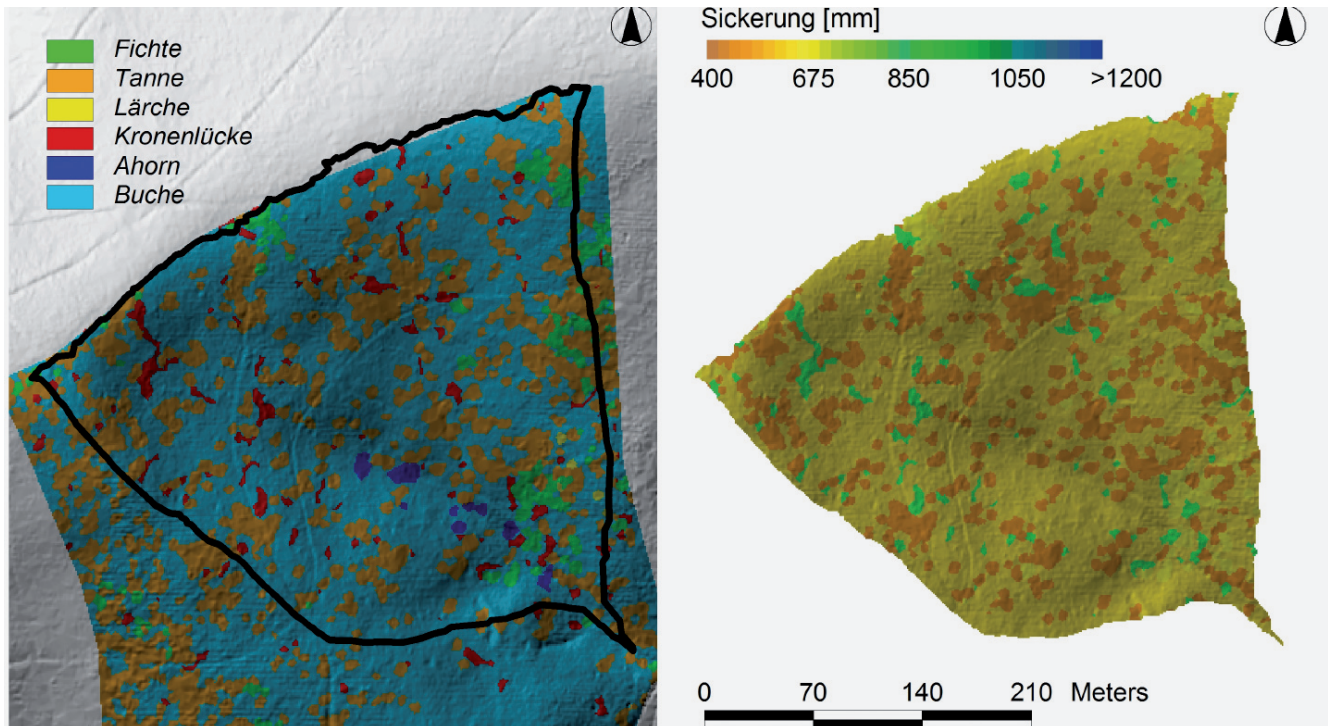


Abb. 1: Bestandeszusammensetzung und Wasserhaushaltsmodellierung im Conventwald-Einzugsgebiet in Abhängigkeit von waldbaulichen Struktureinflüssen. Links (Abb.1a): Baumartenverteilung nach Luftbildauswertung. Rechts (Abb.1b): Jährliche Wasser-Sickerraten, stratifiziert nach der Baumartenzusammensetzung.

Fig. 1: Forest stand composition according to aerial photos (left: Fig. 1a), and water budget modeling (yearly soil water fluxes) in dependence on stand structure effects (right: Fig. 1b), "Conventwald" watershed.

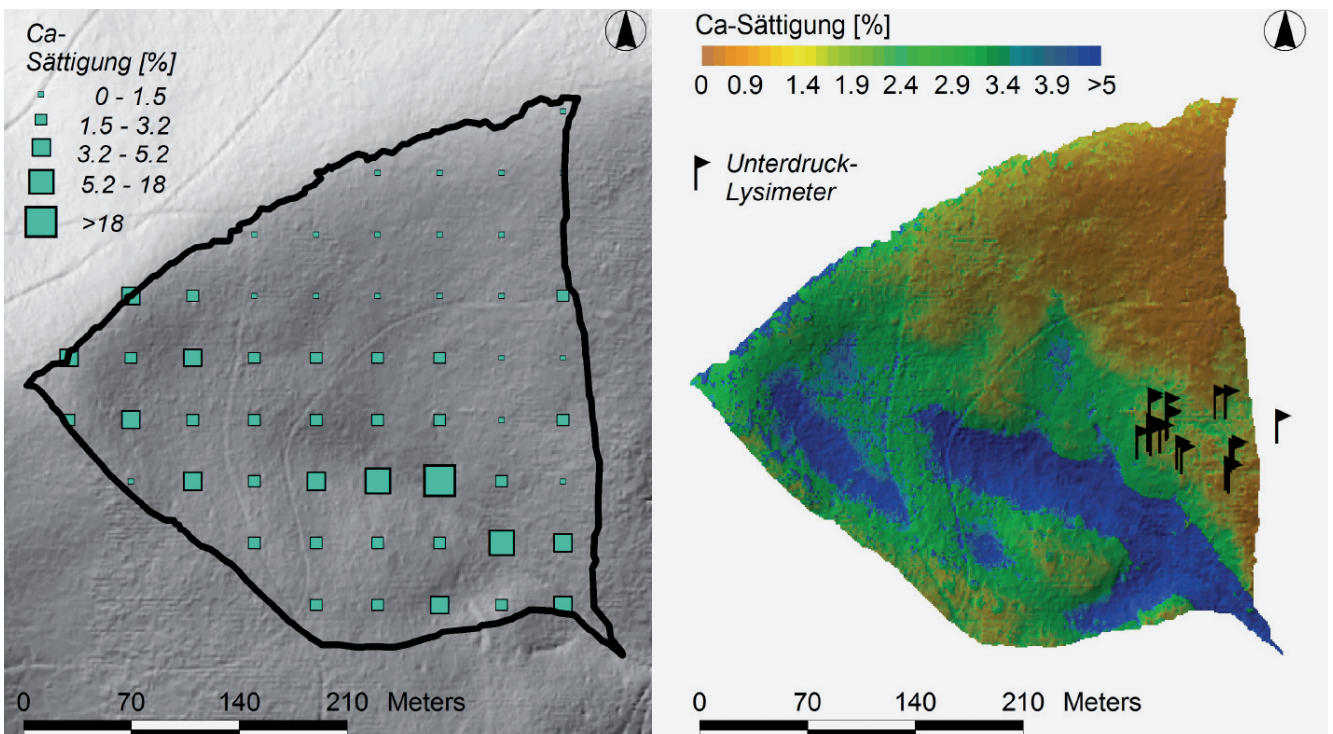


Abb. 2: Upscaling der Bodenfestphase. Links (Abb. 2a): Ca-Sättigung in 10–30 cm Tiefe der Bodeninventur des Jahres 2006 für 56 Stichprobenpunkte im Einzugsgebiet der Conventwaldstudie. Rechts (Abb. 2b): Karte des räumlichen Upscalingmodells in der Tiefenstufe 10–30 cm sowie Lage der Unterdrucklysimeterplots.

