SABINE RIEWENHERM UND HELMUT LIETH (HRSG.) 1991: VERHANDLUNGEN DER GESELLSCHAFT FÜR ÖKOLOGIE (OSNABRÜCK 1989) BAND XIX/III: 663-669

MODELLVERSUCHE ZUR STOFFVERLAGERUNG IN EINEM ACKERBAULICH GENUTZTEN SANDBODEN

Horst Gerke und Reinhard Förster

ABSTRACT

This paper presents the concept of the development of a complex model to describe the ion transport and physicochemical equilibria in the soil for agro-ecosystem studies with special emphasis on calibration and validation and the simulation of a percolation experiment on undisturbed soil columns from a sand soil.
The model experiments are comprising batch experiments (physicochemical equilibria), percolation experiments (steady state conditions), and field monitoring stations (varying boundary conditions). Deviations between measured and simulated results can be due to measurement errors, faulty parameter or process identification.
The equilibration period before starting the fertilization is of great importance if the movement of interacting cations is of interest. In the percolation experiment a mineralization of organic matter induced a cation washout and a change in the cation exchanger composition. The fertilization with potassium and sodium sulfate induced losses of cations, especially calcium and magnesium. In this soil, a sandy and humic A_p-horizon, the cation output exceeded the input by approximately 50 %.

keywords: *agro-ecosystem, sand soil, soil physics, ion movement, model development, model experiments, undisturbed soil columns, percolation experiment, breakthrough curves*

1. EINLEITUNG

Bei der Untersuchung der Wasser- und Stoffdynamik in Agrarökosystemen spielt die Beschreibung der Stoffverlagerung im Boden eine zentrale Rolle. Eine Bilanzierung der Stoffumsatzraten im Boden erlaubt Aussagen über Akkumulation oder Auswaschung von Nähr- und Schadstoffen und liefert somit Grunddaten z.B. zur Beurteilung des Nährstoffhaushalts oder der Grundwasserverschmutzung. Die Kenntnis der Zustandsvariablen, wie z.B. des Wassergehalts oder der Ionenkonzentrationen im Boden, ist eine Voraussetzung zur Beschreibung der Lebensbedingungen von Bodenorganismen oder Pflanzenwurzeln.
Flüsse und Zustandsgrößen lassen sich allerdings - wenn überhaupt - nicht ständig und überall messen. Es werden daher Modelle entwickelt, um diese Größen zu berechnen. Die Bedeutung des Zusammenspiels zwischen Messen und Modellieren bei der Modellentwicklung im Rahmen der Kalibrierung und Validierung wurden von ROHDENBURG (1989) hervorgehoben. Die Entwicklung von mehreren Prozessen umfassenden Modellen ist besonders aufwendig. Es müssen dabei gezielte "Modellversuche" zur Parameterermittlung und -kalibrierung sowie zur Modellvalidierung durchgeführt werden.
Im folgenden sollen Konzeption und Vorgehensweise bei der Entwicklung eines komplexen Modells zur Beschreibung der Stoffverlagerung im Boden erläutert werden. An Ergebnissen von Modellversuchen und Simulationen sollen Probleme diskutiert und das Vorgehen verdeutlicht werden.

2. Modellversuche und Modellentwicklung

Bei der Entwicklung von Modellen der Stoffverlagerung im Boden sind die in Abbildung 1 dargestellten drei Kategorien von Modellversuchen von Bedeutung.

