

TEXTE

72/2017

Bewertung des Eintrags von Pflanzenschutzmitteln in Oberflächengewässer – Runoff, Erosion und Drainage

GERDA – GEobased Runoff, erosion and Drainage risk
Assessment for Germany

Abschlussbericht

TEXTE 72/2017

Umweltforschungsplan des
Bundesministeriums für Umwelt,
Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit

Forschungskennzahl 3711 63 427
UBA-FB 002492

Bewertung des Eintrags von Pflanzenschutzmitteln in Oberflächengewässer – Runoff, Erosion und Drainage

GERDA - GEobased Runoff, erosion and Drainage risk Assessment for
Germany

von

Martin Bach
Universität Gießen, Institut für Landschaftsökologie und
Ressourcenmanagement

Djamal Guerniche, Kai Thomas, Matthias Trapp, Roland Kubiak
RLP AgroScience, Institut für Agrarökologie, Neustadt a. d. Weinstraße

Udo Hommen, Michael Klein
Fraunhofer-Institut für Molekularbiologie und Angewandte Ökologie,
Schmallenberg

Stefan Reichenberger, José Pires
FOOTWAYS S.A, Orleans (France)

Thomas Preuß (bis 30.10.2013)
RWTH Aachen, Institut für Umweltforschung

Im Auftrag des Umweltbundesamtes

Impressum

Herausgeber:

Umweltbundesamt
Wörlitzer Platz 1
06844 Dessau-Roßlau
Tel: +49 340-2103-0
Fax: +49 340-2103-2285
info@umweltbundesamt.de
Internet: www.umweltbundesamt.de

 /umweltbundesamt.de

 /umweltbundesamt

Durchführung der Studie:

Gesellschaft für Boden- und Gewässerschutz e.V.
Hainerweg 33
35435 Wettenberg

Abschlussdatum:

November 2016

Redaktion:

Fachgebiet IV 1.3 Pflanzenschutzmittel
Dr. Dietlinde Großmann

Publikationen als pdf:

<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen>

ISSN 1862-4359

Dessau-Roßlau, September 2017

Das diesem Bericht zu Grunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit unter der Forschungskennzahl 3711 63 427 finanziert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autorinnen und Autoren.

Kurzbeschreibung

Im Projekt wurde das Konzept GERDA (GEobased Runoff, Erosion, and Drainage risk Assessment for Germany) entwickelt, mit dem zukünftig im Zulassungsverfahren von Pflanzenschutzmitteln (PSM) in Deutschland die Exposition von Oberflächengewässern durch Wirkstoff-Einträge über Runoff und Erosion, Drainage, Abdrift und atmosphärischen Transport bewertet werden kann. Zentrales Element in GERDA bildet die statistisch fundierte, Perzentil-basierte Auswahl der Boden-Klima-Szenarien, mit denen mittels der Modelle PRZM und MACRO (als Bestandteil von GERDA) die Expositionsabschätzung für einen Wirkstoff im Rahmen der Zulassungsprüfung durchgeführt wird. Die mit GERDA ermittelten PECs (Predicted Environmental Concentrations) liegen für verschiedene Wirkstoffe im Bereich des 83. bis 93. Perzentils, bezogen auf die räumlich-zeitliche Grundgesamtheit der rd. 132.000 km² potenziellen PSM-Applikationsfläche in Deutschland und der Wetterzeitreihe 1982–2011. Zur Anwendung im Zulassungsverfahren wurde das Softwaretool GERDA v.1 entwickelt. Vergleichsrechnungen für 13 Beispielsubstanzen mit GERDA und dem derzeit verwendeten Modell EXPOSIT zeigen die bedeutende Relevanz der Eintragspfade Runoff und Erosion im Vergleich zu Spraydrift und Drainage. Die Expositionsabschätzung für Oberflächengewässer in Deutschland mit GERDA führt häufig zu strengeren Risikomanagementmaßnahmen im Vergleich zum derzeit verwendeten Modell EXPOSIT. Der Bericht umfasst weiterhin die methodischen Grundlagen der Entwicklung von Boden-Klima-Szenarien spezifisch für Deutschland, eine Schwachstellenanalyse des FOCUS-Ansatzes zur Expositionsabschätzung sowie die Analyse des Modells VFSSMOD als Option zur Risikominde- rung durch Filterstreifen im Zulassungsverfahren.

Abstract

The assessment scheme GERDA (GEobased Runoff, Erosion, and Drainage risk Assessment for Germany) was developed to evaluate the exposure of surface waters from pesticide input via runoff, erosion, drainage, spray drift and atmospheric deposition for the authorization of plant protection products in Germany. Main feature is a statistically reliable percentile-based selection of soil-climate scenarios, used by the models PRZM and MACRO (as core elements of GERDA) for exposure assessment. The PEC (predicted environmental concentrations) calculated by GERDA for various substances ranges between 83th to 93th percentile related to the spatio-temporal statistical population of ca. 132,000 km² potentially treated agricultural area in Germany and the weather time series 1982–2011. The assessment scheme is implemented in the software tool GERDA v.1. A comparison of PEC calculation according to GERDA and the currently used exposure model EXPOSIT for 13 substances demonstrates that surface water exposure due to runoff is of relevance compared to drainage and spraydrift. Exposure assessment with GERDA leads to tighter risk management measures compared to the current exposure assessment scheme. Furthermore the report presents the methodology for soil-climate scenarios developed specifically for Germany, explains some deficiencies of the FOCUS exposure assessment approach, and analyses the capability of the model VFSSMOD for the simulation of efficiency of vegetated filter strips (VFS) as a risk mitigation measure.

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis	14
Abbildungsverzeichnis	22
Zusammenfassung	36
Summary	37
Teil I - Zusammengefasste Darstellung	39
I.1 Einführung	40
I.1.1 Veranlassung	40
I.1.2 Gliederung des Abschlussberichts	41
I.2 Kritische Bestandsaufnahme der Bewertungsinstrumente FOCUS Surface Water (Step 3) und EXPOSIT	44
I.2.1 Bewertung der Prozessbeschreibungen in FOCUSsw und EXPOSIT	45
I.2.2 Sensitivitätsanalysen	47
I.2.2.1 Sensitivitätsanalyse für das Modell PRZM	48
I.2.2.2 Sensitivitätsanalyse für das Modell MACRO	49
I.2.2.3 Sensitivitätsanalyse für den FOCUSsw Gesamtansatz	49
I.2.3 Repräsentativität der Boden- und Klimateigenschaften der FOCUSsw Szenarien für Deutschland	51
I.2.3.1 Bodeneigenschaften	51
I.2.3.2 Klimatelemente	52
I.2.4 Standpunkt der EFSA zum FOCUSsw Bewertungsverfahren	53
I.2.5 Regulatorische Treffsicherheit der Expositionsermittlung	54
I.2.6 Fazit der Bestandsaufnahme FOCUS Surface Water und EXPOSIT	55
I.3 Entwicklung des Instruments GERDA zur Expositionsabschätzung für Oberflächengewässer in Deutschland	56
I.3.1 Ausgangspunkt	56
I.3.1.1 Expositionsabschätzung auf Basis räumlich-zeitlicher Perzentile der PEC	57
I.3.1.2 Festlegung der gewünschten Protektivität der Expositionsabschätzung	58
I.3.2 Entwicklung von Boden-, Klima- und Gewässerszenarien der Expositionsabschätzung für Runoff-, Erosions- und Drainage-Einträge in Oberflächengewässer in Deutschland	60
I.3.2.1 Räumliche Verteilung der austragsbestimmenden Bodeneigenschaften	60
I.3.2.2 Clusterung der austragsbestimmenden Klimavariablen	61
I.3.2.3 Überlagerung von Bodentypen und Klimaclustern	63
I.3.2.4 Ökotoxikologische Bewertung zeitvariabler Expositionsprofile mittels TK-TD-Modellierung	63
I.3.2.5 Identifikation von nationalen Boden-Klima-Szenarien für gegebene Perzentile der PECmax und AUC	65

I.3.3	Übersicht zum Verfahren der Expositionsabschätzung nach GERDA	70
I.3.4	Optionen für Minderungsmaßnahmen in GERDA Stufe 4	75
I.3.5	Option: Expositionsabschätzung für generische Fließgewässer	78
I.3.6	Anmerkungen und Einschränkungen der Expositionsschätzung nach GERDA	79
I.3.7	Unterschiede in den Ansätzen GERDA und FOCUSsw	82
I.3.8	Ausblick, Übertragbarkeit und weiterer Forschungs- und Entwicklungsbedarf	86
I.4	Das Softwaretool GERDA v1.0	89
I.4.1	Generelles Konzept der Software GERDA	89
I.4.2	Technische Beschreibung von GERDA Stufe 3 und Stufe 4	90
I.4.3	Bedienung von GERDA Stufe 3 und Stufe 4	92
I.4.3.1	Substanzen und Projekte	93
I.4.3.2	Ablauf eines GERDA Stufe 3-Assessments	95
I.4.3.3	Ablauf eines GERDA Stufe 4-Assessments (Driftreduktion und Pufferstreifen)	96
I.4.3.4	GERDA-Output	98
I.4.4	Pesticide Application Timer, Berechnung der Driftdeposition, Umgang mit Mehrfachapplikation und Interzeption in GERDA	101
I.4.4.1	Pesticide Application Timer	101
I.4.4.2	Berechnung der Driftdeposition	101
I.4.4.3	Parametrisierung der Interzeption	104
I.4.4.4	Umgang mit Mehrfachapplikationen	105
I.5	Vergleichsrechnungen zur aquatischen Risikobewertung nach GERDA	109
I.5.1	Eigenschaften der Beispielsubstanzen	109
I.5.2	Vergleich der PECmax nach GERDA (Step 3) vs. EXPOSIT für Einträge durch Runoff & Erosion bzw. Drainage – ohne Spraydrift	116
I.5.3	Vergleich der PECmax nach GERDA (Step 3) vs. FOCUSsw Runoff- und Drainage-Szenarien	119
I.5.4	Zulassungsfähigkeit von 13 Beispielsubstanzen nach GERDA (Step 3, ohne Minderungsmaßnahmen) im Vergleich zu EXPOSIT bzw. EVA	123
I.5.5	Zulassungsfähigkeit von 13 Beispielsubstanzen nach GERDA (Step 4) im Vergleich zu EXPOSIT bzw. EVA - mit Berücksichtigung von Minderungsmaßnahmen	126
I.5.6	Parametrisierung von VFSSMOD zur Simulation der Filterwirkung von bewachsenen Pufferstreifen	129
Teil II - Ausführliche Darstellung der Methodik und Ergebnisse		
II.1	Ableitung Boden-Klima-Szenarien - Faktor Boden	135
II.1.1	Das System der FOOTPRINT Soil Types (FST)	135
II.1.2	Datenstruktur der BUEK1000	143
II.1.3	Klassifizierung der BUEK1000	143

II.1.4	Flächenanalyse der FSTs an der landwirtschaftlich relevanten Fläche in Deutschland	145
II.1.5	Repräsentativität der Böden der FOCUSsw-Szenarien für Deutschland	147
II.1.6	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen zur Klassifikation und Häufigkeitsauswertung Böden	150
II.2	Ableitung Boden-Klima-Szenarien - Faktor Klima	151
II.2.1	Inputdaten	151
II.2.2	Identifikation sensibler Klimavariablen	152
II.2.2.1	Sensitive Klimavariablen für Eintragspfad Drainage	152
II.2.3	Ergebnisse der Repräsentativitätsanalyse der FOCUSsw-Szenarien für den Faktor Klima	161
II.2.3.1	Drainage	161
II.2.3.2	Oberflächenabfluss/Erosion	169
II.2.4	Synthese der Klimavariablen - Clusterung Klimazonen Deutschland	175
II.2.4.1	Hauptkomponentenanalyse der Klimavariablen	175
II.2.4.2	Ausweisung von Klimaclustern	177
II.3	Flächenanalyse Deutschland für den Faktor Gewässer und Einzugsgebiet	184
II.3.1	Verwendete Inputdaten	184
II.3.2	Methodik	185
II.3.3	Ergebnisse Analyse Einzugsgebiete	187
II.3.4	Breite/Tiefe-Verhältnis	189
II.4	Vergleich und Bewertung der in FOCUSsw und EXPOSIT berücksichtigten Prozesse	191
II.4.1	Übersicht der berücksichtigten Prozesse	191
II.4.2	Prozessbeschreibungen - Umweltkompartiment Boden	193
II.4.2.1	Sorption im Boden	193
II.4.2.2	Abbau im Boden	194
II.4.2.3	PSM-Austrag über Oberflächenabfluss	197
II.4.2.4	Das Problem des Curve-Number-Ansatzes	199
II.4.2.5	PSM-Austrag über Erosion	200
II.4.2.6	PSM-Austrag über Zwischenabfluss	203
II.4.2.7	PSM-Austrag über Drainage	203
II.4.2.8	Bildung von Metaboliten im Boden	205
II.4.2.9	Verflüchtigung von der Bodenoberfläche	205
II.4.2.10	Aufnahme über die Wurzeln	206
II.4.3	Prozessbeschreibungen - Umweltkompartiment Pflanze	207
II.4.3.1	Crop interception (Interzeption des Wirkstoffs auf der Kulturpflanzenoberfläche)	207

II.4.3.2	Foliar washoff (Blattabwaschung)	207
II.4.3.3	Verflüchtigung von der Pflanzenoberfläche	208
II.4.3.4	Foliar dissipation	208
II.4.4	Prozessbeschreibungen - Umweltkompartiment Gewässer	208
II.4.4.1	Sorption ans Gewässersediment	208
II.4.4.2	Sorption an Makrophyten	208
II.4.4.3	Sorption an suspendierte Partikel	208
II.4.4.4	Abbau im Gewässer	209
II.4.4.5	Stoffaustausch zwischen Wasser und Sediment	209
II.4.4.6	Bildung von Metaboliten im Gewässer	210
II.4.4.7	PSM-Eintrag ins Grundwasser nach Uferfiltration	210
II.4.4.8	Atmosphärische Depositon auf der Gewässeroberfläche	211
II.4.4.9	Verflüchtigung aus dem Gewässer	212
II.4.4.10	Diffusion im Gewässer	212
II.4.4.11	Dispersion	213
II.4.5	Beschreibung der Gewässerszenarien und Berechnung von PEC _{sw} und PEC _{sed}	214
II.4.5.1	Definition der Szenarien (Feld, Wasserkörper und Einzugsgebiet)	214
II.4.5.2	Modellierung des Gewässers	217
II.4.5.3	PEC _{sw} -Berechnung Drainage	218
II.4.5.4	PEC _{sw} -Berechnung Surface Runoff und Erosion	220
II.4.6	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen der Prozessbeschreibungen in EXPOSIT und FOCUS _{sw}	223
II.4.6.1	PEC _{sw} -Berechnung Surface Runoff und Erosion	223
II.4.6.2	Szenariendefinition und PEC-Berechnung	224
II.5	Sensitivitätsanalyse der Modellparameter und Eingabevariablen	227
II.5.1	Klärung der Terminologie	227
II.5.1.1	Sensitivität	227
II.5.1.2	Epistemische Unsicherheit	228
II.5.1.3	Variabilität	228
II.5.1.4	Schlussfolgerungen	228
II.5.2	Synthese vorhandener Sensitivitätsanalysen für das Modell MACRO	229
II.5.2.1	Sensitivität der Parameter für Boden-, Kultur- und Substanz-Eigenschaften	229
II.5.2.2	Sensitivität meteorologischer und klimatischer Variablen	233
II.5.2.3	Synthese der Sensitivitätsanalysen für MACRO (Eintragspfad Drainage)	240

II.5.3	Synthese vorhandener Sensitivitätsanalysen für das Modell PRZM	241
II.5.3.1	Parametersensitivität	241
II.5.3.2	Synthese der Sensitivitätsanalysen für PRZM	252
II.5.4	Sensitivitätsanalysen für den FOCUSsw-Gesamtansatz und EXPOSIT	252
II.5.4.1	Einführung	252
II.5.4.2	Methodik	254
II.5.4.3	Ergebnisse und Diskussion der Sensitivitätsanalyse des FOCUSsw-Gesamtansatz und EXPOSIT	266
II.5.4.5	Schlussfolgerungen	269
II.6	Einschätzung zur Notwendigkeit der Berücksichtigung des Eintragspfads Zwischenabfluss im Tool GERDA271	
II.6.1	Einführung	271
II.6.2	Material und Methoden	271
II.6.3	Ergebnisse und Diskussion	272
II.6.3.1	Variante „nur Interflow“(I) vs. „Variante Oberflächenabfluss +Erosion“(RE)	272
II.6.3.2	Variante „Oberflächenabfluss + Erosion + Interflow“ (REI) vs. Variante „Oberflächenabfluss + Erosion“ (RE)	287
II.6.3.4	Schlussfolgerungen und Ausblick	302
II.7	Bewertung von VFSSMOD zur Modellierung der Risikominderung durch Filterstreifen	305
II.7.1	Hintergrund und Aufgabenstellung	305
II.7.2	Einführung VFSSMOD und SWAN-VFSSMOD	306
II.7.2.1	VFSSMOD	306
II.7.2.2	SWAN-VFSSMOD	307
II.7.3	Analytische Herleitung von deltaPECsw für FOCUS stream und pond	308
II.7.3.1	Analytische Herleitung von deltaPECsw für den FOCUS stream	309
II.7.3.2	Analytische Herleitung von deltaPECsw für den FOCUS pond	316
II.7.4	Neue Version von VFSSMOD (mit Option Wasserspiegel)	317
II.7.5	Modellierungsstudie	321
II.7.5.1	Zielsetzung der Modellierungsstudie	321
II.7.5.2	Simulationsdesign	321
II.7.5.3	Unterschiede der entwickelten PRZM-VFSSMOD-TOXSWA-Kopplung zu SWAN-VFSSMOD	327
II.7.5.4	Modifikation des p2t files mittels der VFSSMOD-Ergebnisse	328
II.7.6	Auswertung der PRZM-VFSSMOD-TOXSWA-Simulationen	330
II.7.6.1	Erste Ergebnisse	330

II.7.6.2	deltaP (relative Reduktion der PSM-Fracht) vs. deltaQ (relative Reduktion des gesamten Wasserzuflusses und deltaE (relative Reduktion der Sedimentfracht)	333
II.7.6.3	Multiple Regressionsanalyse (MLR)	335
II.7.6.4	Schlussfolgerungen aus der Simulationsstudie	350
II.7.7	Untersuchung der Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009)	351
II.7.7.1	Die Regressionsgleichung für deltaP	351
II.7.7.2	Herleitung	351
II.7.7.3	Validierungsstudien	352
II.7.7.4	Diskussion	353
II.7.8	Weitere Diskussionspunkte	354
II.7.8.1	Diskussionspunkte mit dem VFSSMOD-Entwickler (E-Mail)	354
II.7.8.2	SWAN-Szenarioannahmen	355
II.7.9	Empfohlene Einstellungen für VFS-Szenarien	356
II.7.9.1	Bedeutung und verschiedene Typen von simulierten VFS	356
II.7.9.2	Kompromisslösung für GERDA	358
II.8	Verwendung des TK-TD-Modells GUTS zur Bestimmung von Worst Case-Expositionsszenarien	360
II.8.1	Einleitung	360
II.8.2	Methoden	362
II.8.2.2	Verwendete Expositionsprofile	363
II.8.2.3	Berechnung der Expositionsdeskriptoren	372
II.8.2.4	TK-TD-Parameter	373
II.8.2.5	Vorgehensweise Rangzuordnungen	374
II.8.2.6	Statistik	375
II.8.3	Ergebnisse	375
II.8.3.1	FOCUS-Modellink-Szenarien (Untersuchung 1)	376
II.8.3.2	Zufällig generierte Expositionsszenarien	380
II.8.3.3	GERDA-Szenarien	383
II.8.3.4	Subletale Effekte auf Organismen und Effekte auf Populationen	383
II.8.4	Diskussion und Fazit	386
II.9	Zur Verwendung von PEC-Zeitreihen in der Risikocharakterisierung	389
II.9.1	Vergleich von typischen Expositionsmustern in Mesokosmen mit modellierten Expositionsmustern	389
II.9.2	Risikocharakterisierung für variable Expositionsmuster	395
II.9.4	Beispiel für Risikobewertung bei dynamischer Exposition	403
II.9.5	Fazit zur Praktikabilität des Hüllkurvenansatzes im Rahmen der Expositionsbewertung	408

II.10	Übersicht der zur Eintragsminderung für die Pfade Runoff, Erosion und Drainage in den EU-Mitgliedstaaten verwendeten nationalen Risikomanagementmaßnahmen	410
II.10.1	Verwendung der FOCUSsw-Szenarien sowie Minderungsmaßnahmen in nationalen Zulassungsverfahren	410
II.10.2	Übersicht zu Optionen für Minderungsmaßnahmen nach FOCUS (2007a)	415
II.10.3	On-site und off-site Maßnahmen als Risk Mitigation Options in der Expositionsabschätzung	418
II.10.3.1	Bodenkonservierende Bodenbearbeitung und Bodenbedeckung	418
II.10.3.2	Weitere Risikomanagementoptionen	424
II.10.3.3	Bewertung von on-site und off-site-Maßnahmen als Risk Mitigation Options in der Expositionsabschätzung	426
II.11	Überprüfung der Expositionsabschätzung anhand von Monitoringuntersuchungen	429
II.11.1	Anmerkungen zur Untersuchung Bereswill und Schulz (2011)	429
II.11.2	Zur Problematik der Überprüfung von Expositionsmodellen anhand von Monitoringstudien	431
II.12	Danksagung - Acknowledgements	435
II.13	Literaturverzeichnis	436
A1	Einzelergebnisse der Vergleichsrechnungen der PECmax nach EXPOSIT, FOCUSsw und GERDA	452
A2	Klassifizierung der Bodeneinheiten der BUEK1000 in FOOTPRINT Soil Types (FST) mit Hilfe des FST Selector	459
A2.1	Aufbau des FOOTPRINT Soil Type Selector	459
A2.2	Klassifizierung der bodentypologischen Einheiten der BUEK1000 mit Referenzprofil in FOOTPRINT Soil Types	461
A2.3	Klassifizierung der bodentypologischen Einheiten der BUEK1000 ohne Referenzprofil in FOOTPRINT Soil Types	472
A2.4	Beziehung der BUEK zur SGDBE	475
A3	Zuordnung des Hydromorphiegrads zu den genetischen Horizontbezeichnungen, die in der BUEK 1000 auftreten	476
A4	Korrespondenz der Schluff- und Sandgehalte zwischen internationalem und deutschem Partikelgrößenklassensystem für die Texturklassen der Bodenkundlichen Kartieranleitung (KA4)	479
A5	Flächenanteile der verschiedenen FOOTPRINT Soil Types (FST) an der ackerbaulich relevanten Fläche in Deutschland (BUEK 1000 - Nutzungskategorien 21 und 24)	481
A6	Flächenanalyse der auftretenden Boden- und Klima-Kombinationen	487
A7	Auswertung der REGNIE-Daten	490
A8	Ergänzende Erläuterungen zur Methodik der Flächenanalyse Gewässer und Einzugsgebiet	491

A9	Ergebnisdiagramme der Sensitivitätsanalyse nach Morris	497
A10	Parametrisierung des Gewässers in STEPS-3	518
A11	E-Mail-Korrespondenz mit dem VFSMOD-Entwickler	519
A12	Details zu den Vergleichsrechnungen mit EVA 2.1 und Exposit 3.0 beta	526

Tabellenverzeichnis

Tab. I.2-1:	Entscheidungstabelle zur regulatorischen Treffsicherheit im Zulassungsverfahren (α, β : Wahrscheinlichkeit eines Fehlers der 1. Art/2. Art)	52
Tab. I.3-1:	Faktorstufen-Kombinationen der virtuellen Pflanzenschutzmittel für die Berechnung der edge-of-field-Austräge über Runoff & Erosion (Modell PRZM) und über Drainage (Modell MACRO)	64
Tab. I.3-2:	Verteilungsmaße der overall-Perzentilwerte der Zielgrößen PEC _{max,sw} und AUC _{sw} der Expositionsabschätzung für Runoff- & Erosionseinträge (Modell PRZM) von 360 virtuellen PSM bzw. für Drainageeinträge	66
Tab. I.3-3:	Übersicht zur Ermittlung von Expositionsendpunkten für Wirkstoff-Einträge über Runoff & Erosion, Drainage, Drift und atmosphärischen Transport in Oberflächengewässer in Deutschland mittels GERDA (Stufe 3 und Stufe 4)	69
Tab. I.3-4	Übersicht zu Unterschieden zwischen den Ansätzen zur Expositionsabschätzung nach GERDA und FOCUS _{sw}	78
Tab. I.4-1:	In GERDA verwendete Parameterwerte der Driftgleichungen	97
Tab. I.4-2:	Vergleich der (kumulierten) Drift-Deposition ^a bei Mehrfachapplikationen nach Ansatz FOCUS _{sw} und GERDA für verschiedene Verlustraten zwischen zwei Anwendungen	101
Tab. I.5-1:	Expositionsrelevante Eigenschaften der Beispielsubstanzen für die Vergleichsrechnungen mit EXPOSIT, FOCUS _{sw} und GERDA zur Expositionsbewertung	103
Tab. I.5-2:	Anwendungsdaten der Beispielsubstanzen für die Vergleichsrechnungen	105
Tab. I.5-3:	GAP spezifische Eingabeparameter für FOCUS SW und GERDA für die Vergleichsrechnungen	106
Tab. I.5-4:	PEC _{max} [$\mu\text{g/L}$] nach EXPOSIT und GERDA (mit 100% Driftreduktion) für 13 Beispielsubstanzen bzw. Anwendungen	108
Tab. I.5-5:	PEC _{max} [$\mu\text{g/L}$] nach GERDA (Step 3) vs. FOCUS _{sw} Runoff- und Drainage-Szenarien für 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen)	112
Tab. I.5-6:	PEC _{max} -Werte [$\mu\text{g/L}$] für die Beispielanwendungen nach GERDA (ohne Risikominderungsmaßnahmen) für die Gewässertypen „ditch“ und „stream“, der PEC _{max} -induzierende Eintragspfad (Spraydrift oder Runoff & Erosion bzw. Drainage) ist angegeben	115
Tab. I.5-7:	Regulatory Acceptable Concentrations (RAC) und Exposure Toxicity Ratios (ETR) Werte für die Beispielanwendungen nach GERDA (Step 3, ohne Risikominderung)	115
Tab. I.5-8:	Vergleich der Zulassungsfähigkeit von 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) nach EXPOSIT (in Verbindung mit EVA 2.1) und GERDA (Step 3) ohne Risikominderungsmaßnahmen	116

Tab. I.5-9:	Übersicht zur Zulassungsfähigkeit von 14 Beispielanwendungen nach EXPOSIT in Verbindung mit EVA (getrennt für Runoff und Drainage) mit Risikomanagementmaßnahmen	118
Tab. I.5-10:	Exposure Toxicity Ratios (ETR) Werte für die Beispielanwendungen nach GERDA (Step 4) mit Berücksichtigung verschiedener Risikominderungsmaßnahmen	119
Tab. I.5-11:	Vergleich der Zulassungsfähigkeit von 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) nach EXPOSIT (in Verbindung mit EVA 2.1) und GERDA (Step 4) mit Berücksichtigung von Risikominderungsmaßnahmen	120
Tab. I.5-12:	Verminderung der PECmax für Gewässertyp „ditch“ durch Runoff & Erosions-Eintrag für 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) bei Wahl unterschiedlicher Werte für die Parameter FWIDTH und VL im Modell GERDA (Step 4) mit VFSSMOD; 100 % Driftreduktion eingestellt	121
Tab. I.5-13:	Verminderung der PECmax für Gewässertyp „stream“ durch Runoff & Erosions-Eintrag für 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) bei Wahl unterschiedlicher Werte für die Parameter FWIDTH und VL im Modell GERDA (Step 4) mit VFSSMOD; 100 % Driftreduktion eingestellt	122
Tab. II.1-1:	Beschreibung der FOOTPRINT Hydrologic Groups (FHG) und deren Bedeutung für die Parametrisierung des Bodens in den Modellen MACRO und PRZM	127
Tab. II.1-2:	Organic matter profile codes (n. Dubus et al.,2009)	129
Tab. II.1-3:	Absolute Flächen und Flächenanteile der Klassifizierbarkeitsstufen für die verschiedenen Landnutzungskategorien der BUEK1000	132
Tab. II.1-4:	Absolute Flächen und Flächenanteile der Klassifizierbarkeitsstufen für die ackerbaulich relevante Fläche Deutschlands nach BUEK 1000	133
Tab. II.1-5:	Absolute Flächen und Flächenanteile der PRZM Soil Hydrologic Groups (SHG) für die ackerbaulich relevante Fläche Deutschlands nach BUEK 1000	134
Tab. II.1-6:	Klassifikation der 10 FOCUSsw-Böden in FOOTPRINT Soil Types (FSTs) und Repräsentativität dieser Böden für Deutschland	136
Tab. II.2-1:	Curve Numbers bei mittleren Feuchtebedingungen und dazugehörige Niederschlagsschwellenwerte	141
Tab. II.2-2:	Klassenmittelwerte der Wassergehalte bei Feldkapazität, Welkepunkt und mittleren Feuchtebedingungen und Wasservorrat zwischen Midpoint und Feldkapazität in den obersten 10 cm für die PRZM Soil Hydrologic Groups (SHG)	144
Tab. II.2-3:	Curve Numbers bei Feldkapazität (FC, maximale Feuchte in PRZM) und dazugehörige Niederschlagsschwellenwerte für PRZM Soil Hydrologic Group (SHG) C	144
Tab. II.2-4:	Aus 68 Stationsdaten berechnete Perzentile der Potenziellen Evapotranspiration (PET) im Mittel des Bundesgebietes (vieljähriges monatliches Mittel in mm/d)	147

Tab. II.2-5:	10. Perzentil, Median und 90. Perzentil der kumulativen Flächenverteilungsfunktion (Bezugsfläche: bundesweite Raster ausgeschnitten mit ATKIS „Ackerbau“ und „Sonderkultur“) der für den Eintragspfad relevanten Variablen T_SPR und T_AUT	149
Tab. II.2-6:	Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimavariablen T_SPR und T_AUT, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1 - D6 (komplette Zeitreihe, 7 1/3 Jahre)	150
Tab. II.2-7:	Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimavariablen T_SPR und T_AUT, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (Kurzperiode, jeweils 16 Monate)	150
Tab. II.2-8:	10. Perzentil, Median und 90. Perzentil der kumulativen Flächenverteilungsfunktion (Bezugsfläche: bundesweite Raster ausgeschnitten mit ATKIS „Ackerbau“ und „Sonderkultur“) der für den Eintragspfad Drainage relevanten Variablen R_WIN und R_ANN	151
Tab. II.2-9:	Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimavariablen 115 R_WIN und R_ANN, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (komplette Zeitreihe, 7 1/3 Jahre)	151
Tab. II.2-10:	Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimavariablen R_WIN und R_ANN, abgeleitet aus den aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (Kurzperiode, je 16 Monate)	152
Tab. II.2-11:	10. Perzentil, Median und 90. Perzentil der kumulativen Flächenverteilungsfunktion (Bezugsfläche: bundesweite Raster ausgeschnitten mit ATKIS „Ackerbau“ und „Sonderkultur“) der für den Eintragspfad Drainage relevanten Variablen R2_SPR, R20_SPR, R20_AUT und R50_SPR	152
Tab. II.2-12:	Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimaparameter R2_SPR, R20_SPR, R20_AUT und R50_SPR, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (komplette Zeitreihe, 7 1/3 Jahre)	153
Tab. II.2-13:	Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimaparameter R2_SPR, R20_SPR, R20_AUT und R50_SPR, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (Kurzperiode, je 16 Monate)	153
Tab. II.2-14:	Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53) und Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus den FOCUS Runoff-Szenario R1-R4	156
Tab. II.2-15:	Übersicht der für den Eintragspfad Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus den FOCUS Runoff-Szenario R1-R4	156
Tab. II.2-16:	Ausgewählte Jahre in den FOCUS R-Szenarien für die Kurzperioden	157

Tab. II.2-17:	Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53) Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) und Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus dem FOCUS Runoff-Szenario R1 (Kurzperioden „Spring“, „Summer“ und „Autumn“, je 12 Monate)	158
Tab. II.2-18:	Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53) Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) und Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus dem FOCUS Runoff-Szenario R2 (Kurzperioden „Spring“, „Summer“ und „Autumn“, je 12 Monate)	158
Tab. II.2-19:	Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53), Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) und Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus dem FOCUS Runoff-Szenario R3 (Kurzperioden „Spring“, „Summer“ und „Autumn“, je 12 Monate)	159
Tab. II.2-20:	Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53), Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) und Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus dem FOCUS Runoff-Szenario R4 (Kurzperioden „Spring“, „Summer“ und „Autumn“, je 12 Monate)	159
Tab. II.2-21:	Eigenvalues (Varianzen) der Hauptkomponenten (PCA1 bis PCA19) und Varianzklärung mit zunehmender Anzahl an Hauptkomponenten	161
Tab. II.2-22:	Faktorenladungen der drei Hauptkomponenten, die sich aus der Hauptkomponentenanalyse ergeben	162
Tab. II.2-23:	Mittelwerte der 19 Klimavariablen für die 12 Klimacuster in Deutschland	164
Tab. II.2-24:	Euklidische Distanz der FOCUS Wetterzeitreihen (R- und D-Szenarien) zu den Mittelpunkten der Klimacuster. Die vorletzte Zeile gibt die Clusternummer an, zu der das FOCUSsw-Szenario die geringste Euklidische Distanz aufweist	165
Tab. II.2-25:	Verteilung der Euklidischen Distanz der Rasterzellen, die jeweils einem Klimacustern zugehörig sind, und der Euklidische Distanz des Cluster-Centroids zur repräsentativen DWD-Klimastation	166
Tab. II.3-1:	Ergebnisübersicht der EZG-Analyse mit EZG-Abgrenzungen mit „Schwellwert 50000“ (EZG_5km ² , n=38743)	172
Tab. II.3-2:	Ergebnisübersicht der EZG-Analyse mit EZG-Abgrenzungen mit „Schwellwert 100000“ (EZG_10km ² , n=19660)	173
Tab. II.3-3:	Breite/Tiefe-Verhältnis in verschiedenen Gewässern nach Freiland-erhebungen (zit. n. Kubiak et al., 2014)	174

Tab. II.4-1:	Übersicht über die Prozesse, die für die Exposition von Oberflächen- gewässern relevant sind, und deren Berücksichtigung in EXPOSIT und FOCUSsw Step 3	176
Tab. II.4-2:	Definition der Klassen des Grundwassergefährdungspotentials in EXPOSIT (aus UBA, 2011)	187
Tab. II.4-3:	Die drei FOCUS-Wasserkörpertypen (FOCUS, 2001) und der EXPOSIT- Wasserkörper	197
Tab. II.4-4:	Eigenschaften des Gewässersediments und der suspendierten Partikel in allen drei FOCUS water bodies	197
Tab. II.4-5:	Flächenverhältnisse für die FOCUS Runoff- und Drainage-Szenarien	198
Tab. II.4-6:	Festsetzungen der Drainage- und PSM-Austragsereignisse in EXPOSIT	201
Tab. II.4-7:	In EXPOSIT 3.0 verwendete Reduktionseffizienzen in Abhängigkeit von der Breite des grasbewachsenen Pufferstreifens. Reduktionseffizienzen für 10 m und 20 m nach FOCUS (2007)	203
Tab. II.5-1:	Die 15 sensitivsten Parameter in Bezug auf den Modelloutput "kumulative Perkolation" (nur one-at- a-time)	213
Tab. II.5-2:	Die 15 sensitivsten Parameter in Bezug auf den Modelloutput "kumulativer Leachingaustrag"	214
Tab. II.5-3:	Klimatische Variablen mit den jeweils größten Pearson-Korrelations-koeffizienten (Absolutbetrag) für jede der 30 Kombinationen von Applikationssaison, Boden und chemischer Substanz	219
Tab. II.5-4:	Wichtigste Runoff- und Erosionsrelevante Bodeneigenschaften der vier FOCUSsw Runoff-Szenarien (FOCUS, 2001)	224
Tab. II.5-5:	Untersuchte Variablen und Spannbreiten für das Latin Hypercube Sampling (LHS) für Unsicherheitsanalyse des Modells PRZM	228
Tab. II.5-6:	Eliminierte Varianz innerhalb der Gruppen mit abnehmendem Aggregierungsgrad	229
Tab. II.5-7:	Sensitivste PRZM-Parameter in Bezug auf max. tägliche PSM-Austräge	233
Tab. II.5-8:	Aufbau der Sensitivitätsanalyse für FOCUSsw und EXPOSIT	236
Tab. II.5-9:	Inputfaktoren, die in den FOCUS-standard-Analysen variiert wurden	239
Tab. II.5-10:	Inputfaktoren, die in den FOCUS-modified-Analysen zusätzlich zu FOCUS-standard variiert wurden	240
Tab. II.5-11:	Inputfaktoren, die in den FOCUS-modified-Analysen zusätzlich zu FOCUS-standard variiert wurden - Teil 2	241
Tab. II.5-12:	In TOXSWA aufgetretene Fehler aufgrund numerischer Probleme	244
Tab. II.5-13:	Die sensitivsten fünf Faktoren ¹⁾ der verschiedenen Sensitivitätsanalysen	247
Tab. II.7-1:	Fixe Inputparameter	294
Tab. II.7-2:	Kombinationen von FOCUS-Szenario und simulierter Kultur	295
Tab. II.7-3:	In FOCUS auftretende Kombinationen von FOCUS R+E-Szenarien und Gewässertypen (FOCUS, 2001)	295

Tab. II.7-4:	Anzahl der Simulationsläufe für die vorliegende Modellierungsstudie	297
Tab. II.7-5:	Unterschiede der entwickelten PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Kopplung zu SWAN-VFSMOD	299
Tab. II.7-6:	Mittelwerte und mittlere Differenzen der Deltas für verschiedene Koc-Werte; Menge der 4995 PEC _{sw,max} -Ereignisse aus 4995 PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Simulationen, in denen die PEC _{sw,max} durch das gleiche Ereignis verursacht wurde wie in der Kontrollsimulation	305
Tab. II.7-7:	Mittelwerte und mittlere Differenzen der Deltas für verschiedene Koc-Werte; Menge der 8400 PEC _{sw,max} -Ereignisse aus 8400 erfolgreichen PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Simulationen	306
Tab. II.7-8:	Mittelwerte und mittlere Differenzen der Deltas für verschiedene Koc-Werte, getrennt für Wasserkörpertyp und Vorhandensein/Abwesenheit eines hochanstehenden Wasserspiegels; alle VFSMOD-Ereignisse	307
Tab. II.7-9:	Liste der potenziellen erklärenden Variablen für die multiple Regressionsanalyse, Teilmenge pond / kein hochanstehender Wasserspiegel	309
Tab. II.7-10:	Liste der potenziellen erklärenden Variablen für die multiple Regressionsanalyse, Teilmenge pond / hochanstehender Wasserspiegel	309
Tab. II.7-11:	Liste der potenziellen erklärenden Variablen für die multiple Regressionsanalyse, stream / kein hochanstehender Wasserspiegel	309
Tab. II.7-12:	Liste der potenziellen erklärenden Variablen für die multiple Regressionsanalyse, Teilmenge stream / hochanstehender Wasserspiegel	310
Tab. II.7-13:	Anzahl der VFSMOD-Simulationen mit "NaN (not a number)" als Output	310
Tab. II.7-14:	Gesamtanzahl von Records für die Regressionsanalyse und ausgeschlossene Records	312
Tab. II.7-15:	Korrigiertes r^2 (adjusted r^2) für die 80 durchgeführten Regressionen	313
Tab. II.7-16:	r^2 -Werte der de-logarithmierten Scatterplots des loglinear fit	313
Tab. II.7-17:	Die wichtigsten unabhängigen Variablen in der multiplen Regression	315
Tab. II.8-1:	Übersicht über die untersuchten Szenarien und TK-TD-Parameterkombinationen in der Studie	332
Tab. II.8-2:	Deskriptoren (PEC _{max} und TWA) der untersuchten FOCUS-Expositionsprofile	334
Tab. II.8-3:	Deskriptoren PEC _{max} und AUC der untersuchten theoretischen Szenarien	335
Tab. II.8-4:	Eigenschaften der betrachteten, zufällig generierten Expositionsszenarien	337
Tab. II.8-5:	Verwendete Spezies-Chemikalie- Zusammensetzungen, durch unterschiedliche Parameter-Kombinationen in das TK-TD-Modell eingesetzt	342
Tab. II.8-6:	Rangzuordnungen der FOCUS-Szenarien auf Basis der der Szenario-Deskriptoren PEC _{max} , AUC und Min(PEC _{max} , AUC)	345

Tab. II.8-7:	Ränge der FOCUS-Szenarien, geordnet aufsteigend nach der berechneten Überlebensrate aus den TK-TD-Simulationen (minGUTS)	347
Tab. II.9-1:	Exposure-Toxicity-Ratios (ETR) für die Beispielsubstanz UBA_2 mit einer RAC von 0,1 µg/L nach GERDA ohne Risikominderung und mit verschiedenen Minderungsmaßnahmen	371
Tab. II.10-1:	Übersicht zu den FOCUSsw Runoff & Erosion- (R&E) und Drainage-Szenarien, die im Rahmen der nationalen Zulassungsverfahren in den EU-Mitgliedsstaaten berücksichtigt werden, sowie der Option zur Berücksichtigung von Minderungsmaßnahmen für Runoff & Erosions- und Drainage-Einträge im Zulassungsverfahren	376
Tab. II.10-2:	Beispiele für Änderungen der Annahmen zur Expositionsmodellierung in Step 4 des FOCUSsw-Ansatzes, mit denen die Realitätsnähe eines Szenarios verbessert und die Effekte von Minderungsmaßnahmen einbezogen werden können	379
Tab. II.10-3:	Maßnahmen zur Verminderung von Runoff und Erosion (durch Wasser) in den Bereich Bodenbearbeitung, Bodenbedeckung und Landschaftsgestaltung	381
Tab. II.10-4:	Literaturauswertung zum Anteil der Bodenbedeckung bzw. der Menge des organischen Materials auf der Bodenoberfläche in Versuchen zur Reduzierung des Runoff-Austrags von Pflanzenschutzmitteln durch reduzierte Bodenbearbeitung	382
Tab. II.10-5:	MAGPIE Workshop 2013: Proposed runoff mitigation measure efficiencies (not differentiated according to pesticide properties)	385
Tab. A1-1:	Ökotoxikologische Daten und RAC-Werte (Regulatory Acceptable Concentration) für die in den Vergleichsrechnungen verwendeten Beispielsubstanzen	412
Tab. A1-2:	RAC und PECmax-Werte [µg/L] für die Beispielsubstanzen bzw. -anwendungen nach EVA (ohne Drift-reduzierende Technik) und EXPOSIT	413
Tab. A1-3:	Exposure Toxicity Ratios (ETR) für die Beispielsubstanzen bzw. -anwendungen nach EVA (ohne Drift-reduzierende Technik) und EXPOSIT	414
Tab. A1-4:	PECmax-Werte [µg/L] für die Beispielanwendungen nach GERDA Step 3 und Step 4 unter Berücksichtigung von Risikominderung	415
Tab. A1-5:	RAC und Exposure Toxicity Ratios (ETR) Werte für die Beispielanwendungen nach GERDA Step 3 und Step 4 unter Berücksichtigung von Risikominderung	416
Tab. A2-1:	Die sieben Substrattypen, die im FOOTPRINT Soil Type Selector zur Auswahl stehen	419
Tab. A2-2:	Korrespondenztafel zwischen Substrattypen und FOOTPRINT Hydrologic Groups (FHG)	420

Tab. A2-3:	Zuordnung des FOOTPRINT-Substrattyps (letzte Spalte) zu jeder Kombination von GEOGEN (Kennzeichnung der Geogenese nach KA4) und HERK (petrographische Kennzeichnung des Bodenausgangsgesteins)	421
Tab. A2-4:	Gegenüberstellung der Bausteine der Entscheidungsbäume für den organic matter code (organic matter trees)	428
Tab. A2-5:	Umsetzung der Bausteine der organic matter trees in der BUEK	428
Tab. A2-6:	Korrespondenztabelle zwischen bodensystematischen Einheiten der KA4 und FSTs (nur benutzt für BOFORM_IDs ohne Referenzprofil)	430
Tab. A3-1	Einstufung in Hydromorphiegrad	433
Tab. A4-1:	Klassenmittelwerte der Korngrößenfraktionen (%) für die Texturklassen (= Bodenarten) nach Bodenkundlicher Kartieranleitung (KA 4)	435
Tab. A5-1:	Absolute Flächen und prozentuale Flächenanteile der einzelnen FSTs an den ackerbaulich relevante Landnutzungs-Kategorien (NUTZ_NR) in der BUEK 1000	437
Tab. A5-2:	Absolute Flächen und prozentuale Anteile der einzelnen FOOTPRINT Soil Types (FSTs) an den ackerbaulich relevanten Landnutzungs-Kategorien (Code-Nr.) in der Bodenübersichtskarte Deutschland 1:1 Mio (BUEK 1000), getrennt nach Klassifizierbarkeit	440
Tab. A6-1:	Die 10 FST/Nutzungs/Klima-Kombinationen mit dem höchsten Flächenanteil an der Gesamtfläche	445

Abbildungsverzeichnis

Abb. I.3-1:	Schema des gestuften GERDA-Ansatzes zur Bewertung der PSM-Exposition von Oberflächengewässern durch Runoff und Erosion, Drainage, Drift sowie atmosphärischen Transport in Deutschland	67
Abb. I.4-1:	GERDA STEPS: Main Screen	86
Abb. I.4-2:	GERDA-STEPS: Bearbeiten der Basis-Substanzparameter	87
Abb. I.4-3:	Bearbeiten zusätzlicher Substanzparameter, die von GERDA benötigt werden	88
Abb. I.4-4:	Bearbeiten eines GERDA-Projekts	88
Abb. I.4-5:	Fenster für GERDA-Stufe3-Simulationen	90
Abb. I.4-6:	Fenster für GERDA-Stufe4-Simulationen	91
Abb. I.4-7:	Fenster für GERDA-Stufe4-Simulationen (Definieren einer neuen Variante)	92
Abb. I.4-8:	Report GERDA-STEPS	93
Abb. I.4-9:	Zeitreihendiagramm GERDA-STEPS	94
Abb. I.4-10:	Zeitreihendiagramm GERDA-STEPS mit modifiziertem Maximalwert auf der x-Achse	94
Abb. I.5-1:	Koc und Halbwertzeiten im Boden (DT50soil) der Beispielsubstanzen für die Vergleichsrechnungen	104
Abb. I.5-2:	Eintragspfad Runoff: PECmax-Werte nach GERDA (80. Perzentil der räumlichen Verteilung und 80. Perzentil der Jahresmaxima) mit 100 % Driftreduktion im Vergleich zu PECmax-Werten nach EXPOSIT für 13 Beispielsubstanzen	109
Abb. I.5-3:	Eintragspfad Drainage: PECmax-Werte nach GERDA (80. Perzentil der räumlichen Verteilung und 80. Perzentil der Jahresmaxima) mit 100 % Driftreduktion im Vergleich zu PECmax-Werten nach EXPOSIT	110
Abb. I.5-4:	Höchster PECmax-Wert nach GERDA im Vergleich zum höchsten PECmax-Werten nach FOCUS-Szenarien für 13 Beispielsubstanzen und a) Runoff & Erosions-Einträge, b) Drainage-Einträge (jeweils mit Spray-drift-Einträgen)	111
Abb. II.1-1:	Texturdreieck nach World Reference Base for Soil Resources (FAO, 1998)	128
Abb. II.1-2:	Typische Tiefenprofile der organischen Bodensubstanz für einige organic matter profile codes (am Beispiel der FHG/Texturklassenkombination L11)	130
Abb. II.2-1:	Lage der in CLIMWAT 2.0 zur Verfügung stehenden Klimastationen in Deutschland (n=74)	146
Abb. II.2-2:	Verteilung der Klimavariablen T_SPR: Mittlere Temperatur von Anfang April bis Ende Juni (Auswertungszeitraum 1980-2009), ausgeschnitten nach ATKIS-Nutzungen „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“	148

Abb. II.2-3:	Kumulative Flächenverteilungskurve zur Klimavariablen T_SPR: Mittlere Temperatur von Anfang April bis Ende Juni (Auswertungszeitraum 1980-2009)	149
Abb. II.2-4:	Kumulative Flächenverteilungskurve zur Klimavariablen ER_MJ26.64: durchschnittliche Anzahl der Tage mit Überschreitung des Schwellenwertes pro Jahr	154
Abb. II.2-5:	Anzahl der Tage zwischen März und Juni mit einem Niederschlag größer 26.64 mm (ER_MJ26.64 ; ausgeschnitten nach ATKIS-Nutzungen „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“)	155
Abb. II.2-6:	Verteilung der zwölf Klimacluster in Deutschland nach Hauptkomponentenanalyse (PCA) und anschließender Clusteranalyse von 19 Klimavariablen	163
Abb. II.4-1:	Konzept der FOCUS surface water bodies und ihrer Einzugsgebiete	199
Abb. II.5-1:	Median der jährlichen Maxima der täglichen PSM-Austräge für verschiedene FOCUS Runoff-Szenarien (R1-R4) und verschiedene Austragspfade (Runoff und Erosion) als Funktion der DT50 für einen bestimmten Koc (hier: 5000 L kg ⁻¹)	226
Abb. II.5-2:	Median der jährlichen Maxima der täglichen PSM-Austräge für verschiedene FOCUS Runoff-Szenarien (R1-R4) und verschiedene Austragspfade (Runoff und Erosion) als Funktion des Koc für eine bestimmte DT50 (hier: 30 Tage)	226
Abb. II.5-3:	Häufigkeitsverteilung der max. täglichen PSM-Austräge über Surface Runoff für alle 6 in der Unsicherheitsanalyse simulierten Anwendungen	230
Abb. II.5-4:	Häufigkeitsverteilung der max. täglichen PSM-Austräge über Surface Runoff für Terbutryn in Mais (Frühjahrsapplikation) und 5 verschiedene Böden)	231
Abb. II.5-5:	Häufigkeitsverteilung der max. täglichen PSM-Austräge über Surface Runoff für Terbutryn in Mais (Frühjahrsapplikation), Bodenklasse 4 (hydrologic group C)	232
Abb. II.5-6:	Häufigkeitsverteilung der max. täglichen PSM-Austräge über Surface Runoff für Terbutryn in Mais (Frühjahrsapplikation), Bodenklasse 4 (hydrologic group C), Klimaszenario 3 (Saarbrücken) und 3 ausgewählte Wetterjahre	232
Abb. II.6-1:	Scatterplot der PEC _{sw,max} (nur Zwischenabfluss) gegen die PEC _{sw,max} (Oberflächenabfluss + Erosion) für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt	252
Abb. II.6-2:	Scatterplot der AUC _{sw} (nur Zwischenabfluss) gegen die AUC _{sw} (Oberflächenabfluss + Erosion) für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt	252
Abb. II.6-3:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	254

Abb. II.6-4:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragungspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	254
Abb. II.6-5:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragungspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	255
Abb. II.6-6:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	256
Abb. II.6-7:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	256
Abb. II.6-8:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	257
Abb. II.6-9:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragungspfad Zwischen- abfluss (I). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	258
Abb. II.6-10:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragungspfad Oberflächen- abfluss + Erosion (RE). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	258
Abb. II.6-11:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragungspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	259
Abb. II.6-12:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	260
Abb. II.6-13:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	260
Abb. II.6-14:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	261
Abb. II.6-15:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragungspfad Zwischen- abfluss (I). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	262
Abb. II.6-16:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragungspfad Oberflächen- abfluss + Erosion (RE). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	262
Abb. II.6-17:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für den Eintragungspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	263
Abb. II.6-18:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	264
Abb. II.6-19:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	264
Abb. II.6-20:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für den Eintragungspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	265
Abb. II.6-21:	Scatterplot der PEC _{sw,max} (Oberflächenabfluss + Erosion + Zwischen- abfluss, REI) gegen die PEC _{sw,max} (Oberflächenabfluss + Erosion, RE) für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt	266
Abb. II.6-22:	Scatterplot der AUC _{sw} (Oberflächenabfluss + Erosion + Zwischen- abfluss, REI) gegen die AUC _{sw} (Oberflächenabfluss + Erosion, RE) für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt	267

Abb. II.6-23:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	269
Abb. II.6-24:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	269
Abb. II.6-25:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	270
Abb. II.6-26:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	270
Abb. II.6-27:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	271
Abb. II.6-28:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	271
Abb. II.6-29:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	273
Abb. II.6-30:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d	273
Abb. II.6-31:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	274
Abb. II.6-32:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d	274
Abb. II.6-33:	CDF der Median[annual PEC _{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d	275
Abb. II.6-34:	CDF der Median[annual AUC _{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 dt	275
Abb. II.7-1:	Grundprinzip von VF _{SMOD}	280
Abb. II.7-2	Eingabefenster für Runoff mitigation in SWAN 3.0	280
Abb. II.7-3:	deltaPEC _{sw} als Funktion von deltaR für fb = 0,2 und verschiedenen Verhältnisse von deltaP/deltaR	285
Abb. II.7-4:	deltaPEC _{sw} als Funktion von deltaR für fb = 0,6 und verschiedenen Verhältnisse von deltaP/deltaR	285

Abb. II.7-5:	deltaPECsw als Funktion von deltaR für fb = 0,9 und verschiedenen Verhältnisse von deltaP/deltaR.	286
Abb. II.7-6:	deltaPECsw als Funktion von deltaR für fb = 1,0 und verschiedenen Verhältnisse von deltaP/deltaR	286
Abb. II.7-7:	Infiltrations- und Redistributionshypothese für Böden mit hoch anstehendem Wasserspiegel in hydrostatischem Gleichgewicht, vor Erreichen der Sättigung	291
Abb. II.7-8:	Konzeptualisierung von BC1	292
Abb. II.7-9:	Infiltrations- und Redistributionshypothese für Böden mit hoch anstehendem Wasserspiegel in hydrostatischem Gleichgewicht, nach Erreichen der Sättigung	293
Abb. II.7-10:	Effekt der unteren Randbedingung (BC) und der initialen Wassertiefe WTD für ansonsten konstante Einstellungen: Szenario = R1 stream, Koc = 100 L/kg, Simulationsperiode = 240 Monate, Applikationsmonat = 10, VL = 20 m, FWIDTH = 100 m	303
Abb. II.7-11:	Effekt der VFS-Länge in Fließrichtung (VL) und der effektiven Fließbreite (FWIDTH) für ansonsten konstante Einstellungen: Szenario = R1 stream, Koc = 100 L/kg, Simulationsperiode = 240 Monate, Applikationsmonat = 10, lowerBC = 1, WTD = 2 m. Kontrollsimulation (ohne VFS): PECsw, max = 71.2 µg/L, PECsed,max = 13.1 µg/kg	303
Abb. II.7-12:	Effekt der VFS-Länge in Fließrichtung (VL) und der effektiven Fließbreite (FWIDTH) für ansonsten konstante Einstellungen: Szenario = R4 stream, Koc = 100 L/kg, Simulationsperiode = 12 Monate, Applikationsmonat = 10, lowerBC = 1, WTD = 2 m. Kontrollsimulation (kein VFS): PECsw,max = 30.97 µg/L, PECsed,max = 13.92 µg/kg	304
Abb. II.8-1:	Vereinfachtes Beispiel für zwei Expositionsprofile	330
Abb. II.8-2:	Darstellung der Deskriptoren eines Expositionsprofils, die mutmaßlich einen Einfluss auf die ökotoxikologische Relevanz eines Szenarios haben (AUC = Area Under the Curve)	330
Abb. II.8-3:	Expositionsprofile der untersuchten FOCUS-Szenarien über 485 Tage mit der Versuchssubstanz Modelmethrin	334
Abb. II.8-4:	Expositionsprofile der untersuchten, theoretischen Szenarien	336
Abb. II.8-5:	Expositionsprofile der zufällig generierte Szenarien	338
Abb. II.8-6:	Expositionsprofile der GERDA-Szenarien über einen Simulationszeitraum von 30 Jahren	340
Abb. II.8-7:	Darstellung aller 30 separater Simulationsjahre des GERDA-Szenarios WP3_200001_L11	341
Abb. II.8-8:	Schema der Vorgehensweise zum Vergleich der Szenario-Rankings nach den Szenario-Deskriptoren (PECmax, AUC, minPECmax/AUC) mit den Rankings nach dem TK-TD Modell GUTS	344

Abb. II.8-9:	Simulierte Überlebensrate für <i>Chaoborus</i> , <i>Gammarus</i> und <i>Daphnia magna</i> für die untersuchten FOCUS-Expositionsprofile der Substanz Modelmethrin	345
Abb. II.8-10:	Überlebensrate aller Spezies-Chemikalien-Kombinationen der untersuchten FOCUS-Szenarien S1- S8	346
Abb. II.8-11:	Auftragung der Ränge aller FOCUS-Szenarien, geordnet nach der Überlebenswahrscheinlichkeit der Organismen in diesen Szenarien (minGUTS), gegen den jeweiligen Rang des Szenarios nach den Expositionsprofil-Deskriptoren PECmax, AUC und min (PECmax, AUC)	348
Abb. II.8-12:	Auftragung der Ränge aller FOCUS-Szenarien, geordnet nach der berechneten Überlebenswahrscheinlichkeit in diesen Szenarien (minGUTS), gegen den jeweiligen Rang des Szenarios nach den Expositionsprofil-Deskriptoren PECmax, AUC und min(PECmax, AUC)	348
Abb. II.8-13:	Auftragung der Ränge aller Szenarien, geordnet nach der Überlebenswahrscheinlichkeit der Organismen in diesen Szenarien (minGUTS), gegen den jeweiligen Rang des Szenarios nach den Expositionsprofil-Deskriptoren PECmax, AUC und min (PECmax, AUC) für die zufällig generierten Szenarien (Datensatz 1-4 mit je 100 Szenarien)	349
Abb. II.8-14:	Auftragung der Ränge aller Szenarien des Datenpakets 1, geordnet nach der Überlebenswahrscheinlichkeit der Organismen in diesen Szenarien (minGUTS) gegen den jeweiligen Rang des Szenarios nach den Expositionsprofil-Deskriptoren 3d-TWA, 7d-TWA, No. of Days>0,75*PECmax und min(all)	350
Abb. II.8-15:	Ränge nach PECmax und min(PECmax, AUC), aufgetragen gegen den 3d-TWA und 7d-TWA für jedes Szenario	351
Abb. II.8-16:	Darstellung der Ränge nach PECmax gegen die Rangvergabe nach minGUTS für die jährlichen Expositionsprofile bei allen GERDA-Szenaren (30 Jahre)	352
Abb. II.8-17:	Darstellung der Ränge nach min(PECmax/AUC) gegen die Rangvergabe nach minGUTS für die jährlichen Expositionsprofile bei allen GERDA-Szenaren (30 Jahre)	353
Abb. II.8-18:	Auftragung der Ränge aller Jahres-Expositionsprofile von GERDA nach den Expositionsprofil-Deskriptoren PECmax, AUC und min(PECmax, AUC) gegen die Ränge basierend auf der Überlebenswahrscheinlichkeit der Organismen in den jeweiligen Szenarien (minGUTS)	353
Abb. II.8-19:	Korrelation der Ränge nach PECmax, AUC und min(PECmax, AUC) mit dem Rang nach minimalen Populationsgröße in IDamP bei konzentrationsabhängiger Hemmung de Reproduktion von <i>D. magna</i>	354
Abb. II.8-20:	Korrelation der Ränge nach PECmax, AUC und min(PECmax, AUC) mit dem Rang nach minimaler Populationsgröße im logistischen Populationsmodell bei konzentrationsabhängiger Hemmung der Wachstumsrate	354

Abb. II.8-21:	Korrelation der Ränge nach PECmax, AUC und min(PECmax, AUC) mit dem Rang nach minimaler Populationsgröße im logistischen Populationsmodell bei konzentrationsabhängiger Mortalität	354
Abb. II.9-1:	Theoretische Beispiele für typische Verläufe der Konzentration eines Pflanzenschutzmittelwirkstoffs im Wasser in Mesokosmenstudien (eine bzw. drei Applikation mit 1 Woche Intervall und DT50 von 1, 7 oder 14 Tagen)	358
Abb. II.9-2:	Beispiele von gemessenen Expositionsverläufen in Mesokosmenstudien des Fraunhofer Instituts IME (mehrere Kurven: verschiedene Konzentrationsstufen)	359
Abb. II.9-3:	Beispiele für Expositions muster nach FOCUS, hier für ein Fungizid mit einer Applikation und ein Insektizid mit zwei Applikationen	360
Abb. II.9-4:	Vergleich eines hypothetischen RAC-Profiles einer Mesokosmenstudie mit modellierten Expositionsprofilen	363
Abb. II.9-5:	Vergleich eines hypothetischen RAC-Profiles einer Mesokosmenstudie mit Expositionsprofilen. Beispiele für mögliche Überschätzung des Risikos durch Vergleich der Profile	364
Abb. II.9-6:	Beispiel für die Kalibrierung eines TK-TD-Modells für letale Effekte auf <i>Chaoborus spec.</i>	365
Abb. II.9-7:	Beispiel für die die Testung eines TK-TD-Modells für <i>Chaoborus spec.</i>	366
Abb. II.9-8:	Vorhergesagte Populationsdynamik von <i>Chaoborus spec.</i> für zwei FOCUS-Expositionsszenarien	367
Abb. II.9-9:	Deckungsgrad von Fadenalgen an der Wasseroberfläche und an der Mesokosmoswand	370
Abb. II.9-10:	RAC-Profile der Mesokosmenstudie für die Beispielsubstanz UBA_2	371
Abb. II.9-11:	Vergleiche der RAC aus der Mesokosmenstudie mit den PEC-Profilen der Drainage-Szenarien für die Beispielsubstanz UBA_2 mit 20 m Pufferstreifen als Risikominderungsmaßnahme	372
Abb. II.9-12:	Vergleiche der RAC aus der Mesokosmenstudie und der PEC-Profile der Runoff-Szenarien für die Beispielsubstanz UBA_2	373
Abb. II.10-1:	Wirkung von Maßnahmen zur Verminderung des Runoffs, Median und Verteilung der Ergebnisse aus Plot-Versuchen in Europa	383
Abb. II.10-2:	Wirkung von Maßnahmen zur Verminderung des Bodenverlustes, Median und Verteilung der Ergebnisse aus Plot-Versuchen in Europa	383
Abb. II.10-3:	Verminderung von PSM-Austrag (Runoff und Erosion) durch veränderte Bodenbearbeitung: Median und Verteilung der Ergebnisse von rd. 70 Parzellen-Versuchen	385
Abb. A2-1:	Beispiele von Flow Pathway Categories (FPC)	418
Abb. A2-2:	Organic matter tree Nr. 1	427
Abb. A8-1:	Ausschnitt des DGM10 bei Neustadt an der Weinstraße	447
Abb. A8-2:	Ausschnitt des Fließrichtungsrasters bei Neustadt an der Weinstraße	448

Abb. A8-3:	Ausschnitt der Abflussbahnen (mit Schwellwert 50000 beitragende Zellen) und der daraus abgeleiteten EZG-Abgrenzungen	448
Abb. A8-4:	Ausschnitt der Abflussbahnen (mit Schwellwert 100000 beitragende Zellen) und der daraus abgeleiteten EZG-Abgrenzungen	449
Abb. A8-5:	Ausschnitt der Abflussbahnen (mit Schwellwert 1000 beitragende Zellen)	450
Abb. A8-6:	Ausschnitt der in Punkte im 100 m Abstand umgewandelten Abflussbahnen 1000	450
Abb. A8-7:	Ausschnitt der in Punkte im 100 m Abstand umgewandelten Abflussbahnen 1000, ausgeschnitten auf ein 100 m-Puffer um die ATKIS Gewässer	451
Abb. A8-8:	Detailausschnitt der in Punkte im 100 m Abstand umgewandelten Abflussbahnen 1000 und der ATKIS-Gewässerverläufe	451
Abb. A8-9:	Detailausschnitt der in Punkte im 100 m Abstand umgewandelten Abflussbahnen 1000, ausgeschnitten auf ein 100m-Puffer um die ATKIS Gewässer	452
Abb. A9-1:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse EXPOSIT Drainage. Outputvariable PEC _{sw,max} (= PEC initial Graben; $\mu\text{g/L}$)	454
Abb. A9-2:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse EXPOSIT R+E. Outputvariable PEC _{sw,max} (= PEC initial Graben; $\mu\text{g/L}$)	455
Abb. A9-3:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Ditch. Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	456
Abb. A9-4:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Ditch. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	457
Abb. A9-5:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Stream. Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	458
Abb. A9-6:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Stream. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	459
Abb. A9-7:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Pond. Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	460
Abb. A9-8:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Pond. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	461
Abb. A9-9:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard R+E Stream Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	462
Abb. A9-10:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard R+E Stream. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	463
Abb. A9-11:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard R+E Pond. Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	464
Abb. A9-12:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard R+E Pond. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	465

Abb. A9-13:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Ditch. Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	466
Abb. A9-14:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Ditch. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	467
Abb. A9-15:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Stream. Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	468
Abb. A9-16:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Stream. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	469
Abb. A9-17:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Pond. Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	470
Abb. A9-18:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Pond. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	471
Abb. A9-19:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified R+E Pond. Outputvariable PEC _{sw,max} ($\mu\text{g/L}$)	472
Abb. A9-20:	Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified R+E Pond. Outputvariable PEC _{sed,max} ($\mu\text{g/kg}$ Trockenmasse)	473