Fig. 2: Upscaling of data of the soil solid phase. Ca-saturation at 10–30 cm depth of the soil inventory data 2006 (left: Fig. 2a) and map of the spatial upscaling model at this soil depth as well as position of the suction cup plots in the "Conventwald" watershed (right: Fig. 2b).

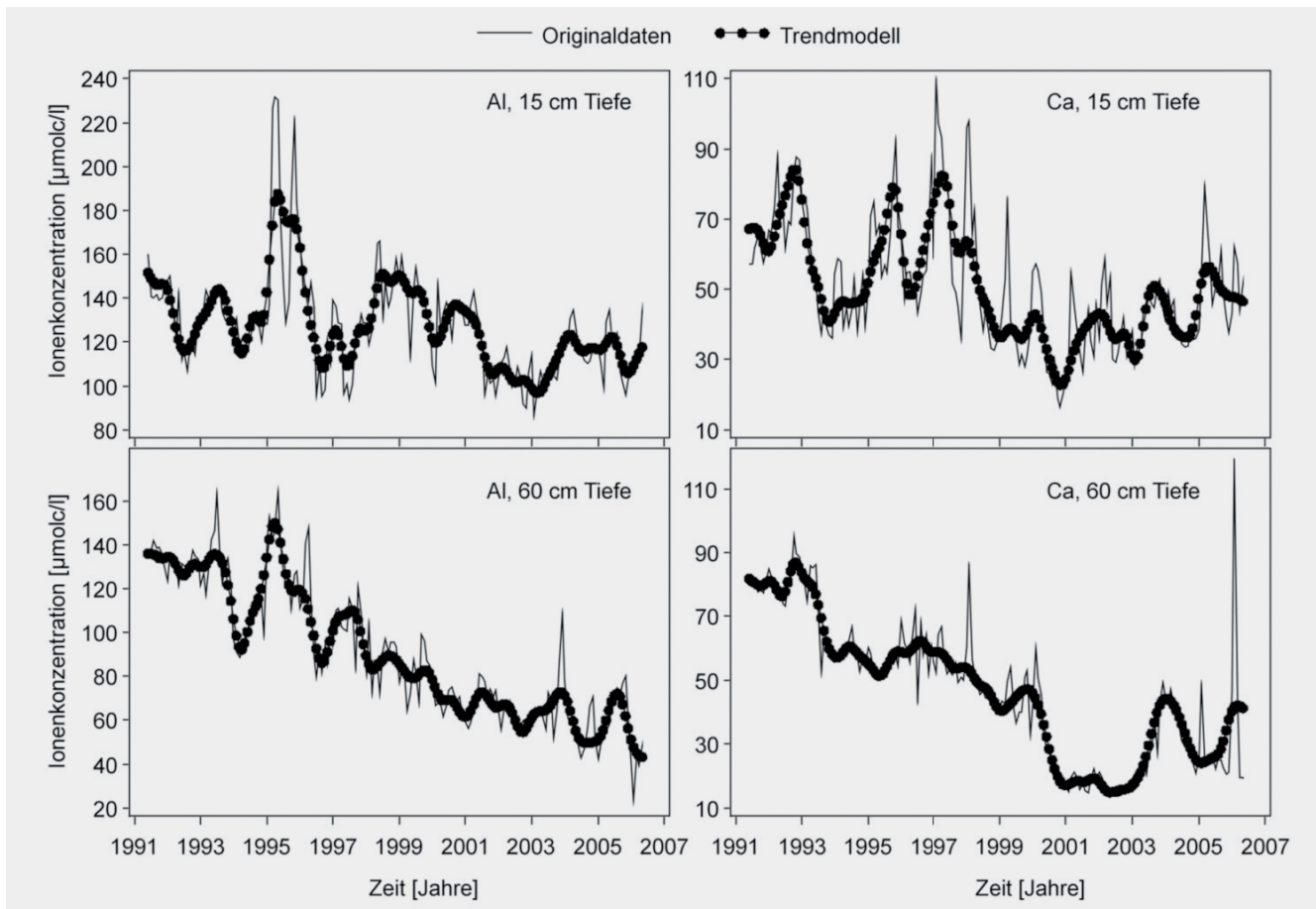


Abb. 3: Beispiel für den Einsatz der X-11-ARIMA Prozedur von SAS (2004) zur Berechnung jahreszeitlich bereinigter Zeitreihen für Bodensickerwasserdaten in 15 und 60 cm Tiefe; Originaldaten = Konzentration, gewichtet für waldbauliche Struktureinheiten; Trendmodell = Zeittrend nach Filterung irregulärer und saisonaler Komponenten, aber Einbezug lang- bis mittelfristig wirksamer zyklischer Faktoren.

Fig. 3: Example of using the X-11-ARIMA procedure of SAS (2004) to calculate seasonally adjusted time series for soil solution data measured in the field; original data = concentration at 15 and 60 cm depth, weighted based on structural forest stand units; adjusted data = time trend after removing irregular and seasonal components but including long-term cyclical factors.

Kationen zu berechnen, die im Rahmen einer stratifizierten Bodeninventur 1996/97 erhoben wurden (ZIRLEWAGEN et al. 1997, VON WILPERT 2008). Die Inventur erfolgte stratifiziert nach der Kronendichte (Kronenkern- vs. Kronenlückengebiete) mit 10–30 Wiederholungen in vier verschiedenen waldbaulichen Varianten (Altbuchen im Mischbestand des Einzugsgebietes, Buchen- und Fichten-Stangenhölzer, ein 90-jähriges Fichten-Baumholz). Die Beprobungsstrategie war angepasst an ein kleinskaliges Inventurdesign mit Beprobungsflächen von etwa 25 x 25 bis 60 x 60 m je Variante, um Kronendichteeffekte auf den Bodenzustand auswerten zu können. Die Probepunkte lagen in unmittelbarer Nachbarschaft zu den Unterdrucklysimetern, eine Voraussetzung, um Messwerte zur Bodenlösung und Bodenfestphase in Austauschgleichungen auswerten zu können. Auch wenn im Wassereinzugsgebiet die Standorte der Unterdrucklysimeter nur im Bereich mittlerer Neutralkationen-Sättigungen lagen (Abb. 2), konnte durch Verwendung von Daten auch der anderen waldbaulichen Varianten der standorttypische Wertebereich der Selektivitätskoeffizienten abgedeckt werden (Kap. 3).