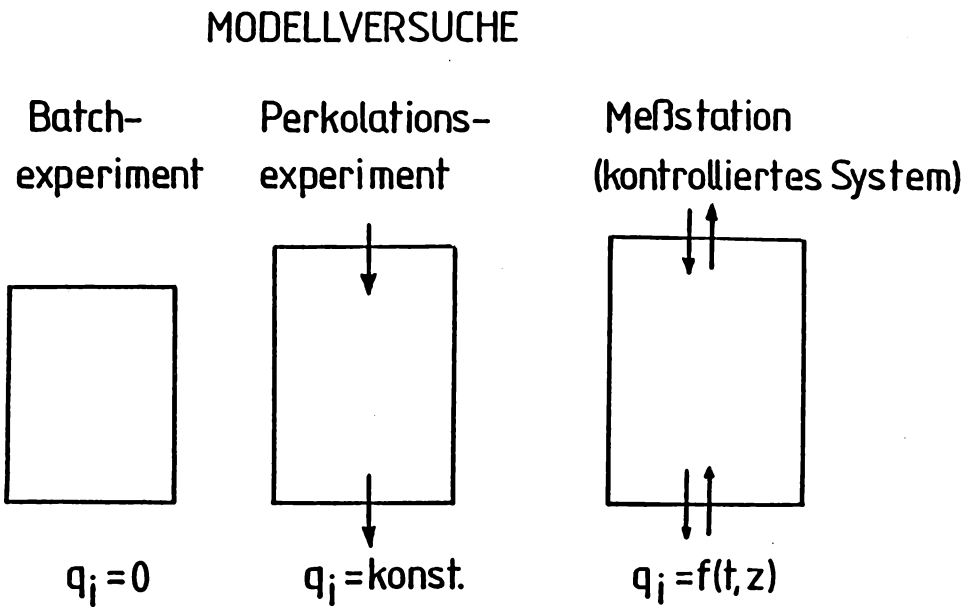

Abb. 1: Kategorien von Modellversuchen zur Entwicklung von Modellen der Stoffverlagerung im Boden, unterschieden nach der Art der Randbedingungen. q entspricht dem Fluß über den Rand des Systems.
(weitere Erläuterungen im Text)

a) Mit Batchexperimenten werden Parameter unter Gleichgewichtsbedingungen bestimmt, wie z.B. die Austauschisothermen. Die Input- und Outputflüsse der Stoffe i sind gleich null (q_i = 0). Gemessen werden die Zustandsgrößen im System nach Gleichgewichtseinstellung. Mit Batchversuchen lassen sich physikochemische Gleichgewichtsmodelle testen.

b) Mit Perkolationsexperimenten werden flußabhängige Modellparameter bestimmt, wie z.B. die hydraulische Leitfähigkeit (K) oder der Dispersionskoeffizient (D). Im Boden wird ein Fließgleichgewicht (q_i = konst.) eingestellt. Während sich K aus den Potentialgradienten und Flußraten direkt ergibt, muß zur Bestimmung von D ein Konzentrationsspuls induziert werden. Aus der substratspezifischen Modifikation des Pulses läßt sich D ermitteln. Die Versuche müssen bei unterschiedlichen Flußraten durchgeführt werden, um die Abhängigkeit der Parameter vom Wassergehalt in ungesättigten Böden zu berücksichtigen. Mit Perkolationsexperimenten lassen sich (i) Transportmodelle für nicht wechselwirkende Stoffe testen und kalibrieren, sowie (ii) Ionenverlagerungsmodelle, die Transport und Wechselwirkungen mit der Matrix kombinieren, testen, wobei hierfür die im Batchexperiment ermittelten Parameter vorliegen müssen.

c) Feldmeßstationen oder kontrollierte Systeme: Sie sind keine Versuche im eigentlichen Sinne, werden jedoch zur Klasse der Modellversuche gerechnet, wenn die Messungen zur Modellentwicklung dienen. Dazu werden über einen längeren Zeitraum die Randbedingungen (z.B. die Flüsse über die Ränder des Systems (q_i = f(t,z)) und die Zustandsvariablen (Ionenkonzentrationen, Potentiale) an möglichst repräsentativen Standorten und in ausreichend hoher zeitlicher Auflösung ermittelt. Mit diesen Daten lassen sich die durch die Stufen a) und b) vorkalibrierten Stoffverlagerungsmodelle unter Feldbedingungen mit zeitlich variierenden Randbedingungen kalibrieren und validieren.