Abkürzungsverzeichnis und Glossar

AP	Arbeitspaket (in der Ausschreibung des UBA zur Projektvergabe)
av.	average (Mittelwert eines Datenkollektivs)
ALKIS	Amtliches Liegenschaftskataster-Informationssystem
ANOVA	Analysis of Variance
ATKIS	Amtliches Topographisch-Kartographisches Informationssystem
BC	Boundary Condition (Randbedingung)
BUEK1000	Nutzungsdifferenzierte Bodenübersichtskarte 1:1.000.000 der Bundesrepublik Deutschland
BVL	Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit
CAM	Chemical Application Method
CDF	Cumulative Distribution Function (Kumulierte Häufigkeitsfunktion)
CMF	Catchment Model Framework (offene Modellplattform für hydrologische 1-D bis 3-D Modellierung)
CN	Curve Number (Verfahren zur Abschätzung des Runoff-Volumens)
Deskriptor	Konzentrationsgröße (z.B. PECmax, AUC), die ein (zeitlich variables) Expositionsprofil anhand eines einzigen Wertes charakterisiert
DT50	Half-life Dissipation Time
DWD	Deutscher Wetterdienst
ECPA	European Crop Protection Association
EFSA	European Food Safety Authority
ERO-RAC	Ecological Recovery Option-RAC
ETO-RAC	Ecological Threshold Option-RAC
ETR	Exposure Toxicity Ratio
EU	Europäische Union
EU-24	Europäische Union mit 24 Mitgliedsstaaten (im Stand von 2006)
EVA	Exposure Via Air; Modell zur Abschätzung der Volatilisation von leichtflüchtigen Wirkstoffen nach der Ausbringung und der Gewässerdeposition durch atmosphärischen Nahtransport
EXPOSIT	Modell zur Bewertung der Gewässerexposition durch Runoff, Erosion und Drainage im PSM-Zulassungsverfahren in Deutschland
FHG	FOOTPRINT Hydrologic Group
FAO	Food and Agriculture Organization (of the United Nations)
FAST	Fourier Amplitude Sensitivity Testing
FEMVTF	FIFRA Environmental Model Validation Task Force
FOCUS	Forum for the Co-ordination of Pesticide Fate Models and their Use
FOOTPRINT	Functional Tools for Pesticide Risk Assessment and Management (EU-F&E-Projekt 2006-2009)
FPC	Flow Pathway Category
FST	FOOTPRINT Soil Type

GAP	Good Agricultural Practice (Anwendungen eines Pflanzenschutzmittels. Es umfasst das Anwendungsgebiet und die Beschreibung der Anwendungen)
GERDA	German Erosion, Runoff and Drainage Risk Assessment
GLP	Good Laboratory Practice
GUTS	General Unified Threshold model of Survival
gw	Groundwater; bezogen auf das Grundwasser
HSG	Hydrologic Soil Group
JKI	Julius-Kühn-Institut
KA4	Bodenkundliche Kartieranleitung, 4. Auflage
Koc	Soil adsorption coefficient
LHS	Latin Hypercube Sampling
MACRO	Model to predict pesticide transport in macroporous field soils
MLR	Multiple Lineare Regressionsanalyse
MS	Mitgliedsstaaten der Europäischen Union
nf	Freundlich-Exponent
OC	Organischer Kohlenstoff (Gehalt im Boden)
PC	Principal Component (Hauptachse einer Hauptkomponentenanalyse)
PCA	Principal Component Analysis (Hauptkomponentenanalyse)
PEC	Predicted Environmental Concentration; vorausgesagte/zu erwartende Konzentration in der Umwelt
PPR	Panel on the Plant Protection Products and their Residues (EFSA)
PRZM	Pesticide Root Zone Model (Modell zur Simulation von Umsatz, Transport und Verbleib von PSM-Wirkstoffen in der ungesättigten Bodenzone)
PSM	Pflanzenschutzmittel
PUF	Plant uptake factor
RAC	Regulatory Acceptable Concentration
R&E	Runoff und Erosion
Runoff	Im Zusammenhang mit Expositionsmodellierung: Wasserfluss auf der Boden- oberfläche und damit verbundener Transport von gelöstem PSM-Wirkstoff
sed	Sediment; bezogen auf das Sediment
SCS	Soil Conservation Service (USDA)
SGDBE	Soil Geographical Database of Europe
SHG	Soil Hydrologic Group (Bodengruppen im SCS CN-Verfahren)
SMU	Soil Mapping Unit
SPADE	Soil Profile Analytical Database of Europe
SSD	Species Sensitivity Distribution
STEPS-1-2-3-4	Erweiterung des FOCUS tools STEPS-1-2

STEPS-3	Einzelnes Modell aus der Modellfamilie STEPS-1-2-3-4, zur Berechnung von PEC _{sw} und PEC _{sed} im Gewässer-Sediment-System (analog zu TOXSWA)
STU	Soil Typological Unit
sw	Surface water; bezogen auf Oberflächengewässer
TER	Toxicity Exposure Ratio
TK-TD	Toxikokinetisch-Toxikodynamisch
TOXSWA	TOXic substances in Surface Waters (Modell zur Berechnung von Umsatz, Transport und Verbleib von PSM-Wirkstoffen im Wasser-Sediment-System in Oberflächengewässern)
TWA	Time-Weighted Average
TWAC	Time-Weighted Average Concentration
UBA	Umweltbundesamt
USDA	United States Department of Agriculture
USLE	Universal Soil Loss Equation
VFS	Vegetated filter strip, grasbewachsener Filterstreifen (Pufferstreifen)
VFSMOD	Modell zur Simulation der Verminderung von Wasserdurchfluss und Sedimenttransport in einem vegetated filter strip
WRB	World Reference Base for Soil Resources

Übersicht zur Bearbeitung der Aufgaben gemäß Leistungsbeschreibung des Umweltbundesamtes (UBA) in den Kapiteln des vorliegenden Abschlussberichts

Arbeitspakete und Aufgaben gemäß UBA-Leistungsbeschreibung	Ergebnisse in Kapitel
I) Bewertung Modellierungskonzept FOCUS Surface Water	
a1) Repräsentativitätsanalyse der FOCUSsw-Szenarien für Faktor Boden	II.1.5
a2) Repräsentativitätsanalyse der FOCUSsw-Szenarien für Faktor Klima	II.2
a3) Repräsentativitätsanalyse der FOCUSsw-Szenarien für Faktor Gewässer und Einzugsgebiet	II.3
b) Sensitivitätsanalyse der Modellparameter und Eingabevariablen	I.2.2; II.5
c) Bewertung der im Modellansatz berücksichtigten substanzspezif. Prozesse	I.2.2; II.4
d) Analyse der Algorithmen zur Ermittlung PEC Oberflächengew. und Sediment	I.2.2; II.5
e) Bewertung der regulatorischen Treffsicherheit der Expositionsermittlung	I.2.5
f) Anpassung des Modellkonzept zur Ermittlung Einträge über Runoff, Erosion und Drainage im nationalen Bewertungsverfahren	I.3.2f
II) Überprüfung und Bewertung von Risikomanagementmaßnahmen	
g) Übersicht zu Risikomanagementmaßnahmen Runoff/Erosion und Drainage in der EU	II.10
h) Bewertung von Gewässerrandstreifen (u.a. VFSSMOD)	II.7, II.10.3
i) Bewertung von bodenkonservierende Bodenbearbeitungsverfahren	II.10.3
j) Empfehlung weiterer Risikomanagementoptionen	II.10.3
k) Ableitung von Vorschlägen für Tier 4	II.7
III) Anpassung des nationalen Bewertungskonzepts und modelltechnische Umsetzung	
l) Konzeption eines angepassten nationalen Bewertungsansatzes	I.3.2f
m) Ableitung und Parametrisierung repräsentativer Szenarien für Deutschland	I.3.2f
n) Anbindung geeigneter Risikomanagementmaßnahmen (aus AP II)	II.7
o) Vorschläge für Verfeinerungsoptionen als Higher Tier Option	I.3.2
p) Bewertung der Verwendbarkeit von Monitoring und Feldstudien zu Runoff/Erosion als Higher Tier Option	II.11
q) Modelltechnische Umsetzung der Aufgaben l) bis n)	GERDA tool
IV) Verknüpfung der vorhergesagten aquatischen Exposition mit Studienbedingungen und Toxizitätsdaten für die Risikobewertung	
r) Ableitung von Expositionsmustern im Gewässer, die realistic worst-case Szenarien abbilden, und einen Vergleich mit Exposition in Higher Tier Studien erlauben	II.8
s) Erstellung Tool zur Berechnung von zeitvariablen PEC _{tw} -Konzentrationen	GERDA tool
t) Einschätzung der Vergleichbarkeit mit Exposition in Higher Tier	II.9

Effektstudien	
u) Analyse der Unsicherheiten der Konzentrations-Zeit-Verläufe der Expositionsmodellierung und Berücksichtigung in der Risikobewertung	II.8, II.9
V) Überprüfung des Konzepts der aquatischen Risikobewertung anhand von Vergleichsrechnungen	
v) Simulationsrechnungen für charakteristische Beispielsubstanzen	1.5
w) Überprüfung des Konzept für Substanzen mit kritischen Funden	1.5
x) Auswirkungen der Risikobewertung für die Zulassungsfähigkeit von Wirkstoffen und die Beibehaltung des bestehenden Schutzniveaus	1.5

Zusammenfassung

Mit dem Konzept GERDA (GEobased Runoff, Erosion, and Drainage risk Assessment for Germany) wird die bislang getrennte Betrachtung der Eintragspfade zur Abschätzung der Pflanzenschutzmittel-Exposition von Oberflächengewässern in Deutschland ersetzt und mit dem europäischen Ansatz harmonisiert. Zentrales Element in GERDA ist die statistisch fundierte, Perzentil-basierte Auswahl der Boden-Klima-Szenarien, die zur Abschätzung der Gewässerexposition über Runoff & Erosion sowie Drainage herangezogen werden. Dafür wurden zunächst die austragsrelevanten Boden- und Klimaeigenschaften der Pflanzenschutzmittel (PSM)-Applikationsflächen (Ackerbau und Sonderkulturen) in Deutschland analysiert. Die Böden der Bodenübersichtskarte 1 : 1 Mio. (BUEK1000) wurden im System der FOOTPRINT Soil Types klassifiziert; für die Klimaeigenschaften wurden 12 Klimacenter ausgegrenzt, denen jeweils eine repräsentative DWD-Klimastation zugeordnet ist.

Anschließend wurden mit den Modellen PRZM (für Eintragspfad Runoff und Erosion) und MACRO (Eintragspfad Drainage) für 360 Applikationen „virtueller“ Pflanzenschutzmittel, d.h. gestufter Kombinationen von Kultur/Koc/DT50/Applikationsmonat, auf allen in Deutschland auftretenden Boden-Klima-Kombinationen die Wirkstoffausträge (edge-of-field) in der gelösten Phase und im Sediment für eine 30-jährige Wetterzeitreihe (1982–2011) berechnet. Im Ergebnis stehen 360 (für PRZM) bzw. 288 (MACRO) räumlich-zeitliche Häufigkeitsverteilungen der Wirkstoff-Austräge für Deutschland zur Verfügung.

Zur Expositionsabschätzung für einen neu zuzulassenden Wirkstoff mit dem Tool GERDA werden daraus jeweils diejenigen Boden-Klima-Kombinationen für die PRZM- und MACRO-Simulationen ausgewählt, die dem 80. räumlichen und dem 80. zeitlichen Perzentil (6.-höchster Wert aus 30 Jahresmaxima) des „virtuellen“ PSM mit den ähnlichsten Werten für Kultur/Koc/DT50/Applikationsmonat des zuzulassenden Wirkstoffs entspricht.

Im Zulassungsverfahren werden dann für den betreffenden Wirkstoff mit diesen ausgewählten Boden-Klima-Kombinationen die Gewässereinträge über Runoff und Erosion (mit PRZM) bzw. Drainage (MACRO) sowie zusätzlich die Einträge über Drift und atmosphärischen Transport (Modell EVA) berechnet. Mit dem Modell STEPS-3 werden anschließend 30-jährige Zeitreihen der PEC_{sw} und PEC_{sed} (PEC = Predicted Environmental Concentration) für die Gewässerszenarien stream und ditch berechnet, aus denen dann die Endpunkte der PEC_{sw}, PEC_{sed}, TWAC_{sw} und TWAC_{sed} (TWAC = Time-Weighted Average Concentration) für die Risikobewertung ausgewählt werden.

Vergleichsrechnungen nach den Verfahren GERDA, FOCUS_{sw} (Step 3) und EXPOSIT für 13 Beispielsubstanzen zeigen, dass bei Verwendung des Tools GERDA zur Expositionsabschätzung für Oberflächengewässer in Deutschland keine generelle Verschärfung des für den Eintragspfad Runoff & Erosion erforderlichen Risikomanagements zu erwarten ist. Die GERDA-Methodik verbessert verschiedene Schwachstellen des FOCUS_{sw}-Verfahrens und ermöglicht eine Perzentil-basierte Expositionsbewertung. Die Methodik kann grundsätzlich mit überschaubarem Arbeitsaufwand auf alle EU-Mitgliedstaaten übertragen werden.

Weiterhin wird das Modell VFSSMOD zur Modellierung der Risikominderung durch Filterstreifen überprüft und es werden die Voraussetzungen aufgeführt, die erfüllt sein müssen, damit grasbewachsene Uferstreifen als Risikominderungsmaßnahme in GERDA berücksichtigt werden können. Die Unterschiede in den Ansätzen von GERDA und FOCUS_{sw} werden vorgestellt und die Einschränkungen der Expositionsschätzung nach GERDA aufgeführt.

Summary

The GERDA concept (GEobased Runoff, Erosion, and Drainage risk Assessment for Germany) replaces the previous pesticide exposure assessment for surface waters in Germany (where input pathways were assessed separately) and harmonizes the assessment scheme with the European approach. The tool GERDA (GEobased Runoff, erosion, and Drainage risk Assessment for Germany) can replace the model EXPOSIT currently in use to evaluate the surface water exposure from pesticide input via runoff, erosion, and drainage in Germany. Main element of GERDA is a statistically reliable percentile-based selection of soil-climate scenarios applied to the exposure assessment. Therefore initially the distribution of soil properties and climate elements relevant for pesticide runoff & erosion and drainage losses has been analyzed for the entire pesticide application area (arable land and special cultures) in Germany. The Soil Map Germany 1 : 1 Mio (BUEK1000) were classified in the system of 102 FOOTPRINT Soil Types, while climate elements were grouped to 12 climate clusters and to each cluster a representative climate station was assigned.

Afterwards for 360 applications of ,virtual' plant protections products (PPP), i.e. tiered combinations of crop/Koc/DT50/application-month, for all soil-climate combinations in Germany the edge-of-field losses (in liquid phase and sediment) for a 30-year weather time series (1982–2011) are simulated with the models PRZM (runoff & erosion input) and MACRO (drainage input), respectively. As a result 360 (for PRZM) and 288 (MACRO) spatio-temporal cumulative distribution functions (CDFs) of substances losses are at hand for Germany.

In the context of the exposure assessment for a new substance with GERDA tool, for PRZM and MACRO simulation runs the soil-climate combinations are selected from these CDFs which represents the 80th spatial and the 80th temporal percentile (6th-highest value of 30 annual maxima) of the virtual PPP, whose crop/Koc/DT50/application-month properties are most similar to the new substance.

In the exposure assessment than the selected soil-climate combinations are used for the modelling of surface water input by runoff & erosion (PRZM) and drainage (MACRO), respectively. Additionally the input via spray drift and atmospheric transport (model EVA) is calculated. Subsequently the model STEPS-3 calculates PEC_{sw} and PEC_{sed} for the surface water scenarios stream and ditch (similar to FOCUS_{sw}) for the 30-year weather time series. From these time series finally the endpoints of PEC_{sw}, PEC_{sed}, TWAC_{sw} and TWAC_{sed} are taken for the evaluation of pesticide surface water exposure risk.

A comparison of PEC calculation according to GERDA, FOCUS_{sw} (Step 3), and EXPOSIT exemplary for 13 substances demonstrates that the tool GERDA for surface water exposure evaluation in Germany does not induce enhanced requirements on the risk management for pesticide input via runoff & erosion. The GERDA methodology rectifies some weaknesses of FOCUS_{sw} approach and facilitates a percentile-based exposure assessment. The methodology is easily applicable to all EU member states with a similar soil and climate data base.

Furthermore the capability of the model VFSSMOD for the simulation of risk mitigation by vegetated filter strips (VFS) is evaluated. The pre-conditions are specified which has to be satisfied to use VFS regularly as a risk mitigation option for the German registration procedure. The differences between the GERDA and FOCUS_{sw} approaches are mentioned and some limitations of the GERDA assessment are explained.

Teil I

Zusammengefasste Darstellung

Hinweis

Die redaktionelle Verantwortung für die Inhalte des Projektberichts liegt bei den Autoren und entspricht nicht notwendigerweise der Meinung des Umweltbundesamtes.

I.1 Einführung

I.1.1 Veranlassung

Die Abschätzung der möglichen Belastung von Gewässern durch die Anwendung von Pflanzenschutzmitteln auf landwirtschaftlichen Flächen wird derzeit in Deutschland für das nationale Zulassungsverfahren und auf EU-Ebene für die EU-Wirkstoffprüfung mit unterschiedlichen Ansätzen durchgeführt. In Deutschland werden für die Expositionsabschätzung von Oberflächengewässern die Eintragspfade Spraydrift, Runoff & Erosion und Drainage unter der Annahme des jeweiligen „realistic worst case“ einzeln bewertet. Einträge über Spraydrift werden mit dem Modell EVA (Exposure Via Air) berechnet, wobei für volatile Stoffe (Dampfdruck $>10^{-5}$ Pa bei 20°C) zeitgleich der Eintrag über Verflüchtigung und Deposition addiert wird. Zur Abschätzung der Exposition von Oberflächengewässern über Runoff & Erosions- und Drainage wird jeweils das Modell EXPOSIT herangezogen. In den aufgeführten Ansätzen wird jeder Eintragspfad - unabhängig von den übrigen - unter der Annahme eines realistic worst case hinsichtlich des Eintrags bewertet.

Auf EU-Ebene wird dagegen auf Basis der FOCUS (Forum for the Co-ordination of Pesticide Fate Models and their Use) Surface Water Szenarien für verschiedene Boden-Klima-Szenarien in der EU eine Gewässerexposition ermittelt, die sich in Step 3 des Verfahrens der FOCUS Working Group on Surface Waters (FOCUSsw) aus den Einträgen über Drift und Runoff & Erosion (R-Szenarien) bzw. über Drift und Drainage (D-Szenarien) insgesamt ergibt (FOCUS, 2001).

Mit der neuen Pflanzenschutzmittelverordnung (EG) 1107/2009 wurde die zonale Bewertung von Pflanzenschutzmitteln (PSM) in der Europäischen Union eingeführt und die gegenseitige Anerkennung von PSM-Zulassungen anderer EU-Mitgliedstaaten gestärkt. Im Fall von Bedenken in Bezug auf die Gesundheit von Mensch und Tier oder die Umwelt in seinem Bereich kann ein Mitgliedstaat nationale Maßnahmen zur Risikominderung festlegen. Wenn diese Risikominderungsmaßnahmen nicht ausreichen, kann ein Mitgliedstaat die Zulassung des Pflanzenschutzmittels in seinem Gebiet verweigern, wenn er angesichts spezifischer ökologischer oder landwirtschaftlicher Bedingungen berechtigten Grund zu der Annahme hat, dass das betreffende Produkt noch immer ein unannehmbares Risiko für die Gesundheit von Mensch und Tier oder die Umwelt darstellt (EG 1107/2009, Art 36 (3), 2. Abs.).

Dies ist die Ausgangssituation für das hier vorliegende Forschungs- und Entwicklungsprojekt im Auftrag des Umweltbundesamtes. Die wesentlichen Aufgaben des Projekts waren es,

- die Expositionsbewertung für das nationale Zulassungsverfahren mit der Expositionsbewertung im Rahmen der EU-Wirkstoffzulassung zu harmonisieren;
- darauf aufbauend ein Instrument für die Expositionsbewertung der Eintragspfade Drift, Runoff & Erosion und Drainage für das PSM-Zulassungsverfahren in Deutschland zu entwickeln;
- Risikominderungsmaßnahmen für die Eintragspfade Runoff & Erosion und Drainage in der Expositionsbewertung zu berücksichtigen.

I.1.2 Gliederung des Abschlussberichts

Der Abschlussbericht gliedert sich in Teil I (Kapitel I.1 bis I.5), in dem Konzept und Entwicklung des Bewertungstools GERDA komprimiert dargestellt werden, einen umfangreicheren Teil II (Kapitel II.1 bis II.11) mit ausführlicher Darstellung der Arbeitsschritte und Ergebnisse der einzelnen Arbeitsaufgaben, sowie einen Anhang.

Ein Handbuch zum Softwaretool GERDA wird separat veröffentlicht.

Teil I – Zusammengefasste Darstellung

Kapitel I.2 umfasst die Ergebnisse der kritischen Bestandsaufnahme der Verfahren von FOCUS Surface Water (Step 3) und EXPOSIT mit einer Bewertung der Prozessbeschreibungen und Sensitivitätsanalysen sowie der Analyse der Repräsentativität für Deutschland. Weiterhin wird eine Definition des Begriff der „regulatorischen Treffsicherheit“ der Expositionsermittlung gegeben.

Kapitel I.3 erläutert die zentralen Entwicklungsschritte des Instruments GERDA. Dies beinhaltet die Ableitung von Boden-Klima-Kombinationen für die Abschätzung der Gewässereinträge über Runoff & Erosion sowie Drainage eines zuzulassenden Wirkstoffs in Deutschland, die Expositionsabschätzung auf Basis räumlich-zeitlicher Perzentile der zu erwartenden Konzentration (Predicted Environmental Concentration, PEC) sowie die Festlegung der Protektivität der Expositionsabschätzung. Weiterhin werden die Voraussetzungen aufgeführt, die erfüllt sein müssen, damit grasbewachsene Uferstreifen als Risikominderungsmaßnahme in GERDA (Step 4) berücksichtigt werden können. Die Einschränkungen der Expositionsschätzung nach GERDA sowie die Unterschiede in den Ansätzen von GERDA und FOCUSsw werden vorgestellt. Daneben wird kurz auf die Option einer Expositionsabschätzung für generische Fließgewässer eingegangen.

In Kapitel I.4 werden das generelle Konzept sowie der Programmablauf der Expositionsabschätzung nach dem GERDA-Ansatz (Stufe 3 und 4) im Softwaretool GERDA v1.0 dargestellt.

Im Kapitel I.5 werden schließlich die Ergebnisse von Vergleichsrechnungen zur aquatischen Risikobewertung und Zulassungsfähigkeit nach den Verfahren GERDA, FOCUSsw und EXPOSIT für 13 Beispielsubstanzen gegenüber gestellt.

Teil II - Ausführliche Darstellung der Methodik und Ergebnisse

In Kapitel II.1 wird zunächst das System der FOOTPRINT Soil Types (Dubus et al., 2009) erläutert. Für die Entwicklung von Boden-Klima-Szenarien für Deutschland für die Eintragspfade Runoff, Erosion und Drainage in Bezug auf den Faktor Boden werden anschließend die in Deutschland relevanten bodensystematischen Einheiten, die in der Bodenübersichtskarte von Deutschland 1 : 1 Mio. (BUEK1000) vertreten sind, im System der FOOTPRINT Soil Types klassifiziert (nur für Ackerbauflächen). Diese Zuordnung ermöglicht auch die Repräsentativitätsanalyse der FOCUSsw-Szenarien für Deutschland hinsichtlich des Faktors Bodens, die in Kapitel II.1 dargestellt ist.

In Kapitel II.2 werden für die Entwicklung von Boden-Klima-Szenarien für Deutschland in Bezug auf den Faktor Klima zunächst diejenigen 18 Klimatelemente identifiziert, die für die Verlagerung von PSM über die Eintragspfade Runoff & Erosion und Drainage besonders sensitiv sind. Im Anschluss daran wird eine Hauptkomponentenanalyse durchgeführt, um die Anzahl der Variablen ohne (größeren) Informationsverlust zu reduzieren. Auf Basis der Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse wird schließlich eine Clusteranalyse vorgenommen, nach der die

Ackerbau- und Sonderkulturflächen in Deutschland 12 Klimaclustern zugewiesen werden. Für jedes Klimacuster steht die repräsentative 30-jährige Wetterzeitreihe (1982 – 2011) einer DWD-Klimastation zur Verfügung. Der Vergleich der Eigenschaften der Klimacuster ermöglicht auch eine Einschätzung der Repräsentativität der FOCUSsw-Szenarien hinsichtlich des Faktors Klima für Deutschland (Kapitel II.2).

Kapitel II.3 erläutert Methodik und Ergebnisse einer GIS-Analyse aller Gewässereinzugsgebiete in Deutschland. Dazu wurden die Häufigkeitsverteilungen verschiedener Parameter von Einzugsgebieten und Gewässerstrukturen erfasst, die den Eintrag und den Transport von PSM aus ackerbaulicher Nutzung in Fließgewässern beeinflussen. Damit wird die Grundlage für repräsentative Gewässerszenarien geschaffen, die später möglicherweise einmal in einer Stufe 5 des GERDA Tools zur PEC-Berechnung herangezogen werden können. Für die Parametrisierung derartiger generischer Einzugsgebiete ist die Kenntnis der Werteverteilungen der relevanten Parameter in den Gewässerlandschaften in Deutschland unabdingbar.

In Kapitel II.4 werden die Prozessbeschreibungen zu Transport und Umwandlung von PSM, die in Bezug auf die Exposition von Oberflächengewässern relevant sind, zwischen FOCUSsw Step 3 und EXPOSIT verglichen. Ferner werden die Prozessbeschreibungen in FOCUSsw und EXPOSIT jeweils dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik gegenüber gestellt. Weiterhin wird die Relevanz der im Gewässer ablaufenden Prozesse (u.a. Diffusion, hydrodynamische Dispersion, Photolyse, Hydrolyse, Bildung von Metaboliten etc.) im Hinblick auf die Konzentrationen im Gewässer bewertet. Daraus leiten sich schließlich die Entscheidungen über die Implementierung der einzelnen Prozesse in das Tool GERDA ab.

In Kapitel II.5 werden die Ergebnisse der Sensitivitätsanalysen für die Modellparameter von MACRO (Version 4.x) und PRZM (Version 3.x), den beiden in FOCUSsw enthaltenen Modellen, für die Boden-, Substanz- und Kultureigenschaften sowie für die meteorologischen Variablen ausführlich wiedergegeben. Weiterhin wird eine globale Sensitivitätsanalyse für den Gesamtansatz der Expositionsabschätzung nach FOCUSsw sowie nach EXPOSIT mittels der „Morris Sensitivity Screening“-Methode (Morris, 1991) vorgenommen.

Kapitel II.6 gibt eine Einschätzung, ob Zwischenabfluss (lateral subsurface flow, interflow) im Tool GERDA (zumindest in zukünftigen Versionen) in der Berechnung von PECsw und PECsed für Oberflächenabfluss und Erosion berücksichtigt werden sollte. Zwischenabfluss als Eintragspfad von PSM kann prinzipiell standardmäßig mit MACRO simuliert und als Komponente in die Expositionsabschätzung für Oberflächengewässer eingeführt werden, was bisher aber weder im Zulassungsverfahren für Wirkstoffe in der EU noch für Pflanzenschutzmittel in Deutschland vorgesehen ist.

Kapitel II.7 beschäftigt sich intensiv mit dem Modell VFSSMOD (Muñoz-Carpena und Parsons, 2011), mit dem die (mögliche) Reduktion des Runoff-Wasservolumens und der erodierten Sedimentfracht bei Passage eines Filterstreifens simuliert werden kann. Mit einer Simulationsstudie wurden die Wirkungen von mehreren Einstellungen des Modells VFSSMOD auf die Reduktionsleistung untersucht. Dabei zeigen zwei Faktoren eine entscheidende Bedeutung: (i) Die Konzentration des Oberflächenabfluss, das heißt das Verhältnis der Fließbreite des Runoff im Filterstreifen zur Breite des Feldes, auf dem der Runoff entsteht; (ii) die Länge des Filterstreifens (in Fließrichtung des Runoff), üblicherweise als Randstreifenbreite bezeichnet. Für VFSSMOD-Szenarien müssen beide Variablen sehr sorgfältig ausgewählt und begründet werden.

Weiterhin wird darauf hingewiesen, dass die Zuverlässigkeit der multiplen Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009), mit der aus den Ergebnissen von VFSSMOD die Reduktion der Wirkstofffracht im Filterstreifen geschätzt wird, noch nicht hinreichend geklärt ist. Die Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) scheint zwar - nach den bislang vorliegenden Ergebnissen - nicht fundamental fehlerhaft und für den Zweck der regulatorischen Risikoabschätzung im Tool GERDA Step 4 nutzbar zu sein (insbesondere in Anbetracht der Tatsache, dass derzeit keine alternative Berechnungsmethode für die Reduktionsleistung von Filterstreifen verfügbar ist). Nach Meinung der Autoren sollten jedoch einige offene Fragen und Unstimmigkeiten noch genauer untersucht werden, bevor VFSSMOD in Verbindung mit der Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) endgültig als Risikomanagementmaßnahme in GERDA Step 4 eingeführt wird.

In Kapitel II.8 wird der Zusammenhang zwischen dynamischen Expositionsprofilen und ökotoxikologischen Effekten untersucht. Mittels des toxikokinetischen-toxikodynamischen (TK-TD) Modells GUTS (General Unified Threshold model of Survival) wurde für eine große Zahl von zufällig generierten Expositionsprofilen die Auswirkung auf die Überlebensrate von unterschiedlichen aquatischen Organismen simuliert. Dabei wurden die Expositionsprofile nach verschiedenen Deskriptoren, die ein (zeitlich hochvariables) Expositionsprofil anhand einer einzigen Größe charakterisieren (z.B. PECmax, Time-Weighted Average (TWA), Area Under the Curve) und der Überlebensrate sortiert. Es zeigt sich, dass das Ranking von Expositionsprofilen nach den beiden Deskriptoren PECmax bzw. AUC (Area Under the Curve) sehr hoch mit dem Ranking der Stärke des modellierten ökotoxikologischen Effekts der betreffenden Expositionsprofile, basierend auf den modellierten Arten bzw. Parameterkombinationen und letalen Effekten, korreliert war. Für einen kleineren Datensatz wurden Effekte auf die Reproduktion oder die Populationswachstumsrate untersucht, die die Ergebnisse mit GUTS bestätigten.

Kapitel II.9 versucht eine orientierende Einschätzung zu geben, inwiefern die Expositionen, die in den vorliegenden Higher Tier-Effektstudien im aquatischen Bereich (insbesondere Mesokosmen) typischerweise realisiert werden, den zeitvariablen Expositionsmustern entsprechen, die von der Expositionsmodellierung (wie bspw. FOCUS oder GERDA) vorhergesagt werden. Ein Abgleich von konkreten GERDA-Prognosen mit den Ergebnissen einer realen Mesokosmenstudie wurde allerdings nur für ein Beispiel durchgeführt. In der Regel werden in Mesokosmenstudien bisher nur ein einzelnes bis wenige Eintragsereignisse gleicher Höhe abgebildet. Die realisierten Expositionsmuster der Studien für verschiedene Wirkstoffe ähneln daher den durch reine Drifteinträge zu erwartenden, da sie nur durch Anzahl und Intervall der Applikation und die Abbaurrate der Substanz im Mesokosmos (DT50) bestimmt werden.

Kapitel II.10 gibt zunächst eine Übersicht, welche FOCUSsw Runoff- und/oder Drainage-Szenarien (bzw. gegebenenfalls welche Alternativen) in den nationalen Zulassungsverfahren der EU-Mitgliedstaaten für die Expositionsabschätzung und -bewertung derzeit zugrunde gelegt werden. Weiterhin sind Optionen zusammengestellt, mit denen im Step 4 des FOCUSsw-Ansatzes die Realitätsnähe eines Szenarios verbessert und die Effekte von Minderungsmaßnahmen einbezogen werden könnten.

In Kapitel II.11 wird anhand einer PSM-Monitoringstudie von Bereswill und Schulz (2011) in zwei landwirtschaftlich genutzten Gebieten in Deutschland exemplarisch dargestellt, welche Aussagen aus einem derartigen Nachzulassungsmonitoring für das Zulassungsverfahren möglicherweise abgeleitet werden können.

1.2 Kritische Bestandsaufnahme der Bewertungsinstrumente FOCUS Surface Water (Step 3) und EXPOSIT

Die Bewertung der Gewässerexposition durch die Anwendung von PSM-Wirkstoffen basiert auf EU-Ebene auf den Ansätzen der FOCUS Working Group on Surface Water Scenarios (FOCUS, 2001). FOCUS hat dafür ein gestuftes Verfahren zur Berechnung von PECs in Oberflächengewässern entwickelt. In der ersten, stark vereinfachenden Stufe (Step 1) wird der Gewässereintrag eines PSM während der Applikation als einmalig stattfindender Gesamteintrag ausgewiesen. In der zweiten Stufe (Step 2) werden, basierend auf dem zeitlichen Anwendungsmuster eines PSM, realitätsnähere Gewässereinträge angenommen, jedoch fehlen spezifische Szenarienbeschreibungen. In der dritten Stufe (Step 3) werden schließlich mit Hilfe der Modelle PRZM, MACRO und TOXSWA die Gewässereinträge durch Drift, Runoff & Erosion sowie Drainage und die resultierenden PECs detailliert für sogenannte „realistic worst case“-Szenarien berechnet. Diese Szenarien sollen realistische Kombinationen von Boden, Klima, Anwendungssituationen und Gewässerkörpern innerhalb der EU abdecken. In Step 4 (SWAN) werden zusätzlich die Effekte von Minderungsmaßnahmen berücksichtigt.

Die FOCUS Methodologie ist in der Vergangenheit von verschiedenen Seiten kritisiert worden, wurde bislang aber noch niemals einer systematischen kritischen Bestandsaufnahme unterzogen (vgl. EFSA, 2013b). Das Gleiche gilt für die Ansätze des Modells EXPOSIT (UBA, 2011), das seit 2001 im deutschen Zulassungsverfahren für die Bewertung der Gewässerexposition verwendet wird.

In der Expositionsbewertung mittels FOCUS_{sw} Step 3 soll die Variationsbreite der in Deutschland vertretenen Bodentypen durch fünf FOCUS_{sw}-Bodenszenarien repräsentiert werden (R1, R2, R3, D4, D6, bezogen auf die ackerbaulich relevante Fläche in Deutschland; s. Kap. II.1.5). Laut FOCUS_{sw} Report (FOCUS 2003) erfüllen diese Szenarien die Anforderung von worst-case Situationen, ohne dass jedoch diese Hypothese von der FOCUS Arbeitsgruppe bislang methodisch überzeugend belegt worden wäre.

Am Anfang der Untersuchung steht daher eine kritische Bestandsaufnahme der methodischen Ansätze der Bewertungsinstrumente FOCUS_{sw} und EXPOSIT. Mit dieser Bestandsaufnahme sollen

- Schwachstellen und Verbesserungsbedarf in den Prozessbeschreibungen in FOCUS_{sw} und EXPOSIT aufgezeigt werden,
- die sensitivsten Parameter und Variablen der Modelle PRZM und MACRO sowie des FOCUS_{sw}-Gesamtansatz identifiziert werden (Sensitivitätsanalysen), und
- die Repräsentativität der Boden- und Klimaeigenschaften der FOCUS_{sw} Szenarien für die Landwirtschaftsfläche in Deutschland ausgewertet werden.

Im Rahmen der Entwicklung eines neuen Bewertungsinstrumentes für das deutsche Zulassungsverfahren sollen diese Ergebnisse dazu dienen, Fehler und Inkonsistenzen des FOCUS-Ansatzes zu vermeiden und die wissenschaftliche Basis der Expositionsmodellierung zu verbessern.

Das Vorgehen und die Ergebnisse werden ausführlich in Kap. II.1 (Flächenanalyse Deutschland – Bodeneigenschaften), Kap. II.2 (Flächenanalyse Deutschland – Klimaelemente), Kap. II.4 (Prozessbeschreibungen) und Kap. II.5 (Sensitivitätsanalysen) beschrieben.

1.2.1 Bewertung der Prozessbeschreibungen in FOCUSsw und EXPOSIT

Bei dem Tool **EXPOSIT** handelt es sich nicht um ein Modell im engeren Sinne, sondern eher um ein Regelwerk: Es werden keine Prozesse simuliert (abgesehen von der PSM-Abbau in den ersten drei Tagen nach Applikation), sondern es wird ausschließlich mit fixen Regeln und Verlustfaktoren gearbeitet. Die Faktoren Klima (Wetter) und Boden werden überhaupt nicht und die Substanzeigenschaften nur unzureichend berücksichtigt. Weiterhin wird ein konstanter Verdünnungsfaktor 2 (unabhängig vom zufließenden Wasservolumen) eingeführt, für den keine Begründung bzw. Interpretation gegeben wird. Der Ansatz, mit dem der relative PSM-Austrag über Oberflächenabfluss nach Reichenberger et al. (2007a) in EXPOSIT verwendet wird, führt außerdem zu einer leichten Unterschätzung der Austräge für relativ schnell abbauende Verbindungen, weil die Abbau auf der Applikationsfläche zwischen Applikation und Austragsereignis zweimal veranschlagt wird: einmal explizit in den Berechnungen im EXPOSIT-Excel-Sheet und einmal implizit in den prozentualen Wirkstoff-Austrägen, ausgewertet von Reichenberger et al. (2007a).

Die Einteilung in vier Gefährdungsgruppen zur Bestimmung der Drainageausträge in EXPOSIT deckt nicht den gesamten Parameterraum ab, der von den drei Parametern Koc, DT50 und Wasserlöslichkeit aufgespannt wird. Die Einordnung eines bestimmten Wirkstoffs in eine Klasse ist also nicht immer eindeutig möglich. Abgesehen davon ist der Parameter Wasserlöslichkeit redundant: Die Wasserlöslichkeit eines Wirkstoffs spielt für sein Sorptionsverhalten im Boden im Freiland normalerweise keine Rolle, da sich die Konzentrationen eines Wirkstoffs in der Bodenlösung meistens weit unterhalb der Löslichkeitsgrenze bewegen.

Insgesamt gesehen wird mit EXPOSIT nicht simuliert, sondern es werden PEC-Werte „gesetzt“. Die regulatorische Treffsicherheit (s. Kap. I.2.5) von EXPOSIT ist daher gering, wobei mutmaßlich in größerem Umfang sowohl falsch negative als auch falsch positive Ergebnisse auftreten können.

Im Vergleich zu EXPOSIT werden im Ansatz von **FOCUSsw** Step 3 wesentlich mehr Pesticide-Fate-Prozesse berücksichtigt und mittels unterschiedlicher Modellansätze (physikalisch basiert, empirisch, konzeptionell) abgebildet. Für diese Modellansätze wurden im Einzelnen die im Folgenden aufgeführten Defizite bzw. Verbesserungsbedarf identifiziert (s. a. Kap. II.5.6). Im Rahmen des hier vorgestellten Projekts konnten allerdings nicht alle identifizierten (möglichen) Schwachstellen auch vertieft untersucht und dafür Verbesserungsansätze entwickelt werden.

- In FOCUSsw wird nicht die gesamte Simulationszeitreihe von MACRO (7 1/3 Jahre) bzw. PRZM (20 Jahre) an TOXSWA weitergegeben und zur PECsw-Berechnung verwendet, sondern nur eine Periode von 16 bzw. 12 Monaten. Diese Zeitfenster sind nach Ansicht der FOCUSsw Working Group repräsentativ für den jeweiligen gesamten Zeitraum, was jedoch von Klein (2007) widerlegt worden ist. Die Verwendung nur eines kurzen, willkürlich ausgewählten Ausschnitts der MACRO- bzw. PRZM-Output-Zeitreihe stellt daher einen gravierenden Schwachpunkt des FOCUSsw Ansatzes dar.
- Die Implementierung des SCS Curve-Number-Ansatzes in PRZM ist konzeptionell nicht korrekt (ebenso wie in anderen Modellen wie bspw. EPIC oder SWAT). Der Curve-Number-Ansatz (CN-Ansatz) wurde in den 1960er und Anfang der 1970er Jahre vom USDA Soil Conservation Service (SCS) zur Vorhersage von Abflussspitzen in kleinen Gewässern entwickelt (Soil Conservation Service, 1972). Mit dem CN-Ansatz wird eigentlich *nicht* der Ober-

flächenabfluss berechnet, sondern der *Direktabfluss* im Gewässer (= Gewässerabfluss minus Basisabfluss). In PRZM wird der vom CN-Ansatz vorhergesagte "runoff" (im Sinne von Direktabfluss) fälschlicherweise als Oberflächenabfluss („surface runoff“) interpretiert (vgl. Garen and Moore, 2005). In Verbindung mit der von FOCUS gewählten Parametrisierung der Curve Numbers führt dies zu einer Überschätzung des Oberflächenabfluss und damit auch des Bodenabtrags in FOCUSsw. Dies führt wiederum zu einer Überschätzung des gelösten bzw. partikulär gebundenen Wirkstoffaustrags. Allerdings wird die Überschätzung des Bodenabtrags durch den folgenden Punkt wieder mehr als kompensiert.

- FOCUSsw beschränkt die Fläche, die Erosionseinträge ins Gewässer liefert, auf einen 20 m breiten Korridor in Nachbarschaft zum Gewässer (FOCUSsw pond bzw. stream). Dies wird damit begründet, dass erodiertes Sediment beim Transport über längere Distanzen dazu neigt, wieder abgelagert zu werden. Die von PRZM verwendeten MUSLE- und MUSS-Gleichungen zur Erosionsberechnung beinhalten jedoch bereits Deposition (Williams, 1975). Eine zusätzliche (doppelte) Berücksichtigung der Sedimentdeposition ist daher konzeptionell falsch. Die Konsequenz ist eine systematische Unterschätzung der PSM-Erosionseinträge in die FOCUSsw-Wasserkörper, was allerdings nur für stark sorbierende Substanzen von Bedeutung ist.
- Die Konzentration infolge von Drift-Eintrag hängt maßgeblich vom Breite/Tiefe-(B/T)-Verhältnis eines Gewässers ab. Im FOCUS Gewässerszenario stream hat B/T den Wert 3,3 : 1. Eine Literaturrecherche (Kubiak et al., 2014) für Deutschland (und einige Nachbarländer) zeigt, dass der Median des B/T-Verhältnisses von frei fließenden Gewässern in der Größenordnung von etwa 10 : 1 liegt (s. Tab. II.3-3). Die Verdünnung von Drift-Einträgen ist in der Realität somit im Mittel ca. um den Faktor 3 geringer im Vergleich zur Annahme des FOCUS Szenario.
- Der Konzentrationspeak im Gewässer infolge von Runoff-Einträgen wird aufgrund der Modellkoppelung PRZM-TOXSWA möglicherweise für Starkniederschläge zu niedrig berechnet. PRZM-Berechnung und -Ausgaben erfolgen mit Zeitschritt 1 d; TOXSWA (und ebenso STEPS) benötigt dagegen stündlichen Input und produziert stündlichen Output (Einzelheiten s.a. Kap. I.3.6). Die PRZM-Tageswerte zu Runoff-Volumen und Wirkstoff-Austrag (egde-of-field) müssen daher in stündliche Werte gewandelt werden. Dazu wird (programmintern) zunächst der Tagesniederschlag durch eine (fixe) Niederschlagsintensität von 2 mm/h dividiert, das Ergebnis definiert die Dauer des Runoff-Ereignisses (in Stunden). Anschließend wird die Runoff-Höhe durch diese Zeitdauer geteilt und damit die Runoff-Intensität für TOXSWA festgelegt (Bsp.: für einen 18 mm Tagesniederschlag berechnet PRZM 4,1 mm Runoff, 18 mm dividiert durch 2 mm/h = 9 h Runoff-Dauer, daraus ergibt sich als Modell Eingang für TOXSWA eine Runoff-Höhe von 4,1 mm / 9 h = 0,46 mm/h Runoff von Mitternacht bis 9 Uhr; s. EFSA, 2013b, p. 66). Sedimentfracht und Wirkstoffeintrag werden analog aufgeteilt.

Tatsächlich sind sommerliche Gewitter-Starkregen im Regelfall jedoch von deutlich kürzerer Dauer und der dadurch verursachte Abfluss auf der Landoberfläche durch Infiltrationsüberschuss (Hortonian Runoff) ist gleichfalls wesentlich kürzer. Der Wirkstoffeintrag über Hortonian Runoff in einen Gewässerabschnitt findet daher oftmals nur über eine Zeitspanne von wenigen Stunden statt. Im Gewässer stellt sich dadurch eine höhere Konzentration ein als nach TOXSWA berechnet, die aber über eine kürzere Zeitspanne wirkt, da auch der

Weitertransport durch das Fließen des Gewässers schneller stattfindet als nach TOXSWA-Annahmen. Für Stoffeinträge über saturation excess runoff (Oberflächenabfluss durch Sättigungsüberschuss siehe Kap. II.2.2.2.2) erscheint die im FOCUS-Ansatz berechnete Zeitspanne für den Eintrag realistischer.

- Wirkstoff-Eintrag über den Expositionspfad Zwischenabfluss (Interflow) wird bislang weder von EXPOSIT noch von FOCUSsw berücksichtigt.
- Die Auswahl des Driftperzentils bei Mehrfachapplikationen erfolgt in FOCUSsw (und auch in EVA) so, dass für die einzelne Applikation ein geringeres Perzentil verwendet wird. Die Anwendung als Summe der Einzelapplikationen stellt dann das 90. Perzentil für Spraydrift einträge dar. So wird bei einer Anwendung mit zwei Applikationen das 82. Perzentil eingestellt, bei 3 Applikationen in einer Anwendung das 77. Perzentil usw. (siehe FOCUS 2001, Kapitel I.5.4). Für Wirkstoffe, die schnell im Wasser abbauen, kann in Abhängigkeit vom Applikationsintervall eine Einzelanwendung mit dem 90. Perzentil für Spraydrift anstelle einer x-fachen Applikation mit einem geringeren Perzentil zu höheren PEC-Werten in Oberflächengewässer führen. Das heißt, die Einzelapplikationen werden als unabhängig voneinander betrachtet. Dies erfordert bei Mehrfachapplikationen immer zwei PEC-Berechnungen mit dem FOCUSsw-System. In einer PEC-Berechnung wird die Einfachapplikation für alle Eintragspfade mit dem 90. Perzentil für Spraydrift eingestellt, eine weitere PEC-Berechnung erfolgt als Mehrfachapplikation für alle Eintragspfade und mit dem geringeren Perzentil für Spraydrift einträge. Das heißt, es wird geprüft, ob die Berechnung mit $1 \times 90.$ Perzentil zu höherer PEC_{max} führt als mit $2 \times 82.$ Perzentil mit Abbau zwischen den Anwendungen; die höhere der beiden PEC_{max} wird dann in die Bewertung eingestellt.

1.2.2 Sensitivitätsanalysen

Die Begriffe Sensitivität, Variabilität und Unsicherheit von Parametern werden häufig missverständlich verwendet bzw. verwechselt und sollen daher nachfolgend zunächst kurz präzisiert werden.

Eine Sensitivitätsanalyse untersucht, wie die Variation im Output eines Modells auf die Variationen der verschiedenen Modellinputs zurückgeführt werden kann. In früheren Untersuchungen wurden Sensitivitätsanalysen meist nach der Methode "ein Faktor auf einmal" (one at a time) durchgeführt, bei der für jeden Modelllauf der Wert eines einzigen Parameters verändert wird und alle übrigen Faktoren ihren Wert für ein Basiszenario beibehalten. Dieser Ansatz ist mittlerweile abgelöst worden von varianzanalytischen Verfahren. Unter der *Sensitivität* eines Parameters wird im Folgenden diejenige Varianz verstanden, mit der dieser Parameter zur Gesamtvarianz des Modelloutputs beiträgt (Saltelli et al., 2005).

Die epistemische *Unsicherheit* eines Parameters bezeichnet den Umstand, dass der wahre Wert eines Parameters nicht bekannt ist. Sie resultiert aus unvollständigem Wissen, z.B. infolge eines zu geringen Stichprobenumfangs oder des Fehlens von (Mess-)Werten. Typische Beispiele für epistemische Unsicherheit von Parametern im Zusammenhang mit der Modellierung von PSM in der Umwelt sind fehlende Informationen zur Lagerungsdichte oder zur Bodenstruktur (Auftreten von Makroporen) für ein Bodenprofil.

Die *Variabilität* eines Parameters bezeichnet das Phänomen, dass der Wert eines Parameters im Raum und/oder in der Zeit nicht konstant ist. Typische Beispiele für Parametervariabilität sind die Variabilität von Boden-Textur und -Struktur innerhalb eines Feldes, die Variabilität von

Sorption und Abbaugeschwindigkeit eines Wirkstoffs zwischen verschiedenen Standorten, oder die Variabilität der Empfindlichkeit gegenüber einem Wirkstoff zwischen verschiedenen Spezies einer taxonomischen Gruppe (z.B. Vögeln) oder zwischen verschiedenen Individuen einer Population.

Der Umstand, dass ein Parameter sensitiv ist, impliziert nicht automatisch, dass dadurch ein hohes Maß an Unsicherheit in den Modellergebnissen hervorgerufen wird. Wenn der wahre Wert des Parameters genau bekannt ist, wird der Parameter nur wenig Unsicherheit in den Modellergebnissen produzieren. Beispielsweise ist die Applikationsrate sensitiv, aber in der regulatorischen Expositionsabschätzung nicht unsicher, da vorgegeben. Andererseits verursacht ein Parameter, der unsicher aber wenig sensitiv ist, ebenfalls wenig Unsicherheit in den Ergebnissen. Ein Parameter ist somit wichtig, wenn er zugleich *sensitiv und unsicher* ist.

Für die Expositionsmodellierung hat dies zur Konsequenz, dass (nach Möglichkeit) alle Parameter berücksichtigt werden sollten, die einerseits eine große Variabilität aufweisen *und* andererseits gleichzeitig auch für die Variabilität der Zielgröße erheblich sind. Dies kann z.B. mittels Simulation verschiedener Szenarien oder Faktorkombinationen erreicht werden.

1.2.2.1 Sensitivitätsanalyse für das Modell PRZM

Die Sensitivitätsanalyse der Modellparameter von PRZM fasst die Untersuchungen von FEMVTF (2001), Reichenberger (2005) und Reichenberger et al. (2007a) mit folgenden Ergebnissen zusammen.

- Die Varianz der Zielgrößen (maximaler täglicher PSM-Austrag über Runoff bzw. Erosion), die durch die interannuelle Variabilität des Wetters verursacht wird, ist bei weitem größer als die Varianz, die aus der Wahl des FOCUSsw Klimaszenarios resultiert. Daraus folgt, dass es vorteilhafter ist, weniger (Klima-)Szenarien zu rechnen, aber so viele Wetterjahre wie möglich für jedes (Klima-)Szenario.
- Für den Austragspfad Runoff ist außerdem die Unsicherheit, die durch die jährliche Variabilität des Wetters verursacht wurde, größer als die Unsicherheit, die von den variierten sensitiven Modellparametern Curve Number, Koc, Gehalt an organischem Kohlenstoff und Freundlich-Exponent verursacht wird. Für den Pfad Erosion sind die Größen der beiden Unsicherheitsquellen vergleichbar. Es ist daher stets zu berücksichtigen, dass die nicht-parametrische Sensitivität (d.h. die Sensitivität bedingt durch die Treibervariablen des Modells) in Bezug auf PSM-Austräge über Oberflächenabfluss und Erosion in PRZM mindestens ebenso groß ist wie die parametrische Sensitivität.
- Die sensitivsten Parameter in PRZM in Bezug auf den maximalen täglichen PSM-Austrag über Oberflächenabfluss und Erosion sind
 - die Curve Number während der Anbauperiode (da PSM-Applikation meist während oder kurz vor dieser Periode erfolgt);
 - das Applikationsdatum (präziser: die Zeitdauer zwischen Applikationszeitpunkt und dem ersten signifikanten Runoff-Ereignis);
 - die Parameter, die die Adsorption steuern (Koc, Freundlich-Exponent, Gehalt an organischem Kohlenstoff);
 - nur für Erosion: die Faktoren, die die Größe von Erosionsereignissen steuern (von diesen wurde nur die Hangneigung in dieser Analyse berücksichtigt).

- Um der interannuellen Variabilität des Wetters und der stochastischen Natur der Zeitdauer zwischen Applikationszeitpunkt und dem ersten signifikanten Niederschlagsereignis Rechnung zu tragen, sind mutmaßlich 10 Simulationsjahre das absolute Minimum. Eine Modulation z.B. mit verschiedenen Applikationsraten in verschiedenen Jahren ist mit einer Simulationsperiode von beispielsweise 10 Jahren nicht möglich und würde mindestens 20- oder 30-jährige Wetterzeitreihen erfordern.

Die Identifikation der sensitiven Klimavariablen für das Modell PRZM wird im Kap. II.2.2 ausführlich erläutert.

1.2.2.2 Sensitivitätsanalyse für das Modell MACRO

Die Sensitivität der Modellparameter von MACRO 4.3 ist bereits in früheren Studien untersucht worden (Dubus et al., 2003a; Dubus and Brown, 2002). Für MACRO sind darüber hinaus auch die für den Drainageausstrag entscheidenden Wettercharakteristiken ermittelt worden (Nolan et al., 2008).

- Die Parameter, die die Sorption und den Abbau eines Wirkstoffs bestimmen, sind immer sensitiv.
- Weiterhin gibt es eine Reihe von sensitiven hydraulischen Parametern:
 - Der Einfluss der hydraulischen Parameter steigt mit zunehmendem Auftreten von Preferential Flow (bevorzugte Fließwege) und zunehmender Adsorption der chemischen Substanz.
 - Drei der fünf sensitivsten hydraulischen Parameter beschreiben die Grenze oder den Austausch zwischen den beiden Fließdomänen (Mikroporen und Makroporen).
- Um der interannuellen Variabilität des Wetters und der stochastischen Natur der Zeitdauer zwischen Applikationszeitpunkt und dem ersten signifikanten Niederschlagsereignis Rechnung zu tragen, sind 10 Simulationsjahre das absolute Minimum. Eine Modulation z.B. mit verschiedenen Applikationsraten in verschiedenen Jahren ist mit einer Simulationsperiode von 10 Jahren nicht möglich und würde mindestens 20- oder 30-jährige Wetterzeitreihen erfordern.

Die Identifikation der sensitiven Klimavariablen für das Modell MACRO wird im Kap. II.2.1 ausführlich erläutert.

1.2.2.3 Sensitivitätsanalyse für den FOCUSsw Gesamtansatz

Ergänzend zur Auswertung der publizierten Sensitivitätsanalysen für die Modelle PRZM und MACRO wurde für den gesamten Ansatz der Expositionsbewertung nach FOCUSsw weitere Sensitivitätsanalysen nach der „Morris Sensitivity Screening“-Methode durchgeführt (Morris, 1991; modifiziert von Campolongo et al., 2007). Zielgrößen waren für EXPOSIT die „PEC initial Graben“ (PEC_{sw,max}) und für FOCUSsw die vier Variablen (i) PEC_{max,sw}, (ii) TWAC_{sw}, (iii) PEC_{max,sed} und (iv) TWAC_{sed}. Dabei bezeichnen die beiden Variablen PEC_{max} jeweils das globale Maximum (Stundenwert) der Konzentration; die beiden Variablen TWAC bezeichnen die Time Weighted Average-Konzentrationen für die Perioden 1, 2, 4, 7, 14, 21, 28, 42, 50 und 100 Tage; jeweils in der Wasserschicht sowie im Sediment des Gewässer. Aus diesen Sensitivitätsanalysen sind folgende Schlüsse zu ziehen (ausführliche Darstellung s. Kap. II.5.4).

- Die Applikationsrate ist immer einer der sensitivsten Faktoren (was zwar selbstverständlich ist, bei der Einschätzung der relativen Bedeutung der anderen Faktoren aber stets mit bedacht werden sollte).
- Mit wenigen Ausnahmen ist im FOCUS-Ansatz die Wahl des Szenarios immer einer der sensitivsten Faktoren. Die Wahl des Szenarios als Kombination von Boden und Klima beinhaltet die Szenario-Parametrisierung (Boden, Basisabfluss, Kulturtermine etc.) und die Wetterzeitreihe.
- Mit einer Ausnahme tritt der Sorptionskoeffizient (K_{oc}) stets unter den fünf sensitivsten Faktoren auf.
- Die Abbauhalbwertszeit im Boden spielt im Mittel eine geringere Rolle als der K_{oc} -Wert, sie hat in den FOCUS Drainage-Szenarien eine höhere Sensitivität als in den FOCUS Runoff & Erosion-Szenarien.
- Die Abbauhalbwertszeiten in Wasser und Sediment sind im Allgemeinen weniger sensitiv als die Abbauhalbwertszeit im Boden.
- Die Sensitivität der in FOCUS Step 3 fixierten Szenarioparameter (Anteil behandelter Fläche im upstream catchment, organischer Kohlenstoffgehalt im Boden, Breite der Wasseroberfläche, Wehrhöhe im TOXSWA-Graben) ist z.T. erheblich. Dies wirft die Frage nach der Variabilität und Unsicherheit dieser Faktoren in der Realität sowie nach der Relevanz und Repräsentativität der FOCUS-Szenarien in Bezug auf die Charakteristika von Gewässer und Einzugsgebiet auf.
- Die Simulationsperiode für TOXSWA ist viel zu kurz und nicht repräsentativ für langjährige Zeitreihen. Es ist nicht möglich, mit 12 bzw. 16 Monaten Simulationsperiode die interannuelle Variabilität des Wetters, insbesondere kurz nach der Applikation, angemessen zu erfassen. Tatsächlich liefern die in FOCUS gewählten Simulationszeiträume, im Vergleich zu anderen Perioden aus den gesamten MACRO- und PRZM-Zeitreihen, eher vergleichsweise niedrige PSM-Austräge. Dies ist bereits aus Untersuchungen von Klein (2007) bekannt; bspw. ist die PEC_{max} desjenigen Klimajahres, das im FOCUSsw R3-Szenario aus der PRZM-Simulationsreihe der Jahre 1975 – 1994 für die Bewertung ausgewählt wird (für Applikationszeitraum Oktober bis Mai: 1980), erheblich niedriger als das 90. Perzentil der PEC_{max} dieser 20-jährigen Reihe.
- Die derzeitige Version von TOXSWA (FOCUS_TOXSWA 2.2.1) ist nur in einem relativ engen Parameterraum und nur für einzelne Jahre aus der 20-jährigen PRZM-Simulationszeitreihe stabil. Am stabilsten ist ein Verhältnis Breite/Wehrhöhe von ca. 2,5 – 3; Anwendungen von TOXSWA auf Fließgewässer mit Breite-Tiefe-Verhältnis ca. >4 und/oder ohne Stauregelung sind mit der vorliegenden Version 2.2.1 nicht möglich. Mehrere PRZM-Jahresreihen enthalten Runoff-Peaks mit einem hohen Abflussvolumen. Infolge dessen tritt in TOXSWA eine zu hohe Fließgeschwindigkeit auf, die aufgrund numerischer Instabilität des Programms zum Absturz führt. Mit anderen Worten, die 20 Jahre, die man eigentlich simulieren müsste, um belastbare Ergebnisse zur Häufigkeitsverteilung der PEC zu erhalten, können in FOCUS mit TOXSWA gar nicht gerechnet werden (zumindest nicht mit allen Szenarien).

I.2.3 Repräsentativität der Boden- und Klimaeigenschaften der FOCUSsw Szenarien für Deutschland

I.2.3.1 Bodeneigenschaften

Für die Bewertung des Modellierungskonzeptes FOCUSsw ist nicht ein hoher Flächenanteil der Szenarien maßgebend, sondern deren Protektivität oder „worst case-ness“ im Hinblick auf den Faktor Bodeneigenschaften. Zur Bewertung der Repräsentativität der Böden in Deutschland wurden alle in der Bodenübersichtskarte Deutschland 1:1.000.000 (BUEK1000; BGR 2007) vorkommenden Bodenformen in FOOTPRINT Soil Types (FST) klassifiziert (Einzelheiten s. Kap. A2). Mit dem Klassifikationssystem der FST sind alle landwirtschaftlich relevanten Bodentypen für die Modelle MACRO und PRZM parametrisiert. Für die PSM-anwendungsrelevante Fläche in Deutschland (Ackerland und Sonderkulturen) wurden 102 verschiedene FSTs ermittelt, von denen 36 potenziell gedrängt sind. Parallel wurden die Böden der 10 FOCUSsw Szenarien in FSTs klassifiziert.

Die Einordnung der FSTs der FOCUS Runoff- und Drainage-Szenarien bzgl. ihrer Flächenrepräsentanz und ihrer „worst case-ness“ für Deutschland wird zusammenfassend wie folgt bewertet (anhand ihrer Suszeptibilität für Drainage, Oberflächenabfluss und Erosion):

- Von den 10 FOCUSsw-Bodenszenarien sind nur 6 in der ackerbaulich relevanten Fläche Deutschlands vertreten (R1, R2, R3, D4, D6) und bilden rund 20 % der ackerbaulich relevanten Fläche in Deutschland ab.
- Davon erreichen nur D4 mit 6,23 % und R3 mit 11,23 % einen nennenswerten Flächenanteil (der jedoch teilweise auf eine systematische Verzerrung zugunsten bestimmter FSTs in der Klassifikationsprozedur beruht).
- Für den Eintragspfad Drainage gibt es hinsichtlich der Bodeneigenschaften kein worst-case FOCUSsw-Bodenszenario für Deutschland bezogen auf die in Deutschland ackerbaulich relevante Fläche. Die Böden der Szenarien D4 und D6 sind hinsichtlich ihrer Bodeneigenschaften (Textur, OC-Gehalt, Lagerungsdichte, Struktur) als „intermediate case“ für Drainage für die in Deutschland ackerbaulich relevante Fläche zu betrachten.
- Für den Eintragspfad Runoff sind die FSTs, die den in Deutschland vorkommenden FOCUS-Runoff-Szenarien R1 und R3 zugeordnet sind, hinsichtlich ihrer Bodeneigenschaften nicht worst case für Oberflächenabfluss, sondern oberes Mittelfeld (also eher "realistic" worst case). Die in FOCUS verwendete Parametrisierung mit Soil Hydrologic Group C macht aus FOCUS R1 und R3 jedoch einen worst case bezogen auf die in Deutschland ackerbaulich relevante Fläche. Der dem Szenario FOCUS R2 entsprechende FST L11h ist eigentlich ein „best-case“ in Bezug auf Oberflächenabfluss (sandig, frei entwässernd und humos). Die FOCUS-Parametrisierung mit Soil Hydrologic Group B-C macht aus R2 allerdings einen „realistic worst case“ für Deutschland.
- In Bezug auf den Eintragspfad Erosion stellt der Boden des Szenarios R1 einen worst case bezogen auf die in Deutschland ackerbaulich relevante Fläche dar.
- Grundsätzlich ist zu beachten: dass eine Repräsentativitätsanalyse für den Faktor Boden allein keine Aussage zur Repräsentativität oder Protektivität der Boden-Klima-Szenarien

der FOCUS SW Szenarios und der damit berechneten PEC liefern, da die PEC nicht linear von den Ausprägungen der Faktoren abhängen (siehe auch Kap. I.2.6).

I.2.3.2 Klimaelemente

Für die Bewertung der Faktors Klima wurde zunächst die räumliche Verteilung von 19 Klimavariablen in Deutschland GIS-basiert analysiert, die für die Verlagerung von Pflanzenschutzmitteln in Oberflächengewässer über die Eintragspfade Drainage, Runoff und Erosion maßgeblich sind (10 Klimavariablen relevant für Modellierung Runoff und Erosion mit PRZM, 8 Klimavariablen für Modellierung Drainage mit MACRO). Über eine Hauptkomponentenanalyse (drei Achsen) der Klimavariablen in Verbindung mit einer anschließenden Clusteranalyse wurden zwölf Klimacuster für die Flächen mit Ackerland und Sonderkultur in Deutschland ausgewiesen und jedem Klimacuster eine Referenz-Klimastation des Deutschen Wetterdienstes (DWD) zugeordnet (s. Kap. II.2).

Parallel dazu wurden die Werte der 19 Klimavariablen für die FOCUSsw R- und D-Szenarien ermittelt. Für jedes Szenario kann damit dessen Position im Koordinatensystem der drei Hauptkomponenten-Achsen beschrieben werden und die Euklidische Distanz der FOCUSsw R- und D-Szenarien zu den zwölf Centroiden der Klimacuster kann berechnet werden. Dieses Maß charakterisiert die Repräsentativität der einzelnen FOCUSsw R- und D-Szenarien hinsichtlich des Faktors Klima (respektive der verwendeten Wetterzeitreihe) in Bezug auf die Klimacuster Deutschland.