Um verwertbare und stabile Selektivitätskoeffizienten zu erhalten, wurden zwei Vorarbeiten durchgeführt: (a) Für jede Struktureinheit und Tiefenstufe der Inventur 1996/97 wurden

die Anteile austauschbarer Kationen gemittelt und (b) es wurden nur Mittelwerte längerer Abschnitte der saisonal bereinigten Zeitreihen von Bodensickerwasserkonzentrationen verwendet. Die Definition von Zeiträumen, innerhalb derer Bodenlösungsdaten zur Berechnung der Selektivitätskoeffizienten verwendet werden sollten, erfolgte mithilfe der Zeitreihenanalyse (s. o.). Im letzten Schritt wurden aus den nach Struktureinheit und Tiefenstufe gemittelten Daten der Bodenlösungs- und Austauschphase die Selektivitätskoeffizienten berechnet. An die berechneten Selektivitätskoeffizienten wurden nichtlineare Regressionsgleichungen angepasst (PROC NLIN, SAS 2004), wobei die Sättigung des Austauschers mit Al- und Felonen als variierender Faktor den Versauerungszustand des Bodens abbildet.

Neben denen aus Inventurdaten von 1996/97 berechneten Selektivitätskoeffizienten wurden Selektivitätskoeffizienten auch aus Inventurdaten des Jahres 2006 berechnet. Hierzu wurden an den Koordinaten der Unterdrucklysimeter-Messplots im Einzugsgebiet die regionalisierten Kationensättigungen des Jahres 2006 mit den zwischen 2005 und 2006 gemessenen Bodensickerwasserkonzentrationen verschritten. Die mit diesem Datensatz berechneten Selektivitätskoeffizienten dienten ausschließlich zur Validierung der Selektivitätskoeffizienten des Jahres 1996/97.



## Bodenstoffflüsse mit Raum- und Zeitbezug

Setzt man in die allgemeine Gapon-Gleichung (1) z. B. Parameter für das Ionenpaar Ca-Al ein und löst nach der (Ca-) Bodenlösungskonzentration auf, ergibt sich die folgende Gleichung (2):

$$(\text{Ca}) = \frac{X\text{Ca}^2 \cdot (\text{Al}^{2/3})}{X\text{Al}^2 \cdot k_G^2} \quad (2)$$

$$(\text{Mg}) = \frac{X\text{Mg}^2 \cdot (\text{Al}^{2/3})}{X\text{Al}^2 \cdot k_G^2} \quad (3)$$

In der Gleichung (2) entspricht X dem äquivalenten Ionenanteil in der Austauschphase, ( ) der Bodenlösungskonzentration und  $k_G$  dem Gapon-Selektivitätskoeffizienten. Für das Ionenpaar Mg-Al lautet die Gleichung entsprechend (3). Für Kationen in der Austauschphase lassen sich nach Kap. 2 statistische Upscaling-Modelle aus Inventurdaten berechnen und kartografisch im GIS darstellen. Der Gapon-Koeffizient  $k_G$  kann über nichtlineare Regressionsbeziehungen in Abhängigkeit von der Al-Sättigung geschätzt und ebenfalls flächig im GIS dargestellt werden (s. o.). Da die Gapon-Gleichung dann aber immer noch eine Gleichung mit zwei Unbekannten ist (zwei unbekannte Ionenkonzentrationen in der Bodenlösung), benutzten wir die vergleichsweise stabile Al-Basensättigungs-Beziehung, um die Al-Konzentrationen in der Bodenlösung mithilfe der Basensättigung aus einer nichtlinearen Regressionsfunktion zu schätzen. Diese wurden in die Gapon-Gleichungen für die Ionenpaare Ca-Al und Mg-Al eingesetzt und so die Ca- bzw. Mg-Konzentrationen in der Bodenlösung für das Untersuchungsgebiet auf der gesamten Fläche abgeleitet. Der Zeitbezug der resultierenden Karten der Bodenlösungsschemie entspricht dann dem Aufnahmezeitpunkt der Inventur der Bodenfestphase – in dieser Studie das Jahr 2006. Bessere, d. h. präzisere Schätzungen der Al-Bodenlösungskonzentrationen ließen sich mithilfe der strafferen Beziehung zum pH der Bodenfestphase berechnen (vgl. SCHEFFER & SCHACHTSCHABEL 1992). Doch waren pH-Werte der Festphase nur für die Inventur 1996/97, nicht aber für die Inventur 2006 im Einzugsgebiet verfügbar, so dass diese Beziehung nicht zur Regionalisierung bodenchemischer Parameter im Wassereinzugsgebiet eingesetzt werden konnte.

Um eine zeitlich-dynamische Dimension in die Auswertungen integrieren zu können, wurden wiederum zeitreihenanalytische Auswertungen der Bodenlösungskonzentrationen eingesetzt (Abb. 3). Die saisonal bereinigten Zeitreihen wurden zunächst in Änderungsfaktoren transformiert, welche die relative Änderung der Zeittrends der Bodensickerwasserdaten gegenüber dem Bezugszeitpunkt der Bodeninventur, dem Jahr 2006, wiedergaben. Diese Änderungsfaktoren wurden dann dazu verwendet, die absolute Größe der regionalisierten Ionenkonzentrationen des Jahres 2006 auch für den Zeitraum 1991–2005 im ganzen Untersuchungsgebiet hochzurechnen: Im GIS wurden die digitalen Karten der Ionenkonzentrationen des Jahres 2006 mit den Änderungsfaktoren verrechnet. Modell-Output waren dann Karten von Ionenkonzentrationen in der Bodenlösung im Zeitraum 1991 bis 2006. Bei diesem Auswertungsschritt wurde die Zeitreihenfrequenz auf jährliche Intervalle beschränkt, um stabile Beziehungen zwischen Bodenlösungs- und Bodenfestphase unterstellen zu können. Raumzeitabhängige Stoffflüsse im Boden wurden durch Multiplikation der Karten der Sickerwasserkonzentrationen mit den Ergebnissen des Wasserhaushaltsmodells WHNSIM (s. o., Abb. 1b) berechnet.

nenkonzentrationen des Jahres 2006 mit den Änderungsfaktoren verrechnet. Modell-Output waren dann Karten von Ionenkonzentrationen in der Bodenlösung im Zeitraum 1991 bis 2006. Bei diesem Auswertungsschritt wurde die Zeitreihenfrequenz auf jährliche Intervalle beschränkt, um stabile Beziehungen zwischen Bodenlösungs- und Bodenfestphase unterstellen zu können. Raumzeitabhängige Stoffflüsse im Boden wurden durch Multiplikation der Karten der Sickerwasserkonzentrationen mit den Ergebnissen des Wasserhaushaltsmodells WHNSIM (s. o., Abb. 1b) berechnet.