Die Vorgehensweise bei der Entwicklung eines Stoffverlagerungsmodells ist in Abbildung 2 schematisch dargestellt.

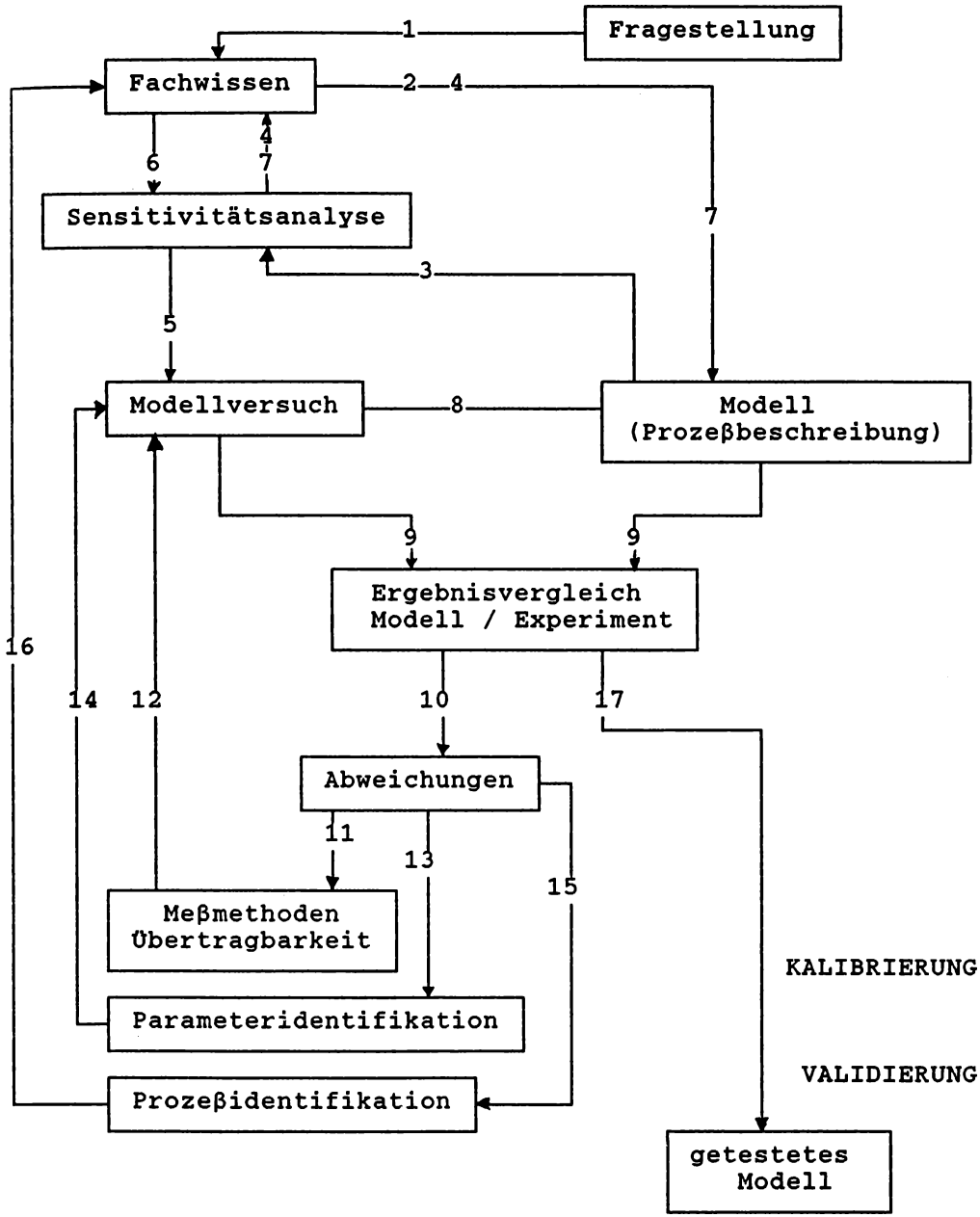

Abb. 2: Schematische Darstellung der Vorgehensweise bei der Modellentwicklung. Die Ziffern beziehen sich auf die Erläuterungen im Text.