- Die Euklidischen Distanzen zum Cluster-Centroid sind für die DWD-Referenzstationen in allen Fällen erheblich geringer als die entsprechenden Größen für die R- und D-Szenarien (s. Tab. II.2-24 und -25). Dies verdeutlicht, dass die Wetterzeitreihen dieser Klimastationen wesentlich repräsentativer sind für die Ausprägung des Faktors Klima in Deutschland als die Wetterzeitreihen der vier R- bzw. sechs D-Szenarien im FOCUSsw-Ansatz. Die Szenarien R2, R3 und R4 zeigen ihre geringste Euklidische Distanz zum Clustercentroid von Cluster Nr. 6, welches sich durch eine besonders hohe Anzahl an Starkniederschlagsereignissen auszeichnet. Für das Szenario R1 tritt die kleinste Euklidische Distanz zum Clustercentroid Nr. 11 auf, das eine relativ hohe Anzahl an Starkniederschlägen in der Frühjahrsperiode zeigt. Die Szenarien D3, D5 und D6 sind dem Klimacuster Nr. 10 am nächsten gelegen, das sich durch besonders hohe Temperaturmittelwerte auszeichnet (T_SPR, T_AUT und T_ANN). Die kleinste Euklidische Distanz zum Szenario D1 zeigt Cluster Nr. 8, zum Szenario D2 Cluster Nr. 3 und zu Szenario D4 Cluster Nr. 7. Cluster 3, 7 und 8 weisen im Vergleich zu den anderen Clustern keine auffälligen Ausprägungen der untersuchten Klimavariablen auf.
- Die Repräsentativität eines Szenarios sagt jedoch zunächst nichts aus über dessen Konservativität (worst case-ness), d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass die bewertungsrelevante Zielgröße (PEC-Wert) über- oder unterschritten wird. Von den 8 Klimavariablen, die besonders sensitiv für den Eintragspfad Drainage sind, können die D-Szenarien nur hinsichtlich von zwei temperaturbezogenen Variablen in Bezug auf ihre Konservativität eindeutig eingeordnet werden. D1 und D4 stellen hierbei einen worst case dar im Vergleich zur deutschlandweiten Verteilung, D3, D5 und D6 entsprechen einer best-case Situation und D2 lässt sich nicht eindeutig zuordnen. Bezüglich der niederschlagsbezogenen Variablen, die besonders sensitiv für den Eintragspfad Drainage sind, lässt sich keines der D-Szenarien eindeutig, d.h. durchgängig für alle Variablen, als worst case oder best case einordnen. Dies gilt sowohl für die Kurz- als auch die Langperiode der jeweiligen Szenarien.

- Hinsichtlich der 10 Klimavariablen für Runoff und Erosion zeigen die FOCUS_{sw} Szenarien R2, R3 und R4 fast durchgehend für alle Klimavariablen einen hohen Grad an Konservativität in Bezug auf die Gesamtverteilung in Deutschland. Das R4 Bodenszenario ist jedoch in der ackerbaulich relevanten Fläche in Deutschland nicht vertreten (siehe Kap. I.2.3.1).
- Wie bereits in Kapitel I.2.3.1. (in Bezug auf Faktor Boden) angemerkt ist eine Repräsentativitätsanalyse des Faktors Klima allein nicht geeignet, eine Aussage zur Repräsentativität oder Protektivität der Boden-Klima-Szenarien der FOCUS_{sw} Szenarios und der damit berechneten PEC abzuleiten. Auch aus einer Kombination der Ergebnisse der (getrennten) Repräsentativitätsanalysen für Faktor Boden und für Faktor Klima kann - aufgrund der Nicht-Linearität der berechneten PEC von den Faktorausprägungen - *keine* belastbare Aussage hinsichtlich der Repräsentativität der Boden-Klima-Szenarien *insgesamt* abgeleitet werden (s. a. Kapitel I.2.6).

I.2.4 Standpunkt der EFSA zum FOCUS_{sw} Bewertungsverfahren

Das „Forum for the co-ordination of pesticide fate models and their use“ (FOCUS) begann 1993 auf Initiative der Europäischen Kommission mit der Entwicklung und Vereinheitlichung von Expositionsmodellen zur PEC-Berechnung (focus.jrc.ec.europa.eu). Im Jahr 2008 wurde von der EFSA das Panel on Plant Protection Products and their Residues (PPR) eingerichtet, das für die übergreifende Konzeption und Weiterentwicklung der Risk Assessment Methodik verantwortlich ist. Zu den Aufgaben des PPR gehören auch die Überprüfung und wissenschaftliche Bewertung der eingesetzten Methoden und Verfahren.

Das PPR Panel kommt in seiner Stellungnahme zur Risikoabschätzung für das *Grundwasser* zu folgendem Schluss (EFSA, 2013a): die FOCUS Groundwater Szenarien sind zwar ausreichend, um einen „safe use“ auf der europäischen Ebene zu demonstrieren, jedoch ungeeignet sind für Risikoabschätzungen auf der *nationalen* Ebene:

"Member states need to be aware that the FOCUS scenarios are limited to demonstrating safe use in significant area in the EU; the FOCUS scenarios therefore may not address all the needs of groundwater assessments at the national level. For national assessments, all crops and the entire potential use area must be considered. The use of FOCUS scenarios for national registration purposes would require a thorough investigation of specific parameters (e.g., preferential flow, uncertainty in compound properties, soil pH, etc.) in order to assess whether the protection goals are met." (EFSA, 2013a, p. 7)

Weiterhin wird in EFSA (2013a, p. 10) angemerkt, dass das Verfahren der FOCUS Groundwater Working Group zur Definition von Szenarien nicht den Empfehlungen der EFSA (2012) entspricht. Insbesondere wird kritisiert, dass die Auswahl der Standorte der Szenarien seinerzeit nur auf Basis von Expertenentscheidung vorgenommen wurde, die räumliche Verteilung der relevanten Bodeneigenschaften (hier: Auswaschungsgefährdung) in der EU dafür jedoch nicht analysiert worden war. Nach Meinung der Autoren der hier vorliegenden Untersuchung trifft diese Kritik an den FOCUS Groundwater Szenarien in gleicher Weise auf die FOCUS Surface Water Szenarien zu.

Die Ansätze zur Risikoabschätzung für *Oberflächengewässer* nach FOCUS Surface Water Working Group waren bislang nicht Gegenstand einer Überprüfung durch das PPR Panel. Im Guidance Dokument on Aquatic Ecotoxicology (EFSA, 2013b) äußert sich das PPR allerdings in einer Nebenbemerkung auch zu den Szenarien für Oberflächengewässer:

„The PPR Panel (...) advises to critically evaluate and improve the surface water exposure assessment in the future“ (EFSA 2013b, p. 59).

Explizit wird auch hier Kritik an der unzureichenden geostatistischen Analyse der Standort-eigenschaften bei der Auswahl der Szenarien für die Runoff- bzw. Drainage-Szenarien geäußert:

“However, due to the lack of comprehensive database that characterize most of these agro-environmental parameters at the European level, when [FOCUS_{sw}] scenarios were defined (1997-2003), they were not selected in a rigorous, statistically based manner” (EFSA 2013b, p. 64)

1.2.5 Regulatorische Treffsicherheit der Expositionsermittlung

Der Begriff "regulatorische Treffsicherheit" ist bislang im Zusammenhang mit dem Zulassungsverfahren für Wirkstoffe bzw. Pflanzenschutzmittel weder im internationalen noch im deutschen Bereich definiert worden. Burns (2001) gibt eine Darstellung zu Validierung und Verifikation von Modellen zur Risikoabschätzung (und den darauf aufbauenden Entscheidungen) unter statistischen Gesichtspunkten. Im Rahmen des hier durchgeführten Projekts wird „regulatorische Treffsicherheit“ als die Wahrscheinlichkeit verstanden, die richtige Entscheidung über die Zulassung oder Nichtzulassung eines Produkts zu treffen. In umgekehrter Blickrichtung sind falsche Ergebnisse der Risikoabschätzung, d.h. sowohl falsch positive als auch falsch negative, so weitgehend wie möglich auszuschließen.

Unter einem *falsch positiven* Ergebnis ist zu verstehen, dass ein Produkt zugelassen wird, obwohl das durch seine Anwendung verursachte Risiko für aquatische Lebensgemeinschaften in Wirklichkeit nicht akzeptabel ist und die Schutzziele mit einer unvertretbar hohen Wahrscheinlichkeit verfehlt werden. Ein *falsch negatives* Ergebnis einer Risikoabschätzung bedeutet, dass ein Produkt nicht zugelassen wird, obwohl das durch seine Anwendung verursachte Risiko in Wirklichkeit akzeptabel wäre. Beide Fehler können nicht gleichzeitig minimiert werden. In die statistische Terminologie übersetzt lautet die *Nullhypothese* „Risiko ist akzeptabel, Produkt kann zugelassen werden“. Dem *alpha-Fehler* entspricht dann: "Risiko fälschlich als nicht akzeptabel eingeschätzt und Produkt zu Unrecht *nicht* zugelassen". Dem *beta-Fehler* entspricht: "Risiko fälschlicherweise als akzeptabel eingeschätzt und Produkt zu Unrecht zugelassen" (Tab. I.2-1).

Tab. I.2-1: Entscheidungstabelle zur regulatorischen Treffsicherheit im Zulassungsverfahren (α, β : Wahrscheinlichkeit eines Fehlers der 1. Art/2. Art).

Risiko Entscheidung \ Ökotoxikolog.	Risiko ist akzeptabel	Risiko ist <u>nicht</u> akzeptabel
PSM wird zugelassen	Richtige Entscheidung (1-α)	Falsch positive Entscheidung β
PSM wird <u>nicht</u> zugelassen	Falsch negative Entscheidung α	Richtige Entscheidung (1-β)

Falsch negative Entscheidungen der Zulassungsbehörde sind für Antragsteller und Landwirtschaft unter wirtschaftlichen und agronomischen Gesichtspunkten nicht tolerierbar (und stellen volkswirtschaftlich einen Wohlfahrtsverlust dar). Bei der Festlegung von Expositionsszenarien dürfen daher worst case-Annahmen nicht über ein gewisses Maß hinausgehend kumuliert werden. In der Terminologie der FOCUS-Arbeitsgruppen, ebenso wie im deutschen Zulassungsverfahren, kommt dies im Begriff des "*realistic* worst case"-Szenarios zum Ausdruck, das bei der

Wahl der Randbedingungen als Leitlinie (Szenario-Philosophie) dient: Bei der Definition der Szenarien sind alle Parameter und Randbedingungen so zu wählen, dass nach der Verknüpfung der Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Größen die resultierende Eintrittswahrscheinlichkeit des Ereignisses, z.B. das Perzentil der PEC, noch in einem "realistischen" Bereich liegt.

Für eine quantitative Abschätzung der regulatorischen Treffsicherheit würden Messwerte zur statistischen Häufigkeit der Fälle in allen vier Feldern der Entscheidungstabelle I.2-1 benötigt. Messergebnisse zur Über-/Unterschreitungshäufigkeit des akzeptablen Risiko in realen aquatischen Ökosystemen liegen aber nicht vor (zumindest nicht mit der erforderlichen statistischen Stichprobendichte; vgl. Kap. II.10). Die Über-/Unterschreitungshäufigkeiten, berechnet mit den regulatorischen Szenarien, hängen dagegen von den festgelegten Randbedingungen ab, d.h. sind intrinsische Werte des Zulassungsverfahrens. Die regulatorische Treffsicherheit der Expositionsbeurteilung lässt sich daher derzeit, wenn überhaupt, bestenfalls *qualitativ* beurteilen.

1.2.6 Fazit der Bestandsaufnahme FOCUS Surface Water und EXPOSIT

In der Zusammenschau verdeutlicht die kritische Bestandsaufnahme erhebliche Schwächen und Defizite der Bewertungsinstrumente FOCUS Surface Water (Step 3) und EXPOSIT. Nach Auffassung der Autoren sind – als Konsequenz der hier dargestellten Ergebnisse – weder FOCUSsw Step 3 (mit den derzeit verwendeten Ansätzen) noch EXPOSIT als Werkzeuge für die Risikoabschätzung und –bewertung im deutschen (oder anderen nationalen) PSM-Zulassungsverfahren zu vertreten. Vor diesem Hintergrund kann eine Harmonisierung der nationalen Zulassungsverfahren in der EU auf Basis des FOCUS Surface Water Step 3-Verfahrens *nicht* darin bestehen, für alle EU-Staaten stets die gleichen vier Runoff- und sechs Drainage-Szenarien (oder ausgewählte Szenarien daraus) zu verwenden.

Dies war ursprünglich auch nicht die Intention von FOCUS Surface Water: der Ansatz der vier R- und sechs D-Szenarien wurde zu einer Zeit geringer Rechnerleistungen und fehlender Geo-Datengrundlagen zur Expositionsbeurteilung entwickelt, um für die EU-Wirkstoffprüfung *eine* sichere Anwendung in der EU („one safe use“-Konzept) belegen zu können. Die Prüfung auf EU-Ebene sollte dann später ergänzt werden durch zusätzliche Bewertungsansätze in den nationalen Zulassungsverfahren für PSM-Präparate. Dieser zweite Schritt wurde jedoch nur von sehr wenigen Mitgliedstaaten tatsächlich umgesetzt (s. Kap. II.10.1).

Mittlerweile sind jedoch erhebliche Fortschritte im Bereich der EDV-Kapazitäten für Simulationsrechnungen ebenso wie in der Bereitstellung und den Analysemöglichkeiten von Boden- und Klimadaten zu verzeichnen. Die im Rahmen dieses Projekts durchgeführten Simulationsrechnungen für eine große Zahl an Kombinationen von Boden-, Klima- und Stoffeigenschaften (s. Kap. I.3.2.5) belegen, dass die sogenannte „worst case-ness“, das heißt die Protektivität eines Boden-Klima-Szenarios, *nicht* abgeleitet werden kann aus den Häufigkeitsverteilungen der Boden- bzw. Klimateigenschaften (innerhalb einer räumlichen Bezugseinheit). Für eine wahrscheinlichkeitsbasierte Auswahl von Boden-Klima-Szenarien ist es vielmehr zwingende Voraussetzung, die Verteilung der Zielgröße – hier: die PEC_{max} – zu kennen.

Die Reduktion der großen Vielfalt der in der EU bzw. ihren Mitgliedsstaaten vorkommenden Boden-Klima-Situationen auf nur vier R- bzw. sechs D-Szenarien ist daher nicht länger zu vertreten. Die Simulationsrechnungen im Rahmen des GERDA-Projekts zur räumlich-zeitlichen Verteilung von PEC_{max}-Konzentrationen (s. Kap. I.3.2.5) haben weiterhin gezeigt, dass hinsichtlich der Runoff- und Drainage-Austräge ausgeprägte nicht-lineare Interaktionen zwischen den Fak-

toren Boden, Klima (Wetterzeitreihe) und Wirkstoffeigenschaften auftreten. Die große Bandbreite der „realistic worst case“-Boden-Klima-Situationen für verschiedene Wirkstoffeigenschaften, Kulturen und Applikationstermine kann daher mit einem einzigen Satz von nur vier R- bzw. sechs D-Szenarien nicht adäquat abgedeckt werden.

Die Autoren empfehlen daher, in Zukunft nicht die Szenarien, sondern die *Methodik der nationalen Risikoabschätzungsverfahren* auf der EU-Ebene zu harmonisieren. Dies beinhaltet:

- (i) die Ermittlung von Boden-Klima-Szenarien und Gewässerszenarien spezifisch für jedes Land, mit statistisch abgeleiteter Repräsentativität der Szenarien (bezogen auf die Gesamtfläche der potenziellen Applikationen in einem Land), so wie das im hier vorgestellten Ansatz mit GERDA für Deutschland vorgenommen wird;
- (ii) die Vereinheitlichung der Modellparametrisierung und der Verfahren zur PEC-Berechnung;
- (iii) die Vereinheitlichung der Risikobewertung; und schließlich
- (iv) die einheitliche Bewertung der Wirkung von Risikominderungsmaßnahmen.

1.3. Entwicklung des Instruments GERDA zur Expositionsabschätzung für Oberflächengewässer in Deutschland

1.3.1 Ausgangspunkt

Ausgangspunkt des Verfahrens ist die Prämisse, dass von den existierenden bzw. verfügbaren Modellen die Modelle PRZM und MACRO am besten geeignet und innerhalb der EU akzeptiert sind, um den Transport und den Abbau von Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffen im System Boden-Pflanze abzubilden und den Wirkstoff-Austrag von Anwendungsflächen über Oberflächenabfluss (surface runoff), Erosion und Drainage-Abfluss zu beschreiben. Diese beiden Modelle bilden daher auch im GERDA-Ansatz den Kern der Expositionsabschätzung.

Mit dieser Prämisse bedeutet die Entwicklung des Instruments GERDA zur Expositionsbewertung der Wirkstoffeinträge in Oberflächengewässer in Deutschland über Runoff, Erosion und Drainage im Kern: **Identifikation von Boden-Klima-Szenarien für PRZM- und MACRO-Simulationen spezifisch für Deutschland, die in Bezug auf PSM-Einträge in Gewässer sowie deren ökotoxikologischen Effekte einen ausreichenden Schutz der aquatischen Lebensgemeinschaften sicherstellen**, und die in einem abgestuften Verfahren der Expositionsabschätzung, analog zum FOCUS Surface Water Tool, als Tier 3 eingestellt werden können.

Dafür ist zunächst zu entscheiden, wie der Begriff „ausreichender Schutz“ in ein statistisch basiertes Protektionsniveau, das heißt einen Perzentilwert umgesetzt werden kann (Kap. 1.3.1). Anschließend wird in Kap. 1.3.2 erläutert, wie die räumlich-zeitliche Häufigkeitsverteilungen (CDFs) der expositionsbeschreibenden Konzentrationen PEC_{max} und AUC (Area Under the Curve, Konzentration integriert über ein Jahr) für Deutschland ermittelt wurden. Auf Basis dieser räumlichen Verteilungen (Boden-Klima-Szenarien) und der zeitlichen Variabilität (Wetterzeitreihen) werden anschließend Boden-Klima-Szenarien für die Expositionsbewertung im deutschen Zulassungsverfahren ausgewählt, die einem definierten Perzentil der CDFs entsprechen. Im Zulassungsverfahren für ein neues PSM werden schließlich, auf Basis dieser

ausgewählten Boden-Klima-Szenarien, mit den Modellen PRZM bzw. MACRO und nachgeschaltet STEPS-3 (anstelle von TOXSWA) die Expositionsendpunkte ermittelt (s. Kap. I.3.3).

I.3.1.1 Expositionsabschätzung auf Basis räumlich-zeitlicher Perzentile der PEC

Grundsätzlich lässt sich die worst case-ness der in den FOCUS_{sw}-Szenarien verwendeten Boden-Klima-Kombinationen in der Praxis nicht *a priori* ermitteln. Eine zuverlässige Aussage über die Protektivität eines Boden-Klima-Szenarios ist *nicht* möglich anhand der Perzentile der Modell-Inputvariablen zu Boden bzw. Klima, die aus Häufigkeitsverteilungen (CDF) für einzelne Variable der Wetterzeitreihe bzw. für die Bodeneigenschaften des betreffenden Boden-Klima-Szenarios ermittelt werden.

Eine statistisch basierte, überprüfbare Festlegung des aquatischen Schutzniveaus, das mit einem Szenario gewährleistet werden soll, kann nur auf Basis der räumlichen und zeitlichen *Häufigkeitsverteilung der Zielgröße PEC* erfolgen, das heißt auf Basis der aus dem Szenario resultierenden Grundgesamtheit aller Gewässer- bzw. Sedimentkonzentration, bezogen auf das gesamte Territorium, das im Zulassungsverfahren reguliert wird, und bezogen auf eine längere Zeitreihe.

Die Entwicklung eines Zulassungsverfahrens mit definierter, statistisch beschreibbarer Über- bzw. Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Expositionsendpunkts würde daher im Idealfall erfordern, PEC_{sw} und PEC_{sed} für einen gegebenen Wirkstoff für *sämtliche* Boden-Klima-Szenarien innerhalb des Territoriums für eine lange (Wetter-)Zeitreihe zu berechnen und daraus die CDFs der Expositionsbewertungsgrößen zu ermitteln. Aus der (flächenbezogenen) CDF einer Zielgröße könnte dann, für ein gegebenes Perzentil, der gesuchte Expositionsendpunkt abgegriffen werden. Ein Beispiel für dieses Verfahren ist der Ansatz von Proziris (Burns et al., 2014), der sich allerdings auf ein Rechner-Cluster mit 160 Quad-Core-Rechnern stützt.

Der beschriebene Idealfall bedeutet in der Praxis jedoch (zumindest auf absehbare Zeit) einen unvermeidbar großen Rechenzeitaufwand, wenn mit einer Stand-alone-Anwendung des Tools zu Expositionsbewertung gearbeitet werden soll (d.h. wenn kein Rechnercluster zur Verfügung steht), was Vorgabe für die Entwicklung der GERDA-Software war. Für den GERDA-Ansatz wurde daher ein approximatives Vorgehen gewählt (ausführliche Beschreibung s. Kap. I.3.1.5): Die flächenbezogenen kumulierten Häufigkeitsverteilungen der PEC_{sw} sind für 360 bzw. 288 sogenannte „virtuelle PSM“ gerechnet worden, das heißt für gestufte Werte-Kombinationen von Stoffeigenschaften Koc und DT50 sowie Anwendungsmonat und Kulturart (360 Kombinationen für PRZM-Simulationen und 288 für MACRO; s. Tab. I.3-1).

Für ein neu zuzulassendes PSM wird dann für die Expositionsbewertung aus diesem Satz von 360 bzw. 288 vorhandenen CDFs für „virtuelle PSM“ jeweils diejenige CDF ausgewählt, deren Werte für Koc, DT50, Applikationsmonat und Kulturart den tatsächlichen Eigenschaften des zuzulassenden PSM am nächsten kommen. Aus diesen CDFs wird dann jeweils diejenige Boden-Klima-Kombination ausgewählt, die einem gegebenen räumlichen Perzentil entspricht. Mit diesen ausgewählten Boden-Klima-Szenarien wird schließlich mit PRZM und mit MACRO eine 30-jährige Wetterzeitreihe gerechnet. Aus dieser Zeitreihe werden schließlich für ein gegebenes zeitliches Perzentil die expositionsbeschreibenden Konzentrationen (PEC_{max}, TWAC; jeweils für sw und sed) als Endpunkte verwendet (s. Kap. I.3.2).

Ein vom Ansatz her vergleichbares Expositionsszenario für Oberflächengewässer auf Basis von geostatistischen Analysen und probabilistischer Modellierung wurde (nach Stand unserer

Kenntnis der Autoren) erstmals von Tiktak et al. (2012) vorgestellt. Tiktak et al. (2012) analysierten die Verteilung der expositionsrelevanten Eigenschaften der Oberflächengewässer und der Böden in den Niederlanden für die Einträge über Spraydrift und Drainage und ermitteln daraus eine zeitlich-räumliche overall-Verteilung der PEC_{sw} in den niederländischen Gräben (Runoff und Erosion wurden dort nicht berücksichtigt), aus der schließlich das 90-Perzentil als Expositionsendpunkt abgegriffen wird.

1.3.1.2 Festlegung der gewünschten Protektivität der Expositionsabschätzung

Die Festlegung eines Perzentils für den/die Expositionsendpunkte kann aus der Methodik des GERDA-Ansatzes heraus nicht begründet werden. Diese Entscheidung muss von der dafür zuständigen Einrichtung getroffen werden.

Die FOCUS_{sw} Working Group (FOCUS 2007a, 2007b) hat in ihrer Beschreibung zum Risk Assessment für Oberflächengewässer nicht spezifiziert, welcher Perzentilwert für die Gewässer-PEC festzulegen ist, um das Kriterium „one safe use“ für einen Wirkstoff entsprechend der Vorgabe der Verordnung (EG) Nr. 1107/2009 (zuvor Richtlinie 91/414/EWG) zu gewährleisten. In anderen Risikobewertungsverfahren werden zu dieser Frage jedoch Vorschläge gemacht bzw. Festlegungen getroffen.

Für das Grundwasser basiert die Risikobewertung auf dem 90-Perzentil (FOCUS 2000), was vom Ständigen Ausschuss für die Lebensmittelkette und Tiergesundheit (Standing Committee on Plants, Animals, Food and Feed (SCoPAFF), Section *Phytopharmaceuticals - Plant Protection Products - Legislation*) der Europäischen Kommission akzeptiert wurde. Für die Festlegung der Standardwerte zum Drifteintrag in Oberflächengewässer wird von FOCUS_{sw} (2001) ebenfalls das 90-Perzentil der Messergebnisse zur Driftdeposition verwendet. Das EFSA PPR (EFSA 2013a) vermutet daher, dass von FOCUS_{sw} (2001) das 90-Perzentil auch für die Expositionsabschätzung Oberflächengewässer insgesamt zugrunde gelegt worden ist, ohne dass dies explizit gesagt wurde. Diese Ansicht wird gestützt durch zwei Passagen in FOCUS (2001, S. 109): (i) "The various assumptions and 'worst-cases' assessments summarized above show that, for many of the scenario factors that determine the magnitude and duration of pesticide residues in water bodies, a 90th percentile worst-case has been adopted."; sowie (ii) "The highest PEC_{sw} estimates from the ten scenarios are likely to present at least a 90th percentile worst-case for surface water exposure [...]".

Für das Schutzgut Boden schlägt das EFSA PPR vor, das 90-Perzentil der PEC(soil) als regulatorisches Ziel zu verwenden (EFSA 2012). Auch für das jüngst entwickelte nationale Szenario für Spraydrift- und Drainage-Einträge aus Feldkulturen in Oberflächengewässer in den Niederlanden wurde die 90-Perzentil-PEC von den zuständigen Ministerien als Expositionsendpunkt festgelegt (Tiktak et al. 2012).

In der Zusammenschau dieser verschiedenen Setzungen wird daher für die derzeitige Expositionsbewertung zum Schutz der aquatischen Lebensgemeinschaften in Deutschland das *90-Perzentil* als Protektionsniveau vorgeschlagen. Dies soll jedoch dem Ergebnis einer grundsätzlichen Diskussion des Schutzniveaus nicht vorgreifen, die an anderer Stelle (außerhalb dieses Forschungsvorhabens) zu führen ist.

A) Festlegung Perzentil-Zielwert der Expositionsendpunkte

Für das Verfahren GERDA zur Expositionsabschätzung von Oberflächengewässern in Deutschland durch Einträge über Runoff & Erosion sowie Drainage gilt derzeit als **Zielwert** für die Expositionsendpunkte das **90. Gesamt-Perzentil**, bezogen auf die Grundgesamtheit der räumlich-zeitlichen Häufigkeitsverteilung in Deutschland (i.e. 132 000 km² potenzielle Applikationsfläche x 30 Wetterjahre) der Jahresmaxima der Wirkstoffkonzentration im Oberflächenwasser.

Wie in Kap. I.3.1 erläutert, kann (aufgrund des Rechenzeitaufwands) im Zulassungsverfahren für ein neues Pflanzenschutzmittel jedoch nicht der vollständige Satz aller PEC-Werte für sämtliche Boden-Klima-Szenarien Deutschland für eine 30-jährige Zeitreihe berechnet werden. Die Grundgesamtheit ist somit *nicht bekannt* und das 90. Perzentil der räumlich-zeitlichen Häufigkeitsverteilung kann *nicht exakt* bestimmt werden. Aufgrund dieser Einschränkung wird daher für das Zulassungsverfahren festgelegt:

B) Festlegung Perzentile der Randverteilungen

Für das Zulassungsverfahren werden (hilfsweise) das **80. Perzentil** der "Randverteilungen", das heißt die Häufigkeitsverteilungen (i) der Boden-Klima-Kombinationen sowie (ii) der Wetterzeitreihe 1982 – 2011 verwendet. Expositionsendpunkte sind die Konzentrationen annualPEC_{max,sw}, annualPEC_{max,sed}, annualAUC_{sw} und annualAUC_{sed}, die

- dem sechst-höchsten Wert aus 30 Jahresmaxima, d.h. dem **80. zeitlichen Perzentil** (nach Weibull plotting position) entsprechen,
- berechnet mit demjenigen Boden-Klima-Szenario, das dem 80-Perzentil der CDF der Boden-Klima-Kombinationen entspricht, d.h. dem **80. räumlichen Perzentil** der flächenbezogenen CDF.

Anmerkung: Die PEC_{max,sw}, die schließlich als Expositionsendpunkte im GERDA-Verfahren ausgewiesen werden, sind entweder auf Einträge durch Drift oder durch Runoff bzw. Drainage zurückzuführen. Davon sind aber nur die annualPEC_{max} zeitvariabel, die durch Runoff bzw. Drainage verursacht werden, d.h. auch nur dafür sind CDFs zu berechnen.

Die Definition im Kasten B) kann als probabilistische Aussage formuliert werden: *"Für 80 % der potenziellen PSM-Behandlungsfläche in Deutschland ist in 80 % der Jahre eine Unterschreitung des Expositionsendpunktes für den Eintrag durch Runoff bzw. Drainage zu erwarten (unter der Annahme, dass Gewässer und Kulturarten [Behandlungsflächen] gleichmäßig über die Boden-Klima-Kombinationen verteilt sind)".*

Die Festlegung des gleichen Perzentils sowohl für die Wahl der Boden-Klima-Kombination als auch für das Jahr der Wetterzeitreihe beinhaltet, dass die räumliche und die zeitliche Überschreitungswahrscheinlichkeit hinsichtlich ihres ökotoxikologischen Risikos gleich gewichtet werden.

Die Perzentil-Festlegungen nach Kasten A) und B) sind allerdings nicht kongruent: Die Wahrscheinlichkeit $P(y | y \leq y_{\text{krit}})$, dass die Größe y kleiner gleich einem gegebenen Wert ist, sei eine (unbekannte) Funktion der Variablen x_1, x_2 . Aus statistischen Überlegungen ergibt sich: wenn die Häufigkeitsverteilung $CDF(y)$ nicht bekannt ist, dann kann das Perzentil $P(y) = f\{P(x_1); P(x_2)\}$ nicht exakt bestimmt werden, sondern es kann nur der Min-Max-Bereich angegeben werden. Es gilt

$$P(x_1) * P(x_2) \leq P(y) \leq 1 - [1 - P(x_1)] * [1 - P(x_2)]$$

Für die Kombination aus dem 80. räumlichen und dem 80. zeitlichen Perzentil bedeutet dies: Der Perzentil-Wert der PEC als abhängiger Variablen kann nicht exakt angegeben werden, es kann nur eingegrenzt werden, dass der Wert im Intervall zwischen dem *64. Perzentil* ($0,8 * 0,8 = 0,64$) und dem *96. Perzentil* ($[1 - 0,8] * [1 - 0,8] = 0,96$) der Grundgesamtheit aller annualPECmax,sw-Konzentrationen in Gewässern liegt. Die Ergebnisse zum tatsächlichen Perzentil der Zielvariablen der Expositionsabschätzung für die 360 (Modellierung mit PRZM) bzw. 288 (MACRO) virtuellen PSM, d.h. gestufte Kombinationen von Koc, DT50, Anwendungsmonat und Kulturart, sind in Kap. I.3.2.5 (Zif. 4) dargestellt.

I.3.2 Entwicklung von Boden-, Klima- und Gewässerszenarien der Expositionsabschätzung für Runoff-, Erosions- und Drainage-Einträge in Oberflächengewässer in Deutschland

Die einzelnen Schritte zur Identifikation von Boden-Klima-Szenarien für PRZM- und MACRO-Simulationen als zentralem Bestandteil eines nationalen Bewertungsansatzes für Deutschland werden im Folgenden erläutert. Die Methodik wird ausführlich in den Kapiteln II.1 (Faktor Boden) und II.2 (Faktor Klima) dargestellt.

I.3.2.1 Räumliche Verteilung der austragsbestimmenden Bodeneigenschaften

Im Ansatz von FOCUS_{sw} werden für die Auswertung der Flächenrepräsentanz der Runoff- und Drainage-Szenarien die relevanten Bodeneigenschaften (u.a. Gehalt an organischem Kohlenstoff, Tongehalt) separat ausgewertet. Damit wird aber die statistische Abhängigkeit der austragsbestimmenden Bodeneigenschaften außer Acht gelassen, was im Endeffekt falsche Ergebnisse zur Höhe und zur Flächenverteilung der Wirkstoffausträge nach PRZM- bzw. MACRO-Simulation zur Folge hat. Für die Expositionsabschätzung mittels GERDA werden stattdessen die in Deutschland vertretenen (Acker-)Böden im System der *FOOTPRINT Soil Types* (Dubus et al., 2009; S. 28 ff.) klassifiziert, wodurch die austragsbestimmenden Eigenschaften integriert und mit ihrer bodengenetischen Abhängigkeit berücksichtigt werden.

Die FOOTPRINT Soil Types (FST) charakterisieren die relevanten Eigenschaften eines Bodens im Hinblick auf die Transportwege Oberflächenabfluss (Runoff), Erosion, Zwischenabfluss, d.h. lateralen hangparallelen Abfluss (Interflow), Drainage und Leaching vom Boden in Oberflächen- und Grundwasser. Wesentliche Vorteile des FST-Klassifikationssystem sind, dass die FST bereits für MACRO und PRZM parametrisiert sind und dass das Konzept in ganz Europa anwendbar ist.

Als beste flächendeckende Informationsbasis zur Verteilung von Bodentypen in Deutschland steht die Bodenübersichtskarte 1:1000.000 (BUEK1000, BGR 2007) zur Verfügung. Für die

Ermittlung der Häufigkeiten und der räumlichen Verteilung der austragsbestimmenden Bodeneigenschaften wurden zunächst die in Deutschland auftretenden, ackerbaulich relevanten bodensystematischen Einheiten der BUEK1000 im System der FOOTPRINT Soil Types klassifiziert. Die FST-Klassifikation charakterisiert Böden anhand von vier Merkmalen: (i) Standorthydrologie (15 FOOTPRINT Hydrologic Groups, FHG), (ii) Textur des Oberbodens (6 Klassen), (iii) Textur des Unterbodens (6 Klassen), und (iv) Tiefenverteilung der organischen Bodensubstanz (11 Tiefenprofil-Typen); Details s. Kap. II.1.

Die BUEK1000 als Bodendatenbank hat folgende Struktur:

- In der Bodenkarte werden *Karteneinheiten (Soil Mapping Units, SMU)* dargestellt. Eine SMU entspricht einem oder mehreren *Polygonen*.
- Eine SMU enthält eine oder mehrere *bodentypologische Einheiten (Soil Typological Units, STU)*. Der Flächenanteil der STUs innerhalb der SMU ist bekannt, ihre Lage innerhalb der SMU ist jedoch *nicht lokalisiert*.

Datengrundlage der Ausweisung von FST im vorliegenden Projekt ist die Version der BUEK1000 N2.3.mdb, Format personal geodatabase (BGR, 2007). Die Entsprechung der STU in der BUEK1000 ist die *Bodenform*, welche eine eindeutige Kombination aus folgenden Faktoren darstellt:

- Klimagebiet (Anzahl: 4)
- Boden-Nummer (72 Leitbodenassoziationen der BUEK1000)
- Nutzungsform (Anzahl: 14)
- Bodenform-Nummer (Laufindex der Böden, die innerhalb einer Kombination aus Klimagebiet, Boden-Nummer und Nutzungsform vorkommen).

Für jede Bodenform-Nummer ist der Flächenanteil an einer Karteneinheit (SMU) in klassierter Form angegeben. Für die Berechnung des Flächenanteils der bodentypologischen Einheiten STU an einer SMU muss, mangels anderer Information, von der Annahme ausgegangen werden, dass dieser Flächenanteil unabhängig von der Bodengroßlandschaft ist.

In der BUEK1000 werden insgesamt 1936 Bodenformen ausgewiesen. Für 432 dieser 1936 Bodenformen sind Referenzprofile beschrieben, die automatisiert mittels eines Klassifikationsschlüssels jeweils einem FST zugeordnet wurden. Die 1504 Bodenformen *ohne* Referenzprofil in der BUEK1000 wurden, ausgehend von ihrem Bodentyp gemäß Beschreibung in der Bodenkundlichen Kartieranleitung (4. Aufl., AG Boden 1994), mit Hilfe einer Korrespondenztabelle einem FST zugewiesen (Anhang Tab. A2-6). Die Böden unter Ackerland in Deutschland werden durch insgesamt 102 FST beschrieben. Damit kann die Flächenrepräsentanz (Flächenanteil an der Acker- und Sonderkulturfläche) jedes FSTs und damit jeder Bodenform der BUEK1000 für Deutschland angegeben werden.

1.3.2.2 Clusterung der austragsbestimmenden Klimavariablen

Als sensitivste Klimavariablen für die Verlagerung von PSM in Oberflächengewässer wurden die folgenden insgesamt 18 Variablen identifiziert; vier für Hortonian runoff, zwei für saturation excess runoff, vier für Erosion sowie acht Klimavariablen für den Austrag über Drainage (vgl. Blenkinsop et al., 2008; Einzelheiten s. Kap. II.2).

- Hortonian runoff

- Anzahl der Tage von März bis Juni mit > 19,01 mm Niederschlag (entspricht > 5 mm Runoff bei unbedecktem Boden)
- Anzahl der Tage von März bis Juni mit > 30,53 mm Niederschlag (entspricht > 5 mm Runoff für Hackfrüchte, max. Deckungsgrad)
- Anzahl der Tage von September bis Dezember mit > 19,01 mm Niederschlag (entspricht > 5 mm Runoff bei unbedecktem Boden)
- Anzahl der Tage von September bis Dezember mit > 30,53 mm Niederschlag (entspricht > 5 mm runoff für Hackfrüchte, max. Deckungsgrad).
- Saturation excess Runoff
 - Anzahl der Tage von November bis März mit vollem Speicher UND > 11,8 mm Regen (entspricht > 2 mm Runoff bei unbedecktem Boden)
 - Anzahl der Tage von November bis März mit vollem Speicher UND > 16,3 mm Regen (entspricht > 2 mm Runoff bei Winterkulturen nach Auflaufen).
- Erosion
 - Anzahl der Tage von März bis Juni mit > 26,64 mm Niederschlag (entspricht > 10 mm Runoff bei unbedecktem Boden)
 - Anzahl der Tage von März bis Juni mit > 40,29 mm Niederschlag (entspricht > 10 mm Runoff für Hackfrüchte, max. Deckungsgrad)
 - Anzahl der Tage von September bis Dezember mit > 26,64 mm Niederschlag (entspricht > 10 mm Runoff bei unbedecktem Boden)
 - Anzahl der Tage von September bis Dezember mit > 40,29 mm Niederschlag (entspricht > 10 mm Runoff für Hackfrüchte, max. Deckungsgrad).
- Drainage
 - Mitteltemperatur von April bis Juni
 - Mitteltemperatur von September bis November
 - mittlerer kumulativer Niederschlag von Oktober bis März
 - mittlerer Jahresniederschlag
 - Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 2 mm Niederschlag
 - Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 20 mm Niederschlag
 - Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 50 mm Niederschlag
 - Anzahl der Tage von September bis November > 20 mm Niederschlag.

Für jede dieser 18 Klimavariablen wurden deren Werte in Deutschland für die Zeitreihe 1980 – 2009 (Niederschläge: Tageswerte, Temperaturdaten: Monatswerte) für die Rasterelemente mit Nutzung "Ackerland" oder „Sonderkultur" (ATKIS-Vektorkarte "Flächennutzung") ausgewertet. Als Ergebnis stehen die Verteilungsfunktionen der Werte dieser 18 Klimavariablen (Periode 1980 – 2009) für rund 13,2 Mio Rasterelemente (100 m x 100 m) in Deutschland mit potenzieller PSM-Applikation (Ackerland und Sonderkulturen) zur Verfügung.

Für die Zusammenfassung zu Klimaclustern wurde mit diesen 18 Klimavariablen sowie zusätzlich der Variable Jahresmitteltemperatur eine Hauptkomponentenanalyse durchgeführt. Die ersten drei Hauptkomponenten (PC1, PC2, PC3) erklären zusammen 87,7 % der Gesamtvarianz der Daten. Die Hauptkomponentenanalyse ermittelt die Faktorladungen für die 19 Klimavariablen und die PC-Scores hinsichtlich der 3 Hauptkomponenten für jede Rasterzelle.

Mit den PC-Scores für die drei Hauptkomponenten wurde eine Clusteranalyse über alle Raster mit Ackerland bzw. Sonderkultur durchgeführt; als Ergebnis wurden die Ackerland- und Sonderkulturflächen in Deutschland in 12 Klimacuster mit unterschiedlichem PSM-Verlagerungsrisiko durch Runoff & Erosion sowie Drainage gruppiert. Die Mittelwerte der Scores der PC1, PC2 und PC3 über alle Rasterelemente eines Clusters entsprechen den PC-Scores des Centroids des betreffenden Klimacusters in der Hauptkomponentenanalyse.

Für alle DWD-Klimastationen (mit lückenloser Zeitreihe 1982 – 2011) in Deutschland wurden ebenfalls mit den Faktorladungen der 19 Klimavariablen die Werte (Scores der PCA) der drei Hauptkomponenten PC1, PC2 und PC3 berechnet. Anschließend kann die Ähnlichkeit, d.h. Repräsentativität, jeder Klimastation für eines der 12 Klimacuster ausgedrückt werden als Abstand (Euklidische Distanz) zu den Werten der drei Hauptkomponenten im Centroid des jeweiligen Clusters. Die Station mit dem geringsten Abstand ihrer Werte zum Centroid wird als repräsentative Klimastation für das betreffende Klimacuster gewählt.

Als Ergebnis wird jedem der 12 Klimacuster eine DWD-Klimastation zugewiesen, deren Wetterzeitreihe 1982 – 2011 als höchstmöglich repräsentativ für die Ausprägung derjenigen Witterungselemente angesehen wird, die maßgeblich für die Verlagerung von PSM über Runoff & Erosion bzw. Drainage sind. Mit diesem Ansatz werden Witterungszeitreihen von DWD-Klimastationen mittels eines statistisch basierten Selektionsverfahrens den Klimacustern zugewiesen und dienen als Modelltreiber für die PRZM- und MACRO-Simulationen.

1.3.2.3 Überlagerung von Bodentypen und Klimacustern

Für die Identifikation von Boden-Klima-Szenarien für PRZM- und MACRO-Simulationen spezifisch für Deutschland muss im nächsten Schritt die Verteilung der Bodentypen mit der Verteilung der Klimacuster überlagert werden, um für jedes Rasterelement die Zugehörigkeit zu einer Boden-Klima-Kombination auszuweisen. Dazu wurden die beiden Polygonlayer „BUEK1000“ und „Klimacuster“ (für die Fläche der ATKIS-Kategorien „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“) miteinander verschnitten, alle auftretenden Kombinationen von FSTs (n = 126 potenzielle FST) und Klimacuster (n = 12) ausgegrenzt und ihr Flächenanteil an den potenziellen PSM-Applikationsflächen (Ackerland und Sonderkulturen) berechnet (ausführlich s. Anhang A6). Die Verschneidung ergab im ersten Schritt insgesamt 1153 Kombinationen von potenziellen FST x Klimacustern in Deutschland. Nach Anwendung der Korrespondenztabelle zwischen potenziellen FSTs (n = 126) und parametrisierten FSTs (n = 102; Tabelle „FSTmap_FSTmm_translation_upd20130619“ in der GERDA input database im GERDA-Installationspaket; vgl. Kap. II.1.1) reduzieren sich diese 1153 FST-Klima-Kombinationen auf

- 973 parametrisierte FST-Klimacuster-Kombinationen für die Simulation mit PRZM (Runoff & Erosion);
- darunter 311 FST-Klimacuster-Kombinationen für die Simulation mit MACRO (Drainage).

1.3.2.4 Ökotoxikologische Bewertung zeitvariabler Expositionsprofile mittels TK-TD-Modellierung

Bei Labortests mit einer definierten, möglichst konstanten Exposition wird die abgeleitete RAC in der Regel mit dem PECmax oder einer TWA verglichen. Daraus lässt sich jedoch nicht zwangsläufig ableiten, dass bei dynamischen, das heißt zeit-variablen Expositionsprofilen das

Szenario mit dem höchsten Konzentrationspeak (= PECmax) innerhalb eines Betrachtungszeitraums auch die größte ökotoxikologische Relevanz hat.

Neben der Höhe des maximalen Peaks sind Expositionsprofile unter anderem auch durch die Häufigkeit von Einträgen und durch die Expositionsdauer (bestimmt durch die Abnahmerate) charakterisiert. Weiterhin können auch die Intervalle zwischen den Peaks und die allgemeine Grundbelastung das Ausmaß der Effekte einer Substanz auf Organismen und Populationen beeinflussen (s. Abb. II.8-2). Die ökotoxikologische Wirkung eines Szenarios wird also, je nach betrachteten Organismen und Substanzen, nicht von einer einzigen expositionsbeschreibenden Größe (wie z.B. der PECmax), sondern von mehreren Parametern determiniert, die den Konzentrationsverlauf über die Zeit charakterisieren. Es stellt sich daher die Frage, wie aus einer (theoretisch unbegrenzten) Zahl von Expositionsprofilen ein ökotoxikologisches ‚realistic worst case‘-Profil identifiziert werden kann.

Es ist evident, dass die Höhe und die Dauer der Belastung zwei entscheidende Faktoren sind. Die PECmax ist die konservativste Beschreibung der Expositionshöhe, während die Fläche unter der Kurve (AUC, Area Under Curve) bzw. TWACs (AUC dividiert durch Zeitdauer) für einen bestimmten Zeitraum die durchschnittliche Belastung widerspiegeln. Wenn man ein Jahr als relevanten Zeitraum für ein Expositionsprofil ansieht, dann wäre die AUC (oder TWAC) für ein Jahr der Parameter, der über die maximale Expositionsdauer integriert. Die üblichen TWACs über 1, 2, 4, 7, 14, 21, 28 usw. Tage können dann als Größen angesehen werden, die in Bezug auf die betrachtete Expositionsdauer zwischen PECmax und dieser AUC als Eckpunkten liegen.

Andere Parameter, die durchaus ökotoxikologisch relevant sein können, wie die Anzahl der Peaks oder Intervalldauern zwischen den Peaks, sind alleine nicht geeignet, Expositionsprofile zu reihen, da sie keine Informationen zu Expositionsdauer und -stärke beinhalten. Es ist daher naheliegend, Expositionsprofile über ein Jahr auf der Basis von PECmax und AUC zu reihen. TWACs für andere Zeitfenster können andere Reihungen der Profile ergeben als diejenigen nach PECmax oder AUC für ein Jahr. Aus pragmatischen Gründen wurden aber im Projekt nur diese beiden (in Bezug auf die Expositionsdauer) extremen Konzentrationseckpunkte verwendet.

PECmax und AUC unterscheiden nicht zwischen Profilen mit z.B. gleichen Peaks, aber unterschiedlichem Intervall zwischen den Peaks, also der ökotoxikologischen Unabhängigkeit von Peaks. Theoretisch wäre die beste Szenarienauswahl diejenige, in der zunächst mit einem Toxikokinetik-Toxikodynamik-Modell (TK-TD), eventuell gekoppelt mit einem Populationsmodell, eine große Zahl von Expositionsprofilen durchgerechnet würde. TK-TD-Modelle sind derzeit die einzigen wissenschaftlichen Ansätze, um Effekte von (komplexeren) Zeitvariablen Expositionsprofilen vorherzusagen (s. Kap. II.8). Aus der Häufigkeitsverteilung der Effektstärke, ermittelt aus den TK-TD-Ergebnissen, könnte dann Perzentil-basiert ein bestimmtes Szenario für die Risikobewertung gewählt werden. Dieses Vorgehen ist in der Praxis des Zulassungsverfahrens jedoch nicht umsetzbar: Zum einen liegen in der Regel bislang keine TK-TD-Modelle für die relevanten Taxa vor (die ebenfalls zunächst noch zu identifizieren wären). Zum anderen wäre der Aufwand unverhältnismäßig hoch, Tausende von Expositionsszenarien durchzurechnen, eventuell sogar noch mit mehreren Effektmodellen.

Um die Auswahl von Expositionsprofilen nach PECmax und AUC im Hinblick auf ihre ökotoxikologische Relevanz zu bewerten, wurde für eine große Zahl von Expositionsprofilen deren ökotoxikologischer Effekt mit Hilfe von TK-TD-Modellen simuliert. Für diese Simulationen wurden zum einen Expositionsprofile aus den FOCUSw-Szenarien herangezogen, zum anderen

wurden TK-TD-Parameter und damit Organismen-Substanz-Kombinationen mit einer möglichst hohen Variabilität zufällig generiert, um eine möglichst große Bandbreite an Möglichkeiten abzudecken (s. Kap. II.8). Die Güte eines Expositionsdeskriptors wurde anhand der Rangkorrelation zwischen der Stärke des ökotoxikologischen Effekts und der Höhe (Konzentration) des Deskriptors überprüft. In den meisten Simulationen wurde das Modell GUTS (General Unified Threshold Model of Survival, Jager et al. 2011) verwendet, es wurden aber auch Simulationen zur Reproduktionshemmung auf Daphnien oder auf Populationswachstumsraten durchgeführt.

Die Auswertungen zeigen, dass die Deskriptoren PECmax und AUC bei deren getrennter Betrachtung den ökotoxikologischen Effekt nicht immer adäquat abbilden. Als Ergebnis wurde das *Rang-Minimum* aus beiden Werten (MIN[PECmax, AUC]) als am besten geeigneter Expositionsdeskriptor für die Vorhersage von worst case-Szenarien identifiziert. So wie GUTS mit unterschiedlichen Parametern Expositionsprofile unterschiedlich reiht, so können auch TK-TD-Modelle für subletale Effekte oder Populationseffekte andere Reihungen ergeben. Die Simulationen (inklusive der Beispiele für Reproduktionshemmung und Populationseffekte) zeigten aber, dass in der Regel eine Reihung nach PECmax oder AUC sehr gut mit einer Reihung nach Effekten (Rang-)korreliert (Kapitel II.8.3). Die Auswahl der Szenarien aus der Reihung nach PECmax und AUC wurde daher als die beste mögliche Lösung angesehen. Mit entsprechendem zusätzlichem Aufwand könnten aber auch zusätzlich Szenarien für bestimmte TWA-Zeitfenster zur Verfügung gestellt werden. Im Projekt sollte aber auch die Anzahl der zu berechneten Szenarien für eine gegebene Anwendung (Pflanzenschutzmittel, Kultur und Anwendungszeitraum) beschränkt werden. Mit der Verwendung von PECmax und AUC ergeben sich bereits acht zu betrachtende Expositionswerte je Anwendung (PECmax/AUC x Graben/Bach x Runoff/Drainage).

Für die Auswahl der Boden-Klima-Kombinationen für die PRZM- und MACRO-Simulationen im GERDA Tool werden deshalb zwei getrennte Häufigkeitsverteilungen (CDF) der Boden-Klima-Szenarien ermittelt: zum einen für die Verteilung der PECmax, zum anderen für die AUC. Aus jeder CDF wird diejenige Boden-Klima-Kombination gewählt, die dem 80. räumlichen Perzentil entspricht. Damit wird sichergestellt, dass für jeden der beiden Deskriptoren das zugehörige 80-Perzentil-Boden-Klima-Szenario im Zulassungsverfahren separat berücksichtigt wird.

Um möglicher Kritik vorzubeugen sei darauf hingewiesen, dass PECmax und AUC an dieser Stelle *nur zur Auswahl der Boden-Klima-Kombination* verwendet werden, mit denen dann für ein neu zuzulassendes PSM die Exposition berechnet wird. Für diese Berechnungen der Gewässerexposition steht das vollständige Konzentrationsprofil über die Zeit für weitere Auswertungen uneingeschränkt zur Verfügung.

1.3.2.5 Identifikation von nationalen Boden-Klima-Szenarien für gegebene Perzentile der PECmax und AUC

Ein Zulassungsverfahren mit definierter statistischer Über- bzw. Unterschreitungswahrscheinlichkeit des Expositionsendpunkts würde es erfordern, die vollständigen CDFs der Expositionsbewertungsgrößen zu ermitteln. Dazu müssten für den zuzulassenden Wirkstoff die Größen PECsw, PECsed, AUCsw und AUCsed für *alle* Boden-Klima-Szenarien über eine lange Zeitreihe berechnet werden. Aus Rechenzeitgründen ist dieses Konzept in der Praxis mit einer Stand-alone-Software jedoch nicht umsetzbar. In GERDA ist daher ein alternatives Vorgehen gewählt worden, das nachfolgend in den Schritten 1. bis 3. beschrieben wird. Im Schritt 4. wird dargestellt, welche tatsächlichen overall-Perzentile (s. Kasten A, Kap. I.3.1.2) sich für die Zielgrößen

ergeben, wenn deren Auswahl als Kombination des 80. räumlichen mit dem 80. zeitlichen Perzentil der Randverteilung (Kasten B) vorgenommen wird.

1. Zunächst werden die Wirkstoffausträge (edge-of-field) für 360 (für PRZM-Simulationen) bzw. 288 (für MACRO) sog. **virtuelle PSM** für alle 973 (PRZM) bzw. 311 (MACRO) Boden-Klima-Szenarien mit 30-jährigen Zeitreihen (Wetterdaten 1982-2011 der Referenzklimastationen der 12 Klimacluster) simuliert. Für die Simulationen wurden folgende Kombinationen der Wirkstoffeigenschaften Koc, DT50, Anwendungsmonat und Kultur verwendet (Tab. I.3-1).

Tab. I.3-1: Faktorstufen-Kombinationen der virtuellen Pflanzenschutzmittel für die Berechnung der edge-of-field-Austräge über Runoff & Erosion (Modell PRZM) und über Drainage (Modell MACRO).

Faktoren	Runoff- & Erosions-Austräge PRZM-Simulationen	Drainage-Austräge MACRO-Simulationen
Virtuelle Pflanzenschutzmittel, definiert durch Kombinationen aus:	360	288
- Kultur	2 (Winterweizen, Silomais)*	
- Applikationsmonat	12 (1. Jan, 1. Feb, ..., 1. Dez)	
- DT50	3 (3, 30, 300 d)	
- Koc	5 (10, 100, 1000, 10 ⁴ , 10 ⁵ L/kg)	4 (10, 100, 1000, 10 ⁴ L/kg)
kombiniert mit		
Boden-Klima-Kombinationen **	973	311
Gesamtzahl Simulationsläufe	350 280	89 568

*) Winterweizen: stellvertretend für alle Wintergetreidearten und Wintererbsen; Silomais: stellvertretend für alle übrigen Kulturarten (einschließlich Dauerkulturen); s.a. Kap. I.4.3.2 (Nummer 3)

***) Kombinationen aus parametrisierten FST und Klimaclustern

Insgesamt wurden zusammen rund 440000 PRZM- und MACRO-Modellläufe gerechnet; jeweils ein Modellauf für jede der Kombinationen Boden(FST) x Klimacluster x Koc x DT50 x Monat x Kulturart. Als Ergebnis wurden 360 (für Runoff- & Erosions-Austräge) bzw. 288 (für Drainage-Austräge) Zeitreihen der 30-jährigen Simulationsperiode mit *Tageswerten* der folgenden Variablen erzeugt:

- Substanz-Runoffaustrag
- Runoffvolumen
- Substanz-Erosionsaustrag
- Sedimentfracht
- Substanz-Drainageaustrag
- Drainagevolumen.

2. Diese 360 und 288 Zeitreihen der edge-of-field Wirkstoffausträge dienen als Eingabedaten für das Modell STEPS-3 (Bestandteil der Software STEPS 1-2-3-4; Klein 2007). Das Modell STEPS-3 wird in GERDA anstelle des Modells TOXSWA im FOCUSsw-Ansatz verwendet (s. Kap. I.3.3) und berechnet daraus für das FOCUS Gewässerszenario „stream“ 30-jährige Zeitreihen der Wirkstoff-Konzentrationen PECsw (mit stündlicher Auflösung) sowie AUCsw. Als Ergebnis stehen damit 2 x 360 und 2 x 288 Häufigkeitsverteilungen (CDFs) für die expositionsbeschreibenden Größen zur Verfügung:

- Runoff & Erosion: 360 CDFs[PEC_{sw}(stream)], 360 CDFs[AUC_{sw}(stream)]
- Drainage: 288 CDFs[PEC_{sw}(stream)], 288 CDFs[AUC_{sw}(stream)]

Anmerkung: Im Unterschied zur Gewässerdimensionierung in FOCUS_{sw} wurde in STEPS-3 für das Gewässerszenario „stream“ eine Gewässertiefe von 10 cm eingestellt, da dies als realistischer angesehen wurde als eine Tiefe von 30 cm. Für das nachfolgende *Ranking* der 973 bzw. 311 Boden-Klima-Kombinationen spielt die Gewässertiefe allerdings keine Rolle: die Gewässertiefe ist für die PEC_{max} des FOCUS_{sw} Szenario „stream“ unerheblich, wenn nur Runoff- bzw. Drainage-Einträge betrachtet werden (keine Drift), da das Runoffvolumen des Abflusses aus den 100 ha im upstream catchment wesentlich grösser ist als das stehende Volumen des Gewässers. Das ermittelte Ranking der Szenarien für das GERDA Tool ist somit unabhängig davon, welche Gewässertiefe für den stream angenommen wird.

- In jeder CDF, das heißt für jedes virtuelle PSM, werden anschließend die 973 (für Runoff & Erosion) bzw 311 (für Drainage) Boden-Klima-Szenarien gerankt, und zwar jeweils nach dem Expositions-beschreibenden Deskriptor (s. Kap. I.3.2.4):
 - PEC_{sw}: Ranking nach dem 80. zeitlichen Perzentil der Größe *annualPEC_{max,sw}*: 6.-höchster Wert der 30 Jahres-Maxima der PEC(1 h) im Wasser
 - AUC_{sw}: Ranking nach dem 80. zeitlichen Perzentil der Größe *annualAUC_{sw}*: 6.-höchster Wert der 30 Jahreswerte der AUC(1 a) im Wasser.

Als Ergebnis stehen damit für 360 bzw. 288 virtuelle PSM Häufigkeitsverteilungen der Boden-Klima-Szenarien in Bezug auf PEC_{sw} sowie AUC_{sw} für Deutschland zur Verfügung.

- Für die 360 bzw. 288 virtuellen PSM sind die Häufigkeitsverteilungen (CDFs) der PEC_{max} und der AUC *vollständig* berechnet worden (in Schritt 1 und 2), die räumlich-zeitlichen Grundgesamtheiten (*overall distribution*) für Deutschland sind somit bekannt. Für diese Fälle kann daher *exakt* ermittelt werden, welchem overall-Perzentil in Deutschland die Zielgrößen *annualPEC_{max,sw}* und *annualAUC_{sw}* entsprechen, wenn diese Zielgrößen als Kombination des 80. räumlichen mit dem 80. zeitlichen Perzentil der Randverteilungen (Boden-Klima-Kombinationen und Wetterzeitreihen) abgegriffen werden.

Für die 360 Werte der *annualPEC_{max,sw}* aus Runoff & Erosion zeigt sich, dass bei deren Auswahl als Kombination von 80. räumlichen und 80. zeitlichen Perzentil der *Median* der 360 Zielgrößen fast genau dem 90. overall-Perzentil der Grundgesamtheit aller *annualPEC_{max,sw}* entspricht (Tab. I.3-2). Das heißt, dass für die Hälfte der 360 virtuellen PSM der nach dem GERDA-Ansatz ermittelte *annualPEC_{max,sw}* für Runoff & Erosion einem *höheren* Perzentil entspricht als dem angestrebten 90. Gesamtperzentil, für die andere Hälfte niedriger. Für die Zielgröße *annualAUC_{sw}* (Runoff & Erosion) liegt der Median beim 88,79. Perzentil, das heißt das angestrebte 90. overall-Perzentil wird nicht ganz erreicht. Für beide Größen führt im ungünstigsten (am wenigsten protektiven) Fall die Kombination von 80. räumlichen und 80. zeitlichen Perzentil nur zum (ungefähr) 83. overall-Perzentil.

Für die Gewässerexposition über Drainage liegen die overall-Perzentile der Größen *annualPEC_{max,sw}* und *annualAUC_{sw}* weniger hoch, der Median der 288 virtuellen PSM entspricht für beide Größen nur ungefähr dem 82,5. overall-Perzentil. Das für das Zulassungsverfahren angestrebte 90. overall-Perzentil der räumlich-zeitlichen Häufigkeitsverteilung wird für einen größeren Teil der virtuellen PSM in Bezug auf den Expositionspfad Drainage somit nicht erreicht.

Tab. I.3-2: Verteilungsmaße der overall-Perzentilwerte der Zielgrößen PEC_{max,sw} und AUC_{sw} der Expositionsabschätzung für Runoff- & Erosionseinträge (Modell PRZM) von 360 virtuellen PSM bzw. für Drainageeinträge (Modell MACRO) von 288 virtuellen PSM mit dem Gewässerszenario „stream“, wenn die Zielgrößen als Kombination aus dem 80. räumlichen Perzentil (der Boden-Klima-Kombinationen) und dem 80. zeitlichen Perzentil (6.-höchster Wert der Jahresmaxima aus 30 Wetterjahren) abgegriffen werden.

Eintragspfad (Modell)	Zielgröße der Expositionsab- schätzung	Verteilungsmaße der 360 bzw. 288 overall-Perzentilwerte der Zielgrößen			
		Minimum	Median	Maximum	Standardabw.
Runoff & Erosion (PRZM)	annualPEC _{max,sw}	83,16	90,07*	93,23	2,40
	annualAUC _{sw}	83,15	88,79	92,67	1,78
Drainage (MACRO)	annualPEC _{max,sw}	80,01	82,56	89,14	2,38
	annualAUC _{sw}	79,98	82,46	93,24	3,28

*) Lesebeispiel: Mit PRZM werden für 360 virtuelle PSM (d.h. gestufte Kombinationen von Koc, DT50, Applikationsmonat und Kultur, s. Tab. I.3-1) 360 Verteilungsfunktionen (CDFs) der Zielgröße PEC_{max,sw} für 973 Boden-Klima-Kombinationen über 30 Jahre mit dem FOCUS_{sw} Gewässerszenario „stream“ berechnet. Bei jeder der 360 CDFs wird anschließend derjenige PEC_{max,sw}-Wert ausgewählt, der der Kombination aus dem 80. räumlichen Perzentil (aus den 973 Boden-Klima-Kombinationen) und dem 80. zeitlichen Perzentil (i.e. 6.-höchstes Jahresmaximum aus 30 Jahren) entspricht, und es wird ermittelt, welchem overall-Perzentil dieser ausgewählte PEC_{max,sw}-Wert auf der jeweiligen CDF entspricht. Im Median aller 360 ausgewählten PEC_{max,sw}-Werte ist dies das 90,07. Perzentil.

Die vorstehend beschriebenen Schritte 1. bis 3. wurden im Rahmen des GERDA-Projekts *einmalig* als Präprozessing für das geplante Zulassungsverfahren mit dem Tool GERDA durchgeführt. Für die Expositionsabschätzung im Zulassungsverfahren für ein neues PSM werden dann aus diesen 2 x 360 bzw. 2 x 288 CDFs diejenigen CDFs ausgewählt, deren Werte für Koc, DT50, Applikationsmonat und Kulturart den betreffenden Werten des zuzulassenden PSM am nächsten kommen. Aus jeder dieser CDFs wird schließlich diejenige Boden-Klima-Kombination abgegriffen, die dem 80. räumlichen Perzentil (bezogen auf die rund 132 000 km² potenzielle Applikationsfläche in Deutschland) entspricht. Diese Boden-Klima-Kombinationen bilden dann im Zulassungstool GERDA die *Deutschland-spezifischen Boden-Klima-Szenarien* (mit definiertem Perzentil der Zielgrößen), für die im Rahmen des Zulassungsverfahrens die Gewässerexposition über Runoff & Erosion sowie Drainage mittels PRZM und MACRO abgeschätzt wird (s. Kap. I.3.3).

I.3.3 Übersicht zum Verfahren der Expositionsabschätzung nach GERDA

Die Expositionsbewertung auf der EU-Ebene nach FOCUS_{sw} Working Group erfolgt in einem mehrstufigen Verfahren (FOCUS 2007a,b). Nach EFSA (2010) ist eine mehrstufige Bewertung nach folgenden Prinzipien aufgebaut:

- Eine niedrigere Stufe ist konservativer als eine höhere Stufe.
- Niedrigere Stufen erfordern weniger Berechnungsaufwand als höhere.
- Höhere Stufen sind realitätsnäher als niedrigere.
- Auf allen Stufen werden die relevanten wissenschaftlichen Informationen genutzt.

- Alle Stufen bewerten auf Basis der gleichen Zielgröße (PEC).

Der Aufbau und die Terminologie der gestuften Expositionsbewertung im nationalen Zulassungsverfahren für PSM in Deutschland soll mit dem FOCUSsw-Ansatz für die Wirkstoffzulassung in der EU möglichst konsistent gehalten werden, daher werden Step 1 und Step 2 des FOCUSsw-Standardverfahrens (FOCUS 2007b) unverändert als Stufe 1 und Stufe 2 in GERDA übernommen (Stufe 2 wird nur für Zone North berechnet in GERDA).

Der generelle Aufbau des Verfahrens GERDA zur Bewertung der Exposition von Oberflächengewässern in Deutschland ist in Abb. I.3-1 dargestellt. Analog zur abgestuften Bewertung in FOCUSsw wird auch das nationale Bewertungsverfahren mit höheren Stufen zunehmend realitätsnäher, damit aber weniger konservativ in den zugrunde liegenden Annahmen und Parametern. Gleichzeitig steigt die Komplexität der verwendeten Szenarien und Modelle.