### 3. Modellanwendung und Diskussion

#### Räumliche Modelle zur Bodenfestphase (Daten 2006)

Auf terrestrischen Standorten, d. h. außerhalb der Bachaue, konnten die Zielvariablen mit einem Bestimmtheitsmaß von 49–75% (Basensättigung), 72–81% (Ca-Sättigung), 33–50% (Mg-Sättigung), 50–66% (Na-Sättigung), 28–59% (K-Sättigung), 64–81% (Mn-Sättigung), 48–56% (H-Sättigung), 40–74% (Fe-Sättigung) und 25–66% (Al-Sättigung) regionalisiert werden. Die Verwendung von Datensätzen entlang der Bachaue resultierte immer in einem viel höheren  $R^2$ , da die Messwertvarianz in dieser Sondersituation deutlich niedriger als auf der übrigen Fläche ist. Die Einbeziehung dieser Sonderstandorte ergab allerdings eine schlechtere Parameteranpassung für den Hauptteil des Testgebietes, den terrestrischen Flächen. Deshalb wurde der stratifizierte Vorgehensweise beim Upscaling der Bodenfestphase der Vorzug gegeben, trotz nominell geringerer Anpassungsgüten. In der regionalisierten Karte der Basensättigung (Abb. 2) sind deutlich die Bereiche zu erkennen, wo mit erhöhter Akkumulation von Wasser und Nährstoffen zu rechnen ist (entlang des Vorfluters und den Hangfüßen) bzw. die oberen Hangsituationen, welche niedrigere Gehalte austauschbarer Neutralkationen aufweisen. Topografische Effekte auf die Höhe der Basensättigung wurden mithilfe von sekundären Reliefattributen wie dem topografischen Vernässungsindex TWI, dem topografischen Positionsindex TOPEX und anderen modelliert. Überprüfungen der Regressionsresiduen auf räumliche Autokorrelation ergaben keinen Hinweis auf Verletzung dieser Modellprämisse.

Da nicht nur die Basensättigung, sondern auch die einzelnen Kationensättigungen regionalisiert wurden, lassen sich die Einzelmodelle indirekt validieren. Es wurden die Summen der mit den Einzelmodellen für Na, K, Mg und Ca berechneten Sättigungen mit der als Zielgröße ebenfalls regionalisierten Basensättigung auf Grundlage von 100 zufällig im GIS ausgewählten Stichproben überprüft (Abb. 4, linke Teilabbildungen). Die verschiedenen Modellansätze zeigen hier eine hohe Übereinstimmung ( $R^2$  zwischen 0,63 und 0,90 bei Modellen bis 60 cm Tiefe). Nur im unteren Mineralboden (60–90 cm Tiefe) weichen die Modelle stärker voneinander ab ( $R^2$  0,52). Im Vergleich zu den Messwerten der Basensättigung zeigt die summative Betrachtung der vier Einzelmodelle Na, K, Mg und Ca ebenfalls eine gute Modell-Performance (Abb. 4, rechte Teilabbildungen).

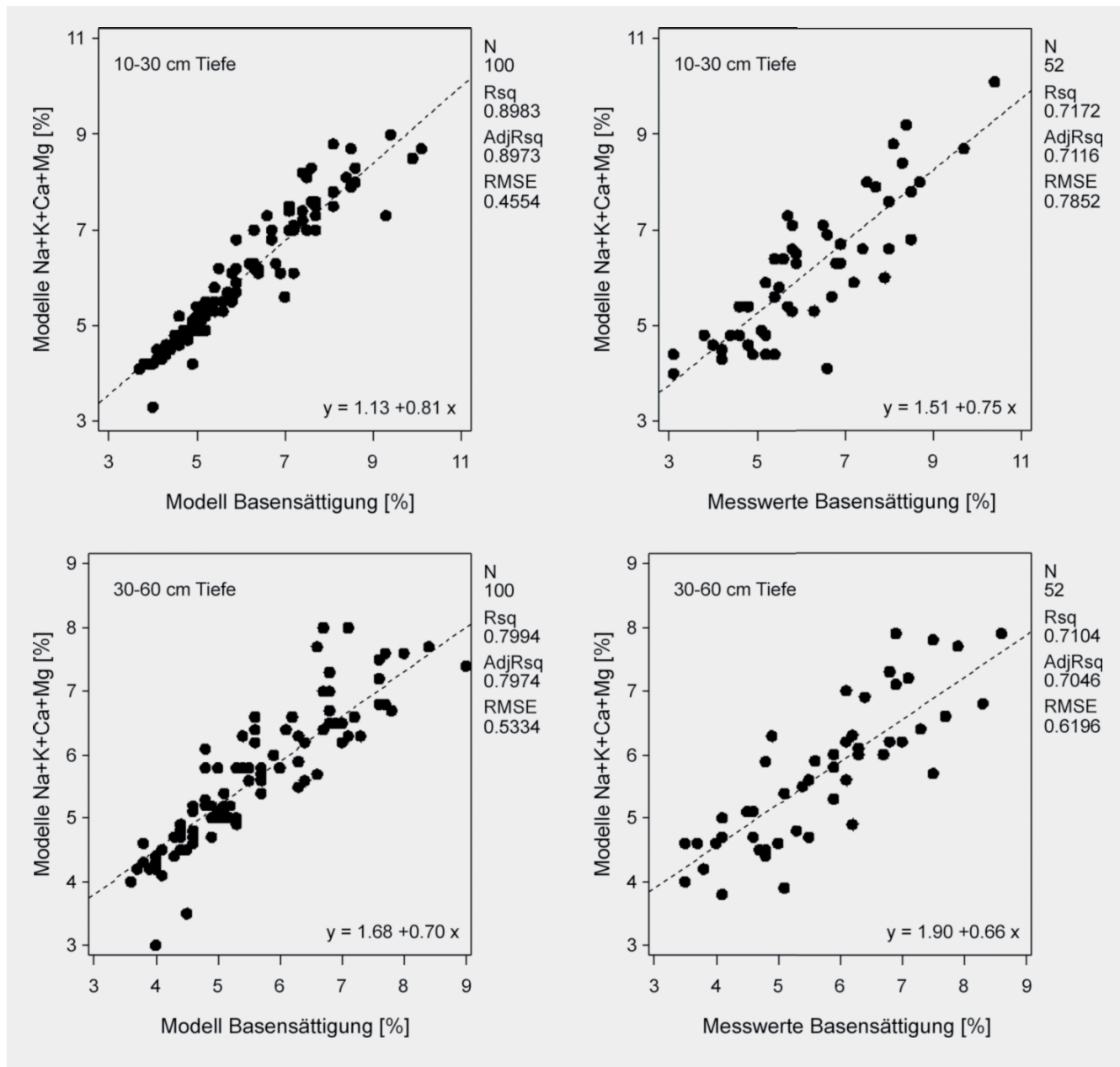


Abb. 4: Modellvalidierungen der Upscaling-Ergebnisse für Kationensättigungen der Bodeninventur 2006; links: Summen der Basensättigung der vier Einzelmodelle Na+K+Ca+Mg aufgetragen gegen die Ergebnisse des „direkten“ Upscaling der Basensättigung; rechts: Summen der vier Einzelmodelle aufgetragen gegen die Messwerte der Basensättigung.