Entsprechend der jeweiligen Fragestellung wird ein erster Modellentwurf aufgestellt (2), der auf dem vorhandenen Fachwissen (1) basiert. Durch Sensitivitätsanalysen (vgl. FÖRSTER und GERKE 1988) (3) kann die Bedeutung einzelner Parameter für das Modellergebnis geprüft werden, wodurch ggf. Modellvereinfachungen vorgenommen (4) oder die Experimente auf die Ermittlung besonders wichtiger Parameter gelenkt werden können (5). Aufgrund des Fachwissens kann die Parametervariation bei der Sensitivitätsanalyse in sinnvollen Größenordnungen stattfinden (6). Eine Aggregierung von Prozessen kann zu einem neuen Modell führen (7), für welches wiederum Sensitivitätsanalysen durchzuführen sind. Das ausgearbeitete Modell (8) sowie die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen (5) dienen zur Planung gezielter Experimente (Modellversuche) zur Parameterermittlung und zum Testen des Modells.
Der anschließende Vergleich zwischen experimentellen und simulierten Ergebnissen (9) steht im Mittelpunkt bei der Kalibrierung und Validierung. Treten Abweichungen (10) auf, müssen drei prinzipielle Ursachen untersucht werden. Es können (a) meßtechnische Fehler eine Rolle spielen oder Unstimmigkeiten aufgrund mangelnder Übertragbarkeit von Daten verantwortlich sein (11). Probleme der Übertragbarkeit können auftreten, wenn z.B. Daten von Bodenproben unterschiedlicher Größe oder bei unterschiedlichen Umgebungsbedingungen (Labor, Gelände) erhoben wurden. Dies führt zu entsprechend geänderten Modellexperimenten (12).
Abweichungen können (b) an einer ungenügenden Parameteridentifikation liegen (13). Ist dies der Fall, müssen entweder die Modellexperimente (14) oder die Identifikationsverfahren (13) verbessert werden. Schließlich können (c) Abweichungen dadurch hervorgerufen werden, daß Prozesse im Modell fehlen oder falsch beschrieben werden (15). In diesem Fall muß nach erfolgter Prozeßforschung (16) eine neue Modellversion erstellt werden (7). Sensitivitätsanalysen und Modell-Experiment-Vergleich beginnen erneut.
Sobald eine ausreichende Übereinstimmung (17) erzielt wird, kann die Modellentwicklung abgeschlossen werden. Experiment und Modell sollten so aufeinander abgestimmt werden, daß Einflüsse der Meßtechnik, Parameter- oder Prozeßidentifikation eindeutig voneinander getrennt untersucht werden können.
Bei der Entwicklung von Stoffverlagerungsmodellen muß diese Vorgehensweise sowohl für Teilmodelle als auch für kombinierte Modellversionen durchgeführt werden. Es sind Modellversuche aller drei oben aufgeführten Kategorien erforderlich.