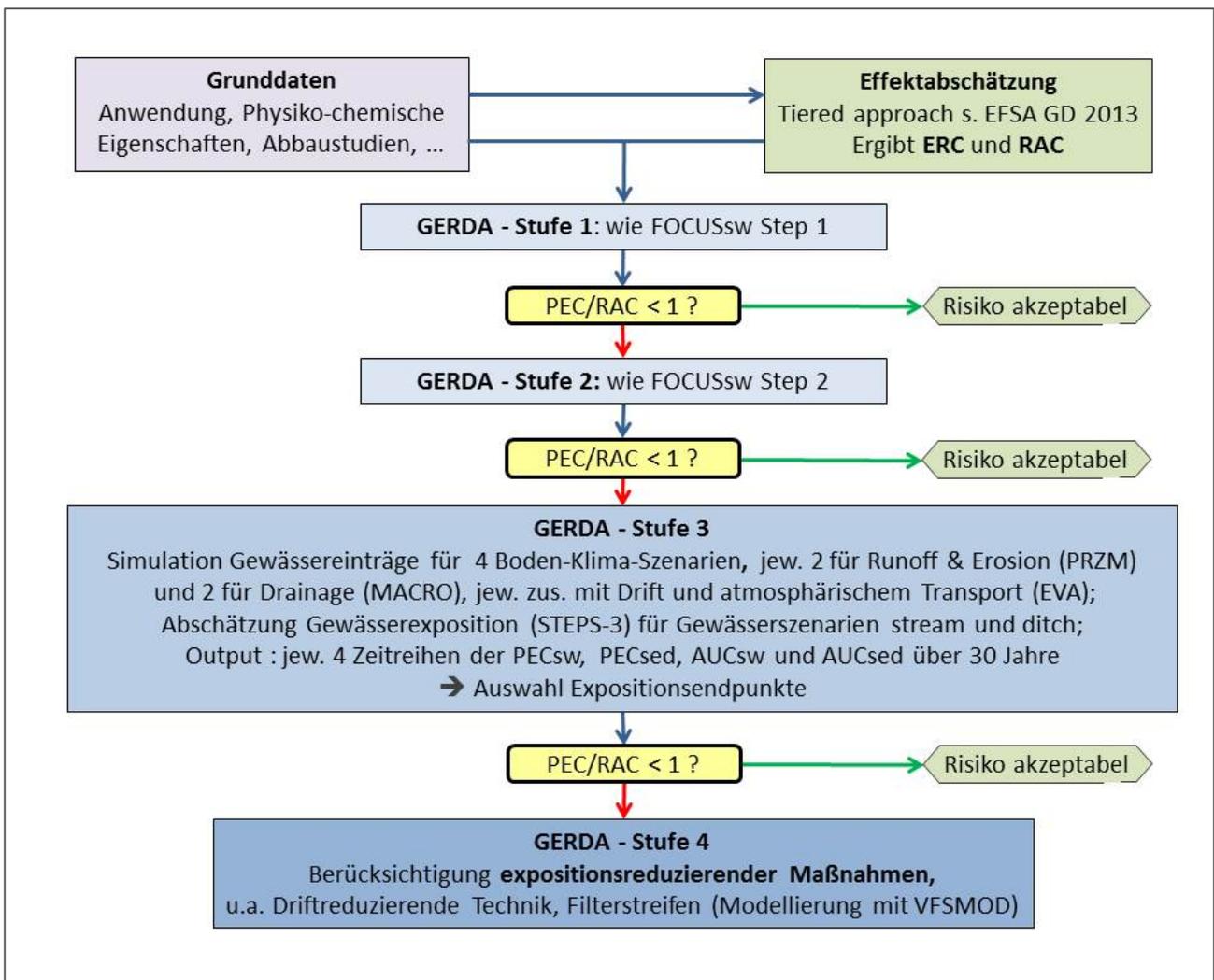


Abb. I.3-1: Schema des gestuften GERDA-Ansatzes zur Bewertung der PSM-Exposition von Oberflächengewässern durch Runoff und Erosion, Drainage, Drift sowie atmosphärischen Transport in Deutschland.

In Tab. I.3-3 ist das Schema des gestuften GERDA-Ansatzes zur Expositionsabschätzung dargestellt, mit dem die Expositionsendpunkte für PSM-Eintrag über Runoff & Erosion, Drainage, Drift und atmosphärischen Transport in Oberflächengewässern ermittelt werden. In den Stufen 3 und 4 basiert das Verfahren auf Deutschland-spezifischen Boden-Klima-Szenarien zur

Abschätzung der Einträge durch Runoff & Erosion sowie Drainage. Aufbau und Handhabung des Softwaretools GERDA zur Durchführung der Expositionsbewertung gemäß diesem Schema wird in Kap. I.4 vorgestellt.

Mit GERDA werden für ein PSM standardmäßig insgesamt 16 PEC-Zeitreihen berechnet, aus denen dann 16 Expositionsendpunkte der PEC_{max} (und von TWACs für verschiedene Zeitfenster) abgegriffen werden können:

- 2 Expositionsmedien (*gelöste Phase* und *Sediment*)
- x 2 Expositionsdeskriptoren (*PEC_{max}* und *AUC*)
- x 2 Eintragspfade (*Runoff & Erosion* und *Drainage*; jew. zusammen mit Drift und atmosphärischem Transport)
- x 2 Gewässerszenarien (*ditch* und *stream*).

Für die Expositionsabschätzung für ein neues PSM wird im GERDA Tool (programmintern) für jede Kombination aus

- den zwei Eintragspfaden Runoff & Erosion sowie Drainage und
- den zwei expositionsbeschreibenden Größen PEC_{max} und AUC

ein Boden-Klima-Szenario aus der betreffenden CDF ausgewählt, das heißt insgesamt vier Boden-Klima-Szenarien (Herleitung und Auswahl der Szenarien s. Kap. I.3.2). Mit diesen Boden-Klima-Szenarien werden die edge-of-field Austräge mit PRZM bzw. mit MACRO simuliert und anschließend mit dem Modell STEPS-3 30-jährige Zeitreihen der Expositionsdeskriptoren PEC und AUC, jeweils für gelöste Phase und Sediment, berechnet. Aus diesen Zeitreihen können schließlich die Konzentrationswerte, die dem regulatorisch vorgegebenen 80. zeitlichen Perzentil entsprechen, als Expositionsendpunkte ausgegeben werden.

Weiterhin werden von GERDA auch TWAC_{sw} und TWAC_{sed} für die bei der ökologischen Risikobewertung üblicherweise betrachteten Zeitintervalle (1 d, 3 d usw.) berechnet. In Tabelle I.3-3 ist der Ablauf der Expositionsbewertung mit GERDA zusammenfassend dargestellt.

Die Gewässerszenarien in GERDA sind sehr ähnlich den FOCUS_{sw}-Gewässerszenarien (Gewässer-geometrie, Sedimenteigenschaften, Upstream-Catchment-Ansatz). Das verwendete Gewässermodell STEP-3 liefert nahezu identische Werte der PEC_{sw} und TWAC_{sw} wie TOXSWA (s. a. Kap. A10 im Anhang).

Für die Identifikation von Boden-Klima-Szenarien (Kap. I.3.2.5) wurden im 2. Schritt PRZM- und MACRO Simulationen für 360 bzw. 288 virtuelle PSM gerechnet. Als Abstufungen wurden dabei für die Dissipationshalbwertszeit die Werte 3/30/300 d und für den Sorptionskoeffizienten die Werte 10/100/1000/10000/100000 L kg⁻¹ gewählt (Stufe 100000 nur für PRZM). Da der Koc- und DT50-Wert des konkreten Wirkstoffs im Zulassungsverfahren im Regelfall nicht mit den Stufenwerten eines der virtuellen PSM zusammenfallen werden, ergeben sich für jeden zu prüfenden Wirkstoff vier „einhüllende“ Boden-Klima-Kombinationen, i.e. die 2 x 2 Kombinationen des jeweils nächst-kleineren und nächst-größeren Wertes der Koc- und DT50-Stufen. Von diesen vier umgebenden Szenarien wird das *nächstgelegene* für die Expositionsmodellierung des zuzulassenden PSM herangezogen, wobei „nächstgelegene“ zu verstehen ist als die geringste Euklidische Distanz im logarithmierten Koc-DT50-Raum.

Tab. I.3-3: Übersicht zur Ermittlung von Expositionsendpunkten für Wirkstoff-Einträge über Runoff & Erosion, Drainage, Drift und atmosphärischen Transport in Oberflächengewässer in Deutschland mittels GERDA (Stufe 3 und Stufe 4).

GERDA Stufe 3							
<p>i) Auswahl (programmintern) von vier Häufigkeitsverteilungen (CDFs) für dasjenige virtuelle PSM, dessen Koc, DT50, Anwendungsmonat und Kulturart den betreffenden Eigenschaften des zuzulassenden PSM am nächsten kommen, (a) je eine CDF für PEC_{max} und für AUC aus den 360 CDFs für Runoff & Erosion (für die Abschätzung Exposition durch Runoff & Erosion); (b) je eine CDF für PEC_{max} und für AUC aus den 288 CDFs für Drainage (für Abschätzung Exposition durch Drainage).</p> <p>ii) Auslesen (programmintern) derjenigen Boden-Klima-Kombination (FST-Klimacluster-Kombination) aus jeder der vier in (i) ausgewählten CDF, die dem 80. räumlichen Perzentil der betreffenden CDF entspricht; Ergebnis: vier Boden-Klima-Szenarien (die unter Umständen auch für 2, 3 oder alle 4 CDFs identisch sein können).</p> <p>iii) Mit dem neu zuzulassenden PSM: Simulation der Wirkstoff-Austräge (edge-of-field) mit den Modellen PRZM 4.51 (Runoff & Erosion) und MACRO 5.2 (Drainage) für das jeweils in (ii) ausgewählte Boden-Klima-Szenario über 30 Simulationsjahre (1982 – 2011). Output: vier 30-jährige Zeitreihen mit Tageswerten zu Wirkstoffaustrag in der gelösten Phase, Wirkstoffaustrag im Sediment, Wasserfluss und Sedimentaustag für den zuzulassenden Wirkstoff.</p> <p>iv) Aus den Einträgen über <u>Runoff & Erosion</u> bzw. <u>Drainage</u> und zusätzlich den Einträgen über <u>Drift</u> und <u>atmosphärischen Transport (Modell EVA)</u> werden mit dem Modell STEPS-3 für die Gewässerszenarien stream und ditch 30-jährige Zeitreihen der PEC_{sw} und PEC_{sed} (zeitliche Auflösung 1 h) berechnet; daraus können TAWC_{sw} und TWAC_{sed} für die Perioden 1, 2, 4, 7, 14, 21, 28, 42, 50 und 100 Tage abgeleitet werden.</p> <p>Insgesamt 16 PEC-Zeitreihen: 2 Eintragspfade (Runoff & Erosion und Drainage) x 2 Deskriptoren (PEC und AUC) x 2 Gewässerszenarien (ditch und stream) x 2 Phasen (sw und sed).</p> <p>v) Expositionsendpunkte: Auswertung der Zeitreihen aus (iv): Auslesen jew. des 80. Perzentils der Jahresmaxima der 30-jährigen Zeitreihe (i.e. 6.-höchstes Jahresmaximum) = bewertungsrelevante PEC_{max} (inklusive Eintrag über Drift und atmosphärischen Transport); es können die folgenden Expositionsendpunkte ausgegeben werden:</p>							
Runoff & Erosion, Drift u. atmosphärischer Transport				Drainage, Drift und atmosphärischer Transport			
PEC _{max} *		AUC*		PEC _{max} *		AUC*	
ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream
<i>PEC_{max,sw}</i>	<i>PEC_{max,sw}</i>	<i>PEC_{max,sw}</i>	<i>PEC_{max,sw}</i>	<i>PEC_{max,sw}</i>	<i>PEC_{max,sw}</i>	<i>PEC_{max,sw}</i>	<i>PEC_{max,sw}</i>
TWAC _{sw}	TWAC _{sw}	TWAC _{sw}	TWAC _{sw}	TWAC _{sw}	TWAC _{sw}	TWAC _{sw}	TWAC _{sw}

$PEC_{max, sed}$	$PEC_{max, sed}$	$PEC_{max, sed}$	$PEC_{max, sed}$	$PEC_{max, sed}$	$PEC_{max, sed}$	$PEC_{max, sed}$	$PEC_{max, sed}$
$TWAC_{sed}$	$TWAC_{sed}$	$TWAC_{sed}$	$TWAC_{sed}$	$TWAC_{sed}$	$TWAC_{sed}$	$TWAC_{sed}$	$TWAC_{sed}$
<p>Die $TWAC_{sw}$ bzw. $TWAC_{sed}$ sind für verschiedene Zeitintervalle (1 d, 3 d, usw.) verfügbar.</p> <p>*) PEC_{max} und AUC verweisen auf die Auswahl der CDF gemäß Schritt i) für (a) Runoff und (b) Drainage.</p> <p>vi) Vergleich der Expositionsendpunkte mit den regulatorisch akzeptablen Konzentrationen (RAC)</p>							

Tab. I.3-3: (Fortsetzung)

GERDA Stufe 4
<p>Wie Stufe 3, zusätzlich:</p> <p>Berücksichtigung der Wirkung von Minderungsmaßnahmen auf die Gewässerexposition (Erläuterungen s. Kap. I.3.4):</p> <ul style="list-style-type: none"> - bewachsene Filterstreifen (Modellierung mit VFSSMOD 4.2.4) - Drift-mindernde Maßnahmen (Drift-reduzierende Technik; Abstandsauflagen)

Anmerkung: Von den vier einhüllenden Szenarien ist das „nächstgelegene“ nur in einem Viertel der Fälle auch das Szenario mit der *höchsten* PECmax. Es könnte daher der Einwand erhoben werden, dass das Verfahren in drei von vier Fällen nicht ausreichend konservativ sei. Dem ist entgegen zu halten, dass dasjenige Boden-Klima-Szenario, das innerhalb der Abstufung der Koc-DT50-Kombinationen die geringste Abweichung zur Koc und DT50 des zu prüfenden Wirkstoffs aufweist, auch dasjenige Szenario ist, das den „realistic worst case“ am besten repräsentiert, das heißt für das 80. räumliche Perzentil der Boden-Klima-Kombinationen die realitätsnächste PECmax ausweist.

I.3.4 Optionen für Minderungsmaßnahmen in GERDA Stufe 4

Als Maßnahmen zur Verminderung von Stoffeinträgen in Oberflächengewässer über verschiedene Eintragspfade kommt grundsätzlich eine Reihe von Möglichkeiten in Betracht. Zur Risikominderung für Spraydrift-Einträge sind seit geraumer Zeit verschiedene technische Maßnahmen entwickelt und erfolgreich in die Praxis eingeführt worden, die in GERDA Stufe 4 in vollem Umfang berücksichtigt werden und auf die hier nicht weiter eingegangen wird. Zur Minderung von Einträgen über Runoff und Erosion werden im Wesentlichen zwei Arten von Maßnahmen diskutiert:

- Filterstreifen mit Grasbewuchs (vegetated filter strips, VFS)
- On-site-Maßnahmen zur Verminderung von Oberflächenabfluss und Erosion wie bspw. reduzierte Bodenbearbeitung (Mulchsaat, Direktsaat).

Grasbewachsene Filterstreifen

Die Verwendung von Filterstreifen als Risikominderungsmaßnahmen in der regulatorischen Praxis kann nach zwei Ansätzen erfolgen:

- i. Festlegung von Default-Werten für die Reduktionsleistung von Filterstreifen für definierte Abstände zum Oberflächenwasserkörper. Dieser Ansatz wird als problematisch betrachtet (s. Kap. II.10.3) und in GERDA Step 4 nicht verfolgt.
- ii. Dynamische Simulation mit dem Modell VFSSMOD in Verbindung mit der Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) zur Berechnung der Verminderung der Wirkstofffracht. Dieser Ansatz wird in GERDA Stufe 4 implementiert und nachfolgend ausführlich vorgestellt.

Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009)

Die Verwendbarkeit des Modells VFSSMOD (Vegetated Filter Strip MODELing system; Muñoz-Carpena und Parsons, 2011) in Verbindung mit der Regressionsgleichung zur Verminderung der Wirkstofffracht von Sabbagh et al. (2009) ist im Rahmen des hier durchgeführten Projekts ausführlich untersucht worden (Kap. II.7). Als Fazit ist festzuhalten, dass die Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) wahrscheinlich nicht fundamental fehlerhaft ist. Sie erscheint im Prinzip nutzbar für die regulatorischen Risikoabschätzung im Tool GERDA, insbesondere im Hinblick auf die Tatsache, dass im Moment keine alternative Berechnungsmethode für die Verminderung der Wirkstofffracht durch Filterstreifen verfügbar ist. Vor einer routinemäßigen Anwendung halten die Autoren jedoch zunächst noch weitere Forschungsarbeiten für erforderlich (s. Kap. II.7.7.4):

- Untersuchung des Bereichs der Anwendbarkeit der Gleichung von Sabbagh et al. (2009), unter Nutzung von (i) zusätzlichen experimentellen Validierungsdaten und (ii) weiteren VFSSMOD-Outputdaten zur Verminderung von Runoff (ΔQ) und Sedimentfracht (ΔE).
- Überprüfung und ggf. Neuberechnung der Regressionsanalyse mit (i) korrekt behandelten "not analysed"-Werten, (ii) zusätzlichen experimentellen Datenpunkten für Kalibrierung und Validierung, und (iii) Prüfung alternativer Strukturen der Regressionsgleichung.

Empfohlene Einstellungen für Filterstreifen-Szenarien in GERDA Step 4

Grundsätzlich muss zunächst die Frage geklärt werden, welche Landschaftsstrukturen die in GERDA Stufe 4 simulierten grasbewachsenen Filterstreifen (VFS) eigentlich wiedergeben sollen. Die Antwort bestimmt die Parametrisierung von VFSSMOD und die Interpretation der VFSSMOD-Ergebnisse. Mindestens drei Typen von VFS sind im regulatorischen Kontext als sogenannte Filter- oder Pufferstreifen denkbar (s. Kap. II.7.9.1).

- Typ A: VFS in Hanglage oder in ebener Position, unmittelbar unterhalb des behandelten Feldes, mit oder ohne hoch anstehenden Wasserspiegel, *nicht* direkt angrenzend an ein Oberflächengewässer: weniger strikte Parametrisierung notwendig.
- Typ B: VFS *direkt* angrenzend an ein Oberflächengewässer, mit hochanstehendem Wasserspiegel, aber nicht notwendigerweise angrenzend an ein behandeltes Feld, erhält konzentrierten Oberflächenabfluss von mehreren Feldern: strengere (weniger günstige) Parametrisierung erforderlich.
- Typ C: Das regulatorische Standard-Szenario: "edge-of-field"-Oberflächenwasserkörper mit einem VFS, der unmittelbar unterhalb des behandelten Feldes UND direkt angrenzend an das Oberflächengewässer liegt UND nur von einem Feld Oberflächenabfluss erhält. Dieses Szenario ist jedoch hydrologisch unrealistisch, die inhärenten Widersprüche müssten zuerst gelöst werden.

Für die Nutzung von VFSSMOD zur Berechnung der Verminderung von Runoff-Volumen und erodierter Sedimentfracht in GERDA Stufe 4 werden von den Autoren folgende Einstellungen vorgeschlagen (ausführliche Darstellung s. Kap. II.7.9.2):

- Als Filterstreifen-Szenario wird die in Kap. II.7.9.2 beschriebene Kompromisslösung gewählt: der VFS liegt direkt unterhalb des behandelten Feldes. Der VFS erhält den gleichen FOOTPRINT Soil Type (FST) wie das behandelte Feld. Über die direkte Nachbarschaft zu einem Oberflächengewässer wird keine Aussage getroffen, aber der VFS fungiert in der regulatorischen Entscheidung als Randstreifen am Gewässer.

- Als untere Randbedingung des VFS wird gewählt:
 - Für VFS, die zu FOOTPRINT Hydrologic Groups (FHG) L, M oder N gehören, wird kein (oberflächennaher) Wasserspiegel angenommen.
 - Für VFS, die zu einer der anderen FHGs gehören, wird ein oberflächennaher Wasserspiegel (Grund- oder Stauwasser) simuliert (mit Dupuit-Forchheimer-Annahmen). (Details zu den FHG siehe Kapitel II.1.1)
- Die initiale Tiefenlage des Wasserspiegels wird mittels 30-jähriger Simulation der Wasserbilanz mit MACRO geschätzt.
- Der Anteil des Upstream Catchment, der mit VFS ausgestattet ist, wird für den Stream auf 0,6 und für den Ditch auf 0,5 gesetzt.
- Die "effektive Fließbreite" (FWIDTH) des Oberflächenabflusses, die den Grad der Abflusskonzentration wiedergibt, kann vom Nutzer *derzeit* frei gewählt werden (zukünftig: Empfehlung s.u.).
- Die Länge des VFS in Fließrichtung (VL; üblicherweise als Breite eines Filterstreifens bezeichnet) kann vom GERDA-Nutzer derzeit frei gewählt werden, wobei die regulatorische Umsetzung hier nicht berücksichtigt wird.

Die beiden letztgenannten Einstellungen (zu FWIDTH und VL) haben den bei weitem größten Einfluss auf das Ergebnis einer VFSMOD-Berechnung. Für die zukünftige regulatorische Praxis erscheint es aus Sicht der Autoren sinnvoll, für FWIDTH einen festen Wert vorzugeben (zur Problematik der Festlegung eines Wertes s. Kap. II.7.9.2). VL ist der zentrale Parameter, der im Risikomanagement modifiziert werden kann. Im Hinblick auf Praktikabilität und Kontrollierbarkeit von Auflagen ist es jedoch naheliegend, in der regulatorischen Praxis feste Werte für VL zu wählen (beispielsweise 5, 10 oder 20 Meter).

On-site-Maßnahmen

Die Festlegung von default-Werten für die Reduktionsleistung von verschiedenen on-site-Maßnahmen, insbesondere im Bereich Bodenbearbeitung und Bodenbedeckung, erscheint mit dem derzeitigen Kenntnisstand wissenschaftlich nicht begründbar (s. Kap. II.10.3). Als Konsequenz der Forderung an das Zulassungsverfahren, hinreichend protektiv zu sein und Szenarien am "realistic worst case" zu orientieren, würden aus den verfügbaren Messwerten zur Reduktion von Runoff und Erosion durch on-site-Maßnahmen (s. Tab. II.10-1 bis -3) geringe bis sehr geringe Werte für die Verminderung resultieren.

Weiterhin ist gegen feste Werte einzuwenden, dass die Wirkung der Einflussfaktoren (Bodenart, Hanglänge, Hangneigung, Niederschlagsintensität, Bodenbedeckung usw.) auf die Reduktionsleistung mit einem fixen Wert nicht hinreichend berücksichtigt werden kann. Die Repräsentativität eines Runoff-Ereignisses bzw. der dabei gemessenen Reduktionswirkung kann nicht beurteilt werden. Über die Protektivität eines fixen Wertes kann daher nichts ausgesagt werden. Die vielfältigen Wechselwirkungen zwischen den aufgeführten Faktoren und deren Einfluss auf Reduktionsleistung können nur mittels Modellierung (z.B. mit PRZM) erfasst werden.

On-site-Maßnahmen (wie bspw. reduzierte Bodenbearbeitung, Mulchbedeckung, Direktsaat etc.) stellen nach derzeitiger Bewertung somit *keine* Option als Risikominderungsmaßnahmen im Zulassungsverfahren dar, weder als Bestandteil des Tools GERDA noch im Rahmen von anderen Ansätzen zur Expositionsschätzung.

1.3.5 Option: Expositionsabschätzung für generische Fließgewässer

Als Option für das Bewertungsverfahren könnten zukünftig, als weiterer Schritt in Richtung größerer Realitätsnähe, die Expositionszeitreihen nicht mehr für die Gewässerszenarien ditch und stream des FOCUSsw-Ansatzes berechnet werden, sondern für eine Reihe von *generischen* Fließgewässern. Diese Gewässerszenarien wären so zu definieren, dass sie *repräsentativ* für ein bestimmtes Perzentil der *realen* Ausprägung der konzentrationsbestimmenden Eigenschaften von Fließgewässern und Einzugsgebieten in Deutschland sind. Diese Option würde dann Stufe 5 des GERDA-Verfahrens bilden (in Abb. I.3-1 nicht aufgeführt).

Als Vorarbeit für eine mögliche Expositionsabschätzung für generische Fließgewässer wurden im Rahmen des hier vorgestellten Projekts die Häufigkeitsverteilungen der Eigenschaften von Gewässern und Einzugsgebieten in Deutschland ermittelt (über GIS-Analyse entsprechender Geodaten, s. Kap. II.3), die für die Festlegung und Parametrisierung generischer Fließgewässer von Bedeutung sind:

- Gewässernetzdichte
- Mittlerer Jahresniederschlag
- Mittlerer Jahresabfluss
- Anteil potenzieller Applikationsflächen (Ackerland und Sonderkulturen).
- Mittleres Sohlgefälle des Hauptgewässers
- Fließstrecke des Hauptgewässers bis zum Gebietsauslass
- Länge-/Breite-Verhältnis des Einzugsgebietes.

Für die Expositionsbewertung im Zulassungsverfahren würde dann für diese generischen Einzugsgebiete mit einem geeigneten Modell (bspw. CMF, Catchment Model Framework; Kraft 2012) das Weg-Zeit-Konzentrationsprofil $C(x,t)$ im Gewässer simuliert, das sich nach PSM-Einträgen aus verschiedenen Quellen (Spraydrift, Runoff & Erosion, Drainage) einstellt. Die PSM-Anwendungen auf den potenziellen Applikationsflächen innerhalb eines Einzugsgebietes bzw. entlang eines Gewässerabschnitts werden dabei als räumlich und zeitlich probabilistischer Prozess behandelt. Die Elementarausträge aus den einzelnen Applikationsflächen (edge-of-field loss) würden weiterhin mit PRZM bzw. MACRO für die im Einzugsgebiet vertretenen Boden-Klima-Kombinationen für die 30-Jahreszeitreihe simuliert. Die hydrodynamische und geomorphologische Dispersion $C(x,t)$ der Konzentrationspeaks, die aus den einzelnen Einträgen resultieren, im Längsverlauf des Gerinnes wird mittels eines Konvektions-Dispersion-Ansatzes dargestellt, in Abhängigkeit von Abflussführung und hydraulischen Eigenschaften des Gerinnes.

Aus den Weg-Zeit-Konzentrationsprofilen können dann Häufigkeitsverteilungen der $PEC_{max,sw}$ und $TWAC_{sw}$ für ein generisches Fließgewässer ermittelt werden, aus denen schließlich ausgewählte Perzentilwerte von $PEC_{max,sw}$ und $TWAC_{sw}$ als regulatorische Endpunkte ausgelesen würden.

Dieser Ansatz wurde im Rahmen des GERDA-Projekts nicht weiter vertieft: eine mögliche Ergänzung des GERDA-Verfahrens um eine derartige Stufe 5 (Expositionsbewertung auf Basis generischer Einzugsgebiete) erfordert zum einen eine vertiefte fachliche Bearbeitung, die im gegebenen Zeitrahmen nicht zu leisten war, und zum anderen würde dieser Ansatz möglicherweise auf Akzeptanzprobleme bei den Interessengruppen stoßen, die nur in einem längerfristigen Diskussionsprozess überwunden werden können.

1.3.6 Anmerkungen und Einschränkungen der Expositionsschätzung nach GERDA

Im Verlauf der Entwicklung der Expositionsabschätzung sind für den GERDA-Ansatz an einigen Stellen Festlegungen getroffen worden, die einen Kompromiss zwischen fachlichen Erfordernissen auf der einen Seite und arbeitswirtschaftlichen Beschränkungen sowie dem Wunsch nach größerer Nutzerfreundlichkeit auf der anderen Seite darstellen. Im Einzelnen betrifft das folgende Aspekte.

- *Klimacuster*: Die Hauptkomponentenanalyse wurde für alle 19 Klimavariablen gemeinsam durchgeführt und in der anschließenden Clusteranalyse wurden die 12 Klimacuster ohne Unterscheidung nach Eintragspfaden Runoff & Erosion und Drainage ausgewiesen. Es wäre auch vorstellbar, die 12 Klimavariablen relevant für Runoff & Erosion und die 9 Drainage-relevanten Variablen (s. Kap. II.2) getrennt zu analysieren und anschließend zwei getrennte Clusterungen für die Ackerfläche Deutschlands vorzunehmen. Diese Überlegung wurde aus zwei Gründen jedoch nicht weiter verfolgt:
 - Der dimensionsreduzierende Effekt der Hauptkomponentenanalyse geht teilweise wieder verloren, wenn die Klimavariablen auf zwei Analysen aufgeteilt werden.
 - Die Ausweisung von zwei unterschiedlichen Klimazonierungen für Deutschland würde die Komplexität des neuen Verfahrens erhöhen.
- Die *Flächenbasis* für das Ranking und die CDF der Boden-Klima-Szenarien ist die „ackerbaulich relevante Fläche“, welche die Flächen der ATKIS-Nutzungsklassen „Ackerland“ und „Sonderkulturen“ beinhaltet (s. Anhang A6). Für die Nutzung *Sonderkulturen* sind in der BUEK1000 jedoch keine Bodendaten hinterlegt; es können daher keine separaten CDFs der Boden-Klima-Szenarien für die Gebiete (respektive Böden) mit Wein-, Obst- und Hopfenanbau ermittelt werden.
- Der *Anbauflächenanteil* der Kulturart(en), für die ein Wirkstoff zugelassen werden soll, geht nicht in die Flächengewichtung für die CDFs der Boden-Klima-Kombinationen ein; Grundlage ist immer die gesamte Acker- und Sonderkulturanbaufläche in Deutschland. Für eine Kulturart wie bspw. Kartoffeln, die nur mit relativ geringem Flächenumfang und insbesondere nicht auf tonigen und lehmigen Böden angebaut wird, resultiert daraus möglicherweise die Auswahl eines Boden-Klima-Szenarios aus der CDF, das nicht dem tatsächlichen räumlichen 80. Perzentil der Verteilung dieser Kultur in Deutschland entspricht.
- Für die Simulation der *Wirkstoffkonzentrationen* im Gewässersediment (PECsed) werden (ebenso wie in FOCUSsw) keine eigenen Boden-Klima-Szenarien herangezogen, sondern es werden die gleichen Szenarien (respektive deren Zeitreihen der Wirkstoff-Austräge) verwendet, die auch zur Simulation der PECsw (gelöste Phase) ausgewählt worden sind. Dies erfolgt, weil (i) für die meisten Wirkstoffe die Austräge in der gelösten Phase dominieren und im Regelfall die kritischeren PECmax erzeugen, und (ii) um den Rechenzeitaufwand in GERDA nicht zu verdoppeln. Außerdem sind die Prozesse Runoff und Erosion sehr eng miteinander gekoppelt, so dass davon ausgegangen wird, dass die Rangfolge der Boden-Klima-Kombinationen auf der CDF für Erosionseinträge ähnlich ist der Reihenfolge der CDF für Runoff.
- Die CDFs beziehen sich auf die Applikationsflächen (Ackerland und Sonderkulturfläche) als räumlicher Grundgesamtheit. Da sich die Risikobewertung aber auf die Aquatik bezieht, müsste eigentlich die Gesamtheit der potenziell von PSM-Einträgen betroffenen *Gewässer-*

strecken in Deutschland zugrunde gelegt werden, und die Gewichtung der Boden-Klima-Szenarien müsste anhand der Länge der jeweils dadurch betroffenen Gewässerstrecken erfolgen. Dafür fehlt aber derzeit in Deutschland noch eine belastbare Geodatengrundlage zum Gewässernetz und zu den hydrologischen Kenngrößen der Gerinne.

- *Gewässerszenarien:* PEC_{sw} und PEC_{sed} werden in GERDA nur für die FOCUS_{sw} Gewässertypen „stream“ und „ditch“ berechnet, nicht jedoch für „pond“. Das Gewässerszenario pond wurde aus folgenden Gründen nicht berücksichtigt:
 - Die Ergebnisse der Untersuchung zur Modellkette PRZM–VFSSMOD–TOXSWA und der Vergleichsrechnungen STEPS-3 vs. TOXSWA vs. FOCUS_{sw} pond liefern für „pond“ im Regelfall niedrigere PEC (mutmaßlich mit Ausnahme zum einen der PEC_{sed} von stark sorbierenden Substanzen, zum anderen der PEC_{sw} nach Mehrfachapplikation sehr persistenter Wirkstoffe, was allerdings im Rahmen des Projekts nicht abschließend überprüft werden konnte).
 - Bei Einbezug des Gewässerszenarios pond würde die Zahl der PEC-Ergebnisse um 50 % zunehmen, was die Handhabung des Tools GERDA kompliziert und die Nutzerfreundlichkeit mindert.
 - Ungeklärt bleibt, ob die Sölle (Toteislöcher) bei Nichtberücksichtigung des pond als zu bewertendem Gewässerszenario ausreichend geschützt sind (s.a. Kap. I.3.8). In Nordostdeutschland (Brandenburg und Mecklenburg-Vorpommern) sind rund 78.000 Standgewässer <1 ha erfasst, davon rd. 40.000 mit einer Fläche <0,1 ha (Kalettka, 2012). In Brandenburg gehören davon rd. 70 % zum Biotoptyp 0212 (Kleingewässer i.e.S.: Sölle, Pfuhle, Kolke); Angaben für Mecklenburg-Vorpommern liegen nicht vor.
- Der Median des *Breite/Tiefe-Verhältnisses* von kleineren, frei fließenden Gewässern in Deutschland beträgt ungefähr 10 : 1 (Kubiak et al., 2014; s.a. Tab. II.3-3). Für das kürzlich neu entwickelte Drift- und Drainage-Szenario für Oberflächengewässer in den Niederlanden (Tiktak et al., 2012) ist als Referenzgewässer ein trapezförmiger Graben mit einer Breite von 2,62 m und einer Tiefe von 0,23 m, d.h. einem B/T von 11,4 festgelegt worden. Im GERDA-Ansatz wird jedoch die Dimensionierung der Gewässerszenarien ditch und stream gemäß FOCUS_{sw} beibehalten, d.h. B/T = 3,3. Dies erfolgt mit zwei Argumenten:
 - Mit Blick auf die Harmonisierung des Zulassungsverfahrens wären andere EU-Mitgliedsstaaten gegenwärtig möglicherweise überfordert, für das B/T-Verhältnis einen höheren (konservativeren) Wert einzuführen. Zudem sind Literaturdaten zum B/T-Verhältnis (Tab. II.3-3) im Wesentlichen bislang nur für Deutschland und die Niederlande verfügbar, eine Änderung der Annahme zum B/T-Verhältnis für die FOCUS_{sw}-Gewässerszenarien bedürfte einer breiteren Recherche zur Gewässermorphologie in den übrigen EU-Ländern.
 - In FOCUS_{sw} berücksichtigt die Berechnung der PEC_{sw}(Drift) kein Fließen im Gerinne. Die initiale Konzentration im Gewässer wird daher tendenziell überschätzt. Diese Überschätzung wird ausgeglichen durch die zu niedrige Menge der Drift-Deposition bezogen auf das Wasservolumen, bedingt durch das zu günstige Breite-Tiefe-Verhältnis. Wenn aufgrund der Forderung nach größerer Realitätsnähe ein B/T-Wert von bspw. 10 : 1 angenommen würde, dann wäre jedoch auch der Effekt des Fließens im Gewässer für die PEC-Berechnung zu berücksichtigen. Geht man von einer Fließgeschwindigkeit von $\geq 0,2$ km/h aus, dann wird die Drift-Deposition in einem 100 m Gewässerabschnitt innerhalb einer Stunde mit mindestens der 3-fachen Wassermenge verdünnt, die driftbedingte Konzentra-

tion wäre somit in diesem (dreifachen) Wasservolumen nicht höher als im FOCUS_{sw} stream Szenario (bei Annahme gleichmässiger Verteilung in diesem Wasservolumen).

- Für die Berechnung der CDFs und die daraus vorgenommene Auswahl der Boden-Klima-Szenarien für die Expositionsbewertung (nicht für die spätere Berechnung des PEC_{sw} im Rahmen einer GERDA-Simulation) wird als *Zieldatum der Applikationen* immer der 1. Tag des Monats verwendet. In Bezug auf Runoff- & Erosions-Einträge ist die Zeitspanne zwischen Applikationstermin und dem ersten Runoff-auslösenden Niederschlag jedoch ein sensibler Faktor für die PRZM-Simulation. Es ist nicht auszuschließen, dass bei Wahl eines anderen Zieldatums der Applikationstermine (z.B. immer der 15. eines Monats) für etliche Wetterzeitreihen auch andere annualPEC_{max} und annualAUC berechnet würden und die Boden-Klima-Kombinationen dann auch in anderer Reihenfolge gerankt worden wären, das heißt es würde eine andere Boden-Klima-Kombination für die PRZM-Berechnungen in der Expositionsbewertung im Zulassungsverfahren ausgewählt. Allerdings sollten durch die lange Evaluationsperiode von 30 Jahren die zufälligen Effekte des Applikationsdatums hinreichend minimiert sein.
- Der Konzentrationspeak im Gewässer infolge von Runoff-Einträgen wird mit der Modellkoppelung PRZM-STEPS-3, ebenso wie mit PRZM-TOXSWA, für Starkniederschläge möglicherweise zu niedrig berechnet. Zur Dauer eines Runoff-Ereignisses (in Stunden) und zur Niederschlagsintensität (in mm/h) während des Ereignisses stehen keine meteorologischen Daten zur Verfügung, stattdessen werden diese Größen programmintern aus der Tagesniederschlagsmenge (mm/d) berechnet (s. Kap. I.2.1, Anstrich 6).
- Wirkstoff-Eintrag über *Interflow* kann zwar von MACRO simuliert werden, wird aber bislang in GERDA nicht berücksichtigt (ausführliche Darstellung siehe Kap. II.6).
- Die Expositionsbewertung für Oberflächengewässer mit dem Modell EXPOSIT wird einerseits für die Risikobewertung aquatischer Organismen verwendet. Andererseits erfolgt auf Basis der errechneten Konzentration im Oberflächengewässer eine Abschätzung des Grundwassergefährdungspotenzials über den Eintragspfad *Uferfiltration*. Das Modell GERDA fokussiert allein auf die Expositionsabschätzung für Oberflächengewässer. Die Verwendung der mit GERDA errechneten Runoff & Erosion- oder Drainage-bedingten PEC-Werte für die Abschätzung des Grundwassergefährdungspotenzials über Uferfiltration ist grundsätzlich möglich, war jedoch nicht Gegenstand dieses Projektes.
- Die Auswahl der Boden-Klima-Kombination erfolgt anhand der Deskriptoren PEC_{max} und AUC (Area Under the Curve), die gemäß *TK-TD-Modellierungen* (Toxikokinetik-Toxikodynamik) die beste Korrelation mit den ökotoxikologischen Effekten *dynamischer* Expositionsprofile gezeigt haben. Auch wenn TK-TD-Modelle derzeit die einzigen wissenschaftlichen Ansätze sind, um Effekte von dynamischen Expositionsprofilen zu simulieren (s. Kap. II.8), so ergeben sich unter Berücksichtigung des aktuellen Entwicklungs- und Erkenntnisstandes zur Anwendung solcher Modelle insbesondere Unsicherheiten hinsichtlich der uneingeschränkten Übertragbarkeit der Ergebnisse auf subletale Effekte aufgrund des verwendeten generellen Modells für letale Effekte (GUTS, Jager et al. 2011). Während die durch die TK-Komponente abgebildeten Prozesse als unabhängig vom Effektyp (letal oder subletal) und daher grundsätzlich als gleich angenommen werden können, ist dies für die TD-Komponente nicht der Fall.

Im Gegensatz zu letalen Effekten spielt bei subletalen Effekten nicht nur die Wahrscheinlichkeit des Eintretens des Effektes (quantale Antwort), sondern auch die Ausprägung des Effektes eine Rolle (z.B. Hemmung der Reproduktion oder des Wachstums). Letale Effekte stellen aber insofern den worst case dar, da bei Auftreten dieses Effektes keine Erholung (des Organismus) mehr möglich ist, während dies bei subletalen Effekten nach Abnahme der internen Konzentration der Fall sein kann. Eine Reihung nach Anzahl der Peaks oder des Intervalls zwischen Einträgen ist unsinnig, da die Stärke und Dauer der Belastung dabei nicht berücksichtigt wird. Denkbar wäre die Reihung nach verschiedenen TWACs, was aber die Zahl der zu betrachtenden Szenarien erhöhen würde. PECmax und AUC können aber als die beiden Extreme des Spektrums möglicher TWACs angesehen werden. Eine Reihung nach der Anzahl von Tagen oberhalb eines ökotoxikologischen Schwellenwertes (RAC) wäre ebenfalls denkbar, ist aber nur substanzspezifisch und nicht generisch möglich. In GERDA-Anwendungen müssten die Verteilungen der Szenarien dafür immer neu erstellt werden.

- Die Evaluationsperiode im GERDA-Ansatz umfasst 30 Jahre, um die Variabilität des Wetters und damit die Häufigkeitsverteilung der Gewässerkonzentration in Bezug auf Einträge über Runoff und Drainage in vollem Umfang abzubilden. Daraus folgend kann jedoch für die Risikobewertung nicht ein bestimmtes *Konzentrations-Zeit-Profil* gewählt werden, das einen worst case darstellen würde, da jedes Wetterjahr und das daraus folgende Konzentrations-Zeit-Muster im Gewässer nur eine Zufallsauswahl (eine Stichprobe aus der Grundgesamtheit einer großen Zahl von Realisationen des Wettergeschehens) für eine bestimmte Boden-Klima-Wirkstoff-Applikation-Kombination darstellen. Es ergibt sich demzufolge eine Vielzahl möglicher Konzentrations-Zeitprofile. Für die Risikobewertung kann daher nicht ein einzelnes Konzentrations-Zeit-Profil zur Verfügung gestellt werden (was auch nicht sinnvoll wäre), sondern es sind aus der Häufigkeitsverteilung über alle Szenarien abstrahierte PEC-Werte (z.B. PECmax, TWACs) abzuleiten, welche aus ökotoxikologischer Sicht geeignete Deskriptoren zur Charakterisierung der Exposition darstellen. Mit dieser Vorgehensweise sind Informationsverluste verbunden (z.B. zur Länge von Intervallen zwischen Peaks), die jedoch nicht zur Folge haben sollten, dass ökotoxikologisch relevante Expositionsmuster nicht abgedeckt werden können.

Einige der vorstehend aufgeführten fachlichen und arbeitswirtschaftlichen Beschränkungen bzw. Kompromisse in der Entwicklung des Tools GERDA werden im Kap. I.3.8 im Zusammenhang mit den Optionen für die zukünftige Weiterentwicklungen von GERDA teilweise nochmals angesprochen.

I.3.7 Unterschiede in den Ansätzen GERDA und FOCUSsw

Bei der Entwicklung des GERDA-Ansatzes zur Expositionsabschätzung wurde – in Hinblick auf das Ziel einer EU-Harmonisierung - angestrebt, das Verfahren so weit wie möglich analog zum FOCUSsw-Ansatz zu gestalten. Neben dem zentralen Unterschied, der Herleitung von Boden-Klima-Szenarien mit statistisch basierter Repräsentativität für Deutschland, gibt es jedoch Punkte, in denen aus fachlichen Gründen von den FOCUSsw-Annahmen abgewichen wird.

Tab. I.3-4 gibt eine Übersicht zu den Unterschieden zwischen den Ansätzen nach GERDA und FOCUSsw. Die Begründungen für diese Modifikationen im nationalen Ansatz für Deutschland sind in den entsprechenden Kapiteln zu finden. Weiterhin wird daran anschließend der Unter-

schied bezüglich der Modellwahl für die Simulation von Konzentration und Verbleib im Gewässer erläutert.

Im FOCUS_{sw}-Ansatz werden die Wirkstoff-Konzentrationen in den Gewässerszenarien ditch, stream und pond mit dem Modell TOXSWA berechnet. Im Ansatz von GERDA wird dafür stattdessen das Modell STEPS-3 aus dem Modellpaket STEPS-1-2-3-4 (Klein, 2007) verwendet (s. Kap. I.4), das erheblich weniger Rechenzeit erfordert und stabil läuft.

Reichenberger und Pires (2013) haben eine umfassende vergleichende Simulationsstudie mit STEPS-3 und TOXSWA durchgeführt (s. a. Anhang A10). Dieser Studie zufolge liefert STEPS-3 nahezu identische Werte der PEC_{sw} und $TWAC_{sw}$ wie TOXSWA (außer in wenigen Fällen von extremen Parameterkombinationen). Bei den Werten für PEC_{sed} und $TWAC_{sed}$ treten jedoch in einigen Parameterbereichen mehr oder weniger große Unterschiede zwischen den beiden Modellen in Erscheinung (es ist anzumerken, dass nicht a priori davon auszugehen ist, dass die TOXSWA-Ergebnisse der PEC_{sed} zutreffender wären als diejenigen von STEPS-3).

Im Rahmen der Studie wurde weiterhin untersucht, ob sich diese Unterschiede mit einer geänderten Parametrisierung von STEPS-3 reduzieren lassen. Es konnte gezeigt werden, dass die bisherige in der Standardversion von STEPS-1-2-3-4 verwendete Parametrisierung einen akzeptablen Kompromiss darstellt zwischen einer - im Vergleich zu TOXSWA - guten Abbildung des Zeitverlaufs von PEC_{sed} und einer guten Schätzung der PEC_{sed} -Peaks in den verschiedenen Gewässerszenarien. Mit dieser Parametrisierung ergibt STEPS-3 konservativere und dabei nicht gravierend abweichende Werte von PEC_{sed} im Vergleich zu TOXSWA. Es erscheint daher gerechtfertigt, im GERDA-Ansatz das Modell TOXSWA durch STEPS-3 mit der gegenwärtigen Parametrisierung zu ersetzen.

Tab. I.3-4 Übersicht zu Unterschieden zwischen den Ansätzen zur Expositionsabschätzung nach GERDA und FOCUS_{sw}.

	Expositionsabschätzung nach GERDA (Stufe 3 bzw. Stufe 4)	Expositionsabschätzung nach FOCUS_{sw} (Step 3 bzw. Step 4)
Boden-Klima-Szenarien	Auswahl spezifisch für Deutschland für eine zuzulassende Substanz auf Basis eines definierten räumlich-zeitlichen Perzentils (bezogen auf die Ackerfläche in Deutschland) der $annualPEC_{max,sw}$ bzw. der $annualAUC_{sw}$	4 R-, 6 D-Szenarien für gesamte EU; keine Aussage zum Perzentil möglich
Zeitreihe der Simulation und Auswertung für PRZM und MACRO-Einträge	30-jährige Zeitreihe (1982 - 2011)	Simulation: PRZM 20 Jahre, MACRO 7,33 Jahre; Auswertung: PRZM 12 Monate, MACRO 16 Monate
Expositionsendpunkte	jeweils das 80. Perzentil der 30-jährigen Konzentrationszeitreihen (d.h. 6.-höchster Wert von 30 Jahresmaxima) von $annualPEC_{max,sw}$ und $annualPEC_{max,sed}$	$PEC_{max,sw}$ und $PEC_{max,sed}$ mit Runoff/Erosion und Drainage-Eintrag nur für ein vorgegebenes Auswertungsjahr
Simulation von Verdünnung, Abbau	Modell STEPS-3 (ausführliche Erläuterung s.	Modell TOXSWA

	Expositionsabschätzung nach GERDA (Stufe 3 bzw. Stufe 4)	Expositionsabschätzung nach FOCUSsw (Step 3 bzw. Step 4)
und Adsorption im Wasser-Sediment-System	nachstehender Text)	
Gewässerszenarien	Modell STEPS-3: ditch und stream, sowohl für Runoff als auch für Drainage	ditch, pond und stream in Abhängigkeit vom Boden-Klima-Szenario (ditch tritt nur in Verbindung mit Drainage auf)
Drift-Deposition	Driftfunktion nach FOOTPRINT (Funktions-parameter wurden auf Basis der Original-daten von Ganzelmeier und Rautmann [Rautmann et al., 2001] neu berechnet) ^a	Driftfunktion: 90. Perzentil nach erneutem Fit an die Eckwerte von Ganzelmeier-und Rautmann [Rautmann et al., 2001] (die bereits gefittete Werte darstellen)
Driftdeposition bei Mehrfachapplikationen	90. Perzentil für das letzte Applikationsereignis in der Anwendung, 50. Perzentil für alle anderen Applikationsereignisse ^b	2 * 82. Perzentil für 2 Applikationen, 3 * 77. Perzentil für 3 Applikationen usw. Für schnell in Wasser abbaubare Wirkstoffe sind zwei PEC-Berechnungen erforderlich, um zu prüfen, ob Applikationen unabhängig voneinander sind (d.h. ob PEC Einzelanwendung größer ist als PEC Mehrfachanwendung)
Deposition über atmosphärischen Nahtransport	Modell EVA für Wirkstoffe mit Dampfdruck $\geq 10^{-5}$ Pa (siehe FOCUS Air 2008) ^c	Keine Berücksichtigung
PRZM-Simulation: Größe der Erosions-beitragenden Fläche	1 ha (gesamtes Feld)	0,2 ha
Pesticide Application Timer	PAT nach Footways ^c	FOCUS PAT
Überprüfung der Eignung der PEC _{max} zur Bewertung von komplexen PEC _{sw} -Expositionsmustern	Überprüfung der worst case-ness des Expositionsendpunktes (PEC _{max} und AUC) hinsichtlich des ökotoxikologischen Risikos von komplexen PEC _{sw} -Expositionsmustern mittels TK-TD-Modellierung (bezogen auf letale Effekte)	Keine Aussagen zur Bewertung von komplexen PEC _{sw} -Expositionsmustern mit dem gewählten Expositionsendpunkt PEC _{max}
Mögliche Minderungsmaßnahmen in Stufe 4	- Modellierung des Wirkstoff-Rückhalts in grasbewachsenen Filterstreifen (VFS) mit Modell VFSSMOD - Anteil des Upstream Catchments, der mit Pufferstreifen ausgestattet ist, festgesetzt auf 60 % für stream und 50 % für ditch	Modellierung mit SWAN 3.0: - Feste Reduktionsfaktoren für grasbewachsenen Filterstreifen nach FOCUS (2007a) oder Modell VFSSMOD - 20 % des Upstream Catchments (UC) mit Pufferstreifen ausgestattet; die nicht mit dem zu modellierenden PSM behandelte

	Expositionsabschätzung nach GERDA (Stufe 3 bzw. Stufe 4)	Expositionsabschätzung nach FOCUSsw (Step 3 bzw. Step 4)
		Fläche des UC (80 %) hat keine Pufferstreifen (daraus resultiert hohe Verdünnung des Runoffeintrages)

a), b), c): Erläuterungen s. Kap. I.4.4

Im Rahmen der Studie wurde weiterhin untersucht, ob sich diese Unterschiede mit einer geänderten Parametrisierung von STEPS-3 reduzieren lassen. Es konnte gezeigt werden, dass die bisherige in der Standardversion von STEPS-1-2-3-4 verwendete Parametrisierung einen akzeptablen Kompromiss darstellt zwischen einer - im Vergleich zu TOXSWA - guten Abbildung des Zeitverlaufs von PECsed und einer guten Schätzung der PECsed-Peaks in den verschiedenen Gewässerszenarien. Mit dieser Parametrisierung ergibt STEPS-3 konservativere und dabei nicht gravierend abweichende Werte von PECsed im Vergleich zu TOXSWA. Es erscheint daher gerechtfertigt, im GERDA-Ansatz das Modell TOXSWA durch STEPS-3 mit der gegenwärtigen Parametrisierung zu ersetzen.

I.3.8 Ausblick, Übertragbarkeit und weiterer Forschungs- und Entwicklungsbedarf

Harmonisierung auf EU Ebene

In Kap. I.2.6 wird empfohlen, in Zukunft nicht die Szenarien, sondern die Methodik der nationalen Risikoabschätzungsverfahren in der EU zu harmonisieren. Die hier vorgestellte Methodik bildet nach Meinung der Autoren einen geeigneten Ausgangspunkt dafür. Der GERDA-Ansatz ist grundsätzlich auch auf der EU-Ebene anwendbar und würde einige der in Kap. I.2 aufgezeigten Schwachstellen des FOCUSsw-Ansatzes überwinden.

Im Rahmen des GERDA-Projekts werden Boden-Klima-Szenarien nur für das nationale Zulassungsverfahren in Deutschland abgeleitet. Verteilungsfunktionen (CDFs) der Boden-Klima-Kombinationen (bezogen auf die Grundgesamtheit aller potenziellen Applikationen in einem Territorium innerhalb eines bestimmten Zeitraum) können jedoch mit überschaubarem Arbeitsaufwand für jedes Land ermittelt werden. Die dafür erforderlichen Bodeninformationen (s. Kap. II.1) und meteorologischen Daten (s. Kap. II.2) sind nach Stand der Kenntnis für (nahezu) alle EU-Mitgliedsstaaten verfügbar.

Sicherung der Pflege und Weiterentwicklung des GERDA Tools

Ziel des hier vorgestellten Projektes ist es, die Expositionsabschätzung mittels EXPOSIT in absehbarer Zeit in Deutschland abzulösen durch den neu entwickelten GERDA-Ansatz. Für diesen Fall sind nach Projektende die notwendigen finanziellen und institutionellen Ressourcen bereit zu stellen, um die zukünftig unverzichtbaren Fehlerkorrekturen, Weiterentwicklungen und Ergänzungen in GERDA zu gewährleisten, einschließlich der Einbindung neuer Versionen der Modelle PRZM, MACRO, STEPS-3 und VFSSMOD (und ggf. weitere). Auch die EFSA (2013a) weist unter anderem in ihrer Stellungnahme zur Risikoabschätzung für das Grundwasser darauf hin, dass die Überprüfung und Verbesserung der verwendeten Modelle und deren Versionskontrolle in einem Zulassungsverfahren einen kritischen Punkt darstellen. Dafür sind eindeutig festgelegte und kontinuierliche Prozeduren zu entwickeln, deren Abläufe und Ergebnisse transparent und qualitätsgesichert sind und deren Finanzierung auch auf längere Sicht gewährleistet ist.

Weiterer Forschungs- und Entwicklungsbedarf

Szenariendefinition

Aus Konsistenzgründen mit FOCUS wurden die Beschreibung der Gewässer Graben (ditch) und Bach (stream) in Bezug auf Hydrologie und Morphologie übernommen. Grundsätzlich wäre auch eine Parametrisierung auf Basis von Freilanddaten denkbar (s. z.B. Kap. II.3.4 zum Breite-Tiefe-Verhältnis).

Ein Gewässerszenario „pond“ wurde in GERDA bisher nicht implementiert (s. Kap. I.3.6, Anstrich „Gewässerszenarien“). Eine Abschätzung, ob durch die Szenarien Graben und Bach auch Teiche (pond) in Deutschland, insbesondere die Sölle in Nordostdeutschland, ausreichend protektiv abgedeckt sind, steht aus. Dabei wäre auch zu klären, ob gegebenenfalls das FOCUS-Szenario pond übernommen werden könnte, oder ob in Bezug auf Morphologie, Durchfluss und PSM-Einträge andere Annahmen getroffen werden müssten.

Als Option für das Bewertungsverfahren könnten zukünftig, als weiterer Schritt in Richtung größerer Realitätsnähe, die Expositionszeitreihen nicht mehr für die Gewässerszenarien ditch und stream des FOCUSsw-Ansatzes berechnet werden, sondern für eine Reihe von *generischen* Fließgewässern. Diese Gewässerszenarien sind so zu definieren, dass sie *repräsentativ* für ein bestimmtes Perzentil der *realen* Ausprägung der konzentrationsbestimmenden Eigenschaften von Fließgewässern und Einzugsgebieten in Deutschland sind. Diese Option würde dann Stufe 5 des GERDA-Verfahrens bilden.

Das Aquatische Guidance Document der EFSA (2013) sieht als eine Möglichkeit des Higher Tier Risk Assessment auch Effektmodellierung vor (z.B. TK-TD- und/oder Populationsmodelle). Für die Anwendung solcher Modelle sind ebenfalls Szenarien notwendig, die die abiotischen Parameter beschreiben (z.B. Wassertemperatur, Nährstoffgehalt, je nach Modell auch Landschaftsstruktur bzw. Gewässernetz). Weiterhin sollten Szenarien- und Stressor-spezifische vulnerable Arten identifiziert werden, die in der Risikoabschätzung zu betrachten sind. Solche ökologischen Szenarien sollten idealerweise mit den Expositionsszenarien gekoppelt sein (Hommen et al., 2016). In einem Projekt für die niederländische Regierung entwickelt Alterra solche ökologischen Szenarien für die Risikobewertung von Pflanzenschutzmitteln in den Niederlanden. Der vorgeschlagene Ansatz verbindet biologische Monitoringdaten, Toxizitätsdaten und Informationen zu relevanten biologischen „Traits“, um vulnerable Arten zu bestimmen (Rico and Van den Brink, 2015; Rico et al., 2016).

Modellierung der Risikominderung durch Filterstreifen mit VFSSMOD

Die Verwendbarkeit des Modells VFSSMOD (Muñoz-Carpena und Parsons, 2011) in Verbindung mit der Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) als zentralem Ansatz zur Simulation der Verminderung der Wirkstofffracht durch Filterstreifen (VFS) ist noch nicht hinreichend geklärt (s. Kap. II.7.7). Vor einer routinemäßigen Anwendung dieses Ansatzes im Rahmen des Zulassungsverfahrens (GERDA Stufe 4) halten die Autoren weitere Untersuchungen zur Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) für erforderlich.

- Untersuchung des Bereichs der Anwendbarkeit der Gleichung von Sabbagh et al. (2009), unter Nutzung von (i) zusätzlichen experimentellen Validierungsdaten und (ii) weiteren VFSSMOD-Outputdaten zur Verminderung von Runoff und Sedimentfracht.
- Überprüfung und ggf. Neuberechnung der Regressionsanalyse mit (i) korrekt behandelten "n/a (not available)"-Werten, (ii) zusätzlichen experimentellen Datenpunkten für Kalibrierung und Validierung, und (iii) Prüfung alternativer Strukturen der Regressionsgleichung.

Die beiden mit Abstand sensitivsten Größen des Modell VFSSMOD in der Berechnung der Verminderung von Runoff-Volumen und erodierter Sedimentfracht sind die beiden Variablen (i) „effektive Fließbreite“ des Oberflächenabflusses (FWIDTH), die den Grad der Abflusskonzentration wiedergibt, und (ii) die Länge des VFS in Fließrichtung (VL, üblicherweise als Breite eines Filterstreifens bezeichnet). Mangels besserem Kenntnisstand wird derzeit von den Autoren vorgeschlagen, dass in GERDA Stufe 4 beide Werte vom Nutzer frei gewählt werden können (s. Kap. II.7.9). Im Hinblick auf die zukünftige regulatorische Praxis wird dies jedoch nicht als sinnvolle Option betrachtet. FWIDTH hängt zum einen von der Relief-Ausformung in einem Einzugsgebiet (Hangneigung, Konvergenz des Abflusses auf der Landoberfläche) und zum anderen vom Niederschlagsereignis, d.h. der Intensität des Oberflächenabflusses ab. Sofern für das Tool GERDA (Stufe 4, Gewässerszenario stream) zur Abbildung von Risk Management Optionen ein fester Wert von FWIDTH festgelegt werden sollte, ist es erforderlich, zunächst GIS-

basierte Landschaftsanalysen durchzuführen, um die Verteilungen von FWIDTH in den Agrarregionen in Deutschland zu erfassen. Auch für VL werden in der regulatorischen Praxis vor dem Hintergrund praktikabler und kontrollierbarer bundesweiter Risikomanagementmaßnahmen ausgewählte Werte (bspw. 5, 10 oder 20 Meter) sinnvoll sein.

Reduktionswirkung von Risikominderungsmaßnahmen

Die Festlegung eines (fixen) Prozentwertes der Reduzierung des Wirkstoffeintrags über Runoff und Erosion bzw. Drainage durch eine Minderungsmaßnahme stellt eine außerordentlich sensitive Stellgröße im Zulassungsverfahren dar. Aus wissenschaftlicher Sicht erscheint es fragwürdig, einen solchen Wert ausschließlich auf Basis von nur ein oder zwei Versuchsergebnissen festzulegen (wie das bspw. im Rahmen der MAgPIE workshops vorgeschlagen wird; s. Kap. II.10.3.3). Zudem wäre jeweils kritisch zu prüfen, wie repräsentativ die Rahmenbedingungen (Bodeneigenschaften, Witterungsverlauf, Kulturart usw.) der betreffenden Versuche für die Gesamtheit der Landschaftseigenschaften in Deutschland (bzw. Europa) waren; mit anderen Worten welchem Perzentil in der Verteilung der Reduktionseffizienzen über alle Applikations-situationen der jeweilige Versuch entsprach.

Für den Fall, dass default-Werte für die Reduktionsleistung von on-site-Maßnahmen (Bodenbearbeitung, Bodenbedeckung) oder off-site-Maßnahmen (vor allem VFS) mittels statistischer Auswertung (einer ausreichend großen Zahl) von Versuchsergebnissen erfolgt, dann ist zu prüfen, ob der *Median*-Wert der experimentell gemessenen Reduktionsleistungen oder ein konservativeres Perzentil, bspw. das 80. oder 90. Perzentil der Verteilung der Minderungsleistung herangezogen werden soll. Einerseits sind im Risk Assessment grundsätzlich konservative Annahmen bzw. Randbedingungen zu wählen, andererseits führt eine Kumulierung von worst case-Annahmen (respektive Perzentilen) im Resultat zu einem extrem seltenen Ereignis.

Falls erwogen wird, für das Zulassungsverfahren in Deutschland die Eintragsminderung durch geänderte Bodenbearbeitungsverfahren (no tillage, reduced tillage) über eine Änderung der Parametrisierung der Curve Numbers in PRZM umzusetzen, dann wären aus Sicht der Autoren vorab zwei Fragen zu prüfen: (i) Stellt der SCS-Curve Number Ansatz, in Anbetracht seiner grundsätzlichen konzeptionellen Probleme (s. Kap. II.4.2.4), überhaupt ein belastbares Modell dafür dar? (ii) Um wie viele Einheiten wäre der Curve Number-Wert (in Abhängigkeit von der Soil Hydrologic Group) dann zu vermindern, um die Reduktionseffizienz einer bestimmten Maßnahme (wie bspw. einer geänderten Bodenbearbeitung) adäquat abzubilden? Insbesondere zu (ii) wäre eine weiterführende Literaturrecherche erforderlich.

I.4 Das Softwaretool GERDA v1.0

Die Handhabung des Tools GERDA wird im **User Manual** ausführlich beschrieben. Die technische Funktionsweise, die dem Tool GERDA zugrunde liegenden Inputdaten sowie die Parametrisierungsmethodik sind im **Technical Report** dargestellt. User Manual und Technical Report werden als ein kombiniertes Dokument (Klein & Reichenberger, in preparation) auf Englisch bereitgestellt werden. Im Folgenden wird an dieser Stelle nur eine kurze Übersicht zum GERDA Tool gegeben.

I.4.1 Generelles Konzept der Software GERDA

Das Ziel der Entwicklung von GERDA ist es, ein Werkzeug zur regulatorischen Expositionsabschätzung in Deutschland für PSM-Einträge in Oberflächengewässer über Oberflächenabfluss, Erosion, Drainage, Spraydrift und Volatilisation/Deposition bereitzustellen. Das Werkzeug soll alle landwirtschaftlich relevanten agro-pedo-klimatischen Bedingungen in Deutschland berücksichtigen und die Modellierung des Effekts von Minderungsmaßnahmen (mitigation measures) ermöglichen. Die Software soll ferner nutzerfreundlicher sein als FOCUS-SWASH und wird (im Gegensatz zu FOCUS-SWASH) über eine einzige Benutzeroberfläche bedient.

GERDA v1.0 verwendet die folgenden Modelle bzw. Programme:

- **MACRO 5.2** für PSM-Austräge aus dem Feld über Drainagen.
- **PRZM 4.51** zur Simulation der PSM-Austräge über Oberflächenabfluss (surface runoff) und Erosion.
- **EVA** (Exposure Via Air) zur Berechnung der Deposition über atmosphärische Nahtransport nach Volatilisation.
- **Abdriftfunktion** nach Ganzelmeier mit Parameterwerten von FOOTPRINT (berechnet aus den Rohdaten v. Ganzelmeier und Rautmann [Rautmann et al., 2001]) zur Berechnung der Einträge über Spraydrift (s. Kap. I.4.4.2).
- **STEPS-3** aus STEPS-1-2-3-4 (Klein, 2007) zur Simulation von Konzentration, Abbau und Verbleib im Gewässer.
- Für higher-tier-Simulationen (GERDA Stufe 4, Berücksichtigung von Risikominderungsmaßnahmen) kann mit **VFSMOD 4.2.4** die Reduktion der Runoff- und Erosionseinträge ins Gewässer durch grasbewachsene Pufferstreifen (vegetated filter strips, VFS) dynamisch simuliert werden. Die Version VFSMOD 4.2.4 ist in der Lage, einen hochanstehenden Wasserspiegel zu simulieren (was z.B. für Auenböden und Gleye von Bedeutung ist).

Die Parametrisierung der Böden und der Kulturen für die Modelle MACRO und PRZM erfolgt nach der im EU-Projekt FOOTPRINT erarbeiteten Methodik (Dubus et al., 2009). MACRO 5.2 und PRZM 4.51 sind die gleichen Versionen der Modelle, die auch in FOCUS surface water zum Einsatz kommen. STEPS-3 ersetzt das Modell TOXSWA des FOCUSsw-Ansatzes und liefert für PECsw nahezu identische Ergebnisse (siehe Kap. I.3.7).

Unter Verwendung der aufgeführten Programme und mit den gewählten Parametrisierungen berechnet GERDA **stündliche 30-Jahres-Zeitreihen** von **PECsw** und **PECsed** für

- Einträge über Drainage + Spray Drift + Deposition nach Volatilisation
- Einträge über Oberflächenabfluss (Runoff) und Erosion + Spray Drift + Deposition nach Volatilisation.

GERDA enthält folgende **agro-pedo-klimatische Szenarien**

- 12 Klimaszenarien (Wetterzeitreihen 1982 – 2011 von 12 DWD-Wetterstationen)
- 102 landwirtschaftlich relevante FOOTPRINT Soil Types (FSTs) in Deutschland (für PRZM Simulationen), davon 36 gedränt (für MACRO)
- 49 parametrisierte Kulturen (davon stehen dem Nutzer in der aktuellen Version allerdings aus technischen Gründen nur 25 FOCUSsw-analoge Kulturen zur Auswahl; die übrigen Kulturen, die zwar in FOOTPRINT bzw. Footways angelegt sind, aber nicht in FOCUSsw vorkommen, sind für den Nutzer vorerst nicht auswählbar).