Fig. 4: Model validations for upscaling results of exchangeable cation percentages, soil inventory 2006; left: sum of the separate upscaling models Na/K/Ca/Mg plotted against a "direct" upscaling model using base saturation as response; right: sum of the separate upscaling models Na/K/Ca/Mg plotted against the measured base saturation.

#### Austauschkoeffizienten

Auf der Basis der Gapon-Gleichung zeigt Abb. 5 relative Austauschselektivitäten für Mg (links) und Ca (rechts), berechnet jeweils in Bezug zum Gegenion Al und geplottet gegen austauschbares Al. Die relativen Selektivitäten von Ca-Al sind höher als diejenigen von Mg-Al mit der Folge höherer Anteile von Mg in der Lösungsphase. Dieser Effekt lässt sich mit der relativen Eintauschstärke von Kationen am Austauscher in Abhängigkeit von der Ionengröße und Ionenladung erklären. Die Selektivitäten in Abb. 5 nehmen mit der Zunahme des dreiwertigen Al in der Austauscherphase ab.

Dies spiegelt die Abhängigkeit der relativen Mg-Al und Ca-Al-Selektivität vom Bodensäurestatus wider. Generell hängen Selektivitätskoeffizienten vom Typ der Oberflächenladung und dem Anteil sorbierter Kationen ab. Trotz der Tatsache, dass in unserer Studie die Selektivitätskoeffizienten an Felddaten angepasst worden sind und damit auf Ungleichgewichts-Beziehungen basieren, liegen sie im Bereich der von Hildebrand (1994) gezeigten Beziehungen. Bei Mg trifft dies exakt zu. Bei Ca sind unsere Koeffizienten etwas niedriger, was auf die unterschiedlichen experimentellen

Randbedingungen zurückgeführt werden kann. HILDEBRAND (1986, 1994) führte, wie die meisten anderen Autoren auch (z. B. SAUVE & HENDERSHOT 1995, LUDWIG & KÖBL 2002, CARLYLE et al. 2004), Laborexperimente mit Austauschlösungen im Quasi-Gleichgewicht durch. Wenn Bodenlösungsdaten aus Freilandversuchen an Unterdrucklysimetern gewonnen werden, sind solche Gleichgewichte naturgemäß nicht zu erreichen und die resultierenden Koeffizienten sind nicht mit Laborexperimenten vergleichbar. Trotz der Verwendung von Felddaten zur Ableitung der Selektivitätskoeffizienten konnten aber sehr straffe Beziehungen zwischen den Koeffizienten und der Austauscherbelegung (Al-Sättigung) gefunden werden. 84 bzw. 95% der Varianz konnten mithilfe nichtlinearer Regressionsmodelle erklärt werden. Die Qualität der Modellanpassung kann für die beabsichtigten Upscaling-

Verfahren als adäquat bewertet werden. Ein niedrigeres Bestimmtheitsmaß für die Ca-Al-Selektivitäten kann als Effekt abweichender Austauschgleichgewichte an organischen Sorptionsplätzen interpretiert werden, der im einfachen, auf mineralische Sorbenten bezogenen Gapon-Gleichungsmodell nicht berücksichtigt ist. Eine Ursache für die hier gefundenen, relativ engen Beziehungen dürfte auch am Verfahren liegen, das zur Auswertung der Sickerwasserdaten eingesetzt worden ist. Wie oben beschrieben, wurden nur Mittelwerte aus längeren Perioden der saisonal bereinigten Sickerwasserdaten verwendet. Da die längerfristigen Trendzyklen in dieser Studie etwa zwei Jahresabstände aufwiesen (Abb. 3), wurden 2jährige Mittelwerte der Trendreihe zur Ableitung der Austauschkoeffizienten herangezogen.