3. Perkolationsexperiment und Simulation

Im Ionenverlagerungsmodell EQTRN (FÖRSTER 1986; FÖRSTER und GERKE 1989) wird der Transport gelöster Stoffe in der Bodenlösung mit der Konvektions-Dispersions-Gleichung beschrieben. Unter der Annahme lokalen thermodynamischen Gleichgewichts in der Bodenlösung werden der Kationenaustausch mit der Gapon-Gleichung, die Ionenpaarung mit dem Massenwirkungsgesetz, die Salzlösung und -fällung mit Löslichkeitsprodukten und die Entgasung und Lösung von gasförmigem CO_2 mit dem Henry'schen Gesetz beschrieben. Die Ionenaktivitäten werden nach der Deby-Hückel-Theorie berechnet. Die Besonderheiten des Modells bestehen darin, daß i) auf der Basis von Ionenspezies gerechnet wird, ii) alle Spezies in Wechselwirkung zueinander betrachtet werden und iii) das chemische System frei wählbar ist ('Multikomponentenansatz').
Beim Modellversuch handelt es sich um ein Perkolationsexperiment an einer in ungestörter Lagerung entnommenen Bodensäule von 15 cm Durchmesser und 30 cm Länge. Diese entstammt dem A_p-Horizont einer seit etwa 20 Jahren ackerbaulich genutzten ehemaligen Bänderparabraunerde (GERKE und FÖRSTER 1989a). Bei Flußraten von etwa 2 cm/Tag herrschten ungesättigte Bedingungen. Als Düngungspuls wurden umgerechnet 300 kg/ha Kalium und 176 kg/ha Natrium in Form von Kalium- und Natriumsulfat appliziert. Im Effluenten wurden die Konzentrationen von Natrium, Kalium, Calcium, Magnesium, Chlorid, Nitrat und Sulfat fortlaufend ermittelt.

Ergebnisse

Die Ergebnisse von Messungen und Modellrechnungen zeigt die Abbildung 3. Dargestellt sind die Konzentrationsverläufe von Kationen und Anionen im aufgefangenen Perkolat als Funktion des ausgetauschten wassergefüllten Porenvolumens (PV).