Neben der Simulation von Minderungsmaßnahmen (GERDA Stufe4) stehen dem Nutzer noch weitere Optionen zur Verfügung:

- 1) In MACRO und in PRZM kann **kinetische Sorption** simuliert werden (Streck-Altfelder-Modell). Die kinetischen Sorptionsparameter können vom Nutzer sowohl als Streck-Parameter (α , f) als auch als Boesten-Parameter (F_{ne} , kd) eingegeben werden.
- 2) Für jede applizierte Substanz kann in der aktuellen Version von GERDA ein **Metabolit** gebildet werden. Der Metabolit kann hierbei im Boden, in Wasser/Sediment oder beiden gebildet werden (in späteren Versionen kann die Anzahl der simulierten Metaboliten erhöht werden).

1.4.2 Technische Beschreibung von GERDA Stufe 3 und Stufe 4

Das Softwarepaket GERDA umfasst die folgenden ausführbaren Dateien (Executables):

- STEPS.exe: die eigentliche GERDA-Executable (Programmierung: Michael Klein, Fraunhofer IME) mit folgenden Funktionen:
 - Benutzeroberfläche von GERDA
 - Datenmanagement (Projekte und Substanzen)
 - interne Datenübergabe
 - Berechnung von PECsw und PECsed
 - Aufarbeitung der stündlichen PECsw-/PECsed-Zeitreihen zu den relevanten Endpunkten
- MACRO 5.2 (MACRO52Model.exe)
- winprzm.exe (v. 4.51)
- v fsm.exe (v. 4.2.4)
- Mehrere Hilfsprogramme
 - exeparfile.exe (Programmierung: Fredrik Stenemo, Geosigma)
 - m2t.exe (modifizierte Version; Programmierung: Fredrik Stenemo, Geosigma)
 - GERDAp2t.exe (Programmierung: Djamal Guerniche, RLP Agrosience)
 - PTModifierGERDA.exe (Programmierung: Djamal Guerniche, RLP Agrosience)

- VFSMODforGERDA.exe (Programmierung: Djamel Guerniche, RLP Agrosience)
- calc_interception_for_EVA.exe (Programmierung: Michael Klein, Fraunhofer IME)

Die GERDA-Software wurde für das Betriebssystem Windows 7 (32bit oder 64bit) entwickelt. Es wurden unter 32bit-Windows jedoch numerische Probleme mit VFSMOD beobachtet, die unter 64bit nicht auftraten. Es wird daher empfohlen, GERDA nur mit Windows 7 64bit zu verwenden.

Fast alle Inputparameter für GERDA sind in der GERDA Input Database abgelegt (GERDA_input_data_20140625.acddb), die im Installationspaket enthalten ist. Die bodenhydraulischen Parameter für MACRO sind nur in den MACRO parameter_files (.par) zu finden. Während die Hilfsprogramme PTModifierGERDA.exe und VFSMODforGERDA.exe direkt auf die Datenbank zugreifen, benutzt STEPS.exe als Input noch ein Textfile (scenario_DE.txt), das durch Export aus der GERDA Input Database erzeugt wurde. Für zukünftige Versionen von GERDA könnte auch STEPS.exe auf Datenbankzugriff umgestellt werden.

Das GERDA-Installationspaket beinhaltet insgesamt 1296 räumliche Verteilungsfunktionen (CDFs) von "worst case-ness" bzw. "vulnerability", die quantitativ mittels MACRO-, PRZM- und STEPS-Modellierung (s. Kap. I.3.2.5) und den Flächenanteilen der FST-Klima-Kombinationen an der ackerbaulich relevanten Fläche (s. Anhang A6) ermittelt wurden.

Die CDFs entsprechen eindeutigen Kombinationen von (in Klammern: Anzahl Wertestufen):

- PSM-Eintragspfad: Drainage oder Runoff & Erosion (2)
- Koc: 5 Stufen (surface runoff & erosion) oder 4 Stufen (drainflow) (5/4)
- DT50 im Boden: (3)
- Applikationsmonat (12)
- Saisonalität: Winter- oder Sommerkultur (2)
- Deskriptorvariable: 80. Perzentil (annual PEC_{sw,max}) oder 80. Perzentil (annual AUC_{sw}) (2)

Die CDFs für Runoff umfassen jeweils 1153 Boden-Klima-Kombinationen (mit „Boden“ ist hier „potenzieller FST“ gemeint), die CDFs für Drainage enthalten 395 Boden-Klima-Kombinationen, und zwar sowohl gedränte als auch ungedränte potenzielle FSTs. Da die Boden-Klima-Kombinationen mit ungedränten Böden immer eine Drainage-PEC_{sw,max} von 0 liefern, haben die Drainage-CDFs einen Achsenabschnitt, der dem Anteil der ungedränten an der gesamten ackerbaulich relevanten Fläche in Deutschland entspricht. Dieser Anteil liegt (gemäß Ergebnis der FST-Klassifizierung) bei rund 70 %.

Die räumlichen (= flächengewichteten) CDFs (= 1296 CDFs) wurden durch Zusammenbringen der PEC_{sw} bzw. AUC_{sw} (berechnet für die Kombinationen der parametrisierten FST und Klimacluster) und der Flächenanteile der Boden-Klima-Kombinationen (Kombinationen von potenziellem FST und Klimacluster) wie folgt erzeugt:

- (i) Die PEC_{sw}- bzw. AUC_{sw}-Tabellen enthalten in ihrem Primärschlüssel den parametrisierten FST und die Klimazone.
- (ii) Die Flächenanteile der Kombinationen von potenziellem FST und Klima an der ackerbaulich relevanten Fläche sind bekannt (s. Anhang A6).
- (iii) Die Relation potenzieller FST / parametrisierter FST ist ebenfalls bekannt.

Um PECsw bzw. AUCsw mit den Flächenanteilen der Kombinationen von potenziellem FST und Klimazone zusammenzuführen, reicht dann eine SQL-Abfrage mit den drei Tabellen aus. Hierbei werden die PECsw und AUCsw ueber die Zuordnungstabelle (iii) von den Kombinationen parametrisierter FST / Klimazone (i) auf die Kombinationen potenzieller FST / Klimazone (ii) übertragen.

1.4.3 Bedienung von GERDA Stufe 3 und Stufe 4

Die Oberfläche von GERDA (Abb. I.4-1) ist eine Erweiterung der Oberfläche von STEPS-1-2-3-4 (Klein, 2007). Es werden hier nachfolgend jedoch nur die Tabs GERDA Stufe 3 und GERDA Stufe 4 vorgestellt. GERDA Stufe 1 und Stufe 2 sind mit FOCUS Step 1 und Step 2 identisch (Stufe 2 wird in GERDA nur für Zone „North“ berechnet).

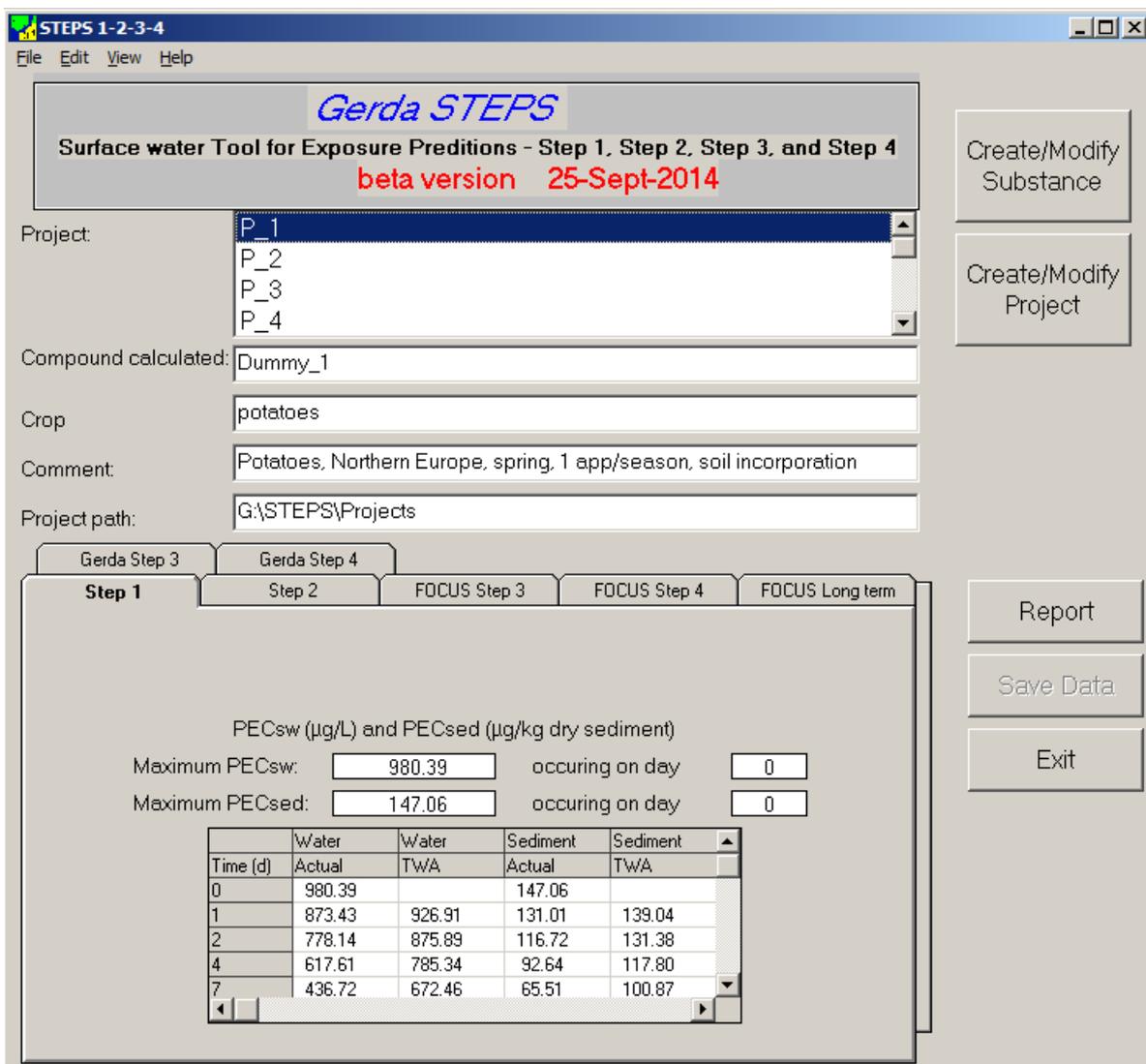


Abb. I.4-1: GERDA STEPS: Main Screen.

I.4.3.1 Substanzen und Projekte

Die Simulationen sind in Projekten organisiert. Ein Projekt in GERDA beinhaltet

- eine aktive Substanz (mit oder ohne Metabolit)
- eine Kultur
- ein Applikationsschema.

Die GERDA-Oberfläche erlaubt dem Nutzer, Substanzen (Abb. I.4-2 und I.4-3) und Projekte (Abb. I.4-4)

- hinzuzufügen
- zu modifizieren
- zu kopieren
- zu löschen.

Projekte und Substanzeigenschaften sind in einer Datenbank (technisch sind es zwei Textdateien) abgelegt.

Gerda STEPS: Substance specific information

Compound calculated:

Comment:

Substance specific data

Molecular Mass(g/mol):	<input type="text" value="190.300"/>	DegT50 in sed/water system (d):	<input type="text" value="6.000"/>
Water solubility at 20 °C (mg/L)	<input type="text" value="6000.000"/>	DegT50 in water (d):	<input type="text" value="6.000"/>
Reference temperature for the water solubility (°C)	<input type="text" value="25.000"/>	DegT50 in sediment (d):	<input type="text" value="6.000"/>
Molar enthalpy of dissolution (J/mol):	<input type="text" value="27000.000"/>	DegT50 in soil (d):	<input type="text" value="6.000"/>
		KOC (L/kg):	<input type="text" value="15.000"/>

include following metabolite

Type of Compound

Parent

Metabolite

Simulation Level

Step 2

Higher Tiers incl. Gerda-scenarios

Record

Add

Delete

Copy

Cancel

Help

Done

Additional parameters used at FOCUS/Gerda. STEP 3

Abb. I.4-2: GERDA-STEPs: Bearbeiten der Basis-Substanzparameter.

Additional parameters for higher tiers:

Degradation		Miscellaneous	
Q10-factor (STEPS):	2.200	Vapour pressure at 20°C (Pa):	0.017
Q10-factor (PRZM):	2.200	Reference temperature for vapour pressure (°C)	20.000
MACRO temperature dependency exponent TRESP (1/K):	0.079	Molar enthalpy of vaporization (J/mol):	95000.000
Reference temperature for DegT50 in soil (°C)	20.000	Diffusion coefficient in water (m²/d):	4.30E-05
Reference temperature for DegT50 in water (°C)	20.000	Diffusion coefficient in air (m²/d):	0.430
Reference temperature for DegT50 in sediment	20.000	Plant uptake factor (-)	0.500
Reference soil moisture (% FC):	100.000	Foliar washoff coefficient (1/mm):	0.050
Walker exponent (-):	0.700	Foliar dissipation half-life (d):	10.000
Walker exponent MACRO 553 (-):	0.490		
Sorption			
Freundlich exponent (-):	1.000		
<input type="checkbox"/> Consider kinetic sorption			
Kinetik Sorption			
PEARL Fne-parameter (-):	0.499		
Streck parameter f (-):	0.00E+00		
PEARL Desorption rate coefficient(1/d):	0.667		
Streck parameter alpha (1/d):	0.00E+00		

Cancel Done

Abb. I.4-3: Bearbeiten zusätzlicher Substanzparameter, die von GERDA benötigt werden.

Gerda STEPS: Project properties

Projects: P_1
 Project path: G:\STEPS\Projects
 Comment: Potatoes, Northern Europe, spring, 1 app/season, soil incorporation
 Active substance: Dummy_1
 No metabolites

General information
 Number of applications per season: 1
 Crop type: potatoes
 Method: soil incorp.
 Incorporation depth (cm): 5

Tier1 and Tier2 information
 Application rate of a.i. (g/ha): 3000.000
 Crop interception: no interception
 Region and season of application: North Europe, Mar. - May

Higher Tier information
 App. No: 1 Rate (g/ha): 3000
 Relative app. window App. month
 Relative application window
 -14 days to 16 days
 related to 1st emergence

Simulation Level
 Step 1
 Step 2
 Higher Tiers incl. Gerda-scenarios

Record
 Add
 Delete
 Copy
 Cancel
 Help
 Done



Abb. I.4-4: Bearbeiten eines GERDA-Projekts.

I.4.3.2 Ablauf eines GERDA Stufe 3-Assessments

- 1) Klicken auf den „GERDA Step 3“-Tab auf dem GERDA Main Screen.
- 2) Auswahl eines Projekts.
- 3) GERDA bestimmt intern die relevanten 4 CDFs (2 Deskriptoren x 2 Eintragspfade). Die Zuordnung der Merkmale „Kultur“ sowie „Applikationsmonat“ (s. Tab. I.3-1) für die Auswahl der CDFs wird wie folgt vorgenommen:
 - Kultur: für alle Wintergetreide und Winterraps: Kultur = „Winterweizen“; für alle übrigen Kulturarten: Kultur = „Silomais“.
 - Applikationsmonat: für Applikationen an allen Kalendertagen eines Monats wird der betreffende Monat gewählt (z.B. Applikationsmonat = „1. Mai“ wird für alle Applikationen vom 1. bis 31. Mai verwendet).
- 4) Auswahl eines räumlichen Perzentils (kumulativer Flächenanteil) der “worst case-ness”. Gemäß den Ausführungen im Kapitel I.3.1 ist das einzustellen
- 5) GERDA liest intern die Boden-Klima-Kombinationen aus den vier CDFs ab, die jeweils dem ausgewählten räumlichen Perzentil der “worst case-ness” entsprechen (≤ 2 Boden-Klima-Kombinationen für MACRO und ≤ 2 für PRZM, vgl. Abb. I.4-5).

Auf der linken Seite des Formulars erscheint die Liste der zu modellierenden Boden-Klima-Wasserkörper-Kombinationen. Auch wenn die Simulationen für ditch und stream separat aufgelistet werden, werden MACRO und PRZM nur einmal pro Boden-Klima-Kombination gerechnet, da das Gewässer keinen Einfluss auf die MACRO- und PRZM-Simulation hat. Die erste Boden-Klima-Kombination für einen bestimmten Eintragspfad (Drainage oder Runoff & Erosion) ist die Boden-Klima-Kombination, die aus der PEC_{sw,max}-CDF gezogen wurde (z.B. Q22n / 203 in Abb. I.4-5). Die zweite Boden-Klima-Kombination (z.B. Q21a / 203 in Abb. I.4-5) wurde aus der AUC_{sw}-CDF gezogen.
- 6) Klicken auf “Runoff (PRZM)-Simulations”, um PRZM zu starten.
- 7) Klicken auf “Drainage (MACRO)-Simulations”, um MACRO zu starten.
- 8) Wenn PRZM- und/oder MACRO-Ergebnisse verfügbar sind, erscheinen sie im Fenster in blau (Abb. I.4-5). Dann auf den STEPS-Button klicken, um die PEC_{sw}/PEC_{sed}-Berechnung mit STEPS zu starten.
- 9) Wenn die PEC_{sw}/PEC_{sed}-Berechnung abgeschlossen ist, auf “Report” klicken, um sich die Ergebnisse anzeigen zu lassen.

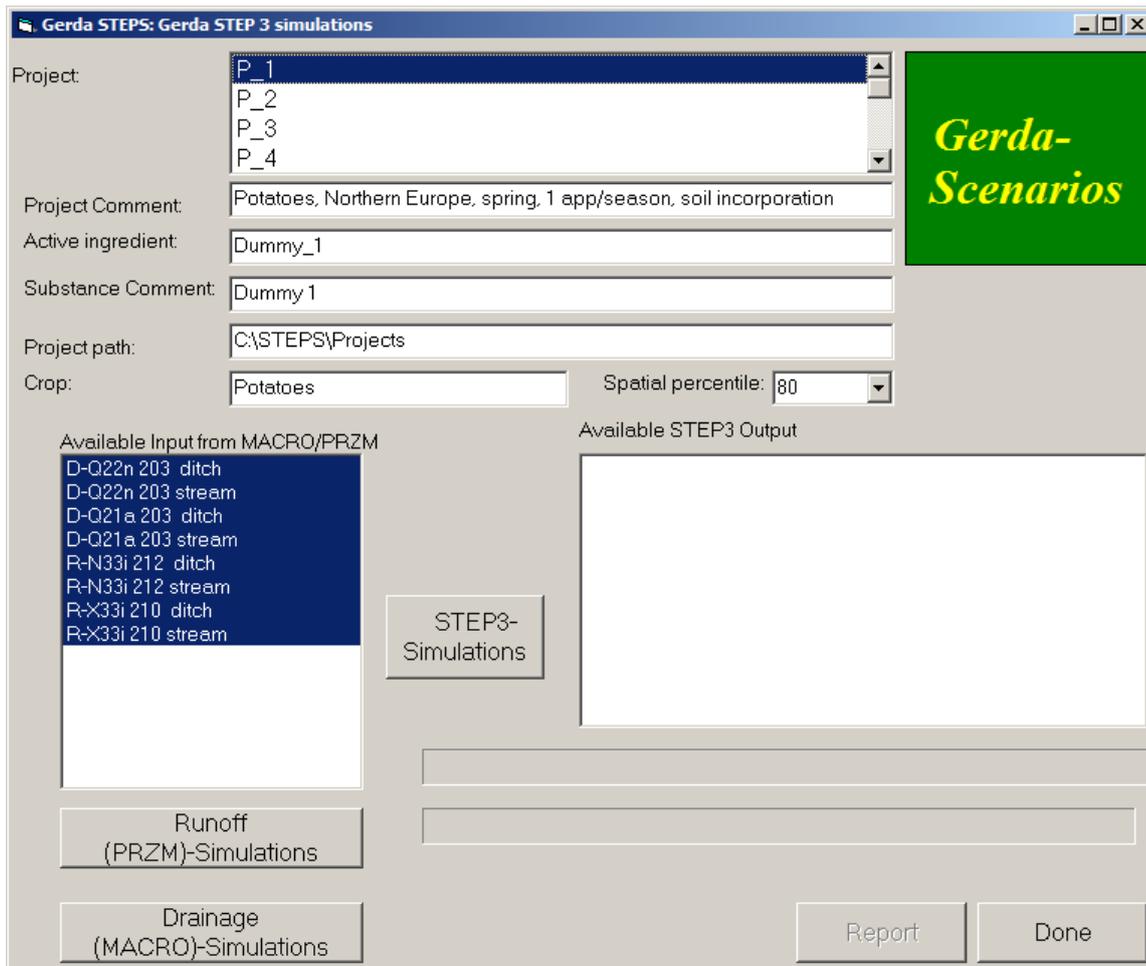


Abb. I.4-5: Fenster für GERDA-Stufe3-Simulationen (MACRO- und PRZM-Output verfügbar).

1.4.3.3 Ablauf eines GERDA Stufe 4-Assessments (Driftreduktion und Pufferstreifen)

- 1) Klicken auf den „GERDA Step 4“-Tab auf dem GERDA Main Screen.
- 2) Auswahl eines Projekts und eines kumulativen Flächenanteils („Landschaftsperzentil“) im GERDA Stufe 4-Formular (Abb. I.4-6).
- 3) Stufe 4-Simulationen können nur durchgeführt werden, wenn die MACRO und PRZM-Outputs aus Stufe 3 bereits vorliegen. Die Boden-Klima-Wasserkörper-Kombinationen erscheinen dann in blau, und der Button „New Variation“ ist aktiv.
- 4) Klicken auf New Variation und Definieren einer neuen Stufe 4-Variante (Abb. I.4-7). Der Nutzer muss folgende Parameter eingeben:
 - Drift buffer zone (m): Distanz zwischen der behandelten Fläche und dem Wasserkörper (Mindestabstand)
 - Vegetated buffer zone (m): Pufferstreifenbreite (Länge des VFS in Fließrichtung VL); der Wert von VL kann nicht größer sein als die Breite der drift buffer zone
 - FWIDTH for ditches (m): effektive Fließbreite des VFS für das Ditch-Szenario
 - FWIDTH for streams (m): effektive Fließbreite des VFS für das Stream-Szenario
 - Special nozzles: Driftreduktionskategorie/-effizienz der verwendeten Düsen

- 5) Klicken auf „Start VFSSMOD“, um die Simulation des Pufferstreifens mit VFSSMOD zu starten. Die vier VFSSMOD-Simulationssketten werden gleichzeitig gestartet (es erscheinen 4 DOS-Fenster; nicht schließen!). Wenn nur Driftminderung simuliert werden soll, brauchen keine Pufferstreifensimulationen mit VFSSMOD gestartet werden.
- 6) Wenn die VFSSMOD-Läufe beendet sind, Klicken auf „STEP4-Simulation“, um die PECsw/PECsed-Berechnung zu starten.
- 7) Wenn die PECsw-/PECsed-Berechnung fertig ist, auf “Report” klicken, um sich die Ergebnisse anzeigen zu lassen.

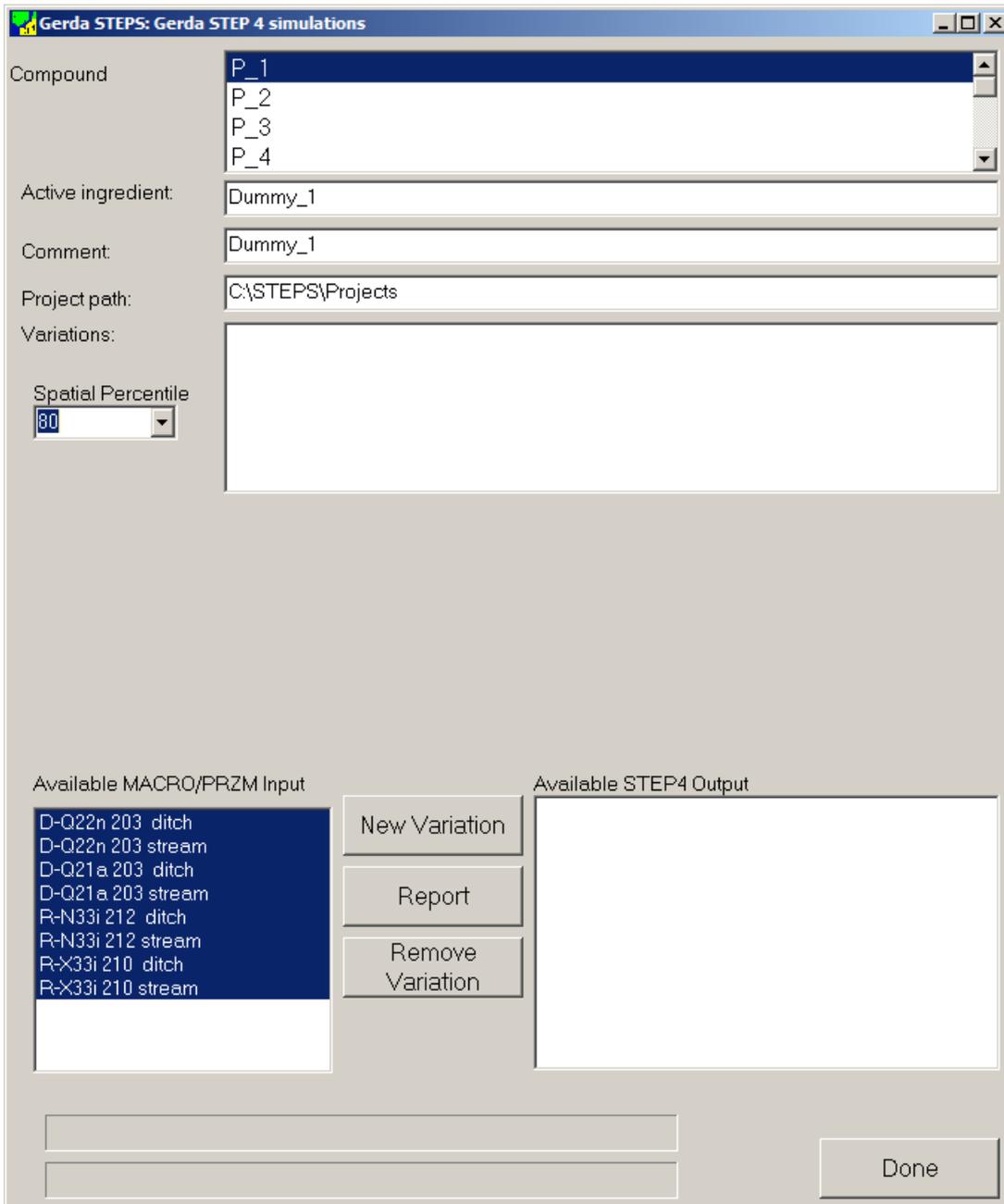


Abb. I.4-6: Fenster für GERDA-Stufe4-Simulationen (MACRO- und PRZM-Output verfügbar).

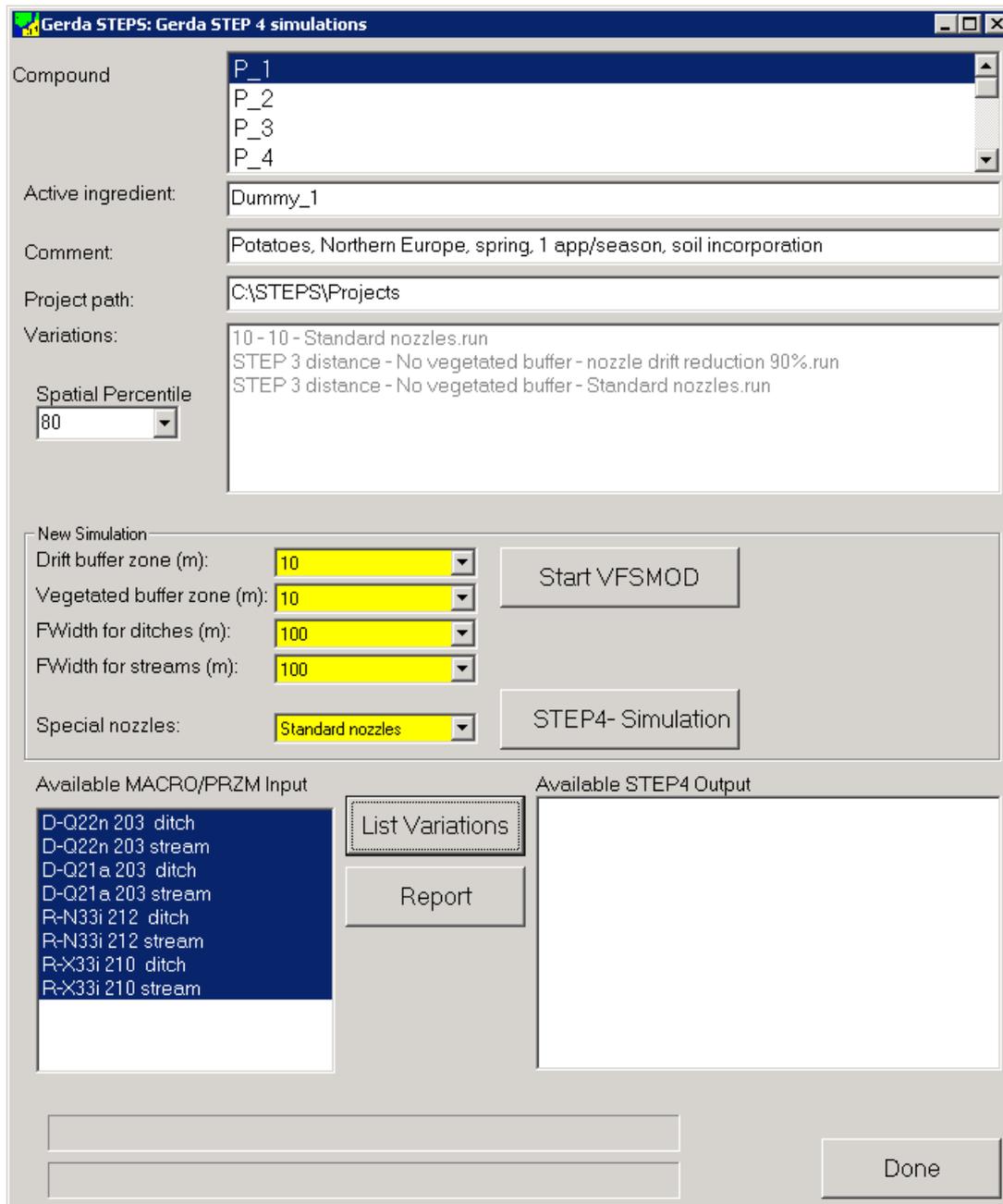


Abb. I.4-7: Fenster für GERDA-Stufe4-Simulationen (Definieren einer neuen Variante).

I.4.3.4 GERDA-Output

GERDA erstellt drei Arten von Output für jede STEPS-Simulation:

- Report (.sum file)
 - Echo all Benutzereingaben und Wasserkörperparameter
 - PEC_{sw,max}: 30 jährliche Werte und 80. Perzentil davon (sechst-höchster Wert nach Weibull plotting position)
 - PEC_{sed,max}: 80. Perzentil der 30 jährlichen Werte
 - TWAC_{sw}, TWAC_{sed} für verschiedene Perioden: 1, 2, 4, 7, 14, 21, 28, 42, 50, 100 Tage (jeweils das 80. Perzentil der 30 jährlichen Werte).

- 30-jährige stündliche Zeitreihe von PEC_{sw}, PEC_{sed} und anderen Variablen (.tab file).
- Zeitreihendiagramme für PEC_{sw} und PEC_{sed} für jedes Simulationsjahr.

Das .tab und das .sum file werden automatisch von GERDA während der PEC_{sw}-/PEC_{sed}-Berechnung erzeugt. Nach dem Klicken auf „Report“ wird der Inhalt des .sum file in ein Fenster der GERDA-Oberfläche geladen (Abb. I.4-8). Von dort kann der Report in die Zwischenablage kopiert („Copy into Clipboard“) oder als .rtf-Datei („Done“) gespeichert werden.

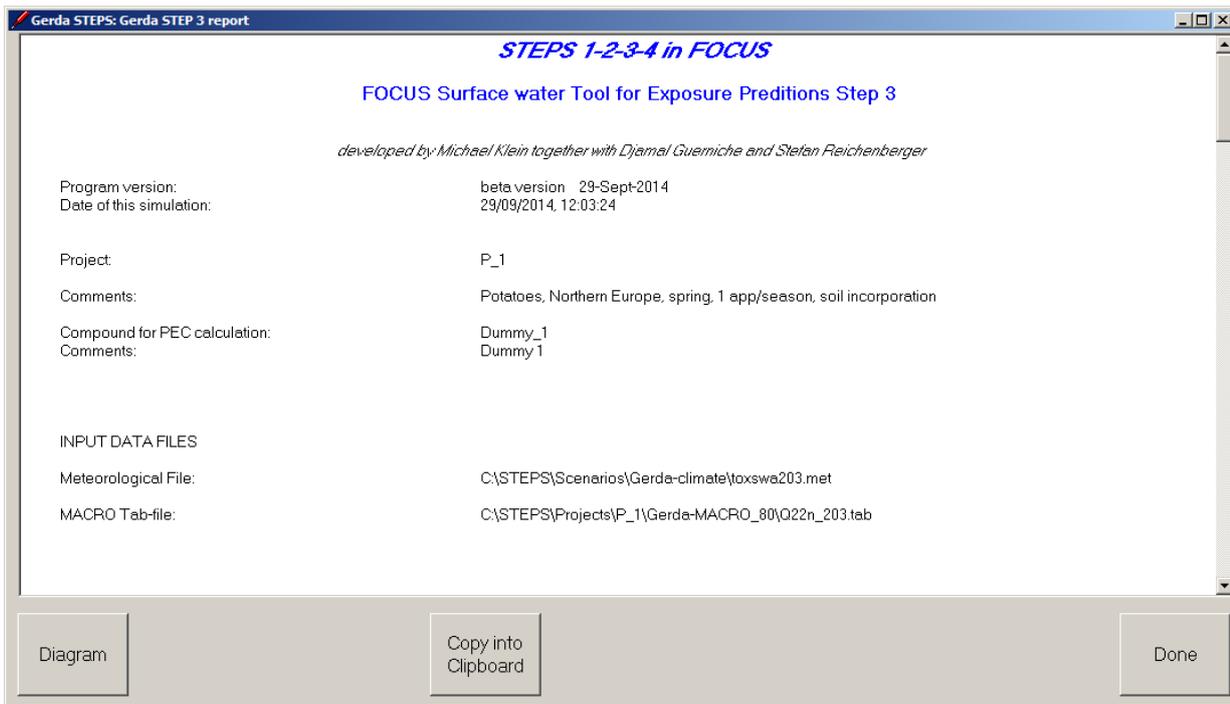


Abb. I.4-8: Report GERDA-STEPS.

Wenn man im Report-Fenster auf „Diagram“ klickt, erstellt die GERDA-Oberfläche Zeitreihendiagramme auf Basis der .tab-Datei (Abb. I.4-9). Die Diagramme können in die Zwischenablage kopiert („Copy into Clipboard“), in das .rtf eingefügt („Copy into report“) oder als Grafikdatei gespeichert werden („Print“). Der Maximalwert auf der x-Achse kann durch Rechtsklicken auf das Diagramm eingestellt werden (Abb. I.4-10).

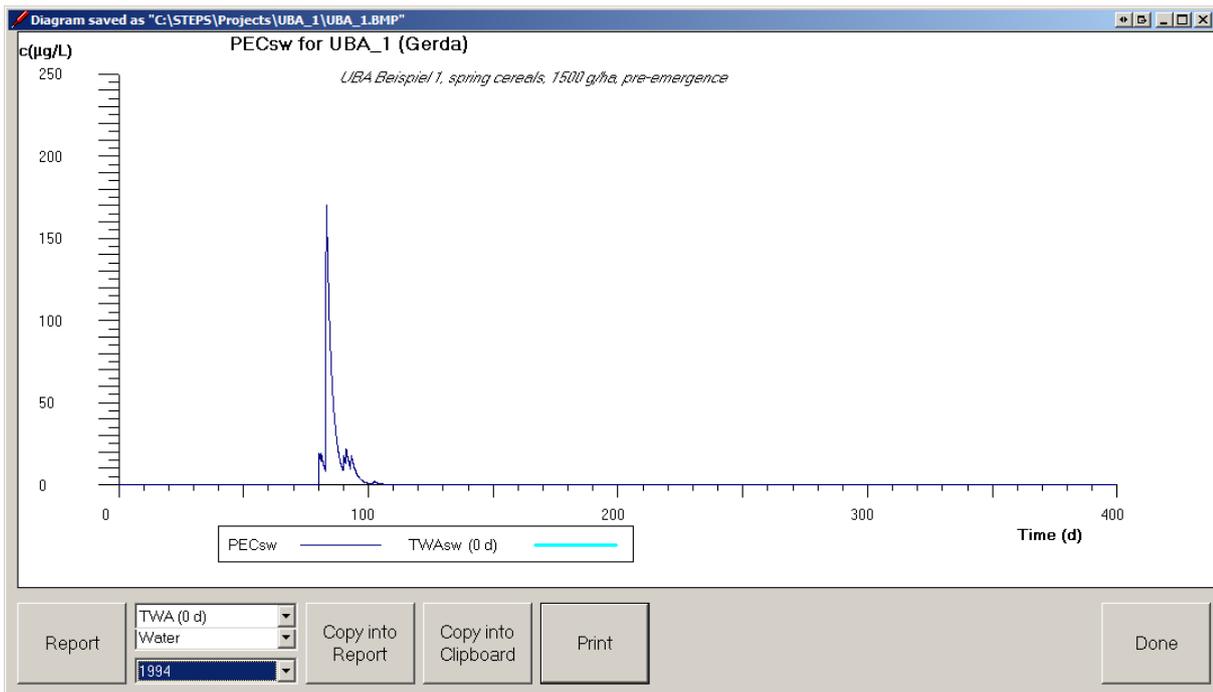


Abb. I.4-9: Zeitreihendiagramm GERDA-STEPs.

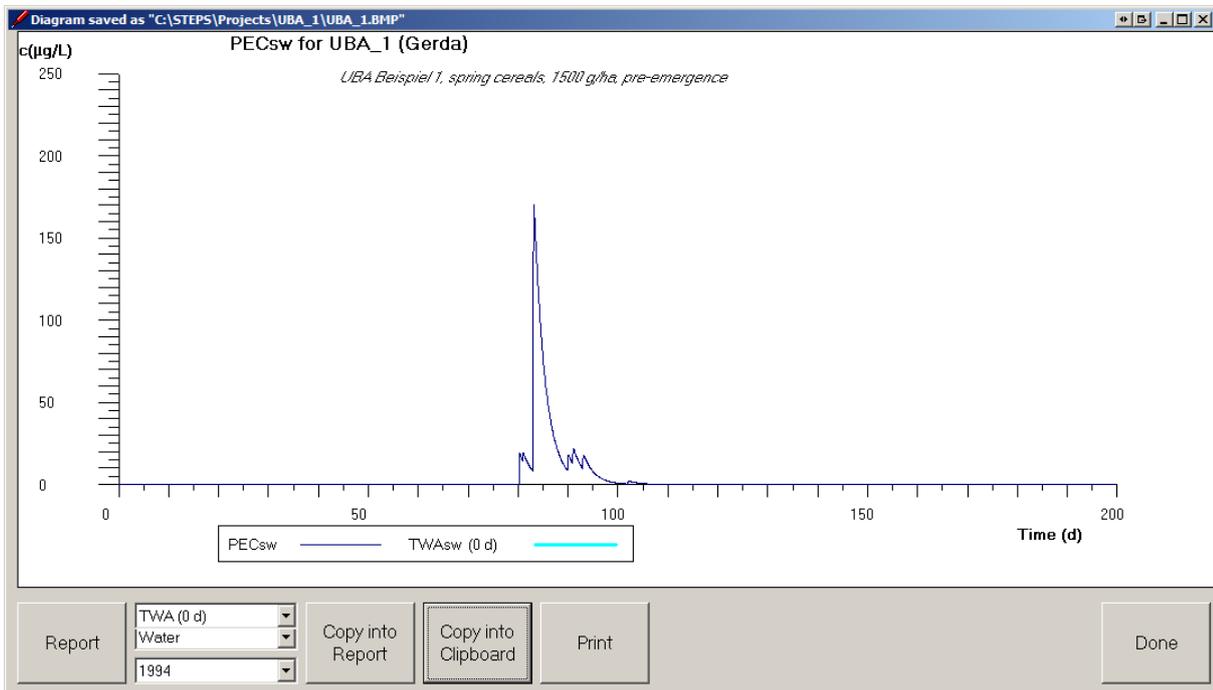


Abb. I.4-10: Zeitreihendiagramm GERDA-STEPs mit modifiziertem Maximalwert auf der x-Achse.

1.4.4 Pesticide Application Timer, Berechnung der Driftdeposition, Umgang mit Mehrfachapplikation und Interzeption in GERDA

Nachfolgend werden kurz die Punkte erläutert, in denen sich das GERDA-Verfahren zur Expositionsabschätzung vom FOCUSsw-Ansatz (Step 3) unterscheidet.

1.4.4.1 Pesticide Application Timer

Der in GERDA verwendete Footways Pesticide Application Timer (Footways PAT) berechnet den Applikationstermin nach folgendem Algorithmus:

Target application date = n

IF rainfall on day n-1 <= 10 mm AND rainfall on day n <= 2 mm, THEN final application date = target application date.

ELSE move to day n+1 and repeat.

Die Berechnung ist wie folgt zu interpretieren: Der Landwirt lässt sich von schlechter Wettervorhersage für die kommenden Tage nicht beeinflussen. Für ihn ist nur wichtig, dass der Boden befahrbar ist (nicht zu feucht) und dass es nicht während der Applikation regnet.

Diese Annahme hat zur Konsequenz, dass die Applikationstage werden immer nur nach *hinten* (d.h. zu späteren Terminen hin) verschoben, niemals nach vorne. Es erfolgt kein iteratives Durchlaufen des Applikationsfensters nach Aufweichen der Regeln. Im Vergleich zu dem in FOCUS verwendeten PAT erscheint den Autoren dieser Ansatz einfacher, realistischer und transparenter.

1.4.4.2 Berechnung der Driftdeposition

Die Driftdeposition wird in GERDA analog zu FOCUS (2001) berechnet. Hierbei wird die Deposition über die Gewässerbreite integriert.

Die Variable DRIFT_PERC (flächenbezogene Driftdeposition relativ zur Aufwandmenge) wird mit den von FOCUS (2001) und von Rautmann et al. (2001) vorgeschlagenen Driftgleichungen berechnet. Um Fehler in der Driftberechnung für Kulturen mit zweiphasiger Driftfunktion zu vermeiden, muss vor der eigentlichen Berechnung eine Fallunterscheidung durchgeführt werden:

1. Für $z_1 < H < z_2$, lautet die integrierte Form der Driftgleichung wie folgt:

$$DRIFT_PERC = \left[\frac{A}{(B+1)} * [H^{B+1} - z_1^{B+1}] + \frac{C}{(D+1)} * [z_2^{D+1} - H^{D+1}] \right] * \frac{1}{z_2 - z_1}$$

A, B, C, D = in Datenbank vorgehaltene Regressionsparameter in Abhängigkeit vom Driftperzentil und dem Parametrisierungstyp (field crops, hops, orchards early, orchards late, vines late)

z1 = Abstand vom Rand der behandelten Fläche zum näheren Ufer des Wasserkörpers (m)

z2 = Abstand vom Rand der behandelten Fläche zum ferneren Ufer des Wasserkörpers (m)

H = Gelenkpunkt (hinge point) der zusammengesetzten Driftfunktion (m).

DRIFT_PERC: relative Driftdeposition (%) auf der Oberfläche des Wasserkörpers in Abwesenheit von Minderungsmaßnahmen. Mathematische Bedeutung von DRIFT_PERC: auf der Gewässeroberfläche deponierte flächenbezogene Masse (mg m^{-2}) / Applikationsrate (mg m^{-2}) * 100 %. Es ist zu beachten, dass sich die deponierte Masse auf m^2 Gewässeroberfläche bezieht, die Applikationsrate jedoch auf m^2 Feld.

2. Für $z_2 \leq H$ wird folgende Gleichung verwendet

$$DRIFT_PERC = \frac{A}{(z_2 - z_1)^*(B+1)} * [z_2^{B+1} - z_1^{B+1}]$$

3. Für $z_1 \geq H$ folgende:

$$DRIFT_PERC = \frac{C}{(z_2 - z_1)^*(D+1)} * [z_2^{D+1} - z_1^{D+1}]$$

Die in GERDA verwendeten Parameter der Driftgleichungen für die verschiedenen Drift-Perzentile (90, 82, 77, 74, 72, 70, 69, 67, 50. s. Tabelle I.4-1) wurden während des Projekts FOOTPRINT durch Fitten der Driftgleichungen an die verschiedenen empirischen Perzentile der Drift-Rohdaten des Julius-Kühn-Institutes (JKI) ermittelt, die den Parametern und Abdrifteckwerten von Rautmann et al. (2001) zugrunde liegen. Ein Teil der Parameterwerte ist mit den in Rautmann et al. (2001) angegebenen identisch.

Die sogenannten "Abdrifteckwerte" (Bundesanzeiger Nr. 100, 26. Mai 2000, S. 9879; Rautmann et al., 2001) bezeichnen etwas völlig anderes als die Parameterwerte, nämlich die Werte der gefitteten Driftfunktion für einen bestimmten Abstand x und ein bestimmtes Perzentil. Da GERDA keine Eckwerte verwendet, sondern nur die integrierte Form der Driftgleichungen, werden im hier vorliegenden Bericht keine Eckwerte dargestellt.

Die in FOCUS (2001) verwendeten Driftparameterwerte wurden durch Fitten der Driftgleichungen an die Abdrifteckwerte von Rautmann et al. (2001) erhalten, was einen Fit an gefittete Werte darstellt und nicht konsistent ist.

Tabelle I.4-1 enthält keine Driftparameter für den Parametrisierungstyp „vines early“. Im Gegensatz zu FOCUS (2001) werden in GERDA horizontale Applikationen in Wein grundsätzlich mit der Parametrisierung „vines late“ gerechnet, weil „vines early“ nicht mehr praxisrelevant ist (Rautmann, persönliche Mitteilung, 2007): „Die Grenze zwischen frühen und späten Entwicklungsstadien ist die Blüte. Im Grunde geht es darum, wie viel Zielfläche, das heißt Blätter bzw. Blütenblätter, vorhanden ist. Wenn im Obstbau vor der Blüte gespritzt wird, ist natürlich auf Grund der hohen "Durchlässigkeit" der Bäume die Abdrift höher als in späten Entwicklungsstadien. Im Weinbau verhielt es sich bisher genau umgekehrt, weil in frühen Stadien auf die Gebläseunterstützung verzichtet wurde. Neuere Untersuchungen haben aber gezeigt, dass heutzutage die Winzer auch in frühen Stadien mit Gebläseunterstützung spritzen. Dabei werden aber nicht alle Düsen geöffnet. Im Ergebnis ist die Abdrift in frühen und späten Stadien heute gleich, so dass es nur noch Eckwerte für den Weinbau allgemein gibt, die mit den bisherigen Eckwerten für späte Stadien identisch sind.“ (Ende pers. Mittlg. Rautmann).

Tab. I.4-1: In GERDA verwendete Parameterwerte der Driftgleichungen.

Parametri- sie- rungstyp	Driftperzentil	A	B	H	C	D
field crops	50	0,9658	-0,9507	0	0,9658	-0,9507
	67	1,5222	-0,9817	0	1,5222	-0,9817
	69	1,6111	-0,9847	0	1,6111	-0,9847
	70	1,6429	-0,9843	0	1,6429	-0,9843
	72	1,7488	-0,9885	0	1,7488	-0,9885
	74	1,8542	-0,9907	0	1,8542	-0,9907
	77	2,0093	-0,9922	0	2,0093	-0,9922
	82	2,3816	-1,005	0	2,3816	-1,005
	90	2,7705	-0,9787	0	2,7705	-0,9787
Hops	50	30,516	-1,0203	10,615	1543,4	-2,6812
	67	53,239	-1,2472	14,51036	3064	-2,7623
	69	59,818	-1,2819	14,61576	3260,1	-2,7726
	70	60,061	-1,269	14,39529	2923,4	-2,7258
	72	59,617	-1,2486	14,36497	2836,4	-2,698
	74	58,557	-1,2172	14,46025	3463,5	-2,7445
	77	60,418	-1,2135	15,27723	4115,5	-2,7618
	82	66,37	-1,2013	15,59148	5871,7	-2,8333
	90	58,271	-1,0043	15,46868	9205,3	-2,8527
orchards early	50	53,645	-0,9466	11,37382	3423,7	-2,656
	67	59,395	-0,894	11,76177	4002,5	-2,6022
	69	59,935	-0,8841	11,78819	4129,1	-2,5997
	70	58,815	-0,8641	11,75308	4287,4	-2,6047
	72	58,165	-0,8396	11,63149	4373,4	-2,6002
	74	58,971	-0,8333	11,77728	4769,7	-2,6146
	77	58,797	-0,817	11,86682	4823,8	-2,5986
	82	62,218	-0,811	11,80952	4353,1	-2,5316
	90	66,686	-0,7517	11,45773	3908,3	-2,421
orchards late	50	26,632	-1,2221	10,4166	109,65	-1,826
	67	29,207	-1,1065	10,39961	180,35	-1,8839
	69	31,535	-1,1312	10,56946	186,08	-1,884
	70	31,682	-1,1249	10,45586	183,7	-1,8737
	72	34,543	-1,1525	10,30477	155,95	-1,7987
	74	36,22	-1,1603	10,30716	159,7	-1,7963
	77	40,041	-1,1756	10,39158	178,09	-1,8131
	82	41,918	-1,1291	10,22209	221,17	-1,8446
	90	60,36	-1,2243	10,52438	212,13	-1,7583
vines late	50	30,408	-1,5987	0	30,408	-1,5987
	67	35,789	-1,5872	0	35,789	-1,5872
	69	36,135	-1,5859	0	36,135	-1,5859
	70	36,583	-1,5852	0	36,583	-1,5852
	72	37,548	-1,5845	0	37,548	-1,5845
	74	38,317	-1,5858	0	38,317	-1,5858
	77	39,45	-1,5872	0	39,45	-1,5872
	82	41,164	-1,5837	0	41,164	-1,5837
	90	44,506	-1,5593	0	44,506	-1,5593

Die in GERDA verwendeten Standardabstände (für Stufe 3-Rechnungen) zwischen behandelter Fläche und Gewässeroberfläche sind identisch mit den Werten in SWASH, ebenso die Abstände zwischen Uferkante und Wasserspiegel (0 für den Ditch, 0,5 m für den Stream).

1.4.4.3 Parametrisierung der Interzeption

Das Modell PRZM besitzt keinen expliziten Parameter der „pesticide interception fraction“. Der Interzeptionsanteil wird immer intern in Abhängigkeit von der CAM (Chemical Application Method) berechnet (s. PRZM-Manual, 2003, Kapitel 6). Mit Ausnahme von CAM = 2 und CAM = 3 ist die Interzeption immer auf Null gesetzt. Für CAM = 2 oder CAM = 3 wird die Interzeption aus dem aktuellen Deckungsgrad der Kultur berechnet.

Die Parametrisierung der Interzeption wird im GERDA Tool für den Eintragspfad Runoff & Erosion und Verflüchtigung/Deposition wie folgt vorgenommen:

- Für "ground spray" und "air blast" wird CAM = 2 gesetzt, die „pesticide interception fraction“ entspricht dann der „current degree of ground cover“; der Wirkstoff wird linear abnehmend auf die ersten 4 cm Bodentiefe verteilt. Anmerkung: der Wert „current degree of ground cover“ wird für Zeitspanne zwischen Auflaufen (emergence) bis maximaler Entwicklung der grünen Pflanze (maturity) linear interpoliert zwischen 0 und dem Maximalwert der Bodenbedeckung der betreffenden Kultur (max ground cover COVMAX; Nutzereingabe), für die Zeitspanne Abreife bis Ernte (harvest) ist ground cover = COVMAX, zwischen Ernte und Auflaufen der Folgekultur ist ground cover = 0,
- Für "granular“ wird CAM = 1 gesetzt, die „pesticide interception fraction“ wird damit = 0; der Wirkstoff wird linear abnehmend auf die ersten 4 cm Bodentiefe verteilt.
- Für "soil incorporation" wird CAM = 4 gesetzt; der Wirkstoff wird gleichmäßig auf die ersten 5 cm Bodentiefe verteilt

Im Falle von „ground spray“ in Raumkulturen (Anwendungen von Herbiziden) wird die Interzeption vom Modell PRZM mit der Applikationsmethode CAM = 2 überschätzt, d.h. der Eintrag mit Runoff & Erosion bzw. Drainage wird tendenziell *unterschätzt*, da sich der Deckungsgrad auf das Blätterdach bezieht, der Landwirt aber auf den Boden appliziert. Mit der Einstellung CAM = 1 (keine Interzeption) kann dagegen der Eintrag mit Runoff & Erosion bzw. Drainage *überschätzt* werden, wenn in Obst-, Wein- und Hopfenkulturen ein gewisser Bodenbewuchs vorhanden ist.

Anmerkung: Die Parametrisierung der Interzeption bei „ground spray“ in Raumkulturen sollte mit der Parametrisierung für die Berechnung des Oberflächenabflusses konsistent sein. In der Parametrisierung der Curve Number (CN-Werte) in FOCUSsw für Raumkulturen („vines“, „pome/stone fruit“ und „hops“) wird angenommen, dass der Boden komplett grasbedeckt ist, was aber in vielen Fällen unrealistisch sein dürfte. Wenn andererseits für „ground spray“ in Raumkulturen die Interzeption auf Null gesetzt würde, dann müsste konsequenterweise auch die Curve Number für "bare soil" benutzt werden, sonst ist der Ansatz nicht konsistent. Für die grasbewachsenen Varianten der FOCUS crops ist daher die Einstellung CAM = 2 nach Auffassung der Autoren insgesamt gesehen weniger falsch als CAM = 1.

In Anbetracht dieser Problematik wurden von Footways (im Zusammenhang mit anderen Projekten) für „vines“ und „pome/stone fruit“ jeweils *mehrere* „Crops“ mit unterschiedlicher Bodendeckung definiert. Diese „Crops“ sind in der GERDA input database enthalten, aber

derzeit für den Nutzer nicht über die GERDA-Oberfläche zugänglich. In einer Überarbeitung von GERDA könnte dies geändert werden und für Varianten der gleichen Kultur mit unterschiedlicher Bodenbedeckung („bare soil“, „grass cover between rows“, „full grass cover“) ergeben sich fuer CAM = 2 automatisch unterschiedliche „pesticide interception fractions“.

Für den Eintragspfad Drainage (Modell MACRO) wird für Sprühapplikation die Interzeptionsfraktion (MACRO-Inputparameter ZFINT) in GERDA aus Konsistenzgründen analog zu PRZM berechnet. Für die Anwendungstechnik Streuen (Granulate) oder Einarbeitung in den Boden wird die Interzeptionsfraktion auf Null gesetzt.

Die in PRZM verwendete Interzeptionsfraktion steht nicht direkt im GERDA-Output, ist aber für jedes Applikationsereignis in der Datei [FST]_[climate]_Interception-output.tab aufgelistet (Übergabedatei der Interzeptionswerte für die EVA-in-GERDA-Berechnungen, wird im PRZM-Unterverzeichnis gespeichert). Die in MACRO verwendete Interzeptionsfraktion ist für jedes Applikationsereignis in der MACRO-Inputdatei [RunID].par dokumentiert.

1.4.4.4 Umgang mit Mehrfachapplikationen

Die Auswahl des Driftperzentils bei Mehrfachapplikationen erfolgt in FOCUSsw (und auch in EVA) so, dass für die einzelne Applikation ein geringeres Perzentil verwendet wird. Die Anwendung als Summe der Einzelapplikationen stellt dann das 90. Perzentil für Spraydrifteinträge dar. So wird bei einer Anwendung mit zwei Applikationen das 82. Perzentil eingestellt, bei 3 Applikationen in einer Anwendung das 77. Perzentil usw. (siehe FOCUS 2001, Kapitel 5.4).

Für Wirkstoffe, die schnell im Wasser abbauen, kann allerdings in Abhängigkeit vom Applikationsintervall eine Einzelanwendung mit dem 90. Perzentil für Spraydrift anstelle einer x-fachen Applikation mit einem geringeren Perzentil zu höheren PEC-Werten in Oberflächengewässer führen. Das heißt, die Einzelapplikationen werden als unabhängig voneinander betrachtet. Da die Einträgen über Spraydrift mit den Einträgen von Runoff oder Drainage gekoppelt sind und hier der Aufwandmenge einer Applikation ebenso einen Einfluss auf die errechnete PECmax hat, müssen bei Mehrfachwendungen zwei FOCUSsw-Berechnungen durchgeführt werden, eine als Mehrfachanwendung mit dem geringeren Driftperzentil und eine weitere als Einfachanwendung mit dem 90. Perzentil für Spraydrift (aber auch der einfachen Aufwandmenge für Runoff und Drainage). Die höhere der beiden PECsw,max wird dann für die weitere Bewertung verwendet.

Zur Vermeidung einer zweimaligen PEC-Berechnung, wie dies bei Mehrfachanwendungen mit FOCUSsw erforderlich ist, wird im Falle von **Mehrfachanwendungen** in GERDA hinsichtlich des Driftperzentils

- für alle Applikationen bis zur vorletzten das 50. Driftperzentil und
- für die *letzte* Anwendung das 90. Driftperzentil

verwendet.

In Tab. I.4-2 sind die kumulierten Drift-Depositionen (für Beispiel Anwendung in Ackerbau, 1 m Gewässerabstand) gegenübergestellt, die sich nach diesem Ansatz im Vergleich zum Verfahren von FOCUSsw ergeben.

Der GERDA-Ansatz führt nur für Wirkstoffe, die schnell aus der Wasserphase verschwinden (80 % Disappearance zwischen zwei Anwendungen, s. Spalte 2 in Tab. I.4-2), zu höheren kumulierten Drift-Depositionen. Das heißt, GERDA ist in diesen Fällen für Spraydrift-Einträge konservativer als FOCUSsw. Zumindest für den Gewässertyp stream ist in fast allen Fällen davon auszugehen, dass der Wirkstoff bis zur nächsten Applikation aus der Wassersäule des betrachteten Abschnitts vollständig verschwunden ist und daher nicht zum nächsten Drift-Konzentrationspeak beiträgt. Zudem entspricht die Wirkstoffkonzentration auf der behandelten Flächen der Konzentration, die der Mehrfachapplikation entspricht. Insbesondere für die Bewertung der Runoffeinträge kann dieser Aspekt einen höheren Einfluss haben auf die PECmax als die Einträge über Spraydrift.

Programmtechnische Aspekte sprechen für die Implementierung des GERDA-Ansatzes. Die doppelte Anzahl der Berechnungen, die beim derzeitigen Verfahren in FOCUSsw erforderlich ist, verkompliziert die Organisation und Benennung von Ausgabefiles. Weiterhin würde sich die Zahl der (zeitaufwändigen) VFSSMOD-Läufe verdoppeln.

Tab. I.4-2: Vergleich der (kumulierten) Drift-Deposition^a bei Mehrfachapplikationen nach Ansatz FOCUSsw^b und GERDA^c für verschiedene Verlustraten zwischen zwei Anwendungen.

Anzahl Appl. ^d	Disappearance zw. zwei Applikationen ^e	FOCUSsw						GERDA						Drift(n) FOCUS </> GERDA?	
		Drift(1) _a	Drift(2)	Drift(3)	Drift(4)	Drift(5)	Drift(6)	Drift(1)	Drift(2)	Drift(3)	Drift(4)	Drift(5)	Drift(6)		
1	n.r.	2,771						2,771							
2	0 %	2,255	4,510					0,966	3,736						FOCUS
	20 %	2,255	4,059					0,966	3,543						FOCUS
	50 %	2,255	3,382					0,966	3,253						FOCUS
	80 %	2,255	2,706					0,966	2,964						GERDA
3	0 %	2,006	4,013	6,019				0,966	1,932	4,702					FOCUS
	20 %	2,006	3,611	4,895				0,966	1,738	4,161					FOCUS
	50 %	2,006	3,009	3,511				0,966	1,449	3,495					FOCUS
	80 %	2,006	2,408	2,488				0,966	1,159	3,002					GERDA
4	0 %	1,872	3,744	5,615	7,487			0,966	1,932	2,897	5,668				FOCUS
	20 %	1,872	3,369	4,567	5,525			0,966	1,738	2,357	4,656				FOCUS
	50 %	1,872	2,808	3,276	3,510			0,966	1,449	1,690	3,616				GERDA
	80 %	1,872	2,246	2,321	2,336			0,966	1,159	1,198	3,010				GERDA
5	0 %	1,787	3,573	5,360	7,146	8,933		0,966	1,932	2,897	3,863	6,634			FOCUS
	20 %	1,787	3,216	4,359	5,274	6,006		0,966	1,738	2,357	2,851	5,051			FOCUS
	50 %	1,787	2,680	3,126	3,350	3,461		0,966	1,449	1,690	1,811	3,676			GERDA
	80 %	1,787	2,144	2,215	2,230	2,232		0,966	1,159	1,198	1,205	3,012			GERDA
6	0 %	1,664	3,328	4,992	6,656	8,320	9,984	0,966	1,932	2,897	3,863	4,829	7,600		FOCUS
	20 %	1,664	2,995	4,060	4,912	5,594	6,139	0,966	1,738	2,357	2,851	3,247	5,368		FOCUS
	50 %	1,664	2,496	2,912	3,120	3,224	3,276	0,966	1,449	1,690	1,811	1,871	3,706		GERDA
	80 %	1,664	1,997	2,063	2,077	2,079	2,080	0,966	1,159	1,198	1,205	1,207	3,012		GERDA

a) Drift(n): kumulierte Drift-Deposition (in % der Aufwandmenge; Ackerbau, 1 m Abstand zum Gewässer) nach der n-ten Anwendung mit Disappearance gem. Sp. 2 zwischen zwei Anwendungen

b) Ansatz FOCUSsw: 1 Anwendung: 90. Perzentil, 2 Anwendungen: 2 x 82. Perzentil, 3 Anwendungen: 3 x 77. Perzentil, usw.

c) Ansatz GERDA: alle Anwendungen bis zur vorletzten: 50. Perzentil, letzte Anwendung: 90. Perzentil

- d) Annahme: Intervalle zwischen den Anwendungen sowie die Aufwandmengen sind identisch für alle Applikationen
- e) „Disappearance“ zwischen zwei Anwendungen umfasst hier alle Vorgänge, die zu einer Abnahme der Konzentration führen (Verdünnung durch nachfließendes Wasser im Gewässertyp ditch oder stream, Abbau im Wasser etc.)

I.5 Vergleichsrechnungen zur aquatischen Risikobewertung nach GERDA

Bei jeder Modifikation eines Risikoabschätzungsverfahrens stellt sich für Antragsteller ebenso wie für die Zulassungsbehörde als Kernfrage, welche Konsequenzen sich daraus für die Zulassungsfähigkeit von Wirkstoffen bzw. Pflanzenschutzmitteln ergeben: Wird mit dem neuem Ansatz eine höhere oder eine niedrigere PEC ermittelt, d.h. bedeuten die Änderungen eine Verschärfung oder eine Erleichterung der Expositionsbewertung? Zur Beantwortung dieser und weiterer Fragen wurden für ausgewählte Beispielsubstanzen bzw. -anwendungen mit EXPOSIT, FOCUS_{sw} (Step 3) und GERDA die PEC_{max} für verschiedene Varianten bzw. Modelleinstellungen für jeweils 13 Wirkstoffe (mit 14 Anwendungen, sowie einem Metabolit) berechnet und miteinander verglichen. Weiterhin werden für die Bewertung nach GERDA die für eine Zulassung ggf. notwendigen Risikominderungsmaßnahmen auf der Basis der Exposure-Toxicity-Ratios (ETR) dargestellt. Im Einzelnen werden PEC_{max}- bzw. ETR-Ergebnisse für folgende Fragestellungen gegenübergestellt.

- PEC_{max} nach GERDA (Step 3) vs. EXPOSIT für Einträge durch Runoff & Erosion bzw. Drainage – *ohne* Spraydrift (Kap. I.5.2)
- PEC_{max} nach GERDA (Step 3) vs. FOCUS_{sw} Runoff- und Drainage-Szenarien (Kap. I.5.3)
- Zulassungsfähigkeit nach GERDA (Step 3) vs. EXPOSIT – ohne Minderungsmaßnahmen (Kap. I.5.4)
- Zulassungsfähigkeit nach GERDA (Step 4) vs. EXPOSIT – jeweils mit einzelnen sowie mit kombinierten Minderungsmaßnahmen (Kap. I.5.5)
- Auswirkung der Parameter VL (Breite des Randstreifens) und FWIDTH (effektive Fließbreite des Randstreifens) auf die Reduktion des Stoffeintrags nach VFSMOD (Kap. I.5.6).

Ein Vergleich der PEC_{max} durch Einträge über Spraydrift zwischen EVA und GERDA ist nicht zweckmäßig, da die Berechnungen aufgrund der Integration der Driftdeposition über die Gewässerbreite in GERDA (vgl. Kap. I.4.4.2) sowie der unterschiedlichen Definition von Wasserkörper und Böschungsbereich per se mathematisch unterschiedliche Ansätze verwenden.

I.5.1 Eigenschaften der Beispielsubstanzen

Die 13 Beispielsubstanzen umfassen die bereits im FOCUS Report (2001) verwendeten sieben Beispielwirkstoffe sowie einen Metabolit, die im Folgenden mit FOCUS_1 bis FOCUS_7 bezeichnet werden. Weiterhin wurden vom Umweltbundesamt (UBA) weitere sechs Substanzen vorgeschlagen, wobei für Substanz UBA_4 zwei Anwendungen untersucht werden. Die für die Expositionsabschätzung wichtigsten Stoffeigenschaften und Applikationsdaten sind in Tab. I.5-1 bis I.5-3 aufgeführt. Die Koc- bzw. DT50-Werte der Beispielsubstanzen liegen z.T. außerhalb des Wertebereichs der Koc/DT50-Kombinationen.