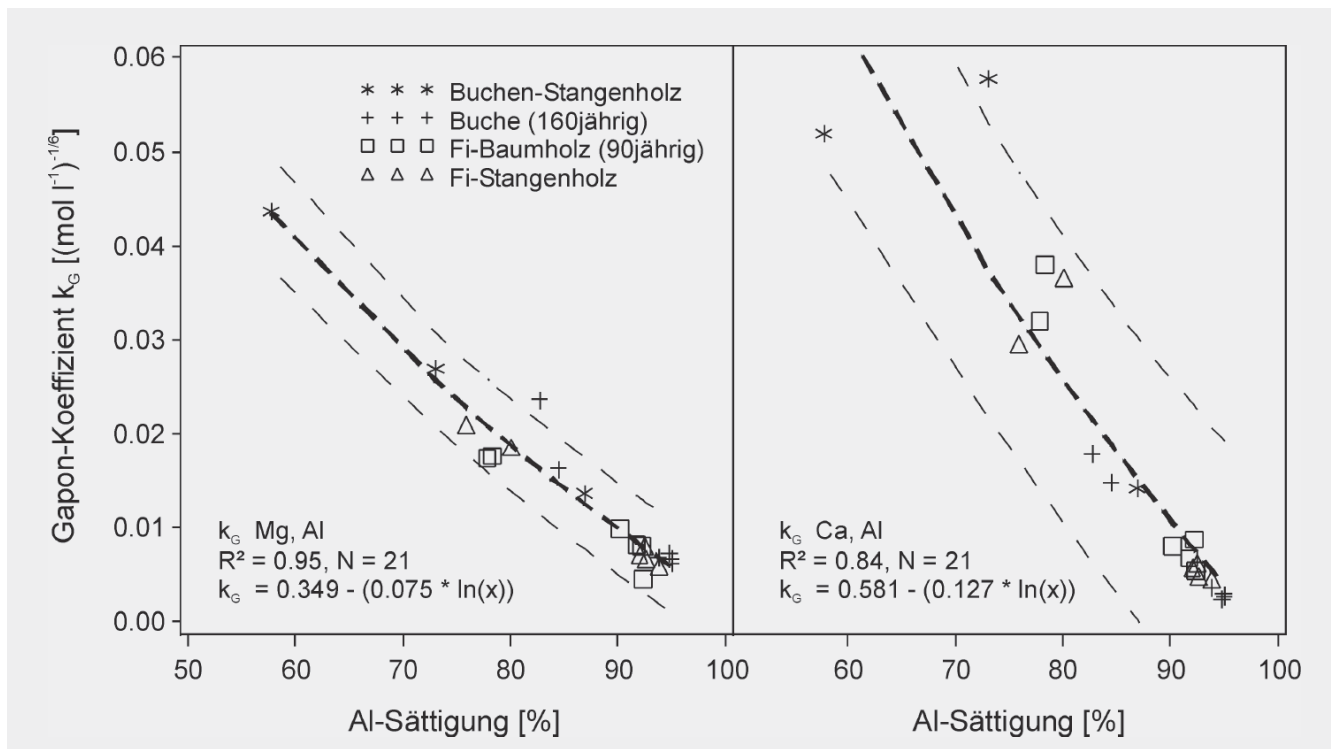


Abb. 5: Relative Selektivitäten von Mg und Ca im Vergleich zu Al, aufgetragen gegen die Sättigung mit austauschbarem Al; Datenbasis 1996/97

Fig. 5: Relative selectivities of Mg and Ca binding compared to Al plotted against the saturation of exchangeable Al, data base 1996/97.

### Raum-Zeitmuster und Validierungsansätze

Die Zeitreihenmodelle zeigen für das Untersuchungsgebiet ausgeprägte Trendeffekte für die Elementfracht im Bodensickerwasser, vor allem im unteren Hauptwurzelraum (60 cm Tiefe, Abb. 3). Längerfristige Trends werden immer wieder von mittelfristig wirksamen Zyklen unterbrochen, wahrscheinlich als Folge von Witterungseffekten, die über jährlich-saisonale Muster hinauswirken und nach Ergebnis der Zeitreihenanalyse häufig zwei Jahre andauern (z. B. Zyklus 2003–2005). Die starke Abnahme der Aluminiumkonzentrationen in der Bodenlösung in 60 cm Tiefe (und die entsprechende deutliche Zunahme des pH, ohne Abb.) über einen Zeitraum von 15 Jahren lässt sich auf einen allgemeinen Rückgang der anthropogenen Depositionen im Unters-

suchungsgebiet zurückführen. Der Trend bei den Neutralkationenkonzentrationen ist in diesem Zeitraum weniger einheitlich. Nach anfänglich deutlicher Abnahme ist seit 2001 eine Trendumkehr zu beobachten. Der Befund starker zeitlicher Effekte in der chemischen Zusammensetzung der Bodenlösung verdeutlicht die Notwendigkeit, solche Effekte auch in die Regionalisierung bodenchemischer Daten zu integrieren. Da (a) für die Kationen in der Austauscherphase valide Upscaling-Modelle berechnet werden konnten, (b)  $k_G$  über die nichtlineare Regressionsbeziehung in Abhängigkeit von der Al-Sättigung auf der Fläche bestimmt werden konnte und (c) für Al in der Bodenlösung initiale Schätzbeziehungen zur Basensättigung (bzw. zum pH) bestanden, ließen sich mit

Gleichung (2) für Neutralkationenkonzentrationen in der Bodenlösung Regionalisierungen durch Verrechnung der modellierten digitalen Karten im GIS durchführen. Zeitbezug der regionalisierten Bodenlösungskonzentrationen war zunächst das Jahr 2006, das Jahr der Bodeninventur. Zeitlich-dynamische bodenchemische Effekte wurden wie oben beschrieben durch Anwendung zeitreihenanalytischer Methoden auf Sickerwasserdaten integriert. Als Zwischenergebnis wurden raumzeitabhängige Bodenlösungskonzentrationen für Al und die Neutralkationen berechnet. Da valide Ergebnisse einer Wasserhaushaltsmodellierung vorlagen (Abb.1), ließen sich daraus raum-zeitlich abhängige Bodenstoffflüsse herleiten. In Abb.6 ist ein Beispiel für die Modellierung von Raum-Zeitmustern von Bodenstoffflüssen im Untersuchungsgebiet aufgeführt. Besonders niedrige jährliche Flussraten traten im

Jahr 2003 auf, bedingt durch den Einfluss des Extremsommers 2003. Dagegen waren die Stoffflüsse im Jahr 1999 besonders hoch, einem Jahr mit hohen Niederschlägen bei gleichzeitig noch relativ hohem Niveau an Konzentrationen basischer Kationen in der Bodenlösung.

Gute Modellperformance garantiert noch keine korrekte Vorhersage einer Zielvariablen. Anhand verschiedener Verfahren wurde das hier dargestellte Methodenkonzept validiert. Auf die Validierungstechniken zur Überprüfung der Upscaling-Modelle bei den Kationensättigungen, die in dieser Arbeit verwendet worden sind, wurde schon oben hingewiesen. Regionalisierte Kationensättigungen zum Stichjahr 2006 wurden auch dazu verwendet, die zum Zeitpunkt 1996/97 berechneten Selektivitätskoeffizienten zu validieren. An den Koordinaten der Unterdrucklysimeter-Messplots