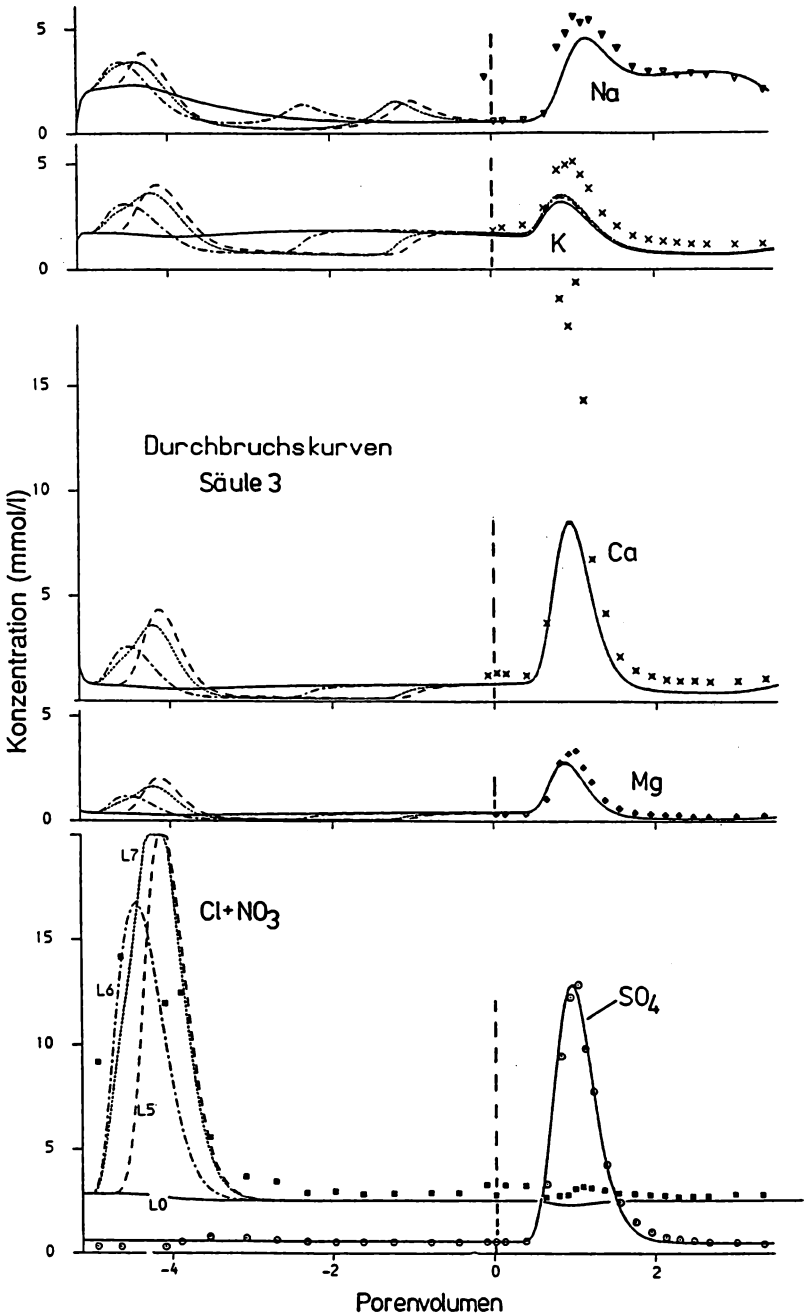

Abb. 3: Kationen- und Anionenkonzentrationen im Effluenten während des Perkolationsversuchs. Die durchgezogenen Linien geben die Simulationsergebnisse, die einzelnen Symbole die Meßergebnisse an. Zum Zeitpunkt des Porenvolumens 0 erfolgte eine Düngung von umgerechnet 300 kg/ha Kalium als K_2SO_4 und 176 kg/ha Natrium als Na_2SO_4.
(weitere Erläuterungen im Text)

Zum Zeitpunkt 0 PV erfolgte die Düngung. Der Zeitraum 0 bis -5 PV umfaßt die Vorlaufphase, in der nur Anionen gemessen wurden. Der Nitrat-Konzentrationspeak bei etwa -4 PV wurde durch Mineralisierung organischer Substanz und anschließende Nitrifizierung hervorgerufen. Diese Prozesse wurden durch die im Labor gegenüber dem Feld erhöhten Lufttemperaturen gefördert. Die Mineralisierung führt zu einem Versauerungsschub und zur Kationenauswaschung. Letzteres stellt sich bei den mit der Bodenmatrix wechselwirkenden Kationen komplex dar.
Da die Nitrifizierung nicht im Modell berücksichtigt ist, wurde versucht, diesen versuchsbedingten Effekt hilfsweise durch eine Säurezugabe zu simulieren. Die durchgezogene Linie (L0) gibt die Situation ohne Versauerungsschub wieder. Bei der Variante L5 wurde ein Säureeintrag (H^+) von 20 mmol/l in 200 ml Perkolationslösung simuliert. Bei L6 wurden als Anfangsbedingung 20 mmol/l Säure gleichmäßig in 0-20 cm Tiefe verteilt. Bei L7 wurden insgesamt 70 mmol Säure je zur Hälfte als Input und als Anfangsbedingung appliziert.
Die Säuregabe führte zu einer (simulierten) Freisetzung aller vier Kationen, die je nach Säuremenge und Applikation unterschiedlich ausfiel. Der Kationenfreisetzung bei -4 PV folgt eine verringerte Konzentration. Das Niveau der L0-Variante wird vor der Düngung bei jeder Variante wieder erreicht. Die Ionenkonzentrationen in der Bodenlösung und die Kationenbelegung am Austauscher befinden sich bei 0 PV wieder im Fließgleichgewicht mit der Zusammensetzung der Perkolationslösung. In diesem Versuch war die Vorlaufphase ausreichend lang, um die benötigte Gleichgewichtseinstellung für den Düngungsversuch herzustellen.