Die Koc- bzw. DT50-Werte der Beispielsubstanzen liegen z.T. außerhalb des Wertebereichs der Koc/DT50-Kombinationen, die von den Simulationsrechnungen zur Entwicklung der Bodenklima-Szenarien für Deutschland abgedeckt sind (s. Kap. I.3.2.5). In Bezug auf die Koc-Werte liegen zwei (für PRZM) bzw. drei (für MACRO) der Beispielsubstanzen außerhalb des von den GERDA-CDFs abgedeckten Bereichs (Abb. I.5-1). Die Substanzen FOCUS_4 und UBA_5 weisen

extrem hohe Koc-Werte auf (1024 000 bzw. 38 000 L/kg). Der in den Drainage-CDFs von GERDA maximal berücksichtigte Koc-Wert von 10 000 L/kg kann aber in Bezug auf das Potential von Drainageeinträgen in Gewässer als hinreichend repräsentativ angesehen werden: für $Koc \geq 10\,000$ L/kg sind nur sehr geringe Drainageausträge aus dem Feld zu erwarten. Gleiches gilt für den in den GERDA-CDF maximal berücksichtigten Koc von 100 000 L/kg für Runoff und Erosion: für $Koc \geq 100\,000$ L/kg erfolgen Austräge hauptsächlich in partikulär gebundener Form, und Austräge in gelöster Form sind vernachlässigbar gering. Eine Substanz (FOCUS_3) hat einen sehr niedrigen Koc von 1, der unterhalb des von GERDA abgedeckten Bereichs liegt. Die DT50(soil)-Werte aller Beispielsubstanzen lagen in dem von GERDA abgedeckten Bereich von 3 bis 300 d.

Tab. I.5-1: Expositionsrelevante Eigenschaften der Beispielsubstanzen für die Vergleichsrechnungen mit EXPOSIT, FOCUSsw und GERDA zur Expositionsbewertung^a,

Substance	Substance properties affecting environmental fate										
	Molar mass (g/mol)	Vapour pressure (Pa @ 20 °C)	Water solubility (mg/L @ 20 °C)	Koc (cm/g)	Freundlich exponent (-)	Log Kow (-) ^b	Soil half-life (EXPOSIT - UBA) (days)	Soil half-life (FOCUS SW) (days)	Surface water half-life (days)	Sediment half-life (days)	Total system half-life (days) ^b
FOCUS_1	190,3	0,017	6000 @ 25 °C	15	1	1,6		6	6	6	
FOCUS_2	215,7	$3,85 \times 10^{-5}$	30	91	0,88	2,5		43	26	26	
FOCUS_3	221	$<1 \times 10^{-5}$	620 @ 25°C	1	1	2,8		4	1,5	1,5	
FOCUS_4	505,2	$1,24 \times 10^{-8}$ @ 25 °C	0.0002 @ 25 °C	1024000	0,93	4,6		26	0,7	76	
FOCUS_5	376	$6,4 \times 10^{-9}$	1,15	860	1	3,2		250	6	118	
FOCUS_6	255	$3,78 \times 10^{-9}$	91 @ pH 7	66	1	2		28	24	24	
FOCUS_6M	197	$<1E^{-7}$ mPa	91 @ pH 7	580	1	N/A		58	33	33	
FOCUS_7	286,1	$1,3 \times 10^{-4}$	2.6 @ pH 7	500	1	3		50	2,5	28	
UBA_1	206,3	$2,8 \times 10^{-6}$	70,2	81	0,879	2,5	32,4	6,9	129,3	1000	129,3
UBA_2	273,5	$8,8 \times 10^{-2}$	530	3808	0,713	6	116	84	999	32	999
UBA_3	329,76	$<1 \times 10^{-5}$	7,05	1073	0,836	3,3	226	73	59,8	149,7	107,7
UBA_4a	307,8	$1,3 \times 10^{-6}$	36	769	0,84	3,7	91,6	34,8	365	1000	365
UBA_4b	307,8	$1,3 \times 10^{-6}$	36	769	0,84	3,7	91,6	34,8	365	1000	365
UBA_5	449,9	2×10^{-7}	0,005	38000	1	5,5	47,5	70,9	15,1	15,1	15,1
UBA_6	296,6	$2,1 \times 10^{-5}$	0,5	304	0,9	3,017	13,6	4,3	0,1 (0,017)	0,1 (0,018)	0,018

^a) Quellen: FOCUS (2001) ; Informationen des UBA ; EFSA Scientific report bzw. EFSA Conclusion on pesticide peer review (EFSA conclusion)

b) nicht verwendet in GERDA Step 3

Aufgrund der Dampfdruckwerte (Dampfdruck $\geq 1 \times 10^{-5}$ Pa) ist der Eintragspfad Verflüchtigung/Deposition laut Modellkonzept von EVA nur für die Substanzen FOCUS_2, FOCUS_7, UBA_2 und UBA_6 potenziell relevant.

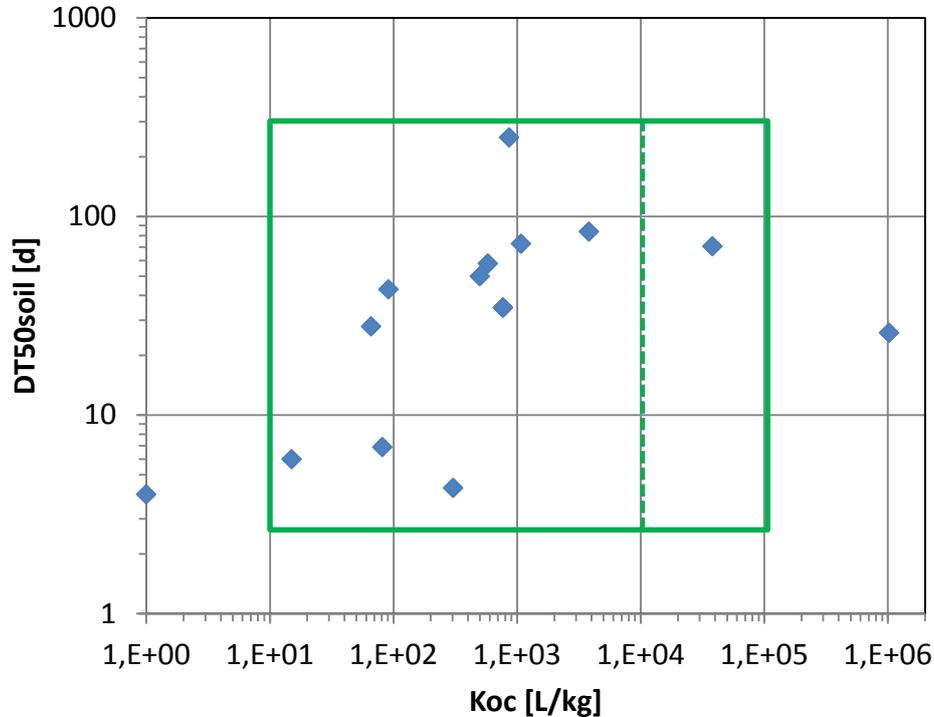


Abb. I.5-1: Koc und Halbwertszeiten im Boden (DT50soil) der Beispielsubstanzen für die Vergleichsrechnungen

Grüne Rechtecke: Spannweite der Koc- und DT50-Werte, die mit den Faktorstufen für die Simulationsläufe mit PRZM (volle Linie) bzw. MACRO (gestrichelt) zur Generierung von Häufigkeitsverteilungen (CDFs) der PECmax für Boden-Klima-Kombinationen in Deutschland abgedeckt sind.

Für fünf Beispielsubstanzen wurde eine Applikation pro Jahr angenommen, für vier Fälle zwei Anwendungen und für UBA_6 wurden 10 Applikationen im Weinbau simuliert (Tab. I.5-2 und I.5-3). Die Substanzen FOCUS_4, FOCUS_5, FOCUS_7, UBA_4 (Anwendung b) und UBA_6 werden in Raumkulturen angewandt, die anderen Anwendungen beziehen sich auf Feldanbau. Bis auf FOCUS_1 (Einarbeitung in den Boden) wird für alle Beispielsubstanzen eine Sprühapplikation angenommen.

Die Beschreibung der Anwendungen (GAP) der Beispielsubstanzen sind in Tabelle I.5-2 und Tab. I.5-3 zusammengefasst. Die Übertragung der GAP in die Programmparameter von FOCUS SW bzw. GERDA (z.B. Kultur [crope type], Applikationstechnik [method], Anwendungszeitpunkt) ist in Tabelle I.5-3 aufgeführt.

Zur Einschätzung der Auswirkung der Einführung von GERDA auf die Zulassungsfähigkeit von Pflanzenschutzmitteln in Deutschland wurden aus den ökotoxikologischen Daten RAC-Werte (Regulatory Acceptable Concentrations) auf der Basis der EFSA-Empfehlungen abgeleitet (EFSA 2013). In den meisten Fällen wurde die RAC auf der Basis des Standarddatensatzes berechnet (tier 1-RACsw;ac für akute bzw. tier 1-RACsw;ch für chronische Effekte). Nur für eine Substanz (UBA_2) beruhte die RAC auf einer der NOEAEC (No Observed Ecologically Adverse Effect

GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

Concentration) einer Mesokosmenstudie (ERO-RAC). Die verwendeten Toxizitätsdaten und die RAC-Ableitung finden sich in Tab. A1-1 im Anhang.

Tab. I.5-2: Anwendungsdaten der Beispielsubstanzen für die Vergleichsrechnungen.

Substanz	Typ*	Application rate (kg/ha)	Method of application	Crop	Number of applications	Interval (days)	Interception (for EVA) (%)	Interception (for EXPOSIT) (%)	Timing (for EXPOSIT, Drainage)	Timing**
FOCUS_1	F	3	Pre-plant soil incorporation	Potatoes	1		n.r.***	0	Sp/Su	minus 1 day before planting
FOCUS_2	H	1	pre-emerg. ground appl.	Maize	1		0	0	Sp/Su	First possible app 1 day after sowing
FOCUS_3	H	1	post-emerg. ground appl.	Winter wheat	1		n.r.	50	Au/Wi	First possible app day after 1 March
FOCUS_4	I	0,0125	orchard air-blast	Apples	3	14	n.r.	25/50/70	Sp/Su	First possible app day after 15 April. min 14 day interval between remaining apps.
FOCUS_5	F	0,075	Air-blast in vines	Vines	5	10	n.r.	4 x 40	Sp/Su	First possible app day after 1 April. Min 10 days between remain-ing apps.
FOCUS_6	H	0,4 (NZ) / 0,2 (SZ)	Post-emerg. ground appl.	Cereals	1		n.r.	0	Au/Wi	First possible app day after 1 March
FOCUS_6M	M	N/A	N/A	N/A	N/A		-	-	-	(Metabolit)
FOCUS_7	F	0,75	Air-blast in vines	Vines	4	14	85	4 x 40	Sp/Su	First possible app day after 1 April. Min 14 days between remaining apps
UBA_1	H	1,5	pre-emerg. ground appl.	Spring cereals	1		n.r.	0	Au/Wi	Feb - April
UBA_2	F	0,75	Spraying	Winter cereals	2	21	70	50/50	Au/Wi	between 29 Feb. and 26 April
UBA_3	F	0,125	Spraying	Spring cereals	2	21	n.r.	50/70	Sp/Su	BBCH 25 - 69
UBA_4a	F	0,25	foliar spray	Winter cereals	2	21	n.r.	90/90	Sp/Su	BBCH 69
UBA_4b	F	0,1	foliar spray	Vines	3	14	n.r.	85/85/85	Sp/Su	Additional indication : vine, 3 x 100 g ai/ha, 14 days BBCH 81
UBA_5	I	0,0075	ground directed spray	Winter cereals	2	10	n.r.	25/25	Au/Wi	Emergence, Oct - Feb
UBA_6	F	1,5	Airblast foliar spray	Grapes	10	7	85	10 x 70	Sp/Su	Up to Z65

GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

* H: Herbizid, I: Insektizid, F: Fungizid, M: Metabolit

** Für FOCUS-Substanzen Angaben aus FOCUS (2001), sonst Information des UBA

*** n.r.: nicht relevant, da Volatilisation/Deposition kein Eintragspfad (Dampfdruck $< 10^{-5}$ Pa)

Tab. I.5-3: GAP spezifische Eingabeparameter für FOCUS SW und GERDA für die Vergleichsrechnungen.

Substanz	Crop type	Method	Application Pattern in FOCUS Steps 1 und 2	Application Pattern in FOCUS Step 3	Application Pattern in GERDA
FOCUS_1	Potatoes	Soil incorporation	South EU March May, no crop interception	"-14 bis + 16 after emergence"	"-14 bis + 16 after emergence"
FOCUS_2	Maize	Ground spray	South EU March May, no crop interception	"-14 bis + 16 after emergence"	"-14 bis + 16 after emergence"
FOCUS_3	Winter wheat	Ground spray	North EU March May, minimum crop interception	1 March - 30 March	March
FOCUS_4	Apples	Airblast spray	North EU March May, minimum crop interception	15 April - 12 June	April
FOCUS_5	Vines	Airblast spray	North EU March May, minimum crop interception	1 April - 10 June	April
FOCUS_6	Cereals	Ground spray	North EU March May, minimum crop interception	0 to 30 days after emergence	March
FOCUS_6M	N/A	-			
FOCUS_7	Vine	Airblast spray	North EU March May, minimum crop interception	"-14 bis + 16 after emergence"	April
UBA_1	Spring cereals	Ground spray	North EU March May, no crop interception	"-14 bis + 16 after emergence"	"-14 bis + 16 after emergence"
UBA_2	Winter cereals	Ground spray	North EU March May, minimum crop interception	1 Feb to 24 March	February
UBA_3	Spring cereals	Ground spray	North EU March May, average crop interception	21 to 72 days after emergence	21 to 72 days after emergence
UBA_4a	Winter cereals	Ground spray	North EU, June - Sep. full canopy	1 June to 22 July	June
UBA_4b	Vine	Airblast spray	North EU, June - Sep. full canopy	1 Sept - 12 Nov	September
UBA_5	Winter cereals	Ground spray	North EU Oct - Feb, no interception	0 to 14 days after emergence	0 to 14 days after emergence
UBA_6	Grapes	Airblast spray	North EU, June - Sep. average crop cover	May	May

I.5.2 Vergleich der PEC_{max} nach GERDA (Step 3) vs. EXPOSIT für Einträge durch Runoff & Erosion bzw. Drainage – ohne Spraydrift

Mit diesem Vergleich werden die PEC_{max}-Ergebnisse nach GERDA und nach EXPOSIT für die beiden Eintragspfade Runoff & Erosion sowie Drainage *separat* gegenüber gestellt. Die PECs wurden mit EXPOSIT 3.0 sowie mit GERDA (Step 3) berechnet. Da EXPOSIT nur Runoff & Erosions- oder Drainageeinträge jedoch nicht Einträge über Spraydrift berücksichtigt, während in GERDA wie in FOCUS SW alle Eintragspfade zusammen berücksichtigt werden, wurde für diesen Vergleich für GERDA eine Driftreduzierung von 100 % im Programm eingestellt (über Änderung des Programmcodes, keine wählbare Option für den Nutzer). Ansonsten wurden jeweils die Standardeinstellungen der Modelle verwendet sowie die Anwendungs- und Substanz-bezogenen Eingabeparameter der Beispielsubstanzen (s. Tab. I.5-2 und I.5-3). Für den Vergleich wurden nur die Ergebnisse zum PEC_{max,sw} ausgewertet. Bei GERDA wurden das Szenario nach dem 80. Perzentil der räumlichen Verteilung (Boden-Klima-Kombinationen) und das 80. Perzentil der jährlichen PEC_{max} (6.-höchstes der 30 Jahresmaxima) verwendet.

Alle berechneten PEC_{max}-Werte sind in den Tabellen A1-2 und A1-4 im Anhang zusammengestellt. Zunächst werden die PEC_{max}-Werte nach EXPOSIT und GERDA verglichen.

EXPOSIT gibt für die Risikoabschätzung der aquatischen Biozönose insgesamt vier PECs aus (ohne Risikominderung durch Pufferstreifen):

- Runoff
 - PEC_{initial}(Graben)
 - PEC_{ohne adsorptive Festlegung}(Graben), abhängig vom bewertungsrelevanten Endpunkt wird anstelle der PEC(Runoff) die PEC(Gesamteintrag inklusive Erosion) bewertungsrelevant; diese PEC wird hier aber nicht weiter für den Vergleich mit GERDA betrachtet.
- Drainage:
 - PEC_{initial}(Graben) - Frühling/Sommer-Applikation (Sp/Su)
 - PEC_{initial}(Graben) - Herbst/Winter-Applikation (Au/Wi),das heißt die bewertungsrelevante PEC(Drainage) wird nach Applikationszeitraum gewählt.

GERDA berücksichtigt dagegen den Applikationszeitraum bei der Eingabe und berechnet PECs für zwei Gewässerszenarien, Graben (ditch) und Bach (stream) jeweils für Drainage und Runoff und jeweils für zwei Boden-Klima-Szenarien (basierend auf der CDF[PEC_{max}] sowie der CDF[AUC], s. Kap. I.3.3). Die PEC_{max} sind in Tab. I.5-4 zusammengefasst und in Abb. I.5-2 und I.5-3 graphisch dargestellt.

Unabhängig vom Eintragspfad Drainage oder Runoff & Erosion unterscheiden sich die von GERDA berechneten PEC_{max} für Graben und Bach jeweils nur geringfügig voneinander, wobei die PEC-Werte für Gräben meist etwas höher sind als für die Bach-Szenarien. Die höheren PEC-Werte im Graben gehen mutmaßlich auf die geringere Verdünnung im Graben(1 : 3) im Vergleich zum Bach (1 : 5) zurück. Die umgekehrten Fälle zeigen jedoch, dass neben der Verdünnung noch weitere Faktoren die PEC beeinflussen und keine eindeutige Regel aufgestellt werden kann.

Tab. I.5-4: PECmax [$\mu\text{g/L}$] nach EXPOSIT und GERDA (mit 100% Driftreduktion) für 13 Beispielsubstanzen bzw. Anwendungen (Sp/Su: Frühjahr/Sommer; Au/Wi: Herbst/Winter); ein höherer PECmax nach GERDA (ditch oder stream) ist fett markiert (keine Markierung bei Gleichheit). Für GERDA sind jeweils die PECmax dargestellt, deren Boden-Klima-Kombinationen nach der CDF[PECmax] ausgewählt wurden.

Substanz	Runoff & Erosion			Drainage		
	EXPOSIT ^a (0 m buffer)	GERDA ditch	GERDA stream	EXPOSIT Drainage	GERDA ditch	GERDA stream
	PECmax [$\mu\text{g/L}$]					
FOCUS_1	8,97	56,60	51,19	6,63	0,92	0,59
FOCUS_2	7,22	46,07	41,71	2,98	0	0
FOCUS_3	1,26	14,31	20,93	2,86	0	0
FOCUS_4	0,20 ^{b)}	0,001	0,001	0,002	0	0
FOCUS_5	1,50	1,76	1,33	0,03	0	0
FOCUS_6	2,81	12,54	16,46	3,57	0,002	0,0013
FOCUS_6M	0,24	0,0093	0,01	0,33	0,34	0,22
FOCUS_7	1,14	14,46	11,02	0,41	0	0
UBA_1	10,66	63,99	53,50	13,53	0	0
UBA_2	2,24	7,75	5,13	0,33	0	0
UBA_3	0,49	1,51	1,08	0,01	0	0
UBA_4a	0,36	3,82	2,48	0,14	0	0
UBA_4b	0,28	0,79	0,59	0,12	0	0
UBA_5	0,12 ^{b)}	0,03	0,02	0,01	0	0
UBA_6	10,78	25,55	42,60	3,91	0	0

a) $\text{PEC}(\text{EXPOSIT}) = \text{PEC}(\text{Runoff})$

b) $\text{PEC}(\text{EXPOSIT}) = \text{PEC}(\text{Gesamtaustrag} = \text{Runoff} + \text{Erosion})$

Für den Eintragspfad Runoff & Erosion sind die mit GERDA errechneten PEC-Werte für fast alle Beispielsubstanzen deutlich höher als die mit EXPOSIT ermittelten. Lediglich für eine Substanz (FOCUS_5) liefern EXPOSIT und GERDA PEC-Werte in ähnlicher Größenordnung. Für zwei Beispielsubstanzen (FOCUS_4 und UBA_5) werden mit EXPOSIT höhere Werte berechnet als mit GERDA. Diese beiden Substanzen zeichnen sich durch einen sehr hohen Koc aus (FOCUS_4: $\text{Koc}=1024000$; UBA_5: $\text{Koc}=38000$). Die in Tabelle I.5-4 aufgeführte PECmax(EXPOSIT) stellt für beide Substanzen eine PEC für den Gesamtaustrag dar, da diese aufgrund der bewertungsrelevanten Toxizität der Substanzen gegenüber Invertebraten nach derzeitigem Bewertungskonzept in die Risikobewertung einzustellen ist. Die PEC(Runoff), berechnet nach Exposit 3.0, ist für beide Substanzen wesentlich geringer (FOCUS_4: $0,005 \mu\text{g/L}$; UBA_5: $0,01 \mu\text{g/L}$). GERDA berücksichtigt wie FOCUS Surface Water beide Eintragspfade Runoff und Erosion gleichzeitig, wobei partikulär gebundene Substanzeinträge während des Eintragsereignisses den oberen Schichten des Sediments zugeordnet werden und dann den im Gewässer ablaufenden Prozessen unterliegen. Da die mit GERDA berechneten PEC-Werte sehr gering sind und in der Größenordnung der mit EXPOSIT errechneten PEC(Runoff) liegen, scheint die Verlagerung an

das Sediment der (aufgrund des hohen Koc) stark adsorptiven Substanzen der relevantere Prozess zu sein.

Für den Metaboliten von FOCUS_6 (FOCUS_6M) lässt sich die Diskrepanz durch den „worst case“-Ansatz von EXPOSIT für Metaboliten erklären: Die gesamte Masse (100 %) des Metaboliten bezogen auf die maximal beobachtete Bildung im Boden (hier 11%) wird gleichzeitig gebildet und der Runoff-Austrag findet am selben Tag wie die Bildung statt. Aufgrund der häufig geringeren aquatischen Toxizität der Metabolite im Vergleich zur Muttersubstanz reicht eine einfache Expositionsabschätzung für die Risikobewertung aus.

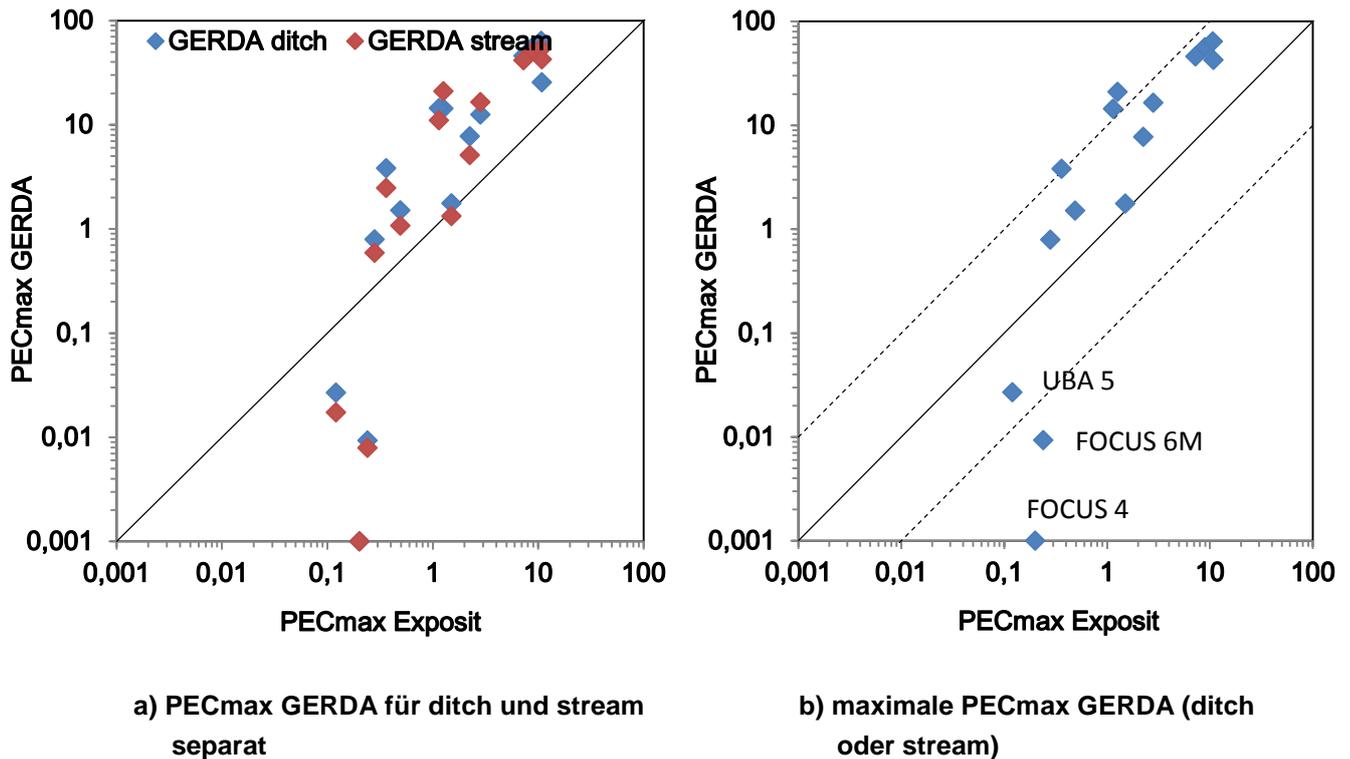


Abb. I.5-2: Eintragspfad Runoff. PECmax-Werte nach GERDA (80. Perzentil der räumlichen Verteilung und 80. Perzentil der Jahresmaxima) mit 100 % Driftreduktion im Vergleich zu PECmax-Werten nach EXPOSIT für 13 Beispielsubstanzen. Die durchgezogene Diagonale ist die 1 : 1 Linie.

Für den Eintragspfad Drainage zeigt sich dagegen das umgekehrte Bild: mit GERDA werden für 12 der 14 Anwendungen überhaupt keine Drainage-Einträge bzw. durch Drainage induzierte $PEC_{max} > 0$ berechnet. Dies ist mutmaßlich darauf zurückzuführen, dass die CDFs für die Auswahl der Boden-Klima-Kombination, die das 80. räumliche Perzentil repräsentiert, sich auf die *gesamte* Ackerfläche (einschließlich Sonderkulturflächen) in Deutschland als Grundgesamtheit beziehen, und nicht nur auf den gedränten Anteil dieser Fläche (rund 30 %, vgl. Kap. A5 und A6). Da die Boden-Klima-Kombinationen mit ungedränten Böden immer eine Drainage- $PEC_{sw,max}$ von 0 liefern, haben die Drainage-CDFs einen Achsenabschnitt, der dem Anteil der ungedränten Flächen an der gesamten ackerbaulich relevanten Fläche in Deutschland entspricht. Anders ausgedrückt, in den Drainage-CDFs sind für 70 % der Fläche die $PEC_{sw,max}$ bzw. $AUC_{sw,max}$ immer gleich Null. Das 80. räumliche Perzentil für die gesamte ackerbaulich relevante Fläche entspricht also nur ungefähr dem 33. räumlichen Perzentil für die gedränte Fläche. Die dem 80. räumlichen Perzentil entsprechende, für die Modellierung ausgewählte

Boden-Klima-Kombination stellt also in Bezug auf die gesamte Ackerfläche einen „realistic worst case“ dar, in Bezug auf die gedränte Fläche aber eher einen „good case“. Dies ist ebenfalls als Ursache zu sehen, dass auch im Fall der drei Substanzen, für die GERDA eine PEC_{max}(Drainage) berechnet, diese Konzentrationen deutlich niedriger sind als die mit EXPOSIT ermittelten.

Die Höhe der berechneten Drainage-PEC_{sw,max} hängt maßgeblich von der Wahl des räumlichen Perzentils ab. Aus den vorliegenden Drainage-PEC_{sw,max}-Ergebnissen für GERDA darf daher nicht geschlossen werden, dass der Eintragungspfad Drainage in Deutschland keine signifikante Rolle spielen würde. Sollten sich die Drainage-PEC_{sw,max}, die mit der derzeit in GERDA verwendeten Methode berechnet werden, als nicht protektiv genug erweisen (dies hängt ab von der Definition des Schutzziels!), ist zu überlegen, die ungedränten Boden-Klima-Kombinationen aus den Drainage-CDFs zu entfernen und ein 80. räumlichen Perzentil zu verwenden, das *nur* auf die *gedränte* Fläche bezogen wird.

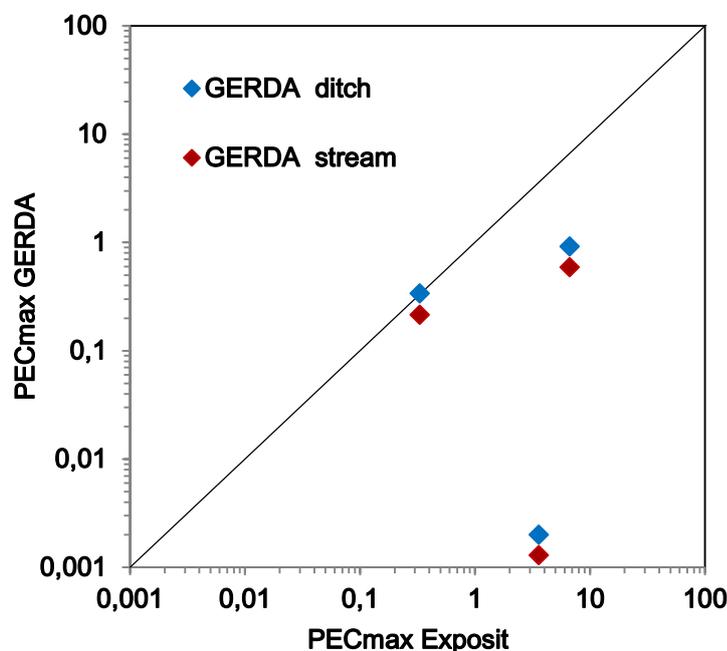


Abb. I.5-3: Eintragungspfad Drainage. PEC_{max}-Werte nach GERDA (80. Perzentil der räumlichen Verteilung und 80. Perzentil der Jahresmaxima) mit 100 % Driftreduktion im Vergleich zu PEC_{max}-Werten nach EXPOSIT. 12 Werte nicht dargestellt mit PEC_{max}(Drainage) nach GERDA = 0.0 µg/L. Die Diagonale ist die 1 : 1 Linie.

I.5.3 Vergleich der PEC_{max} nach GERDA (Step 3) vs. FOCUS_{sw} Runoff- und Drainage-Szenarien

Ein Ausgangspunkt für die Entwicklung von Deutschland-spezifischen Boden-Klima-Szenarien als zentraler Aufgabe in GERDA war die Kritik an der nicht bekannten Repräsentativität der FOCUS_{sw}-Szenarien für Runoff- & Erosions- bzw. Drainage-Einträge (vgl. Kap. I.2.1). Für die nach GERDA ermittelten PEC_{max} kann deren Perzentil, bezogen auf die Grundgesamtheit der Boden-Klima-Kombinationen in Deutschland, relativ genau angegeben werden (bzw. die Spann-

breite eingegrenzt werden, s. Tab. I.3-2). In Tab. I.5-5 sind die PECmax für die vier Runoff- und sechs Drainage-Szenarien in FOCUSsw den Ergebnissen für GERDA (Step 3) für die entsprechenden Gewässertypen gegenübergestellt. Die PECs wurden mit FOCUSsw Step 3 mit der Software FOCUS_TOXSWA 3.3.1 berechnet. Im Folgenden werden dabei die PECmax-Werte unter Berücksichtigung aller Eintragspfade (also inklusive Spraydrift) und ohne Risikominderungsmaßnahmen für die FOCUS- und GERDA-Szenarien verglichen (Tab. I.5-5, Abb. I.5-3). Aufgrund der Anwendungsempfehlungen werden in FOCUS nicht für jede der Beispielsubstanzen alle Szenarien durchgerechnet.

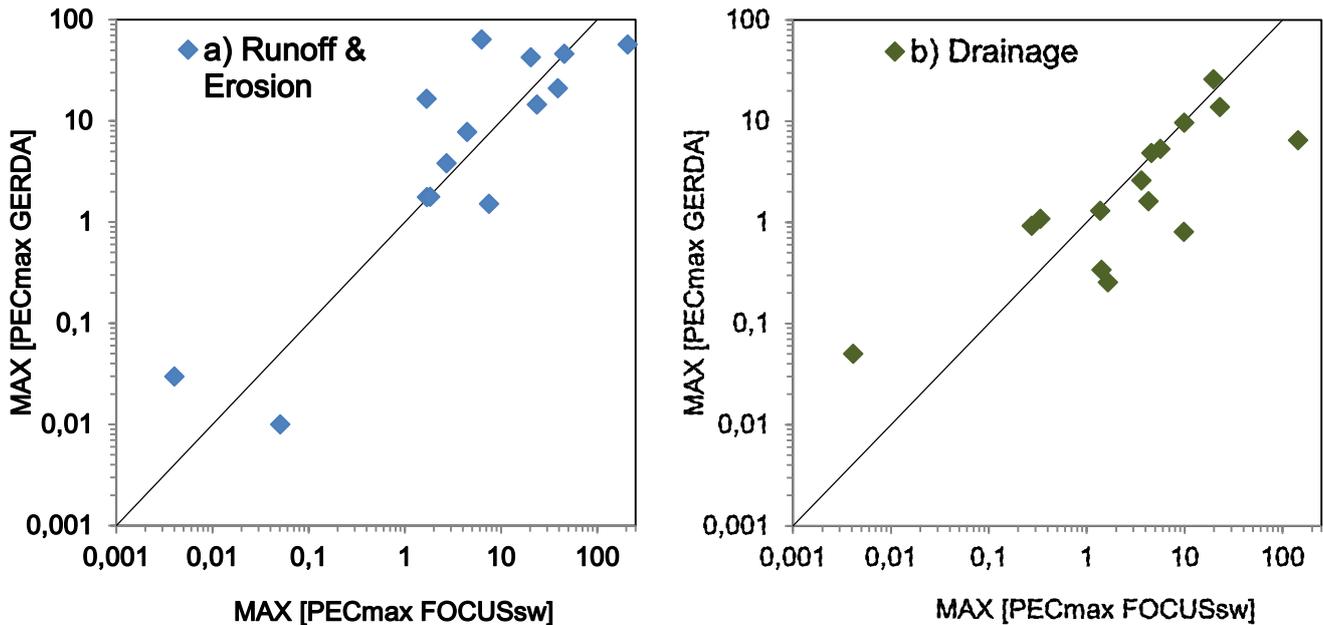


Abb. I.5-4: Höchster PECmax-Wert nach GERDA im Vergleich zum höchsten PECmax-Werten nach FOCUS-Szenarien für 13 Beispielsubstanzen und a) Runoff & Erosions-Einträge, b) Drainage-Einträge (jeweils mit Spraydrift-Einträgen).-Dargestellt ist jeweils der höchste PECmax aus den Gewässertypen (ditch und stream, bei FOCUS zusätzlich auch pond), und für FOCUSsw der jeweils höchste PECmax aus den 4 R- bzw 6 D-Szenarien. Die Diagonale ist die 1:1 Linie.

Tab. I.5-5: PECmax [µg/L] nach GERDA (Step 3) vs. FOCUSsw Runoff- und Drainage-Szenarien für 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) – Runoff & Erosion.

Substanz	FOCUSsw Runoff-Szenarien						GERDA ^a	
	R1		R2	R3	R4	FOCUS SW Szenario mit PECmax	Runoff & Erosion	PECmax bestimmender Eintragspfad in GERDA
	pond	stream	stream	stream	stream			
	PEC max [µg/L]							
FOCUS_1	0,11	20,91		21,29	205,78	R4	56,60 (d)	Runoff
FOCUS_2	0,31	18,05	18,03	5,13	45,08	R4	46,07 (d)	Runoff
FOCUS_3	0,29	12,59		38,85	4,18	R3	20,93 (s)	Runoff
FOCUS_4	Error ^b	Error		Error	Error		1,08 (s)	Spraydrift
FOCUS_5	0,04	1,68	1,10	1,61	1,60	R1	1,76 (d)	Runoff
FOCUS_6					1,67	R4	16,46 (s)	Runoff
FOCUS_6M					0,05		0,01 (s)	Runoff
FOCUS_7	0,19	10,52	6,65	19,774	23,55	R4	14,46 (d)	Runoff
UBA_1					6,26	R4	63,99 (d)	Runoff
UBA_2	0,32	2,64		3,812	4,41	R4	7,75 (d)	Runoff
UBA_3					7,48	R4	1,51 (d)	Runoff
UBA_4a	0,61	2,17		2,152	2,69	R4	3,82 (d)	Runoff
UBA_4b	0,12	1,07	1,44	1,822	1,34	R2	1,77 (d)	Runoff
UBA_5	0,00017	0,0026		0,004	0,0026	R3	0,05 (d)	Spraydrift
UBA_6	0,69	14,41	19,32	20,315	16,85	R3	42,60 (s)	Runoff

Tab. I.5-5: (Fortsetzung) PECmax [$\mu\text{g/L}$] nach GERDA (Step 3) vs. FOCUSsw Runoff- und Drainage-Szenarien für 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) - Drainage.

Substanz	FOCUSsw Drainage-Szenarien										GERDA ^a	
	D1		D2		D3	D4		D5		D6	Drainage	PECmax bestimmender Eintragspfad in GERDA
	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	pond	stream	pond	ditch		
	PEC max [$\mu\text{g/L}$]											
FOCUS_1					0,004	0,27	0,05			0,13	0,92 (d)	Drainage
FOCUS_2					5,26	4,55	1,38	4,73	0,73	5,65	5,33 (d)	Spraydrift
FOCUS_3	131,99	83,45	143,38	90,51	6,32	5,58	0,66	4,98	0,22	6,66	6,45 (d)	Spraydrift
FOCUS_4					0,33	0,34	0,18	0,36	0,02		1,08 (s)	Spraydrift
FOCUS_5										1,37	1,29 (d,s)	Spraydrift
FOCUS_6	3,61	3,30			2,58	2,13	0,41	2,04	0,18		2,58 (d)	Spraydrift
FOCUS_6M	1,41	0,88			0,01	0,26	0,22	0,09	0,10		0,34 (d)	Drainage
FOCUS_7										22,94	13,71 (d)	Spraydrift
UBA_1	9,91	8,11			9,50	7,40	0,33	7,35	0,33		9,67 (d)	Spraydrift
UBA_2	4,35	3,62	4,56	3,71	4,12	3,28	0,21	3,21	0,20	4,16	4,84 (d)	Spraydrift
UBA_3	9,80	4,88			5,53	4,73	0,87	4,78	0,41		0,81 (d)	Spraydrift
UBA_4a	2,23	1,21	2,25	1,85	1,39	1,18	0,09	1,28	0,09	4,26	1,61 (d)	Spraydrift
UBA_4b										1,64	0,26 (s)	Spraydrift
UBA_5	0,004	0,004	0,0041	0,0035	0,004	0,003	0,0002	0,004	0,0002	0,004	0,05 (d)	Spraydrift
UBA_6		83,45		90,51			0,05			19,69	25,90 (d)	Spraydrift

^{a)} Die Buchstaben bezeichnen den Gewässertyp, für den mit GERDA die höchste PECmax berechnet wird (d = ditch, s = stream)

^{b)} Error: bei der Berechnung trat eine Fehlermeldung im Modell PRZM auf, deren Ursache nicht ermittelt werden konnte.

Die PECmax nach GERDA für Runoff & Erosion ebenso wie für Drainage zeigen insgesamt keinen systematischen Bias gegenüber den jeweils höchsten PECmax der FOCUSsw R- bzw. D-Szenarien für die 14 Anwendungen. Da GERDA und FOCUS die gleichen Modelle verwenden, sind die Differenzen hauptsächlich auf die Unterschiede in den Boden-Klima-Szenarien, der Modellparametrisierung und der Simulationsperiode (z.B. 30 Jahre vs. 12 bzw. 16 Monate) zurückzuführen. Auch zwischen den FOCUSsw-Szenarien treten für einige Substanzen/Anwendungen bereits große Unterschiede in den PECsw-Werten auf.

I.5.4 Zulassungsfähigkeit von 13 Beispielsubstanzen nach GERDA (Step 3, ohne Minderungsmaßnahmen) im Vergleich zu EXPOSIT bzw. EVA

Im Zulassungsverfahren für Pflanzenschutzmittel ist für den Prüfbereich Oberflächengewässer nicht der Grad der Übereinstimmung der PECmax im Oberflächengewässer zwischen zwei Verfahren relevant, sondern letztlich nur die Zulassungsfähigkeit eines Pflanzenschutzmittels, die im Prüfbereich Oberflächengewässer vom Ergebnis der Risikobewertung für aquatische Organismen bestimmt wird. Zur Beantwortung dieser Frage wird zunächst die Zulassungsfähigkeit der 14 Beispielanwendungen nach GERDA (Step 3) mit dem derzeitigen Ansatz (EXPOSIT in Verbindung mit EVA) jeweils ohne Risikominderungsmaßnahmen miteinander verglichen.

Als Bewertungsgröße der Zulassungsfähigkeit wird im Folgenden das Exposure/Toxicity Ratio (ETR) < 1 verwendet. Das ETR ergibt sich aus der PEC (hier: PECmax) geteilt durch die RAC und ersetzt nach EFSA PPR (2013) das Toxicity-Exposure Ratio (TER). Die ökotoxikologischen Daten und die RAC-Werte für die Beispielsubstanzen sind im Anhang (Tab. A1-1) wiedergegeben. Die PECmax-Werte nach EVA und EXPOSIT zeigt Tab. A1-2 (Anhang), die zugehörigen ETR sind in Tabelle A1-3 (Anhang) zusammengefasst.

Die PECmax und ETR nach GERDA (Step 3, d.h. ohne Risikominderungsmaßnahmen) und Exposit/EVA sind in Tab. I.5-6 und I.5-7 dargestellt.

Tab. I.5-6: PECmax-Werte [$\mu\text{g/L}$] für die Beispielanwendungen nach GERDA, Exposit und EVA (ohne Risikominderungsmaßnahmen).

Substanz	GERDA (Step 3)						EXPOSIT		EVA Drift
	Runoff & Erosion			Drainage			Runoff	Drainage	
	Ditch	Stream	Pfad ^a	Ditch	Stream	Pfad ^a			
	PECmax [$\mu\text{g/L}$] (ohne Risikominderung)								
FOCUS_1	56,60	51,19	R	0,92	0,59	D	8,97	6,63	
FOCUS_2	46,07	41,71	R	5,33	4,98	S	7,22	2,98	9,23
FOCUS_3	14,63	20,93	R	6,45	5,74	S	1,26	2,86	9,23
FOCUS_4	0,98	1,08	S	0,98	1,08	S	0,20	0,0018	1,22
FOCUS_5	1,76	1,33	R	1,30	1,30	S	1,50	0,03	2,40
FOCUS_6	13,09	16,46	R	2,58	2,30	S	2,81	3,57	3,69
FOCUS_7	14,46	12,90	S	13,71	12,90	S	1,14	0,41	20,91
UBA_1	63,99	59,50	R	9,67	8,61	S	10,66	13,53	13,85
UBA_2	7,75	5,13	R	4,84	4,31	S	2,24	0,33	14,92
UBA_3	1,51	1,09	R	0,81	0,72	S	0,49	0,01	1,77
UBA_4a	3,82	2,48	R	1,61	1,44	S	0,36	0,14	3,89
UBA_4b	1,73	1,72	R	1,73	1,72	S	0,28	0,12	6,72
UBA_5	0,05	0,04	S	0,05	0,04	S	0,12	0,01	0,10
UBA_6	25,92	42,60	R	25,90	25,80	S	10,78	3,91	40,77

^{a)} PECmax ist induziert durch Eintrag über S = Spraydrift, R = Runoff & Erosion oder D = Drainage.

Tab. I.5-7: Regulatory Acceptable Concentrations (RAC) und Exposure Toxicity Ratios (ETR) Werte für die Beispielanwendungen nach GERDA, Exposit und EVA ohne Risikominderung.

Substanz	RAC	GERDA (ohne Risikominderung)			EXPOSIT / EVA (ohne Risikominderung)			
		Runoff & Erosion ^a	Drainage ^a	Zulassungsfähig?	Runoff & Erosion	Drainage	Spraydrift	Zulassungsfähig?
	$\mu\text{g/L}$	ETR ^b			ETR ^b			
FOCUS_1	1,15	49,2	0,8	nein	-	5,8	-	nein
FOCUS_2	2	23,0	2,7	nein	3,6	1,5	4,6	nein
FOCUS_3	10	2,1	0,6	nein	0,1	0,3	0,9	ja
FOCUS_4	0,00041	2632,7	2632,7	nein	487,8	0,0	2976,5	nein
FOCUS_5	1,4	1,3	0,9	nein	1,1	0,0	1,7	nein
FOCUS_6	10	1,6	0,3	nein	0,3	0,4	0,4	ja
FOCUS_7	5	2,9	2,6	nein	0,2	0,1	4,2	nein
UBA_1	2,6	48,9	3,7	nein	4,1	5,2	5,3	nein
UBA_2	0,1	77,5	48,4	nein	22,4	3,3	49,2	nein
UBA_3	0,43	3,5	1,9	nein	1,1	0,0	4,1	nein
UBA_4a	1	3,9	1,6	nein	0,4	0,1	3,9	nein
UBA_4b	1	1,7	1,7	nein	0,3	0,1	6,7	nein
UBA_5	0,00016	313,1	302,5	nein	750,0	62,5	606,9	nein
UBA_6	0,2	192,0	129,5	nein	53,9	19,6	203,9	nein

^{a)} inklusiv Spraydrift, ^{b)} ETR basierend auf höchster PECmax aus PECmax für ditch und stream (siehe Tab. I.5-6)

Von den hier untersuchten 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) wäre gemäß der Expositionsbewertung nach GERDA keine Anwendung ohne Berücksichtigung von Risikominderungsmaßnahmen zulassungsfähig (Tab. I.5-7). Nach EXPOSIT und EVA sind nur die beiden Substanzen FOCUS_3 und FOCUS_6 ohne Risikominderungsmaßnahmen zulassungsfähig. Eine nach beiden Bewertungsverfahren übereinstimmende *positive* Bewertung tritt für keine Anwendung auf.

In der KreuzTab. I.5-8 sind die Ergebnisse nochmal zusammengefasst: Für zwei Substanzen wäre der Wirkstoff nach EXPOSIT in Verbindung mit EVA, jedoch nicht nach GERDA zulassungsfähig; für keine Anwendung könnte nach GERDA eine Zulassung erteilt werden, die nach EXPOSIT/EVA vorher nicht gegeben wäre (jeweils ohne Minderungsmaßnahmen).

Tab. I.5-8: Vergleich der Zulassungsfähigkeit von 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) nach EXPOSIT und EVA mit GERDA (Step 3) ohne Risikominderungsmaßnahmen.

		EXPOSIT in Verbindung mit EVA	
		Zulassung möglich?	
GERDA (Step 3)	Ja	0	0
	Nein	2	12

Nach GERDA (Step 3) ist demnach ohne Minderungsmaßnahmen für keine der 14 Beispielanwendungen die Zulassung möglich, im Vergleich zu EXPOSIT (in Verbindung mit EVA) bedeutet das eine Erschwernis der Zulassungsfähigkeit in zwei Fällen.

Die Ursache für diese Ergebnisse liegt vor allem daran, dass durch GERDA Steps 3 höhere durch Runoff-induzierte Konzentrationen berechnet werden. In 11 von 14 Situationen war Runoff für das Konzentrationsmaximum in GERDA Step 3 verantwortlich. In allen Fällen lag das entsprechende Maximum höher als der jeweilige EXPOSIT-Wert. Unterschiede zwischen beiden Verfahren können je nach Anwendung eine Größenordnung ausmachen.

In den Fällen, in denen das PEC-Maximum in GERDA Step 3 durch Drift dominiert wurde, lag das entsprechende nach EVA berechnete Maximum höher als der GERDA Step 3-Wert, verursacht durch Integration der Driftdeposition über die Gewässerbreite in GERDA (vgl. Kap. I.4.4.2). Die Unterschiede bei den Drainage-Einträgen können aufgrund der Überlagerung mit Driftereignissen hier nicht direkt dargestellt werden. Es wird auf das vorherige Kap. I.5.2 verwiesen.

Im nächsten Schritt wurden Risikominderungsmaßnahmen in EXPOSIT und EVA sowie GERDA berücksichtigt, um die Wirkung dieser Optionen auf die Zulassungsfähigkeit an Hand der Beispielsubstanzen aufzeigen zu können.

I.5.5 Zulassungsfähigkeit von 13 Beispielsubstanzen nach GERDA (Step 4) im Vergleich zu EXPOSIT bzw. EVA - mit Berücksichtigung von Minderungsmaßnahmen

Die Wirkung der folgenden Risikominderungsmaßnahmen wurde für die verschiedenen Ansätze zur Expositionsabschätzung untersucht:

- EVA: Abstand zum Gewässer (5, 10, 15 oder 20 m).
- EXPOSIT - Eintragspfad Runoff & Erosion: Vorhandensein eines bewachsenen Randstreifens zwischen Behandlungsflächen und Gewässer (5, 10 oder 20 m Breite).

Die Wirkung dieser Minderungsmaßnahmen auf die ETR nach EXPOSIT in Verbindung mit EVA ist in Tab. A1-3 (Anhang) detailliert und in Tab. I.5-8 zusammengefasst dargestellt.

„Driftreduzierende Technik“ käme im Prinzip als zusätzliche Maßnahme für vier Substanzen (FOCUS_4, UBA_2, UBA_5 und UBA_6) in Betracht, die gem. Tab. A1-3 auch mit 20 m Driftabstand nach EVA nicht zulassungsfähig sind. Diese Option wird jedoch nicht weiter verfolgt, da die betreffenden Substanzen bereits aufgrund ihrer ETR, induziert durch Runoff, selbst mit 20 m Pufferstreifen nicht zulassungsfähig sind.

In GERDA (Step 4) sind folgende Minderungsmaßnahmen möglich:

- GERDA – Eintragspfad Spraydrift:
 - 5, 10 oder 20 m Abstand zum Gewässer bei der Anwendung
 - Einsatz driftreduzierender Technik mit 50, 75 oder 90 % Driftminderung.
- GERDA - Eintragspfad Runoff & Erosion:
 - bewachsener Randstreifen (vegetated filter strip, VFS) zwischen Behandlungsfläche und Gewässer von 10 oder 20 m Breite; die Reduktionswirkung des Randstreifens wird mit dem nachgeschalteten Modell VFSSMOD berechnet (s. Kap. II.7). Wenn ein Randstreifen angenommen wird, dann entspricht dessen Breite auch dem Abstand für die Berechnung des Eintrags über Spraydrift (d.h. es wird davon ausgegangen, dass ein bewachsener Randstreifen niemals behandelt wird). Dies entspricht dem Ansatz in FOCUS SW (Step 4).

Die Wirkung einzelner Minderungsmaßnahmen auf die PEC_{max} nach GERDA (Step 4) ist in Tab. A1-4 (Anhang) für zwei ausgewählte Varianten dargestellt, „10 m Randstreifen“ sowie „20 m Randstreifen in Verbindung mit 90 % Driftreduktion“ (als Maximum der Minderungswirkung).

Mit Berücksichtigung von Risikominderungsmaßnahmen wären demzufolge nach EXPOSIT/EVA insgesamt acht der 14 Anwendungen zulassungsfähig (Tab. I.5-9, Einzelheiten Tab. A1-3). Für vier Substanzen reichen 20 m Abstand bei der Applikation nicht für ein akzeptables Risiko in Bezug auf Drifteinträge aus (FOCUS_4, UBA_2, UBA_5 und UBA_6). In insgesamt sechs Fällen würden auch 20 m bewachsener Randstreifen für die Verringerung der Runoff & Erosions-Einträge nicht ausreichen (FOCUS_2, FOCUS_4, UBA_1, UBA_2, UBA_5 und UBA_6); weiterhin ist in allen diesen Fällen und zusätzlich für FOCUS_1 keine Anwendung auf drainierten Flächen möglich.

Tab. I.5-9: Übersicht zur Zulassungsfähigkeit von 14 Beispielanwendungen basierend auf PECsw nach EXPOSIT(Runoff und Drainage) und EVA (Spraydrift) mit Risikomanagementmaßnahmen für alle Eintragspfade.

Substanz	EVA	EXPOSIT		EXPOSIT/EVA	
	Spraydrift Risiko akzeptabel? (eingestellter Abstand)	Runoff & Erosion Risiko akzeptabel? (eingestellter Abstand)	Drainage Risiko akzeptabel? (Risikomanagement erforderlich)	Zulassung möglich?	Risikomanagement Spraydrift/ Runoff / Drainage
FOCUS_1	n.r.	n.r.	ja (mit RMD)	Ja	- / - / RMD
FOCUS_2	ja (5 m)	nein (20 m)	Ja	Nein	n.r.
FOCUS_3	ja (0 m)	ja (0 m)	Ja	Ja	- / - / -
FOCUS_4	nein (20 m)	nein (20 m)	ja (mit RMD)	Nein	n.r.
FOCUS_5	ja (5 m)	ja (5 m)	Ja	Ja	5 m/ 5 m/ -
FOCUS_6	ja (0 m)	ja (0 m)	Ja	Ja	- / - / -
FOCUS_7	ja (10 m)	ja (0 m)	Ja	Ja	10 m/ - / -
UBA_1	ja (10 m)	nein (20 m)	ja (mit RMD)	Nein	n.r.
UBA_2	nein (20 m)	nein (20 m)	ja (mit RMD)	Nein	n.r.
UBA_3	ja (5 m)	ja (5 m)	Ja	Ja	5 m/ 5 m/ -
UBA_4a	ja (5 m)	ja (0 m)	Ja	Ja	5 m/ - / -
UBA_4b	ja (10 m)	ja (0 m)	Ja	Ja	10 m/ - / -
UBA_5	nein (20 m)	nein (20 m)	ja (mit RMD)	Nein	n.r.
UBA_6	nein (20 m)	nein (20 m)	ja (mit RMD)	Nein	n.r.
Anzahl der zulassungsfähigen Anwendungen				8	

n.r. nicht relevant

RMD - Risikomanagement Drainage (keine Anwendung auf drainierten Flächen)

Die Zulassungsfähigkeit mit GERDA unter Berücksichtigung verschiedener Risikominderungsmaßnahmen ist in Tabelle I.5-10 zusammengefasst. Die Zusammenstellung basiert auf ETR-Werten errechnet aus den höchsten PECmax der Gewässerszenarien (ditch oder stream). Detaillierte Ergebnisse sind im Anhang Tabelle A1-5 zu finden.

In GERDA werden wie in FOCUS SW für jedes Szenario zwei Eintragspfade berücksichtigt, Runoff und Spraydrift sowie Drainage und Spraydrift. Die in GERDA Step 4 eingestellten Risikominderungsmaßnahmen könnten daher zwei Eintragspfade mindern. Im Fall des Runoff-Szenarios ist dem so. Der in GERDA Step 4 eingestellt bewachsene Randstreifen mindert sowohl Runoff- als auch Spraydrifteinträge. In den Drainageszenarien wird nur Spraydrift durch den eingestellten Randstreifen gemindert.

Nach GERDA wäre mit der Maßnahme „Pufferstreifen 10 m Breite“ (mit entsprechendem Spraydrift-Abstand, aber ohne weitere technische Driftreduzierung) die Zulassungsfähigkeit für drei Substanzen zu erreichen (FOCUS_5, FOCUS_6, und FOCUS_7, s. Tab. I.5-10). Für die Substanz UBA_3 wären 20 m Pufferstreifen erforderlich, damit die Zulassung möglich wäre. Mit Berücksichtigung von Risikominderungsmaßnahmen wären somit nach GERDA insgesamt fünf An-

wendungen zulassungsfähig. Zusätzlich kann driftmindernde Technik in beiden Szenarien zur Minderung von Spraydrifteinträgen in GERDA Step 4 eingestellt werden. Der Einfluss von Driftmindernder Technik wurde nur im Zusammenspiel mit einem 20 m Randstreifen geprüft. Da für fast alle geprüften Substanzen der Eintragspfad Runoff die PECmax bestimmt (siehe Tab. I.5-6), ist eine Verminderung von PECmax durch driftmindernde Technik mit Ausnahme von FOCUS_4 nicht zu erkennen. Bei UBA_5 ist zwar die PECmax nach GERDA Step 3 durch Spraydrift bestimmt. Jedoch scheint mit einem Abstand von 20 m bereits der Eintragspfad Runoff die PECmax zu bestimmen. Driftmindernde Technik führt bei einem Abstand von 20 m zu keiner weiteren Minderung der PECmax.

Tab. I.5-10: Exposure Toxicity Ratios (ETR) Werte für die Beispielanwendungen nach GERDA (Step 4) mit Berücksichtigung verschiedener Risikominderungsmaßnahmen (Erläuterungen s. Text). Zulassungsfähigkeit s. Fußnote.

Sub- stanz	GERDA (Drainage+ Spraydrift)					GERDA (Runoff & Erosion und Spraydrift)				GERDA Zulas- sung möglich?	GERDA Risiko- ma- nage- ment	EXPO- SIT /EVA Zulas- sung?
	0 m	10 m	20 m	20 m + 90%	Risiko akzeptabel? (eingestell- ter Abstand)*	10 m	20 m	20 m + 90%	Risiko akcepta- bel? (eingestell- ter Abstand)*			
	ETR					ETR						
FOCUS_1	0,8	-	-	-	ja (0 m)	23,2	20,0	20,0	nein	Nein		ja
FOCUS_2	2,7	0,5	-	-	ja (10 m)	10,2	8,5	8,4	nein	Nein		nein
FOCUS_3	0,6	0,1	-	-	ja (0 m)	1,4	1,3	1,3	nein	Nein		ja
FOCUS_4	2632,7	736,6		20,7	nein	736,6	206,6	20,7	nein	Nein		nein
FOCUS_5	0,9	-	-	-	ja (0 m)	0,5	-	-	ja (10 m)	Ja	10 m VFS	ja
FOCUS_6	0,3	-	-	-	ja (0 m)	0,6	-	-	ja (10 m)	Ja	10 m VFS	ja
FOCUS_7	2,6	0,4	-	-	ja (10 m)	0,9	-	-	ja (10 m)	Ja	10 m VFS	ja
UBA_1	3,7	0,6	-	-	ja (10 m)	10,9	9,6	9,6	nein	Nein		nein
UBA_2	48,4	7,3		0,4	ja (20 m, 90 %)	36,2	34,3	34,3	nein	Nein		nein
UBA_3	1,9	0,3	-	-	ja (10 m)	1,6	1,4	1,4	nein	Nein		ja
UBA_4a	1,6	0,2	-	-	ja (10 m)	1,8	1,6	1,6	nein	Nein		ja
UBA_4b	1,7	0,3	-	-	ja (10 m)	0,3	-	-	ja (10 m)	Ja	10 m VFS	ja
UBA_5	302,5	45,6		2,5	nein*	58,8	54,4	54,4	nein	Nein		nein
UBA_6	129,5	20,7	9,1	0,9	ja (20 m, 90 %)	49,4	37,5	37,5	nein	Nein		nein
Anzahl möglicher Zulassungen										4		8

* Im Fall von „nein“ wurde als maximal mögliche Minderungsmaßnahme ein Abstand/bewachsener Randstreifen von 20 m und 90 % driftmindernde Technik geprüft

VFS steht für bewachsenen Randstreifen, der gleichzeitig Spraydrift reduziert.

FOCUS_4 und UBA_5: Spraydrift induziert, nicht Drainage bestimmend (siehe Tab I.5.5)

Als Fazit ist festzuhalten, dass für die 14 Beispielanwendungen das Expositionsmodell GERDA – mit Berücksichtigung von Risikominderungsmaßnahmen - in 10 Fällen zur gleichen Bewertung führen würde wie das derzeitige Verfahren mit EXPOSIT in Verbindung mit EVA (Tab. I.5-11), davon wären vier Anwendungen zulassungsfähig und acht nicht. Die Stärke der erforderlichen Risikominderungsmaßnahmen ist allerdings für diese fünf Substanzen zum Teil unterschiedlich nach GERDA und nach EXPOSIT/EVA.

Für vier Beispielanwendungen wäre nach EXPOSIT/EVA die Zulassung möglich, nach GERDA jedoch nicht: Substanz FOCUS_3 ist nach EXPOSIT/EVA ohne weitere Maßnahme zulassungsfähig, während nach GERDA auch der maximale Maßnahmenumfang (20 m Filterstreifen und 90 % Driftreduktion) nicht ausreichen würde. FOCUS_1 ist in EXPOSIT/EVA zulassungsfähig, da bei dem derzeitigen Bewertungskonzept der Eintragspfad Runoff für die Anwendungstechnik „Einarbeitung in den Boden“ pauschal nicht berücksichtigt wird.

Es gibt keine Substanz, die mit GERDA (Step 4) zulassungsfähig ist, aber nicht mit EXPOSIT/EVA zulassungsfähig wäre.

Tab. I.5-11: Vergleich der Zulassungsfähigkeit von 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) nach EXPOSIT und EVA mit GERDA unter Berücksichtigung von Risikominderungsmaßnahmen.

		EXPOSIT in Verbindung mit EVA	
		Zulassung möglich?	Ja
GERDA (Step 4)	Ja	4	0
	Nein	4	6

I.5.6 Parametrisierung von VFSSMOD zur Simulation der Filterwirkung von bewachsenen Pufferstreifen

Das Modell VFSSMOD (in Verbindung mit der Regressionsgleichung zur Verminderung der Wirkstofffracht von Sabbagh et al. 2009) wird im Kap. II.7 ausführlich untersucht. Es zeigt sich unter anderem (vgl. die Schlussfolgerungen aus der durchgeführten VFSSMOD-Simulationsstudie in Kap. II.7.6), dass die Einstellung für die beiden Modellparameter FWIDTH und VL bei weitem den größten Einfluss auf das Ergebnis der VFSSMOD-Berechnung, d.h. auf die Reduktionsleistung eines Filterstreifens haben (s. a. Kap. I.3.4).

- FWIDTH ist der Wert für die "effektive Fließbreite" des Oberflächenabflusses; d. h. ein Maß für die Konzentration (Einengung) der Fließbahn des Oberflächenabflusses vor Eintritt in den Filterstreifen.
- VL gibt die Länge des VFS in Fließrichtung an (üblicherweise als Breite eines Filterstreifens bezeichnet).

Für die zukünftige regulatorische Praxis ist daher die Festlegung von FWIDTH bzw. VL von entscheidender Bedeutung für die Wirkung der Minderungsmaßnahme „Filterstreifen“ (VFS). Diese Entscheidung kann nicht im Rahmen der hier vorgestellten Untersuchung getroffen werden. Als erste Grundlage für diese Diskussion sind Tab. I.5-12 und I.5-13 die PEC_{max} der 13 Beispielsubstanzen sowie deren prozentuale Verminderung dargestellt in Abhängigkeit von der unterschiedlichen Parametrisierung des „vegetated filter strip“ in VFSSMOD.

Tab. I.5-12: Verminderung der PECmax für Gewässertyp „ditch“ durch Runoff & Erosions-Eintrag für 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) bei Wahl unterschiedlicher Werte für die Parameter FWIDTH^b und VL^c im Modell GERDA (Step 4) mit VFSSMOD (als Bestandteil von GERDA); 100 % Driftreduktion eingestellt.

Substanz	Gewässertyp = <u>ditch</u>								
	GERDA Step 3 nur Runoff & Erosion ^a PECmax (µg/L)	GERDA Step 4 ^a mit Verminderung Eintrag Runoff & Erosion durch VFS (Berechnung mit VFSSMOD)							
		VL = 10 m				VL = 20 m			
		FWIDTH = 100 m		FWIDTH = 50 m		FWIDTH = 100 m		FWIDTH = 50 m	
	PECmax	Verminderung ^d	PECmax	Verminderung ^d	PECmax	Verminderung ^d	PECmax	Verminderung ^d	
	(µg/L)	(%)	(µg/L)	(%)	(µg/L)	(%)	(µg/L)	(%)	
FOCUS_1	56,60	8,16	85,6	26,63	52,9	4,93	91,3	22,38	60,5
FOCUS_2	46,07	8,37	81,8	20,27	56,0	5,86	87,3	16,86	63,4
FOCUS_3	14,31	7,46	47,9	9,82	31,4	6,37	55,5	8,82	38,4
FOCUS_4	0,001	< 0,0001	100,0	0,0002	80,0	<0,0001	100,0	0,0002	80,0
FOCUS_5	1,76	0,18	90,0	0,67	61,9	0,08	95,4	0,57	67,6
FOCUS_6	12,54	2,28	81,8	6,03	51,9	0,93	92,5	5,48	56,3
FOCUS_6 M	0,0093	0,002	78,5	0,004	57,0	0,0011	88,2	0,0036	61,3
FOCUS_7	14,46	1,59	89,0	4,68	67,6	0,91	93,7	3,77	74,0
UBA_1	63,99	13,22	79,4	28,35	55,7	9,70	84,9	25,00	60,9
UBA_2	7,75	2,31	70,2	3,62	53,3	1,59	79,4	3,43	55,7
UBA_3	1,51	0,44	70,8	0,67	55,9	0,41	73,0	0,60	60,2
UBA_4a	3,82	1,06	72,3	1,77	53,6	0,65	82,9	1,59	58,2
UBA_4b	0,79	0,10	87,2	0,31	60,3	0,04	95,4	0,25	68,0
UBA_5	0,0297	0,0053	82,2	0,0094	68,4	0,0029	90,2	0,0087	70,7
UBA_6	25,55	2,78	89,1	7,98	68,8	1,44	94,4	6,79	73,4
Mittel (14)^e			80,4		58,3		86,9		63,2

^{a)} 100% Driftreduktion im Modell eingestellt

^{b)} FWIDTH: „effektive Fließbreite“ des Oberflächenabflusses (Grad der Abflusskonzentration)

^{c)} VL: Länge des VFS in Fließrichtung (Breite des Filterstreifens)

^{d)} Verminderung der PECmax (des betreffenden Gewässertyps) gegenüber GERDA (Step 3) in Prozent

^{e)} Mittelwert der Reduktionsleistung (ohne Berücksichtigung FOCUS_4 aufgrund sehr niedriger Konzentration).