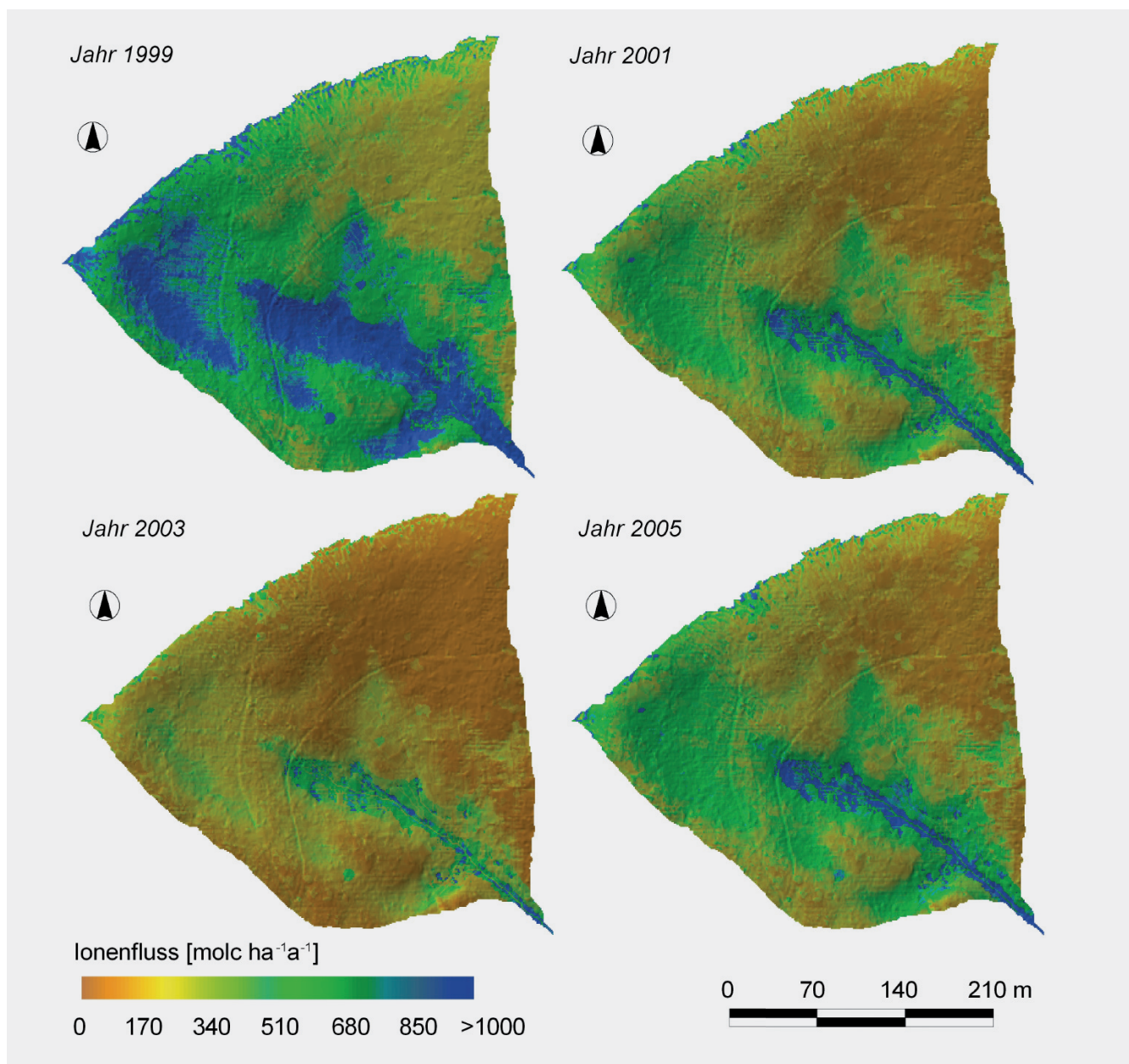


Abb. 6: Beispiel zur Modellierung von Raumzeitmustern von Bodenstoffflüssen. Jährliche Ca-Stoffflüsse in 45 cm Bodentiefe, Conventwald-Einzugsgebiet.

Fig. 6: Example of modeling spatio-temporal patterns of cation fluxes. Yearly Ca soil fluxes, "Conventwald" watershed at 45 cm soil depth.



wurden aus regionalisierten Kationensättigungen und den zwischen 2005 und 2006 gemessenen Bodensickerwasser-konzentrationen Selektivitätskoeffizienten berechnet und mit denen des Jahres 1996/97 verglichen (Abb. 7). Besonders enge Beziehungen zeigen sich bei den Mg-Al-Koeffizienten. Beim Ca-Al-Ionenpaar ist die Streuung wiederum deutlich breiter. Insgesamt bestätigt sich die Annahme, dass trotz der Modellvereinfachungen und der während des Beobachtungszeitraums realisierten bodenchemischen Trends von stabilen Beziehungen zwischen der Chemie der Bodenlösung und der Austauschphase ausgegangen werden kann.

#### 4. Schlussfolgerungen

Die vorliegende Arbeit zeigt einen methodischen Ansatz, mit dem Raum-Zeitmuster von Kationen-Bodenstoffflüssen regionalisiert werden können. Die verwendeten QI-Beziehungen beschränken dessen Anwendung allerdings auf den Mineralboden, und dort auch nur auf Bereiche mehr oder weniger stark saurer Bodenreaktion (keine Carbonatstandorte). Um stabile QI-Beziehungen bei Verwendung von Felddaten aus Unterdruck-Lysimetertechnik unterstellen zu können, sollte die zeitliche Auflösung bei maximal einem Jahr liegen. Saisonale Effekte sind also nicht darstellbar, mittelfristige zyklische Effekte aber schon. Die Methodik ist hinsichtlich GIS, Statistik und Programmumgebung komplex. Im Vergleich zu ausschließlich prozessorientierten Modellen wie SAFE ist sie aber noch durchschaubar und bietet die Chance, an gemessenem Datenmaterial zu neuem Erkenntnisgewinn zu gelangen. Dies trifft insbesondere für das forstliche Umweltmonitoring zu.

Die Methoden, die hier auf der Skala eines Wassereinzugsgebietes erprobt worden sind, sollten sich flexibel auch auf anderen Skalen anwenden lassen. Dabei bestehen eine Reihe von Validierungsmöglichkeiten, um die Qualität der abgeleiteten Algorithmen zu garantieren.