Auf der rechten Hälfte ist in Abb. 3 der Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Konzentrationsverläufen nach der Düngung dargestellt. Es zeigt sich eine relativ gute Übereinstimmung bei der vorliegenden Parametereinstellung (vgl. Gerke und Förster 1989b) mit Ausnahme der Werte für die Calciumionen. Aus dem Verhältnis von Output und Input ist zu ersehen, daß Kalium im Boden zurückgehalten und die nicht gedüngten Kationen Calcium und Magnesium ausgewaschen werden.

Insgesamt überstieg der Kationenaustrag im Zeitraum nach der Düngung (19 Tage) den Eintrag um etwa 50 %. Dieser Prozeß der Kationenfreisetzung, der bei diesem Boden von Bedeutung sein muß, ist allerdings bislang nicht im Modell berücksichtigt.

4. Schlußfolgerungen

Aufgrund der Ergebnisse müßte zur Entwicklung eines Stoffverlagerungsmodells für den Sandstandort eine neue Modellversion erstellt werden. Nach entsprechender Prozeßforschung sollten der oder die fehlenden Prozesse berücksichtigt sein.
Entsprechend der in Abbildung 2 dargestellten Vorgehensweise zur Modellentwicklung wären wiederum Modellversuche durchzuführen, welche der neuen Modellversion angepaßt sein müßten. Dieses Beispiel verdeutlicht das enge Zusammenspiel zwischen Simulation und Experiment sowie den Einsatz und die Bedeutung gezielter Modellexperimente bei der Entwicklung komplexer Modelle zur Beschreibung der Stoffverlagerung im Boden.

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen des DFG-Sonderforschungsbereichs 179 "Wasser- und Stoffdynamik in Agrarökosystemen" angefertigt.

Literatur

FÖRSTER R., 1986: A multicomponent transport model. - Geoderma 38: 261-278.
FÖRSTER R., GERKE H., 1988: Ein Multikomponenten Transport- und Reaktionsmodell zur Beschreibung der Stoffdynamik in Böden. I. Prozesse, mathematisches Modell, Numerik, Parametersensitivitäten. - Mittlgn. Dtsch. Bodenkundl. Gesellsch. 57: 159-164.
FÖRSTER R., GERKE H., 1989: Integration von Modellen des Wasser- und Stofftransportes sowie physikochemischer Wechselwirkungen zur Analyse von Agrar-Ökosystemen. - Verh. Ges. Ökol. (Essen 1988) XVIII: 515-522.

GERKE H., FÖRSTER R., 1989a: Zur Kalibrierung und Validierung von Modellen der Wasser- und Stoffdynamik in Agrarökosystemen. - Verh. Ges. Ökol. (Essen 1988) XVIII: 855-860.
GERKE H., FÖRSTER R., 1989b: Transportverhalten von Ionen in Wechselwirkung mit der Bodenmatrix in einem ackerbaulich genutzten Sandboden. - Mittlgn. Dtsch. Bodenkundl. Gesellsch. 59/I: 151-156.
ROHDENBURG H., 1989: Methoden zur Analyse von Agrar-Ökosystemen in Mitteleuropa unter Betonung geoökologischer Aspekte. - Catena 16: 1-57.

ADRESSE

Dr. H. Gerke
USDA-ARS
U.S. Salinity Laboratory
4500 Glenwood Drive, Riverside
Riverside, CA 92501
USA

Dr. R. Förster
Institut für Geographie
und Geoökologie/SFB 179
TU Braunschweig
Langer Kamp 19c
D-W-3300 Braunschweig

ZOBODAT - www.zobodat.at

Zoologisch-Botanische Datenbank/Zoological-Botanical Database

Digitale Literatur/Digital Literature

Zeitschrift/Journal: Verhandlungen der Gesellschaft für Ökologie

Jahr/Year: 1991

Band/Volume: 19_3_1991

Autor(en)/Author(s): Gerke Horst, Förster Reinhard

Artikel/Article: Modellversuche zur Stoffverlagerung in einem ackerbaulich genutzten Sandboden 663-669