Offensichtlich hat die Veränderung von FWIDTH in den vorliegenden Fällen einen wesentlichen größeren Einfluss auf die Filterwirkung als VL (in der hier gewählten Spannweite der Werte für die beiden Parameter): Die Verminderung der Abflusskonzentration beim Graben (ditch) um die Hälfte (Erhöhung von FWIDTH von 50 auf 100) verbessert die Reduktion (im Mittel von 13 Wirkstoffen) um 22,1 %-Punkte (für VL = 10 m) bzw. 23,7 %-Punkte (VL = 20 m).

Die Verdoppelung der Länge des Filterstreifens von 10 m auf 20 m verbessert die Filterwirkung dagegen nur um 6,6 %-Punkte respektive 4,9 %-Punkte (für FWIDTH = 50 bzw. 100 m).

Tab. I.5-13: Verminderung der PECmax für Gewässertyp „stream“ durch Runoff & Erosions-Eintrag für 13 Beispielsubstanzen (14 Anwendungen) bei Wahl unterschiedlicher Werte für die Parameter FWIDTH^b und VL^c im Modell GERDA (Step 4) mit VFSMOD (als Bestandteil von GERDA); 100 % Driftreduktion eingestellt.

Substanz	Gewässertyp = <u>stream</u>								
	GERDA Step 3 ^a nur Runoff & Erosion ^a PECmax (µg/L)	GERDA Step 4 ^a mit Verminderung Eintrag Runoff & Erosion durch VFS (Berechnung mit VFSMOD)							
		VL = 10 m				VL = 20 m			
		FWIDTH = 100 m		FWIDTH = 10 m		FWIDTH = 100 m		FWIDTH = 10 m	
	PECmax (µg/L)	Vermin- derung ^d (%)	PECmax (µg/L)	Vermin- derung ^d (%)	PECmax (µg/L)	Vermin- derung ^d (%)	PECmax (µg/L)	Vermin- derung ^d (%)	
FO-CUS_1	51,19	9,81	80,8	25,40	50,4	4,68	90,9	23,00	55,1
FO-CUS_2	41,71	7,85	81,2	19,25	53,9	3,79	90,9	14,77	64,6
FO-CUS_3	20,93	8,70	58,5	13,61	35,0	6,83	67,4	13,02	37,8
FO-CUS_4	1,0794	0,0001	100,0	<0,0001	100,0	<0,0001	100,0	<0,0001	100,0
FO-CUS_5	1,33	0,14	89,3	0,48	63,9	0,06	95,2	0,37	72,2
FOCUS_6	16,46	2,19	86,7	5,77	64,9	0,91	94,5	4,70	71,5
FOCUS_6M	0,01	0,0014	86,0	0,0031	69,0	0,0008	92,0	0,0025	75,0
FOCUS_7	12,9	1,02	92,1	4,11	68,1	0,61	95,3	2,84	78,0
UBA_1	59,5	12,80	78,5	26,40	55,6	8,72	85,4	23,28	60,9
UBA_2	5,13	1,51	70,6	2,36	54,0	1,00	80,6	2,21	56,9
UBA_3	1,09	0,35	67,7	0,43	61,0	0,34	68,5	0,40	63,2
UBA_4a	2,48	0,68	72,6	1,16	53,4	0,42	83,0	1,08	56,4
UBA_4b	0,594	0,08	86,4	0,26	56,0	0,03	94,9	0,21	64,3
UBA_5	0,043	0,0035	91,9	0,0062	85,6	0,0019	95,6	0,0059	86,3
UBA_6	42,6	2,61	93,9	9,88	76,8	1,55	96,4	7,50	82,4
Mittel (14)^e			82,4		63,2		88,7		68,3

^{a)} 100% Driftreduktion im Modell eingestellt

^{b)} FWIDTH: „effektive Fließbreite“ des Oberflächenabflusses (Grad der Abflusskonzentration)

^{c)} VL: Länge des VFS in Fließrichtung (Breite des Filterstreifens)

GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

^{d)} Verminderung der PEC_{max} (des betreffenden Gewässertyps) gegenüber GERDA (Step 3) in Prozent

^{e)} Mittelwert der Reduktionsleistung (ohne Berücksichtigung FOCUS_4 aufgrund sehr niedriger Konzentration).

Die PEC_{max} und die Reduktionsleistungen für den Gewässertyp „stream“ (Tab. I.5-13) unterscheiden sich nur geringfügig von den Ergebnissen für „ditch“, auf eine separate Diskussion wird daher verzichtet.

Teil II

Ausführliche Darstellungen der Methodik und Ergebnisse

II.1 Ableitung Boden-Klima-Szenarien - Faktor Boden

Für die Ableitung von Boden-Klima-Szenarien für Deutschland - Faktor „Boden“ - werden die Böden in Deutschland, auf denen (potenziell) PSM ausgebracht werden, im Hinblick auf ihre austragsbestimmenden Eigenschaften charakterisiert und ihr Flächenanteil ausgewertet. Für die Expositionsabschätzung mittels GERDA werden dazu ausdrücklich *nicht* isolierte Eigenschaften wie der Gehalt an organischem Kohlenstoff oder der Tongehalt verglichen, da die isolierte Betrachtung zum einen wenig aussagekräftig ist und zum anderen die statistische Abhängigkeit der verschiedenen Bodeneigenschaften außer Acht lässt.

Stattdessen werden die in Deutschland auftretenden, ackerbaulich relevanten bodensystematischen Einheiten, die in der BUEK1000 beschrieben werden im System der **FOOTPRINT Soil Types** (Dubus et al., 2009; S. 28 ff.) klassifiziert. Da der Flächenanteil der bodensystematischen Einheiten pro Karteneinheit in der BUEK bekannt ist, lässt sich dann die Flächenrepräsentanz der FOCUS_{sw} Szenarios hinsichtlich des Bodens für Deutschland direkt ableiten. Für die Repräsentanzanalyse des FOCUS_{sw}-Ansatzes werden daneben auch die in den FOCUS_{sw} Szenarien auftretenden Böden im FST-System klassifiziert.

II.1.1 Das System der FOOTPRINT Soil Types (FST)

Konzept der FOOTPRINT Soil Types

Die Systematik der FOOTPRINT Soil Types (FST; Dubus et al., 2009) wurde im Rahmen des EU-Projekts FOOTPRINT von John Hollis (UK) mit folgender Zielsetzung entwickelt:

- Gruppierung der in Europa gemäß der Soil Geographical Database of Europe SGDBE (Le Bas et al., 1998) auftretenden Böden in eine begrenzte Anzahl von generischen Bodentypen, basierend auf ihren hydrologischen, Textur- und Sorptionspotenzial-Charakteristiken
- Die FOOTPRINT Soil Types sollen alle relevanten Transferpfade (Oberflächenabfluss, Erosion, Zwischenabfluss, d.h. lateral subsurface flow, interflow, Drainage und Leaching) vom Boden in Oberflächen- und Grundwasser widerspiegeln.
- Parametrisierung der landwirtschaftlich relevanten unter diesen Bodentypen für die Modelle MACRO 5.x und PRZM, um eine flächendeckende Modellierung des Umweltverhaltens und Transports in ganz Europa zu ermöglichen

Die Vorteile der FOOTPRINT Soil Types sind:

- Die FOOTPRINT Soil Types sind mit einer gut dokumentierten Methodik bereits für MACRO und PRZM parametrisiert (Dubus et al., 2009, Jarvis et al., 2007; Reichenberger et al., 2008).
- Das Konzept ist in ganz Europa anwendbar.
- Die FOOTPRINT Soil Types wurden bereits in mehreren Studien (z.B. Footways, 2011; Moeys et al., 2011) in mindestens fünf verschiedenen europäischen Ländern erfolgreich angewandt.
- Eine Modellierung für das Rohr-Einzugsgebiet (Schweiz) mit dem Tool FOOT-CRS auf Basis einer lokalen, in FOOTPRINT Soil Types übersetzten Bodenkarte ergab gute Übereinstimmung mit den gemessenen PSM-Konzentrationen am Auslass des Einzugsgebiets (Reichenberger et al., 2011).

Die Anwendbarkeit des FST-Systems ist nicht auf Pflanzenschutzmittel beschränkt, sondern ist z.B. auch für die Modellierung von Nitratausträgen geeignet und ist auch nicht an ein be-

stimmtes Modell gebunden. Die FOOTPRINT Soil Types sind jedoch bisher nur für MACRO und PRZM parametrisiert worden.

Methodik zur Klassifizierung der Bodeneinheiten der BUEK 1000 im System der FOOTPRINT Soil Types

Die Vorgehensweise zur Klassifizierung der Bodeneinheiten der BUEK1000 im System der FOOTPRINT Soil Types ist ausführlich im Anhang A2 beschrieben. Als Inputdaten werden verwendet:

- BUEK 1:1.000.000 (BGR, 2007) flächendeckend für Deutschland
 - Geometrie (Polygon-Layer)
 - Relation Karteneinheit (soil mapping unit, SMU) / bodentypologische Einheiten (soil typological unit, STU) mit Flächenanteil jeder STU an der SMU, in der sie sich befindet.
 - Bodenprofile (mit Horizonteigenschaften) für alle landwirtschaftlich relevanten bodentypologischen Einheiten (STU)

Das System der FOOTPRINT Soil Types hat folgenden Umfang:

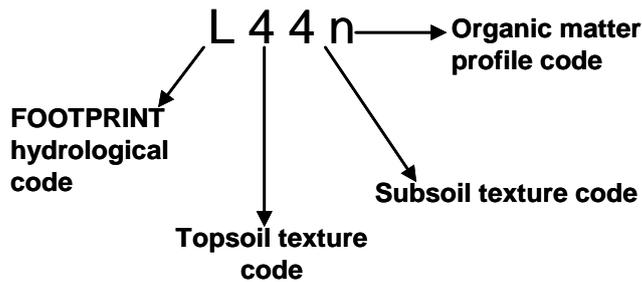
- Das System enthält ca. 985 in Europa potenziell auftretende FSTs (als Ergebnis des Klassifikations-Flowcharts)
- 367 davon kommen in der Soil Geographical Database of Europe (SGDBE) für die EU (bezogen auf die EU-24)
- 264 aus diesen 367 wurden als landwirtschaftlich relevant identifiziert und für MACRO and PRZM parametrisiert.

Die Tatsache, dass von 985 unter den klimatischen, geologischen und geomorphologischen Bedingungen Europas potenziell auftretenden Böden tatsächlich nur 367 in der Soil Geographical Database of Europe vorkommen, kann z.T. durch den groben Maßstab der SGDBE (1:1.000.000; für Deutschland tatsächlich nur 1:2.000.000) erklärt werden: Seltene Bodentypen mit kleinem Flächenanteil fallen im Zuge der Generalisierung der Karte heraus.

Es gibt eine im FOOTPRINT-Projekt erarbeitete Korrespondenztabelle (Tabelle „FST-map_FSTmm_translation_upd20130619“ in der GERDA input database im GERDA-Installationspaket) zwischen den 986 potenziellen FSTs und dem nächst-ähnlichen der 269 parametrisierten FST. Falls der bei der Klassifikation erhaltene FST nicht zu den 269 parametrisierten gehört, wird stattdessen der ähnlichste parametrisierte FST für die Modellierung verwendet.

Der Name des FST ist ein Code bestehend aus

- Großbuchstabe (L-Z): bezeichnet die FOOTPRINT Hydrologic Group (FHG)
- erste Zahl (1-6): Texturklasse des Oberbodens
- zweite Zahl (0-6): Texturklasse des Unterbodens
- einer oder mehrere Kleinbuchstaben: Code des Tiefenprofils der organischen Bodensubstanz.



Die Bedeutung der vier Eigenschaften, die einen FST charakterisieren, wird in den folgenden vier Abschnitten erläutert.

Die FOOTPRINT Hydrologic Group (FHG)

Die FOOTPRINT Hydrologic Groups (FHG) beschreiben die Standorthydrologie (site hydrology) des Bodens (Tab. II.1-1). Die FOOTPRINT Hydrologic Group bestimmt in MACRO die untere Randbedingung (bottom boundary condition) und in PRZM die soil hydrologic group (und damit die Parametrisierung des SCS-Curve Number-Ansatzes, der in PRZM zur Berechnung des Oberflächenabflussvolumens verwendet wird).

Es gibt 15 FHG, die sich in 5 grundlegende Typen der Standorthydrologie gliedern:

- FHG L, M, N: “frei dränend” (präziser: freie Sickerung)
- FHG O, P, Q: Grundwasser im Profil (Gley-Dynamik) → keine Sickerung, da kein hydraulischer Gradient
- FHG R, S, T, U, V: undurchlässiges Substrat (= Untergrund; nicht notwendigerweise das Ausgangsmaterial)
 - R: tiefgründiger Boden über hartem Substrat
 - S, T: flachgründiger Boden über hartem Substrat
 - U, V: tiefgründiger Boden über weichem Substrat
- FHG W, X, Y: langsam durchlässiges Substrat (Pseudogley-Dynamik)
- FHG Z: ungedrönter Torf: → wird nicht modelliert

Tab. II.1-1: Beschreibung der FOOTPRINT Hydrologic Groups (FHG) und deren Bedeutung für die Parametrisierung des Bodens in den Modellen MACRO und PRZM (n. Dubus et al., 2009).

FHG	Description	MACRO bottom boundary condition	PRZM Soil Hydrologic Group
L	Permeable, free draining soils on permeable sandy, gravelly, chalk or limestone substrates with deep groundwater (below 2 m depth).	Unit hydraulic gradient	A
M	Permeable, free draining soils on hard but fissured substrates (including karst) with deep groundwater (below 2 m depth).	Unit hydraulic gradient	B
N	Permeable, free draining soils on permeable soft loamy or clayey substrates with deep groundwater (below 2m depth).	Unit hydraulic gradient	B-C
O	Permeable soils on sandy or gravelly substrates with intermediate groundwater (at 1 - 2 m depth)	Zero flow	A
P	Permeable soils on soft loamy or clayey substrates with intermediate groundwater (at 1 - 2 m depth)	Zero flow	B-C
Q	All soils with shallow groundwater (within 1 m depth) and artificial drainage	Zero flow	A
R	Permeable, free draining soils with large storage, over hard impermeable substrates below 1 m depth	Zero flow	B
S	Permeable, free draining soils with moderate storage, over hard impermeable substrates at 0.5 - 1 m depth	Zero flow	B-C
T	Shallow, permeable, free draining soils with small storage, over hard impermeable substrates within 0.5 m depth	Zero flow	C
U	Soils with slight seasonal waterlogging ('perched' water) over soft impermeable clay substrates	Zero flow	B-C
V	Soils with prolonged seasonal waterlogging ('perched' water) over soft impermeable clay substrates	Zero flow	C
W	Free draining soils over slowly permeable substrates	Percolation rate regulated by water table height	B
X	Slowly permeable soils with slight seasonal waterlogging ('perched' water) over slowly permeable substrates	Percolation rate regulated by water table height	B or B-C
Y	Slowly permeable soil with prolonged seasonal waterlogging ('perched' water) over slowly permeable substrates	Percolation rate regulated by water table height	B-C
Z	All undrained peat or soils with peaty tops	Not modelled	D

Implikationen der FHG für die MACRO-Modellierung

- Leaching:
 - Für Böden der FHG L, M, N, W, X, Y werden Leaching-Flux-Konzentrationen berechnet (kumulativer PSM-Austrag / kumulative Perkolation).
 - Für Böden der FHG O, P, Q werden Resident-Konzentrationen berechnet (PSM-Vorrat in unterster numerischer Lage / Wasservolumen in unterster numerischer Lage), da keine Sickerung auftritt.
 - Für Böden der FHG R, S, T, U, V gibt es keinen Leaching-Output, da undurchlässig.
- Laterale Wasserbewegung

- Böden der FHG Q, U, V, Y-Böden haben künstliche Drainagen
- In Böden der FHG O, P, R, S, T, W, X tritt Zwischenabfluss (= lateral subsurface flow, interflow) auf.
- In Böden der FHG L, M, N tritt ausschließlich vertikale Wasserbewegung im Boden auf).

Wasserflüsse über künstliche Drainagen und Zwischenabfluss werden in MACRO technisch auf die gleiche Weise modelliert (allerdings mit anderer Parametrisierung). Die Interpretation der erhaltenen Wasserflüsse bzw. der PSM-Austräge kann jedoch unterschiedlich sein.

Die Implikation der FHG für die PRZM-Modellierung besteht in der Zuordnung einer soil hydrologic group und damit eines Satzes von Curve Numbers für die Modellierung. Die Curve Numbers bestimmen die Häufigkeit und Größe von Oberflächenabflussereignissen.

Texturklasse des Oberbodens

- Operationelle Definition: Textur der obersten 40 cm (Mineralboden; ohne etwaige organische Auflagen)
- In geschichteten Böden gewichtetes Mittel über 0 - 40 cm Tiefe
- Texturdreieck nach World Reference Base for Soil Resources (WRB) (Abb. II.1-1; FAO, 1998)
- Schluff (silt): 2 - 50 µm Partikeldurchmesser
- Klassen
 - 1 = grob (Sand oder sandiger Lehm): Texturen mit Sand > 65 % UND Ton < 18 %
 - 2 = mittel (lehmig): Texturen mit Ton < 35 % UND [(Ton >= 18 % UND Sand >= 15 %) ODER 15 % <= Sand <=65 %] .
 - 3 = mittelfein (schluffig): Texturen mit Ton < 35 % UND Sand < 15 %.
 - 4 = fein (tonig): Texturen mit 35 % <= Ton <= 60 %
 - 5 = sehr fein (sehr tonig): Texturen mit Ton > 60 %
 - 6 = Torf (peat)



GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

Abb. II.1-1: Texturdreieck nach World Reference Base for Soil Resources (FAO, 1998)(aus Dubus et al.,2009).

Texturklasse des Unterbodens

- Operationelle Definition: Textur in 40-80 cm Tiefe
- In geschichteten Böden gewichtetes Mittel über 40-80 cm Tiefe
- Begriff „Unterboden“ (subsoil) ist nicht zu verwechseln mit dem „Untergrund“ (Substrat; im Englischen „substrate“)
- Klassen: s. vorstehender Abschnitt „Textur des Oberbodens“.

Code des Tiefenprofils der organischen Bodensubstanz (organic matter profile code)

Dieser Code (Tab. II.1-2) bezieht sich auf den Tiefenverlauf des Gehalts an organischer Bodensubstanz (Humus). Eine Ausnahme stellt Suffix i dar, da es sich nicht auf organische Substanz, sondern auf Toneinwaschung (clay illuviation) bezieht. Einige Beispiele von typischen Tiefenverläufen sind in Abb. II.1-2 dargestellt.

Tab. II.1-2: Organic matter profile codes (n. Dubus et al.,2009).

FOOTPRINT organic profile code	Description	SOIL (from SGDBE)
A	Alluvial soils with an uneven distribution of organic matter down the profile	Fluvisols, fluvic subgroups
G	With a thick (artificially deepened) topsoil relatively rich in organic matter	Plaggen soils
H	With an organic-rich topsoil	Chernozems, phänozems humic and mollic subgroups
I	With a clay increase in the subsoil	Planosols, luvisols, podzoluvisols, luvic and planic subgroups
N	With a 'normal' organic profile	
F	Permafrost soils (non-agricultural) with an uneven distribution of organic matter down the profile	Gelic subgroups
O	Soils in volcanic material with organic-rich upper layers	Andosols
P	Podzols' with a relatively organic rich topsoil and a relatively organic rich subsoil layer	Podzols
R	Soils where the organic profile is limited by rock within 1 m depth	Rendzinas rankers and lithosols
T	With a peaty topsoil	Histosols and histic subgroups
U	Undeveloped' soils with relatively small organic matter content.	Regosols

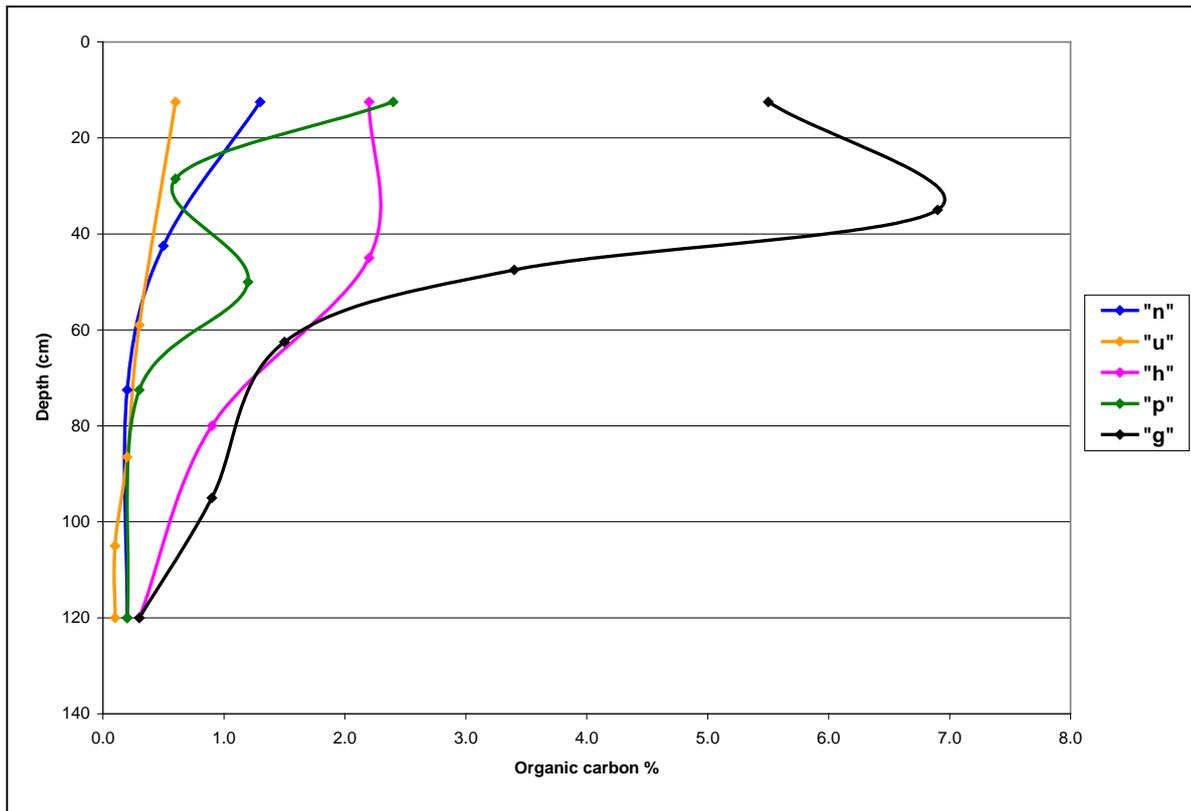


Abb. II.1-2: Typische Tiefenprofile der organischen Bodensubstanz für einige organic matter profile codes (am Beispiel der FHG/Texturklassenkombination L11) (Quelle: Dubus et al., 2009).

FST-Eigenschaften und -Parameter

Die FST-Profil- und -Horizonteigenschaften wurden im Rahmen des FOOTPRINT-Projekts (Dubus et al., 2009) folgendermaßen abgeleitet:

- Alle bodentypologischen Einheiten (Soil Typological Units, STU) in der Soil Geographical Database of Europe SGDBE (Le Bas et al., 1998) wurden in FSTs klassifiziert.
- Die Profil- und Horizontdaten in den Datenbanken SPADE-1 and SPADE-2 (Soil Profile Analytical Database for Europe; Hollis et al., 2006) wurden genutzt, um mittlere FST-Profil- und -Horizonte abzuleiten.

Das Resultat ist eine Tabelle mit Bodeneigenschaften für alle 264 landwirtschaftlich relevanten und für MACRO und PRZM parametrisierten FSTs („FOOTPRINTsoil properties database“).

Während des FOOTPRINT-Projekts wurde keine zentrale Datenbank mit Bodenparametern für MACRO und PRZM erstellt. Die Parametrisierungsmethodik ist jedoch voll dokumentiert und öffentlich zugänglich in den Publikationen FOOTPRINT DL21 (Jarvis et al., 2007), FOOTPRINT DL20 (Reichenberger et al., 2008) und FOOTPRINT Final Report (Dubus et al., 2009).

Es ist anzumerken, dass das System der FOOTPRINT Soil Types nicht an die aus SPADE-1 und SPADE-2 abgeleiteten Profil- und Horizonteigenschaften gebunden ist. Beispielsweise haben Tranter et al. (pers. Mitteilung Julien Moeys, 2012) vor kurzem eine neue Bodenkarte für Schweden und im Zuge dessen nationale FST-Referenzprofile erstellt. Analog bietet es sich ggf. an, für das im hier vorliegenden Projekt zu entwickelnde Tool GERDA Profile aus der BUEK1000 (BGR, 2007) zu verwenden, die repräsentativ für bestimmte FSTs sind.

II.1.2 Datenstruktur der BUEK1000

Eine Bodenkarte mit Bodendatenbank ist üblicherweise folgendermaßen aufgebaut:

- In der Bodenkarte werden **Karteneinheiten (Soil Mapping Units, SMU)** dargestellt. Eine SMU entspricht einem oder mehreren *Polygonen*.
- Eine SMU enthält eine oder mehrere **bodentypologische Einheiten (Soil Typological Units, STU)**. Die STUs sind innerhalb der SMU *nicht lokalisiert*; ihr Flächenanteil innerhalb der SMU ist jedoch bekannt.

In der dem Konsortium zur Verfügung gestellten Version der BUEK (BUEK1000 N2.3.mdb, Format personal geodatabase; BGR, 2007) ist die Entsprechung der SMU die sog. KG_BGL_BOD_NUTZ_ID, die identisch ist mit dem Feld KOMBI in der Polygonkarte, die in der Datenbank (layer bk1_clc_reg3_polygon) enthalten ist. Der Identifier KG_BGL_BOD_NUTZ_ID stellt eine eindeutige Kombination (unique combination) aus folgenden Faktoren dar:

- Klimagebiet (KG_NR; Anzahl: 4)
- Bodengroßlandschaft (BGL_NR; Anzahl: 37),
- Boden-Nummer (BOD_NR; die 72 Leitbodenassoziationen der BÜK)
- Nutzungsform (NUTZ_NR; Anzahl: 14)

Die Entsprechung der STU in der BUEK ist die **BOFORM_ID (Bodenform_ID)**, welche eine eindeutige Kombination aus folgenden Faktoren darstellt:

- Klimagebiet (KG_NR; Anzahl: 4)
- Boden-Nummer (BOD_NR; die 72 Leitbodenassoziationen der BÜK)
- Nutzungsform (NUTZ_NR; Anzahl: 14)
- Bodenform-Nummer (BOFORM_NR; Laufindex der Böden, die in einer Kombination aus KG_NR, BOD_NR und NUTZ_NR = KG_BOD_NUTZ_ID vorkommen)

Für jede STU (BOFORM_ID) ist der Flächenanteil an der SMU (KG_BOD_NUTZ_ID) in klassierter Form angegeben. Die STUs lassen sich mit den SMUs über einen gemeinsamen Schlüssel KG_BOD_NUTZ_ID verbinden. Da die Bodengroßlandschaft (BGL_NR) in der BOFORM_ID nicht enthalten ist, muss bei der Berechnung des Flächenanteils einer STU an einer SMU mangels anderer Information von der Annahme ausgegangen werden, dass dieser Flächenanteil unabhängig von der Bodengroßlandschaft ist.

II.1.3 Klassifizierung der BUEK1000

Für die Identifikation von Boden-Klima-Szenarien wurden alle relevanten bodensystematischen Einheiten, die in der BUEK1000 beschrieben werden, im System der FOOTPRINT Soil Types klassifiziert. Die Einzelheiten der Methodik und Zuordnung sind im Anhang A2 beschrieben.

Im ersten Schritt wurde analysiert, in wie weit die Flächen in der BUEK1000 für die verschiedenen Nutzungstypen in FSTs klassifiziert werden können. Dabei wurden drei Klassifizierbarkeitsstufen (Index "classif") unterschieden:

- -1: nicht klassifizierbar, da keine BOFORM_ID vorhanden (d.h. es ist keine Bodenform definiert);

- 0: nur unscharf klassifizierbar: BOFORM_ID ist vorhanden, aber es gibt kein Referenzprofil (zur Methodik der Klassifikation siehe A2.2 im Anhang);
- 1: exakt klassifizierbar (BOFORM_ID und Referenzprofil vorhanden) (zur Methodik der Klassifikation siehe A2.3).

Es zeigt sich, dass für eine Reihe von Landnutzungskategorien (u.a. für Dauerkulturen) die Flächen überhaupt nicht in FSTs klassifizierbar sind (Tab. II.1-3). Tatsächlich sind Bodenformen und auch Referenzprofile nur für die vier Nutzungskategorien der BUEK1000 21 (Ackerflächen), 23 (Grünland), 24 (landwirtschaftl. Flächen heterogener Struktur) und 31 (Wälder) exakt definiert.

Tab. II.1-3: Absolute Flächen und Flächenanteile der Klassifizierbarkeitsstufen für die verschiedenen Landnutzungskategorien der BUEK1000.

Landnutzungskategorie			classif 1)	Kombination classif / NUTZ_NR	
Code (NUTZ_ NR)	Bezeichnung (NUTZ_BEZ)	Fläche (n. BUEK 1000) Km ²		Fläche km ²	Anteil an der Landnut- zungs- kategorie (%)
11	Siedlungsflächen	11.860,0	-1	11.860,0	100 %
13	Deponien, Abbauflächen	771,0	-1	771,0	100 %
21	Ackerflächen	164.700,0	-1	511,5	0,31 %
			0	103.000,0	62,52 %
			1	61.210,0	37,17 %
22	Dauerkulturen	1.584,0	-1	1.584,0	100 %
23	Grünland	40.150,0	-1	9,2	0,023 %
			0	19.760,0	49,22 %
			1	20.380,0	50,76 %
24	Landwirtschaftl. Flächen heterogener Struktur	28.420,0	-1	43,0	0,15 %
			0	15.080,0	53,05 %
			1	13.300,0	46,80 %
31	Wälder	103.400,0	-1	358,7	0,35 %
			0	47.160,0	45,59 %
			1	55.920,0	54,06 %
32	Strauch- und Krautvegetation	2.219,0	-1	2.219,0	100 %
33	Offene Flächen, Strände, Dünen, Felsen	500,1	-1	500,1	100 %
41	Feuchtfächen im Landesinneren	782,4	-1	782,4	100 %
42	Salzwiesen	55,2	-1	55,2	100 %
43	Flächen in der Gezeitenzone	2.789,0	-1	2.789,0	100 %
51	Binnengewässer	2.867,0	-1	2.867,0	100 %
52	Meeresgewässer	21,2	-1	21,2	100 %

1) Klassifizierbarkeitsstufe: -1 : nicht in FST klassifizierbar; 0: nur unscharf in FST klassifizierbar; 1: exakt in FSTs klassifizierbar

Für die ackerbaulich relevante Fläche (Landnutzungskategorien 21 und 24) fällt der nicht klassifizierbare Anteil nicht ins Gewicht (Tab. II.1-4). Der Anteil der nur unscharf, d.h. ohne Referenzprofil klassifizierbaren Fläche, beträgt aber rd. 61 %, einen erheblichen Unsicherheitsfaktor für die Flächenverteilung der FSTs in der ackerbaulich relevanten Fläche Deutschlands darstellt.

Tab. II.1-4: Absolute Flächen und Flächenanteile der Klassifizierbarkeitsstufen für die ackerbaulich relevante Fläche Deutschlands nach BUEK 1000 (Kategorien 21 und 24).

Klassifizierbarkeitsstufe		Klassifizierbarkeitsstufen der Landnutzungskategorien 21 + 24 (zus. 193.114 km ²)	
		absolute Fläche km ²	Anteil %
-1	nicht in FST klassifizierbar	554,5	0,29 %
0	nur unscharf in FST klassifizierbar	118.000,0	61,13 %
1	exakt in FST klassifizierbar	74.510,0	38,59 %

II.1.4 Flächenanalyse der FSTs an der landwirtschaftlich relevanten Fläche in Deutschland

Den Flächenanteil einer Bodenform (BOFORM_ID) an einer KG_BOD_NUTZ-Kombination (siehe Kap. II.1.2 zur Datenstruktur der BUEK) erhält man, indem man zuerst den Klassenmittelwert der Flächenanteilstufe FLANT bildet und die Klassenmittelwerte so skaliert, dass ihre Summe für eine KG_BOD_NUTZ-Kombination 100 % ergibt.

- 1) Die Klassifikationsergebnisse für alle BOFORM_IDs stehen in der Tabelle Bodenform_final_all_BOFORMIDs_classified_final (Datei Flächenanalyse_FSTs_und_Einordnung_FOCUS_Scenarios_20120817.mdb):
 - Spalte FST_final_all enthält den FST code
 - FLANT_class_mean_scaled enthält den Flächenanteil der BOFORM_ID an der KG_BOD_NUTZ_ID = KG_LBA_NUTZ
 - classif besagt, wie die BOFORM_ID klassifiziert wurde: 1 ->exakt, 0 ->unscharf
- 2) Die Attributtabelle des BUEK-Polygonlayers wurde in Access importiert und die FSTs mit ihren Flächenanteilen mit den Polygonen mit einem Left join über das gemeinsame Feld KG_LBA_NUTZ aka KG_BOD_NUTZ_ID verbunden.
- 3) Schließlich wurden die prozentualen Flächenanteile und absoluten Flächen aller erhaltenen FSTs in verschiedenen Aggregierungsgraden berechnet.

Die Klassifizierung der 1936 Bodenformen ergab 126 verschiedene potenzielle FSTs, was 102 parametrisierten FSTs entspricht. Die geringere Anzahl parametrisierter FST ergibt sich daraus, dass für den Fall, dass ein potenzieller FST nicht zu den 269 parametrisierten FST gehört, statt dessen der ähnlichste parametrisierte FST genommen wird. Für die ackerbaulich relevante Fläche Deutschlands laut BUEK (Nutzungskategorien 21 und 24) wurden insgesamt 97 verschiedene FSTs ermittelt, von denen 32 als gedrängt definiert sind.

Die prozentualen Flächenanteile und absoluten Flächen aller erhaltenen FSTs in verschiedenen Aggregierungsgraden finden sich in der Datei `Flächenanalyse_FSTs_und_Einordnung_FOCUS_Scenarios_20120817.mdb` in den Tabellen

- `FST_area_percentage_per_NUTZ` (getrennt nach Nutzung)
- `FST_area_percentage_per_NUTZ_classif` (getrennt nach Nutzung und Klassifizierbarkeitstufe)
- `FST_area_percentage_per_21_24` (für die Nutzungen 21 (Ackerbau) und 24 (landwirtschaftliche Flächen heterogener Struktur) zusammen (siehe auch Tab. II.4-11))
- `FST_area_percentage_per_21_24_classif` (für die Nutzungen 21 (Ackerbau) und 24 (landwirtschaftliche Flächen heterogener Struktur) zusammen; getrennt nach Klassifizierbarkeitstufe (siehe auch Tab. II.4-2)).

Im Folgenden wird nur auf die beiden letzten Tabellen (s. Anhang A5) eingegangen. Der FST mit dem höchsten Flächenanteil an der ackerbaulich relevanten Fläche in Deutschland ist N22n (Tabelle `FST_area_percentage_per_21_24`; Anhang A5) mit 11,23 %. Dies ist jedoch vor allem dadurch bedingt, dass in der Klassifikation *ohne* Referenzprofil dem sehr häufigen Bodentyp "Norm-Braunerde" des FST N22n zugewiesen wurde (s. Anhang A5). Dieser FST ist somit überproportional repräsentiert. Ähnliches trifft in geringerem Maße zu für den zweithäufigsten FST N33i (8,76 % Flächenanteil), der in der Klassifikation ohne Referenzprofil der "Norm-Parabraunerde" zugewiesen wurde, und die nachfolgenden Böden Y22i (6,22 %; zugewiesen zu "Norm-Pseudogley" und "Parabraunerde-Pseudogley") und Q22n (4,50 %, zugewiesen zu "Norm-Gley").

Wenn man nur die exakt klassifizierte Fläche (*mit* Referenzprofil) betrachtet, sind die FSTs mit dem größten Flächenanteil an der ackerbaulich relevanten Fläche (Tab. `FST_area_percentage_per_21_24_classif`) L11n (11,07 %), W22i (7,01 %) und Q22a (5,02 %). Da die exakt klassifizierte ackerbaulich relevante Fläche jedoch deutlich kleiner ist als die unscharf klassifizierte Fläche (Tab. II.1-4), wird in den weiteren Auswertungen (insbesondere in der Flächenanalyse der Boden-Klima-Kombinationen) nicht mehr nach Klassifizierbarkeitstufe differenziert werden.

Auf der Basis der Flächenanteile der FST in der BUEK 1000 können die Böden im Hinblick auf den Transportwege Surface Runoff (Oberflächenabfluss) wie folgt charakterisiert werden. Je höher die PRZM hydrologic soil group (Methode nach FOOTPRINT; Dubus et al., 2009) des Bodens und damit die Runoff Curve Numbers, desto höher sind die Häufigkeit und die Größe von Oberflächenabflussereignissen. Da jeder FST einer PRZM soil hydrologic group (PRZMSHG) zugehört, lassen sich die Flächenanteile der PRZMSHGs an der Ackerland- und Sonderkulturfläche Deutschlands unmittelbar berechnen (Tab. II.1-5).

- PRZM Hydrologic Soil Group C nimmt nur einen sehr kleinen Teil der Fläche ein (0,13 %) und kann somit als *extreme worst case* interpretiert werden.
- Gruppe B-C kann hingegen als *realistic worst case* betrachtet werden.
- Gruppe D tritt in der Parametrisierungsmethodik von FOOTPRINT, die nur den Oberflächenabfluss und nicht den Direktabfluss widerspiegelt, nur für ungedrängte Torfböden (s. Tab. II.1-5) auf und spielt somit für die Landwirtschaft keine Rolle.

Die FSTs mit PRZM Soil Hydrologic Group B-C entsprechend den FOOTPRINT Hydrologic Groups N, P, S, U, X (wenn Textur schwerer als Lehm) und Y (s. Tab. II.1-1).

Tab. II.1-5: Absolute Flächen und Flächenanteile der PRZM Soil Hydrologic Groups (SHG) für die ackerbaulich relevante Fläche Deutschlands nach BUEK 1000 (Kategorien 21 und 24, zus. 193144 km²).

PRZM_SHG ¹⁾	Anzahl FSTs	absolute Fläche der PRZM_HSG (km ²)	Flächenanteil der PRZM_HSG (%)
A	38	67.090,0	34,74
B	22	32.110,0	16,63
B-C	35	93.090,0	48,21
C	2	256,9	0,13

¹⁾ PRZM Soil Hydrologic Group, Methode nach FOOTPRINT (Dubus et al., 2009)

Unsicherheitsbetrachtung

Der größte Unsicherheitsfaktor in der Klassifikation der Bodenformen der BUEK1000 in FOOTPRINT Soil Types und der daraus resultierenden räumlichen Verteilung der FSTs für Deutschland ist zweifellos, dass nur für knapp ein Viertel der 1936 Bodenformen Referenzprofile vorliegen und damit nur knapp 40 % der ackerbaulich relevanten Fläche zuverlässig klassifizierbar sind (s. Tab. II.1-4).

Der Fehler bzw. die Verzerrung zugunsten bestimmter FSTs, die durch die Klassifizierung der 1504 Bodenformen *ohne* Referenzprofil entsteht, ist möglicherweise nicht unerheblich. Andererseits würde es jedoch vermutlich noch größere Unsicherheit verursachen, wenn die Verteilung der FST von der Flächen der 432 Bodenformen *mit* Referenzprofil als repräsentativ für Deutschland betrachtet und dann auf die gesamte Acker- und Sonderkulturfläche extrapoliert würde.

Für die Ermittlung von CDFs der Boden-Klima-Szenarien für Deutschland (sei es für Drainage bzw. Runoff & Erosion oder, was nicht Gegenstand dieses Projekts ist, für Leaching) ist die ermittelte FST-Verteilung für die ackerbaulich relevante Fläche in Deutschland nach Meinung der Autoren jedoch völlig ausreichend.

Um eine echte *räumlich probabilistische* Risikoabschätzung für PSM-Anwendungen auf allen Acker- und Sonderkulturflächen in Deutschland zu ermöglichen, wäre folgendes Vorgehen zu wählen: die FST-Klassifizierung der BUEK ist anhand von Referenzprofilen zu wiederholen, sobald eine größere Anzahl von Referenzprofilen zur Verfügung steht (insbesondere für Sonderkulturen, wo bisher überhaupt keine Referenzprofile vorliegen). Nach Auskunft von Andreas Richter (BGR, schriftl. Mittlg. 19.04.2012) „wird gegenwärtig eine umfangreiche Datengrundlage im Rahmen der BUEK200 in Zusammenarbeit mit den Staatlichen Geologischen Diensten der Bundesländer erarbeitet, liegt aber noch nicht vor.“

II.1.5 Repräsentativität der Böden der FOCUSsw-Szenarien für Deutschland

Die 10 Böden der FOCUS surface water Szenarien (D1 bis D6, R1 bis R4; FOCUS, 2001) wurden anhand der im FOCUSsw Report vorhandenen Informationen (Appendix C, Appendix D, Zusatzinformationen im Hauptteil des FOCUSsw Reports) in FOOTPRINT Soil Types klassifiziert. Ergänzende Hinweise kamen von John Hollis (mündl. Mitteilung); beispielsweise geht aus dem FOCUSsw Report (FOCUS, 2001) nicht eindeutig hervor, dass der Boden des Szenarios D6 ein grundwasserbeeinflusster Auenboden ist.

Die Ergebnisse der Klassifikation der 10 Böden der FOCUSsw-Szenarien in FSTs sind in Tab. II.1-6 dargestellt. Es ist anzumerken, dass die Textur der Böden mehrerer Szenarien (D4, R3, R4) sehr nahe an der Grenze der FAO-Texturklassen liegt und diese Böden daher an der Grenze zwischen zwei FSTs liegen.

Tab. II.1-6: Klassifikation der 10 FOCUSsw-Böden in FOOTPRINT Soil Types (FSTs) und Repräsentativität dieser Böden für Deutschland.

FOCUSsw Szenario	Substrattyp nach FOOTPRINT	FST	PRZM Soil Hydrologic Group ¹⁾		ackerbaulich relevante Fläche ²⁾ , die vom FST bedeckt wird	
			nach FOCUS ³⁾	nach FOOTPRINT ⁴⁾	km ²	%
D1	B	Y45i		B-C	0	0 %
D2	A	V45i		C	0	0 %
D3	C	Q11h		A	0	0 %
D4	B	Y22i		B-C	12.025,3	6,23 %
D5	A	V22n		C	0	0 %
D6	G	Q24a		A	149,0	0,08 %
R1	D	N33n	C	B-C	2.462,2	1,28 %
R2	D	L11h	B-C	A	2.282,6	1,18 %
R3	D	N22n	C	B-C	21.695,9	11,23 %
R4	D	N22u	C	B-C	0	0 %

1) Die Soil Hydrologic Group bestimmt den zu verwendenden Satz von Curve Numbers für die Parametrisierung des SCS Curve Number Ansatzes

2) Bezug: Gesamtfläche der Landnutzungskategorien 21 und 24 (n. BUEK 1000): 193.114 km²

3) Der gesamte Direktabfluss wird als Oberflächenabfluss behandelt (Erläuterung s. Text)

4) Spiegelt nur tatsächlichen Oberflächenabfluss wider (Erläuterung s. Text)

Wenn man die FOCUSsw-Bodenszenarien über die FSTs mit der BUEK1000 verknüpft ist festzustellen, dass von den 10 FOCUSsw-Bodenszenarien nur 6 in Deutschland vorkommen, nämlich R1, R2, R3, D4, D5 und D6; in den Nutzungsarten Ackerbau und Sonderkulturen sind es nur 5 (D5 fällt heraus).

Die Flächenrepräsentanz von R3 ist relativ hoch (11 %, wenn man exakte und unscharfe Klassifikation zusammenfasst). Das kommt aber wiederum daher, dass in der unscharfen Klassifikation der "Norm-Braunerde" der gleiche FST (N22n) zugewiesen wurde. An der exakt klassifizierbaren Fläche hat R3 bzw. N22n nur 2,7 % Anteil. Die Flächenrepräsentanz von D4 ist aus dem gleichen Grund relativ hoch. Die Flächenrepräsentanz von R1 (N33n) ist gering, aber es gibt mehrere relativ ähnliche FSTs mit höherem Flächenanteil (z.B. N33i).

„Worst case-ness“ der Böden der FOCUSsw-Szenarien für Deutschland

Für die Bewertung des Modellierungskonzeptes FOCUSsw ist nicht eine hohe Flächenrepräsentanz der Szenarien maßgebend, sondern deren Protektivität oder „worst case-ness“; im Zusammenhang dieses Kapitels im Hinblick auf den Faktor Bodeneigenschaften.

Die in Deutschland vorkommenden Drainage-Szenarien D4 und D6 sind hinsichtlich ihrer Bodeneigenschaften (Textur, OC-Gehalt, Lagerungsdichte, Struktur; vgl. Appendix C in FOCUS, 2001) als intermediate case bis worst case anzusehen, aber keinesfalls als best case. Die worst case-ness der Parametrisierung ist schwierig zu beurteilen, zumal es sich um vertikal heterogene Böden handelt.

Die den in Deutschland vorkommenden FOCUS-Runoff-Szenarien R1 und R3 zugeordneten FSTs sind hinsichtlich ihrer Bodeneigenschaften (Appendix D in FOCUS, 2001) nicht worst case für Oberflächenabfluss, sondern oberes Mittelfeld (also eher "realistic" worst case). Allerdings

unterscheiden sich die Parametrisierungen des Curve Number-Ansatzes in FOCUS und FOOTPRINT voneinander.

- In FOCUS wird der Direktabfluss, berechnet mit der üblichen Parametrisierung des Curve-Number-Ansatzes, aufgrund der Fehlinterpretation des Curve-Number-Ansatzes in PRZM (vgl. Diskussion in Kap. II.4.2.1.4) als Hortonian runoff simuliert.
- In FOOTPRINT wird dagegen versucht, mit Hilfe von - je nach Standorthydrologie modifizierten - Curve Numbers mit PRZM nur den tatsächlichen Oberflächenabfluss zu simulieren. Die in Deutschland vorkommenden FOCUS-Runoff-Szenarien R1 und R3 stellen also zwar nicht in Bezug auf den Bodentyp, aber in Bezug auf die Parametrisierung des Curve Number-Ansatzes einen worst case für Deutschland dar.

In Bezug auf den Austragspfad Erosion stellt das Szenario R1 aufgrund des hohen Schluffgehaltes des Bodens und des niedrigen Humusgehaltes (sowohl des Originalprofils als auch des entsprechenden FSTs) mutmaßlich einen worst case dar.

II.1.6 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen zur Klassifikation und Häufigkeitsauswertung Böden

- Alle in der BUEK 1:1.000.000 vorkommenden 1936 Bodenformen wurden in FOOTPRINT Soil Types (FST) klassifiziert. Die Methodik ist im hier vorliegenden Bericht dokumentiert und kann gegebenenfalls später problemlos auf aktualisierte Versionen der BUEK1000 oder auf die BUEK2000 angewendet werden.
- Die Klassifizierung der 1936 Bodenformen ergab 126 verschiedene potenzielle STs (dies entspricht 102 modellierten FSTs). Für die PSM-anwendungsrelevante Fläche Deutschlands laut BUEK1000 (Ackerland und Sonderkulturen, Nutzungskategorien 21 und 24 der BUEK1000) wurden 97 verschiedene FSTs ermittelt, von denen 32 als gedrängt definiert sind.
- Die Böden der 10 FOCUSsw Szenarios wurden in FSTs klassifiziert.
- Einordnung der FSTs der FOCUS Runoff-Szenarien bzgl. ihrer Flächenrepräsentanz und (anhand ihrer Suszeptibilität für Drainage, Oberflächenabfluss und Erosion) ihrer „worst case-ness“ für Deutschland ergibt:
 - Die Verknüpfung der FOCUSsw-Bodenszenarien über die FSTs mit der BUEK 1000 ergab, dass von den 10 FOCUSsw-Bodenszenarien nur 5 in der ackerbaulich relevanten Fläche Deutschlands auftreten (R1, R2, R3, D4, D6).
 - Davon erreichen nur D4 (6,23 %) und R3 (11,23 %) eine nennenswerte Flächenrepräsentanz, die jedoch z.T. auf der Verzerrung zugunsten bestimmter FSTs in der Klassifikationsprozedur für die Bodenformen ohne Referenzprofil beruht.
 - Die Böden von D4 und D6 sind als intermediate case für Drainage zu betrachten, was aber durch Testsimulationen zu bestätigen wäre.
 - Die Böden von R1 und R3 sind eher im oberen Mittelfeld einzuordnen in Bezug auf die Suszeptibilität für Oberflächenabfluss. Die in FOCUS verwendete Parametrisierung mit Soil Hydrologic Group C macht aus ihnen jedoch einen worst case für Runoff.
 - Der Boden des Szenarios R1 ist als sicherer worst case für Erosion zu sehen.

II.2 Ableitung Boden-Klima-Szenarien - Faktor Klima

Für die Entwicklung von Boden-Klima-Szenarien für Deutschland in Bezug auf den Faktor Klima wurden zunächst diejenigen Klimaelemente identifiziert, die für die Verlagerung von Pflanzenschutzmitteln in Oberflächengewässer über die Eintragspfade Drainage, Runoff und Erosion besonders sensitiv sind. Anschließend wurden die räumlichen Verteilungen der Werte dieser Klimavariablen in Deutschland aus 30-jährigen Wetterzeitreihen ermittelt. Diese rasterbasierten Auswertungen ermöglichen es, flächennutzungsbezogene kumulative Verteilungsfunktionen der Klimavariablen für die Flächen mit Ackerbau und Sonderkulturen in Deutschland zu erstellen.

Weiterhin wurden auch für die Wetterzeitreihen, die in den FOCUSs Drainage- und Runoff-Szenarien verwendet werden, dieselben austragsrelevanten Klimavariablen ausgewertet. Dadurch können die FOCUS-Szenarien direkt in der flächenbezogenen Verteilungsfunktion eingeordnet werden und somit hinsichtlich ihrer Flächenrepräsentanz und ihrer „worst case-ness“ für Deutschland charakterisiert werden.

Im Anschluss an die Auswertung der klimarelevanten Einzelparameter wurde eine Hauptkomponentenanalyse durchgeführt, um die wichtigsten Einflussfaktoren zu gruppieren und damit die Anzahl der Variablen ohne (größeren) Informationsverlust zu reduzieren. Auf Basis der Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse wurde schließlich eine Clusteranalyse durchgeführt, um eine überschaubare Anzahl an Klimazonen für die Regionen mit Ackerbau und Sonderkulturen in Deutschland auszuweisen. Die FOCUS-Wetterzeitreihen konnten dann jeweils einer dieser Klimazonen zugeordnet werden.

II.2.1 Inputdaten

Für die Ableitung der Boden-Klima-Szenarien – Faktor Klima – wurden die folgenden Inputdaten ausgewertet:

- Langjährige Rasterdatensätze (1980 – 2009) mit bundesweit täglichen Niederschlagswerten (Auflösung $1/60^\circ \times 1/120^\circ$; DWD, 2011)
- Langjährige Rasterdatensätze (1980 – 2009) mit bundesweit monatlichen Niederschlagswerten (Auflösung 1 km x 1 km; DWD 2012)
- Langjährige Rasterdatensätze (1980 – 2009) mit bundesweit monatlichen Temperaturwerten (Auflösung 1 km x 1 km; DWD 2012)
- ALKIS/ATKIS-Vektordatensatz mit den Landnutzungstypen „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“ (BKG, 2012)
- Langjährige Monatsmittelwerte (soweit möglich 1971-2000) der Potentiellen Evapotranspiration für etwa 70 Klimastationen in Deutschland aus dem Tool CLIMWAT 2.0 (FAO, 2006).

II.2.2 Identifikation sensibler Klimavariablen

II.2.2.1 Sensitive Klimavariablen für Eintragspfad Drainage

In der Sensitivitätsanalyse von Nolan et al. (2008) wurden die für den (mit MACRO modellierten) Drainageaustrag von PSM wichtigsten Klima-/Wettervariablen identifiziert. Die dort aufgeführten acht Variablen wurden auch von Blenkinsop et al. (2008) zur Ableitung der FOOT-PRINT Climate Zones verwendet und werden hier für die Flächenanalyse des Faktors Klima - Eintragspfad Drainage – herangezogen.

Für die verfügbaren rasterbasierten Wetterzeitreihen für Deutschland (s.o.) wurden die folgenden acht Variablen für die Periode von 1980 – 2009 berechnet bzw. ausgewertet. Dieser Zeitraum wurde gewählt, da in der Klimaforschung 30 Jahre der Zeitspanne entsprechen, die als Minimum für statistische Auswertungen (Mittelwerte, Häufigkeiten, Extrema usw.) gilt. Die REGNIE-Daten liegen qualitätsgeprüft bis 2009 vor, so dass sehr aktuelle Zeitreihen zur Verfügung standen.

- T_SPR: Mitteltemperatur von April bis Juni
- T_AUT: Mitteltemperatur von September bis November
- R_WIN: mittlerer kumulativer Niederschlag von Oktober bis März
- R_ANN: mittlerer Jahresniederschlag
- R2_SPR: Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 2 mm Niederschlag
- R20_SPR: Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 20 mm Niederschlag
- R50_SPR: Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 50 mm Niederschlag
- R20_AUT: Anzahl der Tage von September bis November > 20 mm Niederschlag.

Die temperaturbezogenen Variablen T_SPR und T_AUT wurden auf Basis der Raster der Monatsmittelwerte (1 km x 1 km, Koordinatenreferenzsystem ETRS 89, UTM Zone 32N) direkt in ArcGIS berechnet. Auch die Variablen R_WIN und R_ANN werden mittels monatlich aufgelöster Rasterdaten ermittelt.

Die restlichen vier Variablen (R2_SPR, R20_SPR, R50_SPR und R20_AUT) wurden mit täglich aufgelösten Niederschlagswerten aus dem REGNIE Datensatz (Regionalisierte Niederschlagshöhen; DWD, 2011) berechnet. Die Methodik zur Auswertung der REGNIE-Datensätze wird im Anhang A6 erläutert.

II.2.2.2 Sensitive Klimavariablen für Eintragspfad Oberflächenabfluss/Erosion

Zur Charakterisierung der deutschlandweiten Niederschlagsdaten und der FOCUSsw R-Szenarien hinsichtlich der Eintragspfade Oberflächenabfluss und Erosion mussten zunächst besonders relevante Klimavariablen abgeleitet werden. Die vorhandenen Niederschlagszeitreihen (sowohl die flächendeckenden Raster als auch die FOCUS-SW-Wetterdaten) wurden anschließend mit Hilfe von Zeitreihenanalysen hinsichtlich des Auftretens dieser Variablen untersucht. Dabei sind zum einen die Häufigkeiten von Starkniederschlägen zu berücksichtigen, die relevant für Hortonian runoff (infiltration excess runoff) sind. Hierzu wurden verschiedene, nach dem in PRZM verwendeten Curve Number-Ansatz Runoff-auslösende, Schwellenwerte herangezogen, die sich aus unterschiedlichen PRZM Soil Hydrologic Groups und unterschiedlichen Bodenbedeckungen ergeben. Zum anderen wurde der saisonale Niederschlagsüberschuss betrachtet,

der relevant für Saturation excess runoff ist. Dabei wurden kumulative Niederschläge für verschiedene Perioden (z.B. 1 Monat, 10 Tage, 5 Tage), Kalendermonate und Jahreszeiten (z.B. die Hauptapplikationszeiten im Frühjahr und Herbst) herangezogen.

Schließlich sollten die für die unterschiedlichen Eintragspfade relevanten Variablen aufgrund bestimmter Annahmen eingegrenzt werden, so dass am Ende etwa 8 bis 10 Variable verbleiben. Für diese wurde dann jeweils eine räumliche kumulative Verteilungskurve ermittelt, die sich aus den flächendeckenden Rastern (bzw. Ackerbau und Sonderkultur nach ATKIS) ergeben. Im Anschluss konnten dann die FOCUSsw-Runoff Zeitreihen hinsichtlich ihrer Flächenrepräsentanz eingeordnet werden.

Für die Herleitung der für Runoff und Erosion relevanten Klimavariablen muss grundsätzlich zwischen realen Prozessen und deren mathematischer Umsetzung in PRZM unterschieden werden. Die hydrologischen Prozessbeschreibungen in PRZM (insbesondere die vertikale Wasserbewegung im Profil) sind stark vereinfacht und wenig realistisch. Da die abzuleitenden Klimaszenarien jedoch für Modellierungen mit dem Modell PRZM verwendet werden sollen, war es sinnvoll, nur Variablen zu verwenden, die sowohl eine reale Bedeutung als auch einen Effekt auf die Entstehung von Oberflächenabfluss im Modell PRZM haben.

PRZM simuliert Oberflächenabfluss immer als Hortonian runoff (nähere Erläuterungen im folgenden Kapitel), der mathematisch durch Modifikation des empirischen USDA Soil Conservation Service (SCS) Curve Number Ansatzes beschrieben wird (siehe Kap. II.4.2.3) Der SCS Curve Number-Ansatz ist allerdings ursprünglich ein Ansatz zur Berechnung des Direktabflusses in Kleineinzugsgebieten und wird in Modellen wie PRZM oder SWAT falsch interpretiert (siehe Kap. II.4.2.4). Die Aufgabe war daher, Wettervariablen zu identifizieren, die

- a) für die Auslösung von Oberflächenabfluss in PRZM maßgeblich sind, und
- b) den real auftretenden Phänomenen Hortonian runoff und saturation excess runoff zugeordnet werden können.

II.2.2.2.1 Hortonian runoff (Infiltration excess runoff)

Oberflächenabfluss durch Infiltrationsüberschuss (Infiltration excess runoff oder Hortonian runoff) entsteht, wenn der einfallende Niederschlag die maximale Infiltrationsrate und die Oberflächenspeicherkapazität des Bodens übersteigt (ausführliche Beschreibung der Prozesse s. II.4.2.3). Die maximale Infiltrationsrate (auch Infiltrationskapazität genannt) nimmt mit zunehmenden Schluff- und Tongehalten ab (geringere gesättigte Leitfähigkeit der Bodenmatrix), aber mit zunehmender Bodenstruktur und zunehmendem Vorhandensein von Makroporen an der Oberfläche zu.

Da PRZM nur tägliche Niederschläge als Modellinput verwendet, wurde hier nicht auf stündliche Niederschlagsintensitäten zurückgegriffen, sondern auf Tagesniederschläge.

PRZM passt die Curve Number auf Tagesbasis aufgrund des Bodenfeuchtestatus der obersten 10 cm an. Um in PRZM die Schwelle für die Auslösung von infiltration excess runoff im Spätfrühling oder im Sommer widerzuspiegeln, wenn i.d.R. ein mittlerer oder sogar ein niedriger Feuchtestatus vorliegt, sollte man daher die Curve Number für antecedent moisture condition II (CNII) heranziehen. Diese entspricht einem mittleren Bodenfeuchtestatus (Mittelwert aus Feldkapazität und Welkepunkt). Wenn die Curve Number bekannt ist, lässt sich über die Curve-Number-Formel sofort die runoffauslösende Schwelle berechnen:

$$P_{crit} = 0.2 * 25.4 [(1000/CN) - 10]$$

Pcrit ist dann der Niederschlag in mm, bei dem gerade noch kein Runoff auftritt. Jede Überschreitung führt zu Runoff.

Die Auswahl der Schwellenwerte wurde mit folgenden Überlegungen eingegrenzt:

- PRZM Soil Hydrologic Group (SHG) nach FOOTPRINT: Die in den 264 parametrisierten FSTs auftretende PRZM SHG mit den höchsten Curve Numbers ist group C. PRZM SHG group D kommt nicht vor. (Man beachte, dass sich die in FOOTPRINT zugewiesene PRZM SHG nur auf den Oberflächenabfluss bezieht, und nicht wie die ursprüngliche USDA SHG auf den gesamten Direktabfluss, der auch Zwischenabfluss und Drainage beinhaltet). PRZM SHG group D gäbe es in Europa nur bei landwirtschaftlich nicht relevanten Böden: ungedrünter Torf (saturation excess runoff) und teil- oder vollversiegelter Boden (Hortonian runoff). Im Folgenden wird somit nur PRZM SHG group C als worst case für Hortonian runoff betrachtet.
- Saison: Da der größte PSM-Austrag über Oberflächenabfluss meist in den ersten Tagen oder Wochen nach Applikation auftritt, reicht es aus, die Hauptapplikationsperioden und die Zeit kurz danach zu betrachten. Vorschlag:
 - 01.03. - 30.06. (März bis Juni)
 - 01.09. - 31.12. (September bis Dezember).
- Bodenbedeckung: Es sollten der best case und der worst case der Bodenbedeckung (für Ackerkulturen und konventionelle Bodenbearbeitung) berücksichtigt werden, die in obigen Zeiträumen zumindest zeitweise auftreten können.
 - Worst case: unbedeckter Boden vor dem Auflaufen oder nach Ernte und Umpflügen (entspricht dem Wert von CN6 für die annualen Kulturen, also z.B. row crops CN6) → kann in beiden Perioden auftreten
 - Best case: row crops, good condition CN4 (CN4 entspricht der Periode zwischen maximalen Entwicklung der grünen Pflanze und der Ernte) → da Hackfrüchte üblicherweise nicht über den Winter angebaut werden, in der Frühjahrsperiode ist dieser Wert nicht zu erwarten
 - Best case: small grain, good condition CN4 (CN4 entspricht der Periode zwischen maximalen Entwicklung der grünen Pflanze und der Ernte) → nur in der Frühjahrsperiode zu erwarten, da Getreide und Raps im September schon abgeerntet sind.

Die dazugehörigen Niederschlagsschwellenwerte sind in Tab. II.2-1 dargestellt.

Tab. II.2-1: Curve Numbers bei mittleren Feuchtebedingungen und dazugehörige Niederschlagsschwellenwerte.

PRZM Soil hydrologicgroup (SHG)	Bodenbedeckung	Parametrisierung	CNII	Schwelle für runoff-auslösenden Niederschlag mm	Niederschlag, der zu 5 mm Oberflächenabfluss führt mm	Niederschlag, der zu 10 mm Oberflächenabfluss führt mm
C	unbedeckt	fallow	91	5,02	19,01	26,64

PRZM Soil hydrolo- gicgroup (SHG)	Bodenbe- deckung	Parametrisie- rung	CNII	Schwelle für runoff- auslösen- den Nieder- schlag mm	Niederschlag, der zu 5 mm Oberflächen- abfluss führt mm	Niederschlag, der zu 10 mm Oberflächen- abfluss führt mm
C	Hackfrüch- te, max. Deckungs- grad	row crops, contoured, good condition, CN4	82	11,15	30,53	40,29
C	Getreide oder Raps, max. Deckungs- grad	small grain, contoured, good condition, CN4	81	11,9	31,86	41,83

Da die CN für “small grain, contoured, good condition, CN4” und “row crops, contoured, good condition, CN4” für PRZM SHG group C sehr ähnlich sind, könnte man vereinfachend auch gleich CN = 82 für alle voll entwickelten Kulturen ansetzen.

Man sieht, dass der Schwellenwert für den runoffauslösenden Niederschlag relativ niedrig liegt. Aufgrund der Nichtlinearität der Abflussgleichung steigt aber der Oberflächenabfluss am Anfang nur langsam mit der Niederschlagsmenge an. Der Niederschlag, der zu 5 mm Oberflächenabfluss führt, stellt ein geeigneteres Maß für das Runofferzeugungspotential einer bestimmten Wetterzeitreihe dar (für kleinere Abflussmengen kann man mit einem Versickern auf dem Weg zum Gewässer rechnen, falls der Acker nicht direkt an das Gewässer angrenzt). Der Niederschlag, der zu 10 mm Oberflächenabfluss führt, wird als Maß für das Potential zur Erzeugung signifikanter Erosion herangezogen.

Ausgehend von den vorausgehend ausgeführten Überlegungen wurden folgende Variablen im Rahmen der Zeitreihenanalyse analysiert:

- Hortonian runoff
 - HR_MJ19.01: Anzahl der Tage von März bis Juni mit > 19,01 mm Niederschlag (entspricht > 5 mm runoff bei unbedecktem Boden)
 - HR_MJ30.53: Anzahl der Tage von März bis Juni mit > 30,53 mm Niederschlag (entspricht > 5 mm runoff für Hackfrüchte, max. Deckungsgrad)
 - HR_SD19.01: Anzahl der Tage von September bis Dezember mit > 19,01 mm Niederschlag (entspricht > 5 mm runoff bei unbedecktem Boden)
 - HR_SD30.53: Anzahl der Tage von September bis Dezember mit > 30,53 mm Niederschlag (entspricht > 5 mm runoff für Hackfrüchte, max. Deckungsgrad)
- Erosion
 - ER_MJ26.64: Anzahl der Tage von März bis Juni mit > 26,64 mm Niederschlag (entspricht > 10 mm runoff bei unbedecktem Boden)
 - ER_MJ40.29: Anzahl der Tage von März bis Juni mit > 40,29 mm Niederschlag (entspricht > 10 mm runoff für Hackfrüchte, max. Deckungsgrad)

- ER_SD26.64: Anzahl der Tage von September bis Dezember mit > 26,64 mm Niederschlag (entspricht > 10 mm runoff bei unbedecktem Boden)
- ER_SD40.29: Anzahl der Tage von September bis Dezember mit > 40,29 mm Niederschlag (entspricht > 10 mm runoff für Hackfrüchte, max. Deckungsgrad)

Da sich die FOCUS-Wetterzeitreihen für die R-Szenarien nicht über die kompletten 30 Jahre erstrecken, sondern nur 20 Jahre umfassen (1975 – 1994), wurde die Überschreitungshäufigkeit jeweils in eine mittlere Überschreitungsanzahl pro Jahr umgerechnet.