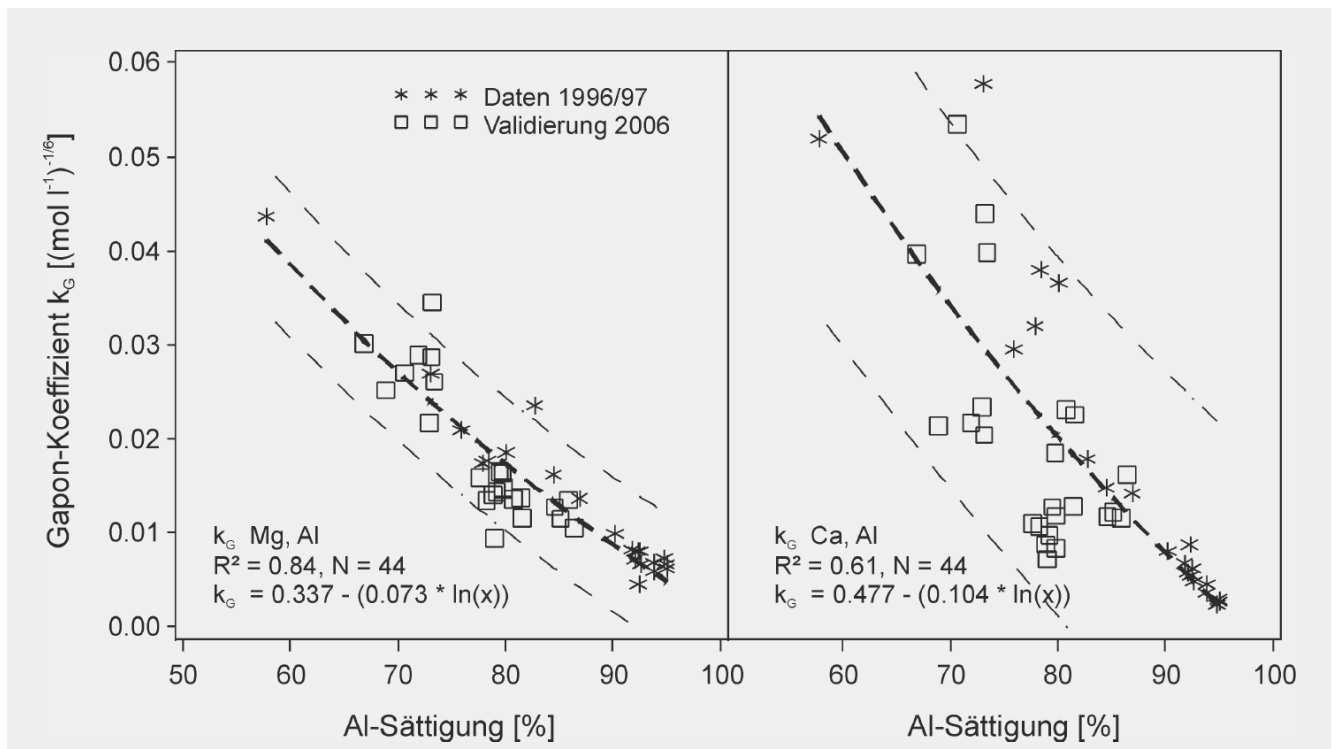


Abb. 7: Relative Selektivitäten von Mg und Ca am Kationenaustauscher im Vergleich zu Al, aufgetragen gegen die Sättigung mit austauschbarem Al; Vergleich der Koeffizienten, berechnet mit Daten 1996/97, und denen des Validierungsdatensatzes des Jahres 2006.

Fig. 7: Relative selectivities of Mg and Ca sorption compared to Al plotted against the saturation of exchangeable Al; comparison of coefficients of the data base 1996/97 with those of the validation data set of the year 2006.

## Literatur

- BML BUNDESMINISTERIUM FÜR ERNÄHRUNG, LANDWIRTSCHAFT UND FORSTEN(1990):Bund-/LänderarbeitsgruppeBZE: Bundesweite Bodenzustandserhebung im Wald (BZE, Arbeitsanleitung).
- CARLYLE, H.F.; TELLAM, J.H.; PARKER, K.E. (2004): The use of laboratory-determined ion exchange parameters in the predictive modeling of field-scale major cation migration in groundwater over a 40-year period. *Journal of Contaminant Hydrology* 68: 55–81.
- GAPON, E.N. (1933): Theory of exchange adsorption in soils. *J. Gen. Chem.* 3: 144–152.
- HILDEBRAND, E.E. (1986): Zustand und Entwicklung der Austauschereigenschaften von Mineralböden aus Standorten mit erkrankten Waldbeständen. *Forstw. Cbl.* 105: 60–76.
- HILDEBRAND, E.E. (1994): The heterogeneous distribution of mobile ions in the rhizosphere of acid forest soils: facts, causes and consequences. *J. Environ. Sci. Health A29(9)*: 1973–1992.
- HUWE, B.; TOTSCHKE, K.U. (1995): Deterministic and stochastic modelling of water, heat and nitrogen dynamics on different scales with WHNSIM. *Journal of Contaminant Hydrology* 20: 265–284.
- ICP FORESTS (1998): manual on methods and criteria for harmonized sampling, assessment, monitoring and analysis of the effects of air pollution on forests. <http://www.icp-forests.org>
- LUDWIG, B.; KÖLBL, A. (2002): Modeling cation exchange in columns of disturbed and undisturbed sub-soil. *European Journal of Soil Science* 53: 645–653.
- SAS INSTITUTE INC. (2004): SAS OnlineDoc® 9.1.3. Cary, NC: SAS Institute Inc.
- SAUVE, S.; HENDERSHOT, W.H. (1995): Cation selectivity coefficient variations in acidic forest soils from Sutton, Quebec. *Geoderma*. 68: 301–308.
- SCHEFFER, F.; SCHACHTSCHABEL, P. (1992): Lehrbuch der Bodenkunde. Ferdinand Enke Verlag Stuttgart, 491 S.
- Strayer, D.L.; Ewing, H.A., Bigelow, S. (2003): What kind of spatial and temporal details are required in models of heterogeneous systems? *Oikos* 102: 654–662.
- VON WILPERT (2008): Waldbauliche Steuerungsmöglichkeiten des Stoffhaushalts von Waldökosystemen – am Beispiel von Buchen- und Fichtenvarianten der Conventwald-Fallstudie. Schriftenreihe Freiburger Forstliche Forschung 40, Habil. Univ. Freiburg i. Br.
- VON WILPERT, K.; ZIRLEWAGEN, D.; KOHLER, M. (2000): To what extent can silviculture enhance sustainability of forest sites under the immission regime in Central Europe? *Water Air Soil Pollut* 122: 105–120.
- ZIRLEWAGEN, D. (2003): Regionalisierung bodenchemischer Eigenschaften in topographisch stark gegliederten Waldlandschaften. Schriftenreihe Freiburger Forstliche Forschung 19, Diss. Univ. Freiburg i. Br.
- ZIRLEWAGEN, D.; VON WILPERT, K. (2001): Modeling water and ion fluxes in a highly structured, mixed-species stand. *For. Ecol. Manage.* 143: 27–37.
- ZIRLEWAGEN, D.; VON WILPERT, K. (2004): Using model scenarios to predict and evaluate forest management impacts on soil base saturation at landscape level. *Eur. J. Forest Res.* 123: 269–282.
- ZIRLEWAGEN, D.; KOHLER, M.; VON WILPERT, K. (1997): Die Auswirkungen waldbaulicher Strategien auf die chemischen Eigenschaften der Bodenfestphase. *Mitt. Dt. bodenkundl. Ges.* 85: 1429–1432.
- ZIRLEWAGEN, D.; RABEN, G.; WEISE, M. (2007): Zoning of forest health conditions based on a set of soil, topographic and vegetation parameters. *For. Ecol. Manage.* 248: 43–55.

## Autorenanschriften

Dietmar Zirlewagen  
 Interra, Büro für Umweltmonitoring  
 St.-Peter-Str. 30, D-79341 Kenzingen  
 Telefon +49 7644-930539  
 Email [d.zirlewagen@interra.biz](mailto:d.zirlewagen@interra.biz)

Klaus von Wilpert  
 FVA Baden-Württemberg  
 Abteilung Boden und Umwelt  
 Wonnhaldestraße 4, D-79100 Freiburg  
 Telefon +49 761 4018-173  
 Email [Klaus.Wilpert@forst.bwl.de](mailto:Klaus.Wilpert@forst.bwl.de)