II.2.2.2.2 Saturation excess runoff

Oberflächenabfluss durch Sättigungsüberschuss (saturation excess runoff) entsteht, wenn der Wasserspiegel bis an die Bodenoberfläche steigt, so dass zusätzlicher Regen nicht mehr infiltrieren kann und oberirdisch abfließen muss (Garen und Moore, 2005).

PRZM kann keine Wassersättigung simulieren (zumindest nicht die Version winprzm.exe, die bis Juni 2012 in FOCUSsw eingesetzt wurde). PRZM passt jedoch die Curve Number als Funktion des Feuchtestatus in den obersten 10 cm des Bodens an. Wenn die obersten 10 cm bis zu Feldkapazität wassergesättigt sind, wird in PRZM die maximale Curve Number (CN_FC) erreicht.

Wenn die ersten 10 cm homogen sind und die gleichen Eigenschaften aufweisen (das ist in FOCUS und FOOTPRINT gegeben), vereinfacht sich die Formel zu:

$$CN_FC = CNII + (FC - WP) \cdot (CNIII - CNII) / (FC + WP)$$

mit

CN_FC Curve Number bei Feldkapazität FC

CNIII Curve Number bei antecedent moisture condition III (wird in PRZM nicht erreicht)

CNII Curve Number bei antecedent moisture condition II (mittlere Bodenfeuchte, abhängig von Kultur, Boden und Entwicklungsstadium der Kultur)

FC Feldkapazität (Wassergehalt bei Feldsättigung)

WP Wassergehalt am permanenten Welkepunkt

CNIII wird in PRZM aus CNII folgendermaßen berechnet.

$$CNIII = 23,0 \cdot CNII / (10,0 + 0,13 \cdot CNII)$$

Die Curve Number bei Feldkapazität hängt also nur von der CNII, dem Wassergehalt bei Feldkapazität und dem Wassergehalt bei Welkepunkt ab.

Um in PRZM die Auslösung von saturation excess runoff (üblicherweise im Winter) widerzuspiegeln, sollte man die Curve Number bei Feldkapazität heranziehen. In der Zeitreihenanalyse muss daher folgendes Niederschlagsgeschehen erfasst werden:

- 1.) Das Auffüllen des Speichers in den obersten 10 cm des Bodens auf Feldkapazität
→ kumulativer Niederschlag minus Evapotranspiration
- 2.) Auftreten eines Runoff-auslösenden Niederschlags für CN_FC → Tagesniederschlag.

Zunächst wurden die Klassenmittelwerte von FC und WP in den obersten 10 cm für alle PRZM SHGs auf Basis der 269 in PRZM parametrisierten 269 FSTs berechnet, sowie der mittlere

Wassergehalt bei mittleren Feuchtebedingungen (Mittelwert zwischen FC und WP; entsprechend CNII) berechnet. (PRZM SHG D tritt in den 269 FSTs nicht auf, so dass worst case jetzt SHG C ist. Man beachte, dass sich die in FOOTPRINT zugewiesene PRZM SHG nur auf den Oberflächenabfluss bezieht, und nicht wie die ursprüngliche USDA SHG auf den gesamten Direktabfluss). Anschließend wurde für jede PRZM SHG das zwischen mittleren Feuchtebedingungen und Feldkapazität aufzufüllende Speichervolumen in den obersten 10 cm berechnet (Tab. II.2-2).

Tab. II.2-3 zeigt für SHG C und verschiedene Bodenbedeckungen die CN bei Feldkapazität und dazugehörige Niederschlagsschwellenwerte. Im Winter ist der Boden entweder unbedeckt (Sommerkulturen) oder die Winterkultur befindet sich noch in einem frühen Entwicklungsstadium (CN2); CN4 ist also nicht relevant.

Erosion braucht im Fall des saturation excess runoff nicht betrachtet zu werden, da die Niederschläge hier üblicherweise weniger erosiv sind als diejenigen, die zu Hortonian runoff führen. Da bei höherer Wassersättigung des Bodens die Versickerungsneigung auf dem Weg zum Gewässer geringer ist, wurde hier mit 2 mm Abfluss eine niedrigere Schwelle statt der 5 mm-Abfluss-Schwelle (hortonian runoff/Erosion) festgelegt. Ein geeignetes Maß für das Auftreten von saturation excess runoff ist also die Anzahl der Niederschläge bei vollem Wasserspeicher, die ein Runoffvolumen von > 2 mm auslösen.

Zunächst mussten also die Tage der Winterperiode der Zeitreihe berechnet werden, an denen der Wasserspeicher gefüllt ist, also alle Tage, an denen die Differenz (kumulativer Regen minus kumulative PET) $\geq 7,85$ mm ist (Beschreibung der Bilanzierung des Niederschlags s. Kap. II.2.2.2.3). Es wurde vereinfachend angenommen, dass in der Wintersaison die tatsächliche Evapotranspiration (actual evapotranspiration, AET) gleich der potentiellen (PET) ist. Aufgrund der fehlenden Datengrundlage wurde der Faktor Schneeschmelze hinsichtlich der Auffüllung des Boden-Wasserspeichers nicht berücksichtigt.

Für alle Tage in der Winterperiode (Nov. bis März) wurden die folgenden Variablen berechnet:

- Saturation excess runoff
 - Anzahl der Tage von November bis März mit vollem Speicher UND > 11.8 mm Regen (entspricht > 2 mm runoff bei unbedecktem Boden) (SER_NM11.8)
 - Anzahl der Tage von November bis März mit vollem Speicher UND > 16.3 mm Regen (entspricht > 2 mm runoff bei Winterkulturen nach Auflaufen) (SER_NM16.3)

Tab. II.2-2: Klassenmittelwerte der Wassergehalte bei Feldkapazität, Welkepunkt und mittleren Feuchtebedingungen und Wasservorrat zwischen Midpoint und Feldkapazität in den obersten 10 cm für die PRZM Soil Hydrologic Groups (SHG) A bis C.

PRZM SHG	meanFC fraction	meanWP fraction	Anzahl FSTs	FC-WP fraction	midpoint (mean of FC and WP) fraction	FC-midpoint fraction	mean water storage between midpoint and FC mm
A	0,3604	0,2185	92	0,1419	0,289	0,071	7,10
B	0,3189	0,1789	72	0,1401	0,249	0,070	7,00
B-C	0,3561	0,1987	93	0,1574	0,277	0,079	7,87
C	0,3688	0,2118	7	0,1571	0,290	0,079	7,85

Tab. II.2-3: Curve Numbers bei Feldkapazität (FC, maximale Feuchte in PRZM) und dazugehörige Niederschlagsschwellenwerte für PRZM Soil Hydrologic Group (SHG) C, unter Benutzung des Klassenmittelwerts der FC.

PRZM SHG	Klas- sen- mittel FC	Klas- sen- mittel WP	Boden- bedeckung	Parametrisie- rung	CN II	CN at FC	Schwelle f. runoff-aus- lösenden Nieder- schlag bei FC mm	Niederschlag (mm), der bei FC zu folgendem Oberflächenabfluss führt:		
								2 mm	5 mm	10 mm
C	0,3688	0,2118	unbedeckt	fallow	91	92,32	4,23	11,80	17,30	24,60
C	0,3688	0,2118	Hackfrüchte, max, Deckungs- grad	row crops, contoured, good condition, CN4	82	84,51	9,31	20,01	27,27	36,46
C	0,3688	0,2118	Getreide oder Raps, max, Deckungs- grad	small grain, contoured, good condition, CN4	81	83,64	9,94	20,96	28,40	37,79
C	0,3688	0,2118	Getreide oder Raps, nach Auflaufen	small grain, contoured, good condition, CN2	86	88,00	6,93	16,31	22,82	31,20

II.2.2.2.3 Niederschlagsbilanzierung

Um die Tage mit einem vollen Bodenwasserspeicher zu ermitteln, musste zunächst für jeden Tag im Zeitraum November bis März das gespeicherte Wasservolumen berechnet werden. Dies erfolgte nach folgender Formel:

Tag 1: $\text{storage}(1) = \text{MIN}[(\text{rain}(1) - \text{PET}(1)); 7.85]$

Tag 2, ..., n: $\text{storage}(n) = \text{MIN}[(\text{storage}(n-1) + \text{rain}(n) - \text{PET}(n)); 7.85]$.

mit

storage gespeichertes Wasservolumen in den obersten 10 cm des Bodens (mm)

rain Tagesniederschlag in Regenäquivalenten (mm)

PET tägliche potentielle Evapotranspiration (mm)

7.85 Obergrenze der Wasserspeichermenge in den obersten 10 cm des Bodens (Festlegung; entspricht dem Wasservorrat zwischen Midpoint und Feldkapazität in den obersten 10 cm für PRZM Soil Hydrologic Group C)

Im Modell PRZM kann der Boden im normalerweise verwendeten Simulationsmodus (ein „restricted drainage mode“ existiert, funktioniert aber nicht) nicht mehr Wasser aufnehmen, als der Feldkapazität entspricht. Überschüssiges infiltrierendes Wasser führt daher nicht zu weiterer Sättigung, sondern zu Sickerung in das nächste Bodenlayer. Weiterhin wird in der hier durchgeführten Bilanzierung festgelegt, dass der Wasserspeicher in den obersten 10 cm des Bodens 7,85 mm nicht überschreiten kann.

Die tägliche Berechnung des gespeicherten Wasservolumens wurde für jede Rasterzelle des REGNIE-Datensatzes durchgeführt. Sobald der Wasserspeicher gefüllt ist ($\text{storage} = 7,85$ mm) und gleichzeitig ein Niederschlagsereignis von über 11,8 mm (unbedeckter Boden) bzw. 16,3 mm (Winterkulturen nach Auflaufen) auftritt, kommt es nach diesem Ansatz zu einem Runoff-Ereignis infolge Sättigungsüberschuss.

Da die für die Niederschlagsbilanzierung benötigte PET nicht als flächendeckender Rasterdatensatz vorliegt, wurde ein vereinfachter Ansatz zur Einbindung der PET entwickelt: Das Software-Tool CLIMWAT 2.0 (FAO, 2006) liefert stationsbezogene langjährige monatliche Mittelwerte für verschiedene Klimaparameter, unter anderem der PET (http://www.fao.org/nr/water/infores_databases_climwat.html). CLIMWAT enthält eine klimatische Datenbasis, die ursprünglich für den Einsatz im Programm CROPWAT gedacht ist. Die Daten können aber auch für andere Einsatzfelder in einer Textdatei exportiert werden. Bei der Zusammenstellung der Datenbank wurde versucht, den Zeitraum 1971 – 2000 abzudecken. Wenn keine Daten für diese Periode verfügbar waren, wurde auf Perioden zurückgegriffen, die nach 1975 enden und mindestens 15 Jahre umfassen.

Für Deutschland stehen 74 stationsbezogene Datensätze zur Verfügung (Abb. II.2-1).

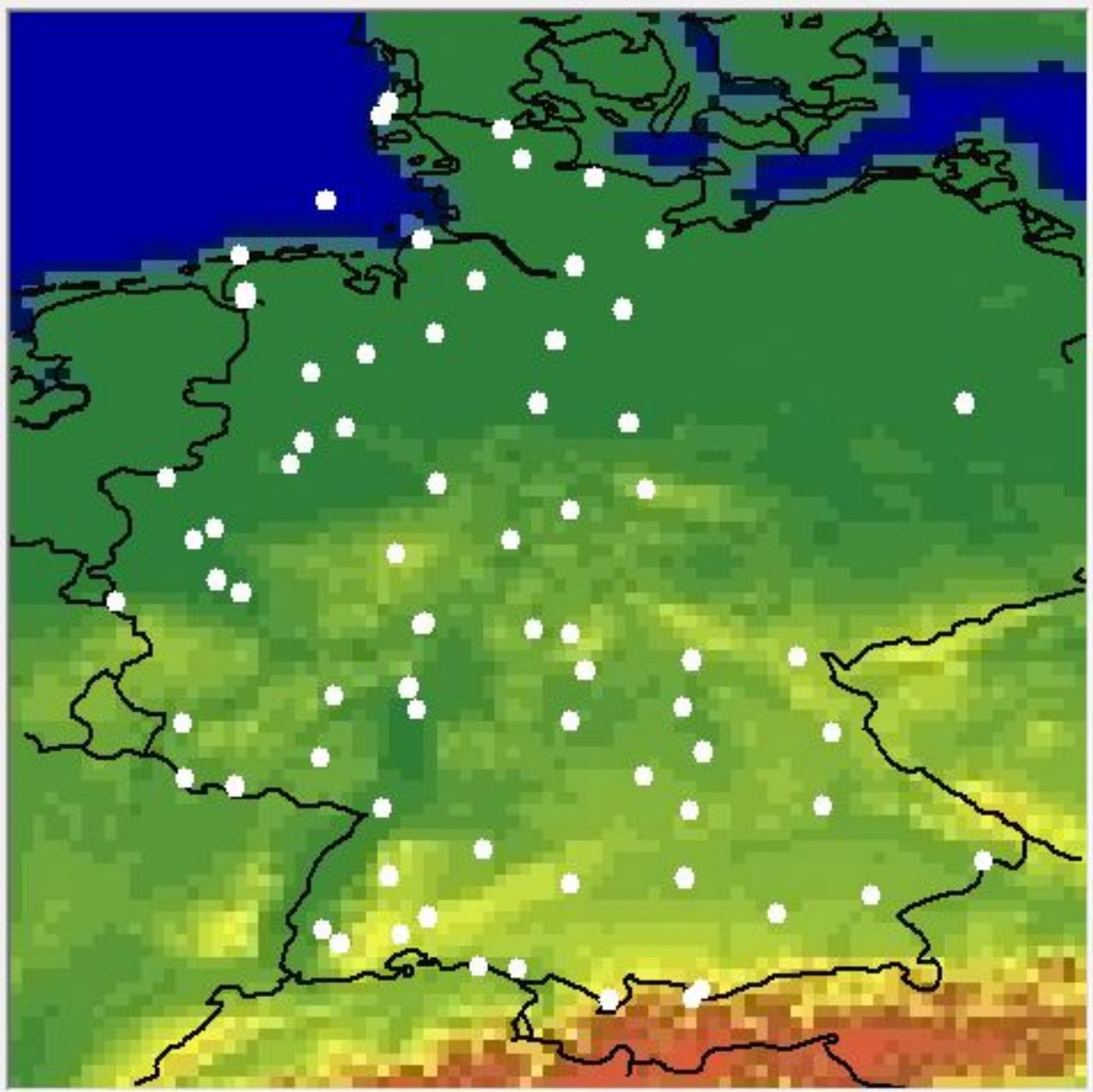


Abb. II.2-1: Lage der in CLIMWAT 2.0 zur Verfügung stehenden Klimastationen in Deutschland (n=74).

Aus diesen Stationsdaten sollen für jeden Monat der Winterperiode ein bundesweiter monatlicher mittlerer Wert der PET abgeleitet werden. Die PET ist in der CLIMWAT Datenbank in mm/Tag angegeben (für jeden Monat ein Wert). Zur Ermittlung eines flächendeckenden Wertes wurden nur diejenigen Stationen herangezogen, die aufgrund ihrer Lage relevant sind. Nicht relevant sind Stationen in besonderer Höhenlage (z. B. Wasserkuppe) und Helgoland. Es verbleiben 68 Stationen zur weiteren Analyse. Dabei werden aus den Stationsdaten für jeden Monat das 10. Perzentil und das 90. Perzentil der PET ermittelt, um die Schwankungsbreite zwischen den Stationen einschätzen zu können. Da sich die Spanne als nicht zu groß darstellt, wird für die Niederschlagsbilanzierung ein bundesweites monatliches 50. Perzentil aus den PET-Werten der Stationen abgeleitet (Tab. II.2-4). Für jede Rasterzelle des REGNIE-Datensatzes kann somit die Differenz aus dem kumulativen Niederschlag und dem aus den CLIMWAT abgeleiteten PET-Wert gebildet werden.

Tab. II.2-4: Aus 68 Stationsdaten berechnete Perzentile der Potenziellen Evapotranspiration (PET) im Mittel des Bundesgebietes (vieljähriges monatliches Mittel in mm/d).

Monat	10. Perzentil [mm/d]	50. Perzentil [mm/d]	90. Perzentil [mm/d]
Januar	0,29	0,38	0,49
Februar	0,47	0,56	0,70
März	0,91	1,11	1,33
November	0,50	0,59	0,72
Dezember	0,29	0,37	0,49

II.2.3 Ergebnisse der Repräsentivitätsanalyse der FOCUSsw-Szenarien für den Faktor Klima

II.2.3.1 Drainage

Die Klimavariablen T_SPR und T_AUT, R_WIN und R_ANN werden auf Basis von monatlich aufgelösten Klimarastern und die Variablen R2_SPR, R20_SPR, R50_SPR und R20_AUT auf Basis von täglich aufgelösten Niederschlagsrastern ausgewertet. Als erstes Ergebnis liegen für alle Variablen deutschlandweite Raster vor. Anschließend werden die Raster auf eine Zellgröße von 100 m x 100 m „resampelt“ und schließlich die Flächen mit Nutzung „Ackerbau“ und „Sonderkultur“ nach ALKIS/ATKIS ausgeschnitten. Abb. II.2-2 zeigt beispielhaft die Karte der mittleren Temperatur zwischen April und Juni (T_SPR) für den Zeitraum 1980 – 2009. Für diese Fläche wurde jeweils für jede Klimavariablen eine kumulative Flächenverteilungskurve erstellt, aus der dann jeweils das 10. und das 90. Perzentil und der Median hinsichtlich der Variablen ermittelt wurden (in Abb. II.2-3 beispielhaft für die Variable T_SPR dargestellt).

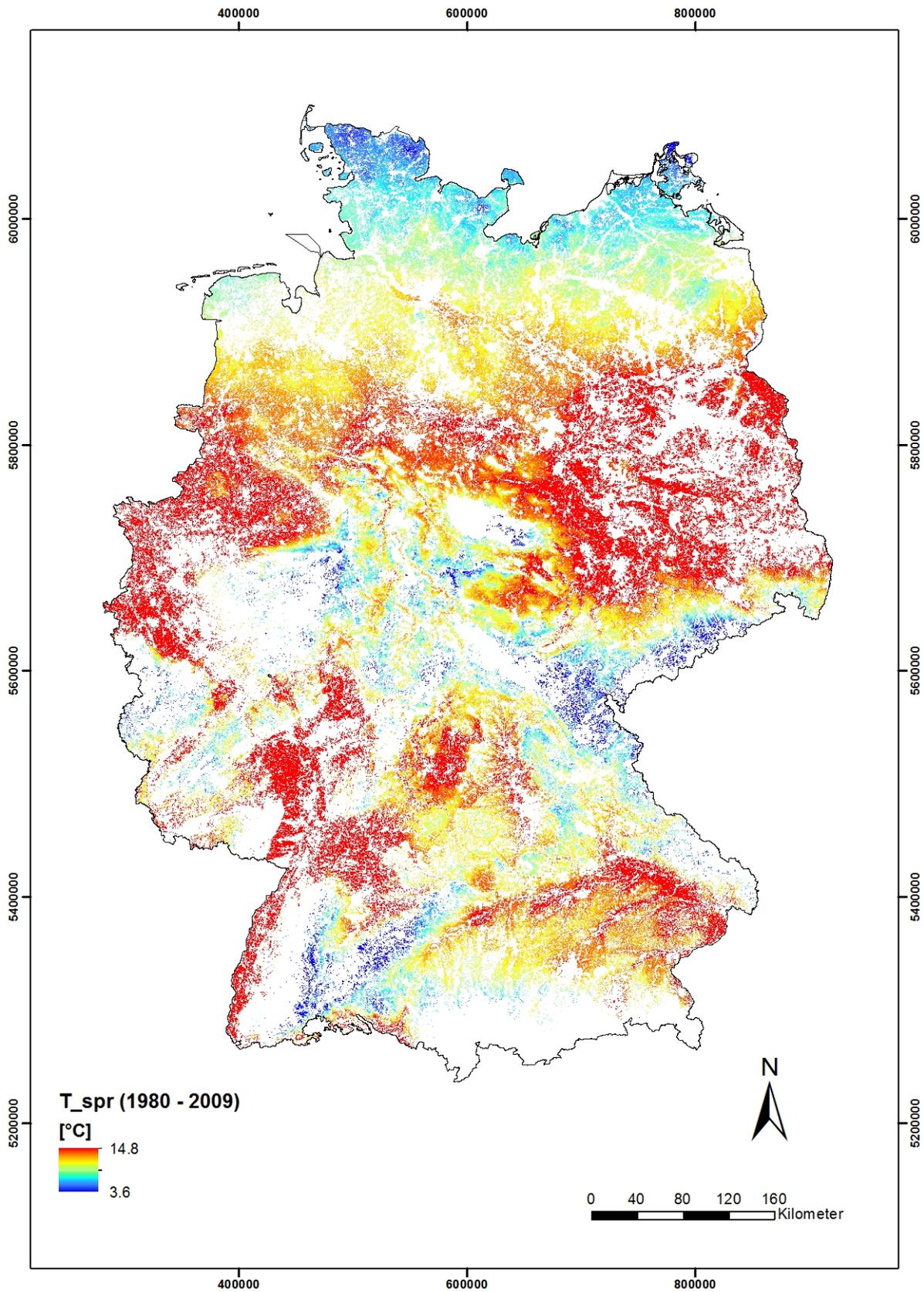


Abb. II.2-2: Verteilung der Klimavariablen T_{SPR}: Mittlere Temperatur von Anfang April bis Ende Juni (Auswertungszeitraum 1980-2009), ausgeschnitten nach ATKIS-Nutzungen „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“.

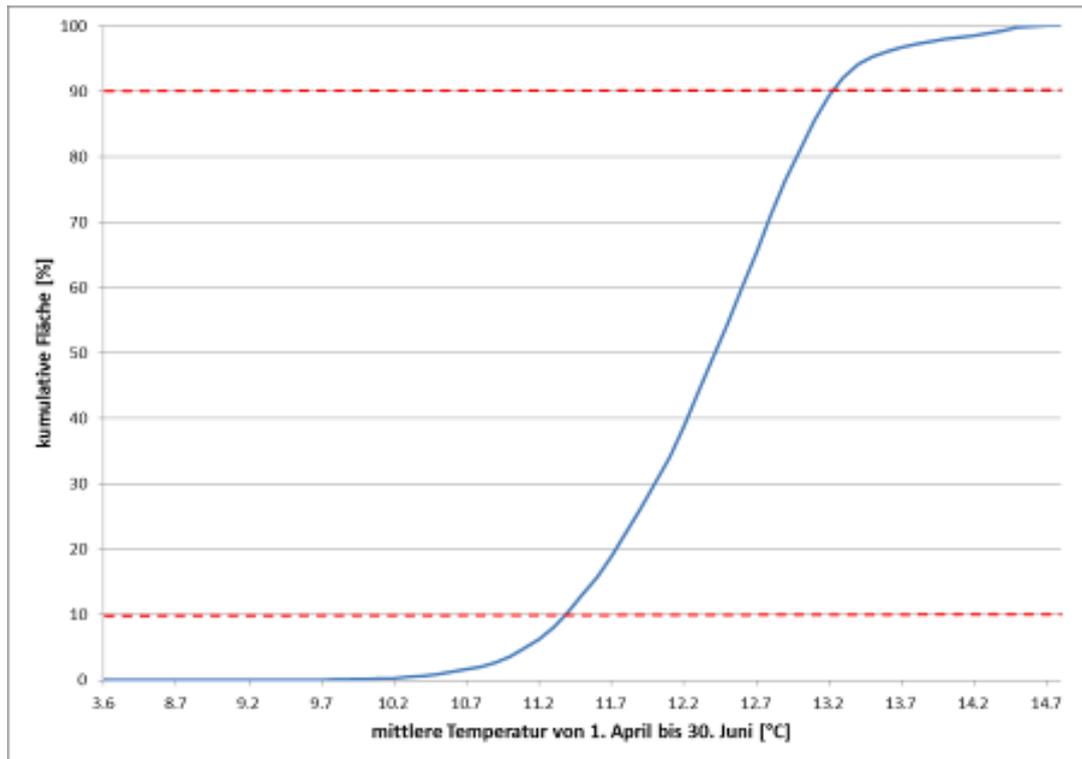


Abb. II.2-3: Kumulative Flächenverteilungskurve zur Klimavariablen T_SPR: Mittlere Temperatur von Anfang April bis Ende Juni (Auswertungszeitraum 1980-2009) (rot gestrichelte Linie: 10. und 90. Perzentil).

Bewertung der Temperaturvariablen

Die nachfolgenden Tabellen II.2-5 bis II.2-13 zeigen zusammenfassend die Ergebnisse bezüglich der Auswertungen zu den 8 Klimavariablen nach Blenkinsop et al. (2008), die für den Eintragspfad Drainage besonders sensitiv sind. Dabei sind zunächst in einer Tabelle die abgefragten Perzentile aus der flächendeckenden (d. h. alle Flächen mit Ackerbau und Sonderkulturen) Auswertung zusammengestellt, in der darauf folgenden zwei Tabelle jeweils die zu den D-Szenarien gehörigen Ergebnisse. Da sich die Wetterzeitreihen der Drainage-Szenarien jeweils nur über 7 Jahre erstrecken, musste die Häufigkeit der Schwellenwertüberschreitung (R2_SPR, R20_SPR, R50_SPR und R20_AUT) in einen durchschnittlichen Wert pro Jahr (av. d/a) umgerechnet werden. Die Wetterzeitreihen der D-Szenarien umfassen folgende Zeiträume : D1 (Lanna): 1976 – 1983, D2 (Brimstone): 1980 – 1987, D3 (Vredepeel): 1986 – 1993, D4 (Skousbo): 1979 – 1986, D5 (La Jaillièrre): 1972 – 1979, D6 (Thiva): 1980 – 1987.

Tab. II.2-5: 10. Perzentil, Median und 90. Perzentil der kumulativen Flächenverteilungsfunktion (Bezugsfläche: bundesweite Raster ausgeschnitten mit ATKIS „Ackerbau“ und „Sonderkultur“) der für den Eintragspfad Drainage relevanten Variablen T_SPR und T_AUT.

Variable	10. Perzentil [°C]	Median [°C]	90. Perzentil [°C]
T_SPR(Mitteltemperatur April bis Juni)	11,4	12,5	13,3
T_AUT (Mitteltemperatur Sep. bis Nov.)	8,2	9,2	10

Tab. II.2-6: Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimavariablen T_SPR und T_AUT, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1 - D6 (komplette Zeitreihe, 7 1/3 Jahre).

Szenario	T_SPR		T_AUT		repräsentiert in Situation in Deutschland (flächenbezogen)
	[°C]	kum. Flächenanteil [%]	[°C]	kum. Flächenanteil [%]	
D1	10,1	0,2	6,4	< 0,1	worst case
D2	11,5	13,0	10,1	92,9	nicht eindeutig
D3	13,3	92,1	10,7	99,3	best case
D4	11,0	3,6	8,8	29,8	tendenziell worst case
D5	13,9	97,6	12,5	100	best case
D6	18,9	100	17,9	100	best case

Da die Temperatur positiv mit dem Abbau von PSM korreliert ist, stellt hinsichtlich der Temperaturvariablen das 10. Perzentil das „realistic worst case“ Kriterium dar. Das heißt, dass diejenigen Szenarien, deren berechnete Temperaturvariablen kleiner oder gleich dem 10. Perzentil sind, als worst case Szenarien hinsichtlich dieser Variablen angesehen werden können. Somit zeigt sich, dass D1 hier einen worst case für Deutschland darstellt, während D3, D5 und D6 jeweils einen best-case abbilden, da nur ein geringer Flächenanteil höhere Mitteltemperaturen für April bis Juni (T_SPR) für die betrachteten Jahreszeiten aufweisen. D2 ist hinsichtlich der Variablen T_SPR und T_AUT (Mitteltemperatur von September bis November) nicht eindeutig einem „worst case“ oder „best case“ zuzuordnen, Szenario D4 tendiert zum worst-case.

Tab. II.2-7: Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimavariablen T_SPR und T_AUT, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (Kurzperiode, jeweils 16 Monate).

Szenario	T_SPR		T_AUT		repräsentiert in Situation in Deutschland (flächenbezogen)
	[°C]	kum. Flächenanteil [%]	[°C]	kum. Flächenanteil [%]	
D1	8,7	0,0	7,5	2,1	worst case
D2	10,7	1,6	10,1	92,9	nicht eindeutig
D3	14,0	97,9	10,5	97,7	best case
D4	9,7	0,1	8,7	26,8	tendenziell worst case
D5	12,7	65,3	12,2	100,0	best case
D6	18,8	100,0	17,7	100,0	best case

Für die tatsächliche Simulation des PSM-Eintrages in Oberflächengewässer über den Eintragspfad Drainage in FOCUS-TOXWA werden für die D-Szenarien eine Kurzperiode von 16 Monaten Länge verwendet (FOCUS, 2001). Das betreffende Jahr ist für: D1: 1982, D2: 1986, D3: 1992, D4: 1985, D5: 1978 und für D6: 1986. Die Kurzperiode erstreckt sich jeweils vom 01.01. eines Jahres bis zum 30.04. des Folgejahres. Betrachtet man die Klimavariablen T_SPR und T_AUT, so zeigen sich bei den Ergebnissen hinsichtlich der Kurzperioden (vgl. Tab. II.2-7) kaum Unterschiede zu den Langperioden (Tab. II.2-6). Lediglich bei D5 weist T_SPR eine deutlich geringere flächenbezogene kumulative relative Häufigkeit auf (65,3 %), dieses Szenario ist also hinsichtlich der Temperaturvariablen bezogen auf die Kurzperiode nicht mehr als reines best-case Szenario einzuordnen.

Bewertung der Niederschlagsvariablen

Mit zunehmendem Niederschlag nimmt, stark vereinfachend gesagt, auch das Eintragsrisiko von PSM über den Pfad Drainage zu. Daher stellt das 90. Perzentil der jeweiligen Niederschlagsvariable den realistic worst case dar. Alle Werteausprägungen der niederschlagsbezogenen Variablen gleich oder größer des 90. Perzentils sind also als worst case Szenario zu betrachten. Bezüglich der Niederschlagsparameter R_WIN (mittlerer kumulativer Niederschlag von Oktober bis März) und R_ANN (mittlerer Jahresniederschlag) zeigt sich D1 als best-case Szenario während D3 ungefähr mittlere Verhältnisse auf der Bezugsfläche abbildet. D2, D4 und D5 tendieren eher Richtung best-case, D6 zeigt hier kein eindeutiges Bild. Für D6 macht der Winterregen einen Großteil des Jahresniederschlags aus. Dies ist typisch für ein mediterranes Klima, macht D6 in Bezug auf Niederschlag für Deutschland aber wenig repräsentativ.

Tab. II.2-8: 10. Perzentil, Median und 90. Perzentil der kumulativen Flächenverteilungsfunktion (Bezugsfläche: bundesweite Raster ausgeschnitten mit ATKIS „Ackerbau“ und „Sonderkultur“) der für den Eintragspfad Drainage relevanten Variablen R_WIN und R_ANN.

Variable	10. Perzentil [mm]	Median [mm]	90. Perzentil [mm]
R_WIN(mittlerer Niederschlag von Okt. bis März)	241	341	443
R_ANN(mittlerer Jahresniederschlag)	551	736	907

Tab. II.2-9: Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimavariablen R_WIN und R_ANN, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (komplette Zeitreihe, 7 1/3 Jahre).

Szenario	R_WIN		R_ANN		repräsentiert in Situation in Deutschland (flächenbezogen)
	[mm]	kum. Flächenanteil [%]	[mm]	kum. Flächenanteil [%]	
D1	251	14,2	567	14,1	best case
D2	318	40,6	639	29,5	tendenziell best case
D3	347	52,8	711	44,7	medium case
D4	283	27,1	648	31,4	tendenziell best case
D5	320	41,4	582	17,8	tendenziell best case
D6	428	85,7	536	5,9	nicht eindeutig

Tab. II.2-10 zeigt die Ergebnisse zu R_WIN und R_ANN für die Kurzperioden der D-Szenarien. In der jeweiligen 16-monatigen Periode weisen die Szenarien D1, D2 und D3 kaum Unterschiede hinsichtlich dieser Niederschlagsparameter zu den Langperioden auf. D4 zeigt in der Kurzperiode einen deutlich höheren Winter- und Jahresniederschlag und bildet bezogen auf die relevante Fläche mittlere Verhältnisse ab. D5 hat in der Kurzperiode einen deutlich höheren Winterniederschlag und D6 einen deutlich höheren Jahresniederschlag verglichen mit der Langperiode.

Tab. II.2-10: Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimavariablen R_WIN und R_ANN, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (Kurzperiode, je 16 Monate).

Szenario	R_WIN		R_ANN		repräsentiert in Situation in Deutschland (flächenbezogen)
	[mm]	kum. Flächenanteil [%]	[mm]	kum. Flächenanteil [%]	
D1	266	20,3	556	11,3	best case
D2	323	42,6	669	35,8	tendenziell best case
D3	318	40,6	728	48,3	medium case
D4	331	46	752	53,5	medium case
D5	402	75,8	612	24,2	nicht eindeutig
D6	672	99,8	824	73,4	worst-case

Hinsichtlich der Eintrittshäufigkeit bestimmter Niederschlagsereignisse (R2_SPR, R20_SPR, R20_AUT und R50_SPR) lässt sich kein Szenario eindeutig als worst case einordnen. Es gibt also kein D-Szenario, das bezüglich all dieser Variablen im worst case Bereich anzusiedeln ist. Man kann aber ersehen, welches Szenario für die einzelnen Niederschlagsvariablen einen worst case darstellt.

In Bezug auf R2_SPR (Anzahl der Tage mit Niederschlag >2mm zwischen April bis Juni) sind alle Szenarien aber als best-case anzusehen. Hinsichtlich R20_SPR (Anzahl der Tage mit Niederschlag >20mm zwischen April bis Juni) weist D5 mit 51,1 % die größte flächenbezogene kumulative relative Häufigkeit auf, stellt somit hinsichtlich dieser Variable das ungünstigste D-Szenario dar, im Vergleich zur Gesamtverteilung bildet es allerdings nur einen medium case ab. Betrachtet man R20_AUT (Anzahl der Tage mit Niederschlag >20mm zwischen September bis November) stellen D4 und D6 den worst case dar. D2 und D5 stellen in Bezug auf R50_SPR (Anzahl der Tage mit Niederschlag >50mm zwischen April bis Juni) mit je 98,1 % flächenbezogene kumulative relative Häufigkeit einen worst case für Deutschland dar.

Tab. II.2-11: 10. Perzentil, Median und 90. Perzentil der kumulativen Flächenverteilungsfunktion (Bezugsfläche: bundesweite Raster ausgeschnitten mit ATKIS „Ackerbau“ und „Sonderkultur“) der für den Eintragspfad Drainage relevanten Variablen R2_SPR, R20_SPR, R20_AUT und R50_SPR.

Variable	10. Perzentil av. [d/a]	Median av. [d/a]	90. Perzentil av. [d/a]
R2_SPR (Anzahl der Tage mit NS >2mm zwischen April bis Juni)	19,17	23,1	27,10
R20_SPR (Anzahl der Tage mit NS >20mm zwischen April bis Juni)	0,52	0,83	1,61
R20_AUT (Anzahl der Tage mit NS >2mm zwischen Oktober bis März)	0,32	0,8	1,55
R50_SPR (Anzahl der Tage mit NS >50mm zwischen April bis Juni)	0,00	0,03	0,06

Tab. II.2-12: Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimaparameter R2_SPR, R20_SPR, R20_AUT und R50_SPR, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (komplette Zeitreihe, 7 1/3 Jahre) (Erklärung der Variablen s. Text).

Szenario	R2_SPR		R20_SPR		R20_AUT		R50_SPR	
	av. [d/a]	kum. Flächenanteil						
D1	11,9	0	0,71	33,9	1,4	85,7	0	42,3
D2	18,1	2,5	0,71	33,9	1,1	72,6	0,14	98,1
D3	17,4	0,5	0,29	0,1	1,1	72,6	0	42,3
D4	16,6	0,04	0,29	0,1	1,7	93,4	0	42,3
D5	18,4	4,2	0,86	51,1	0,7	43,5	0,14	98,1
D6	5,4	0	0,57	15,3	3	99,6	0	42,3

Tab. II.2-13 zeigt die auf die Klimavariablen R2_SPR, R20_SPR, R20_AUT und R50_SPR bezogenen Ergebnisse hinsichtlich der Kurzperioden der D-Szenarien. Hier zeigt sich, dass nicht mehr alle D-Szenarien in Bezug auf R2_SPR einen best-case darstellen, D4 und D5 haben mit 37,2 % eine deutlich höhere flächenbezogene kumulative relative Häufigkeit als die komplette Periode und stellen somit eher ein medium case dar. Bei der Niederschlagsvariable R20_SPR zeigen D1, D2 neben D5 die größte flächenbezogene kumulative relative Häufigkeit (jeweils 66,7 %). Bezogen auf die Kurzperioden sind D1, D2, D3 und D6 als realistic worst case für R20_AUT einzuordnen und bilden auch einen höheren kumulativen Flächenanteil als die jeweiligen Langperioden ab. D4 und D5 zeigen im Vergleich zur kompletten Zeitreihe hinsichtlich dieser Variablen einen deutlich niedrigeren relativen kumulativen Flächenanteil. Da in keiner der D-Kurzzeitreihen ein Niederschlagsereignis von über 50 mm im Frühjahr eintritt, ist hinsichtlich der Variable R50_SPR kein Szenario als worst case einzuordnen.

Tab. II.2-13 Übersicht der für den Eintragspfad Drainage relevanten Klimaparameter R2_SPR, R20_SPR, R20_AUT und R50_SPR, abgeleitet aus den FOCUS Drainage-Szenarien D1-D6 (Kurzperiode, je 16 Monate) (Erklärung der Variablen s. Text).

Szenario	R2_SPR		R20_SPR		R20_AUT		R50_SPR	
	av. [d/a]	kum. Flächenanteil						
D1	15	0	1	66,7	2	97,2	0	42,3
D2	20	18	1	66,7	2	97,2	0	42,3
D3	19	8,8	0	0	2	97,2	0	42,3
D4	22	37,2	0	0	1	66,4	0	42,3
D5	22	37,2	1	66,7	0	0	0	42,3
D6	7	0	0	0	5	100	0	42,3

II.2.3.2 Oberflächenabfluss/Erosion

Die in Bezug auf den Eintragspfad Hortonian runoff und Erosion ausgewählten Niederschlagsvariablen HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, HR_SD19.01, HR_SD30.53, ER_SD26.64 und ER_SD40.29 und die hinsichtlich Saturation excess runoff berechneten Variablen SER_NM11.8 und SER_NM16.3 werden auf Basis von täglich aufgelösten Niederschlagsrastern ausgewertet. Als Ergebnis liegen für alle Variablen deutschlandweite Raster vor. Abb. II.2-5 zeigt beispielhaft die Karte mit der Anzahl der Tage zwischen März und Juni mit einem Niederschlag größer 26,64 mm (ER_MJ26.64) für den Zeitraum 1980 bis 2009.

Analog zum Vorgehen bei der Analyse der Klimavariablen für Eintragspfad werden auch für Runoff/Erosion im zweiten Schritt die Raster auf eine Zellgröße von 100 m x 100 m „resampelt“ und schließlich auf die Fläche mit den Nutzungen „Ackerbau“ und „Sonderkultur“ nach ALKIS/ATKIS ausgeschnitten (Abb. II.2-4). Für diese Fläche wurde jeweils für jede Klimavariablen eine kumulative Flächenverteilungskurve erstellt und daraus das 10. und 90. Perzentil sowie der Median der betreffenden Variablen ermittelt. Abb. II.2-4 zeigt die Flächenverteilungskurve beispielhaft für die Variable ER_MJ26.64.

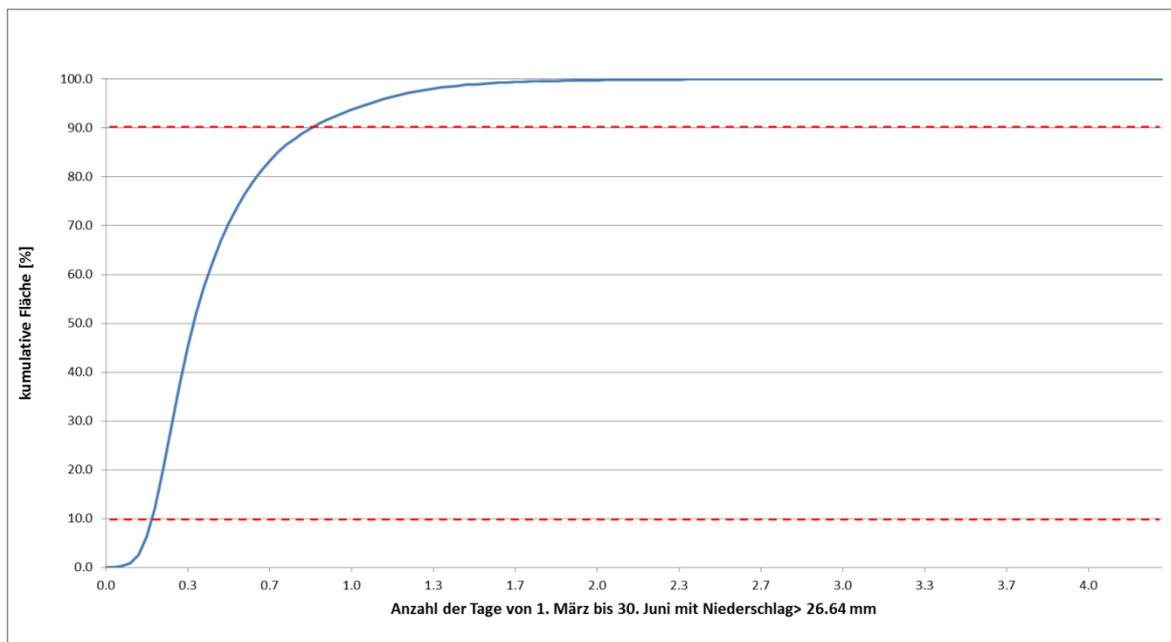


Abb. II.2-4: Kumulative Flächenverteilungskurve zur Klimavariablen ER_MJ26.64: durchschnittliche Anzahl der Tage mit Überschreitung des Schwellenwertes pro Jahr (rot gestrichelte Linien: 10. und 90. Perzentil).

Die R-Szenarien umfassen jeweils 20 Jahre (1975 - 1994). Um die berechneten Variablen in der Gesamtflächenverteilung einordnen zu können, wurden die Werte in eine Angabe „durchschnittliche Anzahl an Tagen pro Jahr“ (av.d/a) umgerechnet.

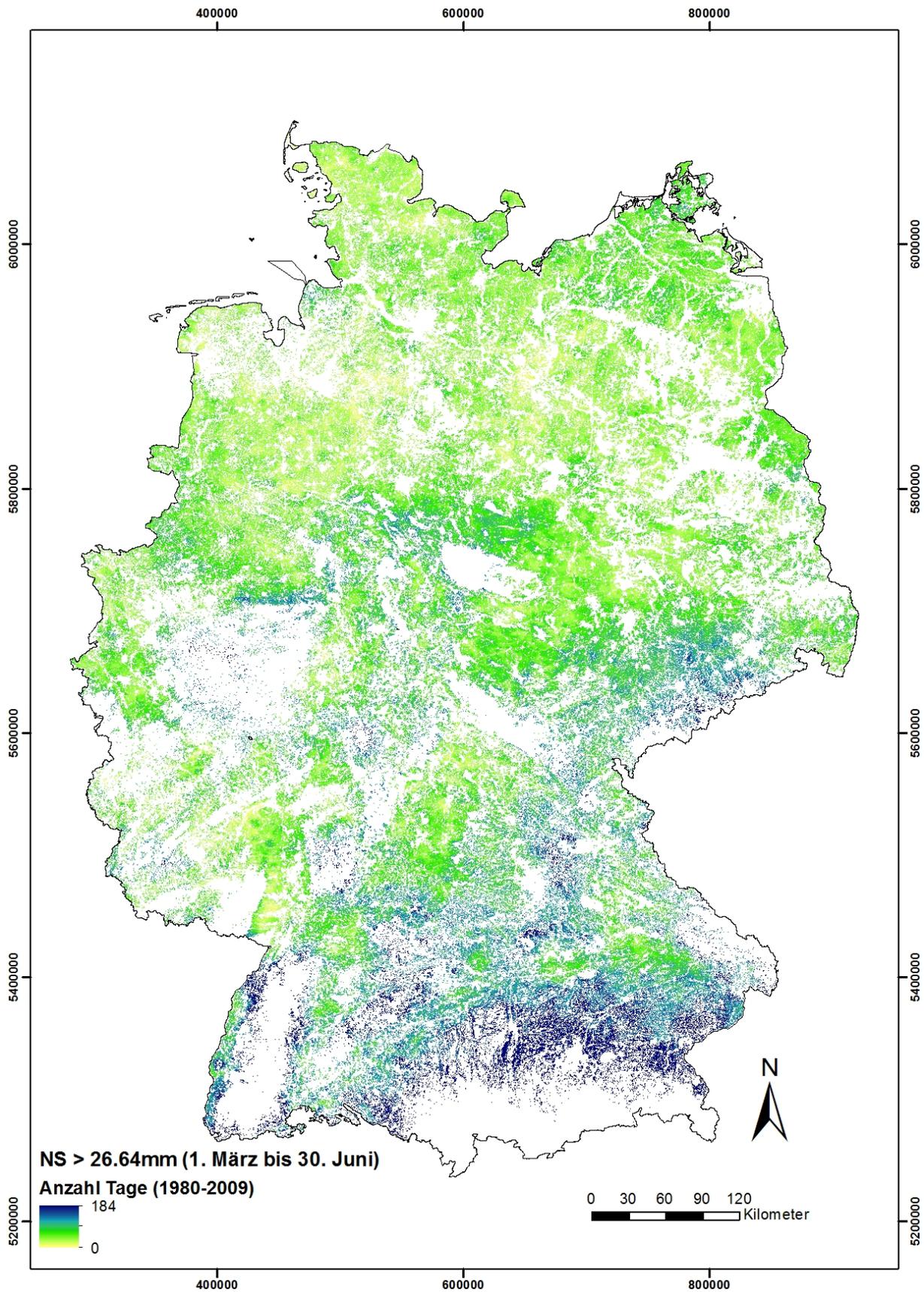


Abb. II.2-5: Anzahl der Tage zwischen März und Juni mit einem Niederschlag größer 26.64 mm (ER_MJ26.64 ; ausgeschnitten nach ATKIS-Nutzungen „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“).

Tab. II.2-14: Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53) und Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) relevanten Klima-parameter, 10. Perzentil, Median und 90. Perzentil aus der Gesamtflächenverteilung (bundesweite Raster ausgeschnitten mit ATKIS-Nutzungen „Ackerbau“ und „Sonderkultur“) und abgeleitet aus den FOCUS Runoff-Szenarien R1-R4 (Erklärung der Variablen s. Text).

Variable	Gesamtfläche			FOCUS							
	10. Perz.	Medi-an	90. Perz.	R1	kum. Flä-chen-anteil	R2	kum. Flä-chen-anteil	R3	kum. Flä-chen-anteil	R4	kum. Flä-chen-anteil
	av. [d/a]	av. [d/a]	av. [d/a]	av. [d/a]	[%]						
HR_MJ19,01	0,7	1,1	2,2	2,0	86,7	5,3	99,9	2,6	95	2,8	96,4
HR_MJ30,53	0,1	0,2	0,5	0,6	92,5	1,5	99,9	1,0	99	1,1	99,4
ER_MJ26,64	0,2	0,4	0,9	0,7	84,9	2,3	99,9	1,6	99,3	1,5	98,9
ER_MJ40,29	0	0,1	0,2	0,3	96,7	0,6	99,9	0,5	99,6	0,5	99,6
HR_SD19,01	0,5	1,2	2,3	1,9	80,9	11,1	100	3,8	99	5,7	99,9
HR_SD30,53	< 0,1	0,2	0,4	0,4	88,4	5,0	100	2,0	99,9	3,2	100
ER_SD26,64	0,1	0,3	0,8	0,8	91,5	6,2	100	2,6	99,9	4	100
ER_SD40,29	0	0,0	0,1	0,2	96,5	2,4	100	1,1	100	2,15	100

Die Ergebnisse der Auswertungen bezüglich des Auftretens verschiedener Starkregenereignisse (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, HR_SD19.01, HR_SD30.53, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) zeigen, dass alle R-Szenarien einen worst case für die relevante Fläche in Deutschland darstellen. Die Szenarien R2, R3 und R4 entsprechen hinsichtlich aller betrachteten Niederschlagsschwellenwerte einer kumulativen relativen Häufigkeit für die relevante Fläche in Deutschland von über 95 %. Die Eintrittshäufigkeit der Starkniederschläge des Szenario R2 repräsentiert sogar über 99,9 % Flächenanteil bezüglich aller Variablen.

Das Szenario R1 zeigt eine etwas geringere „worst case-ness“ als R2, R3 und R4, da vier Variablen einen kumulativen Flächenanteil von über 80 % zeigen, die restlichen vier zeigen auch eine Flächenrelevanz über 90 %.

Tab. II.2-15: Übersicht der für den Eintragspfad Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, 10. Perzentil, Median und 90. Perzentil aus der Gesamtflächenverteilung (bundesweite Raster ausgeschnitten mit ATKIS-Nutzungen „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“) und abgeleitet aus den FOCUS Runoff-Szenarien R1 - R4 (Erklärung der Variablen s. Text).

Variable	Gesamtfläche			FOCUS							
	10. Perz.	Med.	90. Perz.	R1	kum. Flä-chen-anteil	R2	kum. Flä-chen-anteil	R3	kum. Flä-chen-anteil	R4	kum. Flä-chen-anteil
	av. [d]	av. [d]	av. [d]	av. [d]	[%]						
SER_NM11.	1,7	3,9	6,8	4,8	64,5	25,9	100	6	83,1	7,7	94,1

8											
SER_NM16.	0,5	1,6	3,1	2,2	73,0	18	100	3,4	92,2	5,3	98,3
3											

Für die eigentliche Berechnung der PSM-Einträge in Oberflächengewässer über die Eintragspfade Runoff & Erosion werden in FOCUS-TOXWA Kurzperioden verwendet. Innerhalb der R-Szenarien gibt es je nach Applikationssaison eine „Frühjahrs“ (Spring), „Sommer“ (Summer) und „Herbst“ (Autumn) Kurzeitreihe. Jeder Kurzperiode ist ein bestimmtes Jahr zugewiesen (vgl. Tab. II.2-16).

Tab. II.2-16: Ausgewählte Jahre in den FOCUS R-Szenarien für die Kurzperioden.

	Spring	Summer	Autumn
R1	1984	1978	1978
R2	1977	1989	1977
R3	1980	1975	1980

Die R-Kurzperioden sind jeweils 12 Monate lang und erstrecken sich je nach Applikationssaison

- Spring: 01.03.X - 28.02.X+1,
- Summer: 01.06.X - 31.05.X+1
- Autumn: 01.10.X - 30.09.X+1

wobei X für das jeweils ausgewählte Jahr und X+1 für das Folgejahr steht.

Die nachfolgenden vier Tab. II.2-17 bis II.2-20 zeigen die Ergebnisse zu allen Runoff/Erosionsrelevanten Klimavariablen bezogen auf die Kurzperioden. Jede Tabelle zeigt ein Szenario, differenziert nach Spring-, Summer- und Autumn-Periode.

Bei der Analyse der R-Kurzperioden zeigt sich, dass das Szenario R2 insgesamt die höchste Flächenrelevanz aufweist. Bis auf die Variable ER_SD40.29 in Bezug auf R2-Herbst weisen alle Niederschlagsvariablen eine flächenbezogene kumulative relative Häufigkeit von über 99 % auf. Auch die Kurzperioden von R3 und R4 bilden weitestgehend worst case Bedingungen ab. Nur vereinzelt treten dort bei den unterschiedlichen Kombinationen aus Kurzperioden und Niederschlagsvariablen kumulative Flächenanteile unter 90 % auf. Lediglich die R1-Kurzperioden bilden deutlich seltener den worst case hinsichtlich der betrachteten Variablen ab. Es liegen zwar teilweise kumulative Flächenanteile von über 90 % vor, allerdings werden im Gesamtbild deutlich öfter keine worst case Bedingungen abgebildet. Auch gibt es hier den größten Anteil an Variablen, die einen Null-Wert zeigen, also gar nicht innerhalb der Kurzperiode auftreten.

Tab. II.2-17: Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53) Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) und Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus dem FOCUS Runoff-Szenario R1 (Kurzperioden „Spring“, „Summer“ und „Autumn“, je 12 Monate) (Erklärung der Variablen s. Text).

Variable	R1 Spring	kum. Flächenanteil	R1 Summer	kum. Flächenanteil	R1 Autumn	kum. Flächenanteil
	[d]	[%]	[d]	[%]	[d]	[%]
HR_MJ19.01	3	97,3	2	86,7	1	40,6
HR_MJ30.53	1	99	1	99	0	0,1
ER_MJ26.64	1	93,1	1	93,1	0	0
ER_MJ40.29	0	10,3	0	10,3	0	10,3
HR_SD19.01	3	97,1	1	42,4	1	42,4
HR_SD30.53	0	4,3	0	4,3	0	4,3
ER_SD26.64	0	0,5	1	95,6	1	95,6
ER_SD40.29	0	30,7	0	30,7	0	30,7
SER_NM11.8	5	68,03	5	68,03	5	68,03
SER_NM16.3	3	88,83	1	32,76	1	32,76

Tab. II.2-18: Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53) Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) und Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus dem FOCUS Runoff-Szenario R2 (Kurzperioden „Spring“, „Summer“ und „Autumn“, je 12 Monate) (Erklärung der Variablen s. Text).

Variable	R2 Spring	kum. Flächenanteil	R2 Summer	kum. Flächenanteil	R2 Autumn	kum. Flächenanteil
	[d]	[%]	[d]	[%]	[d]	[%]
HR_MJ19.01	8	100	4	99,3	7	100
HR_MJ30.53	2	100	2	100	3	100
ER_MJ26.64	2	99,7	2	99,7	4	100
ER_MJ40.29	1	100	1	100	1	100
HR_SD19.01	10	100	15	100	9	100
HR_SD30.53	4	100	8	100	3	100
ER_SD26.64	7	100	10	100	6	100
ER_SD40.29	1	100	2	100	0	30,7
SER_NM11.8	38	100	30	100	38	100
SER_NM16.3	20	100	22	100	20	100

Tab. II.2-19: Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53), Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) und Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus dem FOCUS Runoff-Szenario R3 (Kurzperioden „Spring“, „Summer“ und „Autumn“, je 12 Monate) (Erklärung der Variablen s. Text).

Variable	R3 Spring	kum. Flächenanteil	R3 Summer	kum. Flächenanteil	R3 Autumn	kum. Flächenanteil
	[d]	[%]	[d]	[%]	[d]	[%]
HR_MJ19.01	2	86,7	1	40,6	3	97,3
HR_MJ30.53	1	99	1	99	1	99
ER_MJ26.64	1	93,1	1	93,1	1	93,1
ER_MJ40.29	0	10,3	0	10,3	0	10,3
HR_SD19.01	5	99,7	7	100	6	99,9
HR_SD30.53	1	99,1	3	100	2	99,9
ER_SD26.64	2	99,6	4	100	3	99,9
ER_SD40.29	1	100	2	100	2	100
SER_NM11.8	9	96,89	11	98,79	9	96,89
SER_NM16.3	3	88,83	5	97,93	3	88,83

Tab. II.2-20: Übersicht der für den Eintragspfad Hortonian Runoff (HR_MJ19.01, HR_MJ30.53, HR_SD19.01 und HR_SD30.53), Erosion (ER_MJ26.64, ER_MJ40.29, ER_SD26.64 und ER_SD40.29) und Saturation excess runoff (SER_NM11.8 und SER_NM16.3) relevanten Klimaparameter, abgeleitet aus dem FOCUS Runoff-Szenario R4 (Kurzperioden „Spring“, „Summer“ und „Autumn“, je 12 Monate) (Erklärung der Variablen s. Text).

Variable	R4 Spring	kum. Flächenanteil	R4 Summer	kum. Flächenanteil	R4 Autumn	kum. Flächenanteil
	[d]	[%]	[d]	[%]	[d]	[%]
HR_MJ19.01	3	97,3	2	86,7	3	97,3
HR_MJ30.53	1	99	1	99	1	99
ER_MJ26.64	1	93,1	1	93,1	2	99,7
ER_MJ40.29	1	100	1	100	1	100
HR_SD19.01	6	99,9	5	99,7	8	100
HR_SD30.53	6	100	4	100	5	100
ER_SD26.64	6	100	4	100	7	100
ER_SD40.29	4	100	2	100	5	100
SER_NM11.8	11	98,79	13	99,46	4	51,38
SER_NM16.3	8	99,64	12	99,97	2	67,22

Die Beurteilung der worst case-ness oder Repräsentativität eines Szenarios für Deutschland anhand einer einzigen Variable oder mehrerer Variablen ist wenig aussagekräftig. Daher wurde als nächster Schritt (Kapitel II.2.4) eine Hauptkomponentenanalyse mit dem Ziel einer Dimensionsreduktion durchgeführt.

II.2.4 Synthese der Klimavariablen – Clusterung Klimazonen Deutschland

Um eine *integrierende* Charakterisierung der PSM-Applikationsflächen in Deutschland bezüglich der Runoff-, Erosions- und Drainage-relevanten Klimavariablen durchzuführen, wurde für alle Rasterzellen mit der Nutzungsart Ackerbau und Sonderkulturen (ausgeschnitten nach ALKIS/ATKIS) eine **Hauptkomponentenanalyse (Principal Component Analysis, PCA)** mit allen analysierten Klimavariablen durchgeführt (die 18 vorstehend beschriebenen Variablen plus der Jahresmitteltemperatur für den Zeitraum 1980 bis 2009). Ziel der PCA ist es, die Anzahl der Variablen zu reduzieren und die Ausprägung der Klimavariablen für jede Rasterzelle mittels der PC-Scores komprimiert zu beschreiben. Auf Basis der Ergebnisse der PCA wurde anschließend eine **Clusteranalyse** (k-means Methode) durchgeführt und im Ergebnis werden 12 Klimacuster für die Flächen mit Ackerland und Sonderkultur in Deutschland ausgewiesen, die sich hinsichtlich des Faktors Klima für das PSM-Verlagerungsrisikos durch Runoff, Erosion bzw. Drainage unterscheiden. Das methodische Vorgehen zur Durchführung der PCA- und der Clusteranalyse folgt weitgehend Blenkinsop et al. (2007).

II.2.4.1 Hauptkomponentenanalyse der Klimavariablen

In einem vorbereitenden Schritt mussten zunächst die Raster, die aus den Auswertungen zu den vier monatlichen Werten hervorgingen (s. u.), mit den Rastern, die aus täglichen Niederschlagsdaten stammen, im GIS zur Deckungsgleiche gebracht werden, da die Zellen beider Ursprungsraster nicht identisch übereinander liegen (s. Kap. II.2.1 zur Auflösung der Rasterkarten). Nach dem „Resample“ der Raster auf eine Zellgröße von 100 m x 100 m und Verschneiden mit den Nutzungsarten „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“ der ATKIS/ALKIS-Karte wurden deshalb die vier auf monatlichen Werten basierten Raster (T_SPR, T_AUT, R_WIN und T_ANN) in x-Richtung um ca. 43 m und in y-Richtung um ca. 2 m verschoben, um diese in die deckungsgleiche Lage mit den Rastern zu bringen, die aus den täglichen Daten abgeleitet wurden. Für die PCA wurden weiterhin nur diejenigen Rasterzellen verwendet, die für alle Variablen mit einem Wert belegt sind (im Küsten- und Außengrenzbereich weisen die Raster aus Tages- und Monatswerten eine unterschiedliche Ausdehnung auf). Im Ergebnis sind das 13.194.161 Rasterzellen (100 m x 100m), das Untersuchungsgebiet umfasst also rund 132.000 km².

Bei der PCA wird in einem ersten Schritt ermittelt, wie viele Hauptkomponenten für die anschließende Analyse benötigt werden. Dazu können verschiedene Methoden herangezogen werden. Ebenso wie Blenkinsop et al (2008) wurden hier drei Methoden zur Bestimmung der benötigten Hauptkomponenten angewandt. Dies war zum einen die „Screen-Plot-Methode“, bei der die sogenannten Eigenvalues (entspricht der Varianz der Hauptkomponente) der Hauptkomponenten (Tab. II.2-21) geplottet werden und die Anzahl der PCA aufgrund eines signifikanten „Knicks“ der Kurve ermittelt wird. Kaiser (1960) schlägt für die Auswahl vor, dass alle Hauptkomponenten übernommen werden, die einen Eigenvalue größer 1,0 aufweisen („rule of one“), während Jolliffe (1972, 1986) als Schwellenwert einen Eigenvalue größer 0,7 anführt.

Tab. II.2-21: Eigenvalues (Varianzen) der Hauptkomponenten (PCA1 bis PCA19) und Varianzerklärung mit zunehmender Anzahl an Hauptkomponenten (grau unterlegt: erklärte Varianz durch die ersten drei Hauptkomponenten, die für die Clusteranalyse verwendet werden).

Hauptkomponente	Eigenvalue	kumulative Varianz
PCA1	11,32	0,596
PCA2	3,09	0,758
PCA3	2,16	0,872
PCA4	0,67	0,908
PCA5	0,61	0,939
PCA6	0,26	0,953
PCA7	0,22	0,965
PCA8	0,18	0,975
PCA9	0,13	0,982
PCA10	0,10	0,987
PCA11	0,09	0,992
PCA12	0,04	0,994
PCA13	0,03	0,996
PCA14	0,03	0,997
PCA15	0,02	0,998
PCA16	0,01	0,999
PCA17	0,01	0,999
PCA18	0,01	1,000
PCA19	0,00	1,000

Alle drei Methoden ergeben übereinstimmend, dass für die hier durchgeführte PCA drei Hauptkomponenten verwendet werden sollen (PCA1, PCA2 und PCA3), die zusammen 87,2 % der Gesamtvarianz erklären (Tab. II.2-21, dritte Spalte).

Im nächsten Schritt der PCA werden die sogenannten *Faktorladungen* für die drei Hauptkomponenten ermittelt. Mit diesen Ladungen können dann für jede Rasterzelle, ausgehend von den Eingangsvariablen, deren *PC-Scores* hinsichtlich der drei Hauptkomponenten berechnet werden. Die Faktorladungen bestimmen dabei, wie stark die jeweiligen Eingangsvariablen bei der Berechnung der PC-Scores gewichtet werden. Aufgrund der am stärksten ladenden Variablen können die Hauptkomponenten näher charakterisiert werden. Für die PCA1 haben verschiedene Starkniederschlags-Variablen den größten Einfluss (vgl. Tab. II.2-22). Auf PCA2 haben sowohl Niederschlags- als auch Temperatur-bezogene Variablen einen starken Einfluss, während bei PCA3 die Temperaturvariablen die größte Rolle spielen.

Tab. II.2-22: Faktorenladungen der drei Hauptkomponenten, die sich aus der Hauptkomponentenanalyse ergeben.

Parameter	PCA1	PCA2	PCA3
ER_MJ26P64	0,24	-0,27	0,16
ER_MJ40P29	0,20	-0,31	0,21
ER_SD26P64	0,27	0,14	0,02
ER_SD40P29	0,22	0,16	0,10
HR_MJ19P01	0,26	-0,18	0,14
HR_MJ30P53	0,22	-0,31	0,17
HR_SD19P01	0,27	0,18	-0,03
HR_SD30P53	0,27	0,13	0,05
R_ANN	0,28	0,12	-0,06
R2_SPR	0,26	0,02	0,03
R20AUT	0,27	0,16	-0,01
R20SPR	0,24	-0,26	0,16
R50SPR	0,14	-0,26	0,24
SER_NM11P8	0,25	0,26	-0,11
SER_NM16P3	0,26	0,22	-0,07
R_WIN	0,24	0,28	-0,15
T_ANN_1	-0,11	0,31	0,50
T_AUT	-0,12	0,35	0,41
T_SPR	-0,09	0,12	0,57

Blau unterlegt:
Runoff-/Erosions-
variable

Braun unterlegt:
Drainage-Variable

Gelb unterlegt:
Variablen, die jeweils die vier
ersten Ränge der
Faktorenladungen pro
Hauptkomponente einnehmen

Als Ergebnis der PCA liegen somit für alle Rasterzellen PC-Scores für PCA1, PCA2 und PCA3 vor. Diese PC-Scores werden im nächsten Schritt als Clusterungsvariablen in einer Clusteranalyse verwendet.

II.2.4.2 Ausweisung von Klimaklustern

Auf Basis der Ergebnisse der PCA wurde anschließend eine Clusteranalyse (k-means Methode) durchgeführt und für die Flächen mit Ackerland und Sonderkultur in Deutschland 12 Klimakluster ausgewiesen. Abb. II.2-6 zeigt die Zuordnung der Raster zu den 12 Klimaklustern.

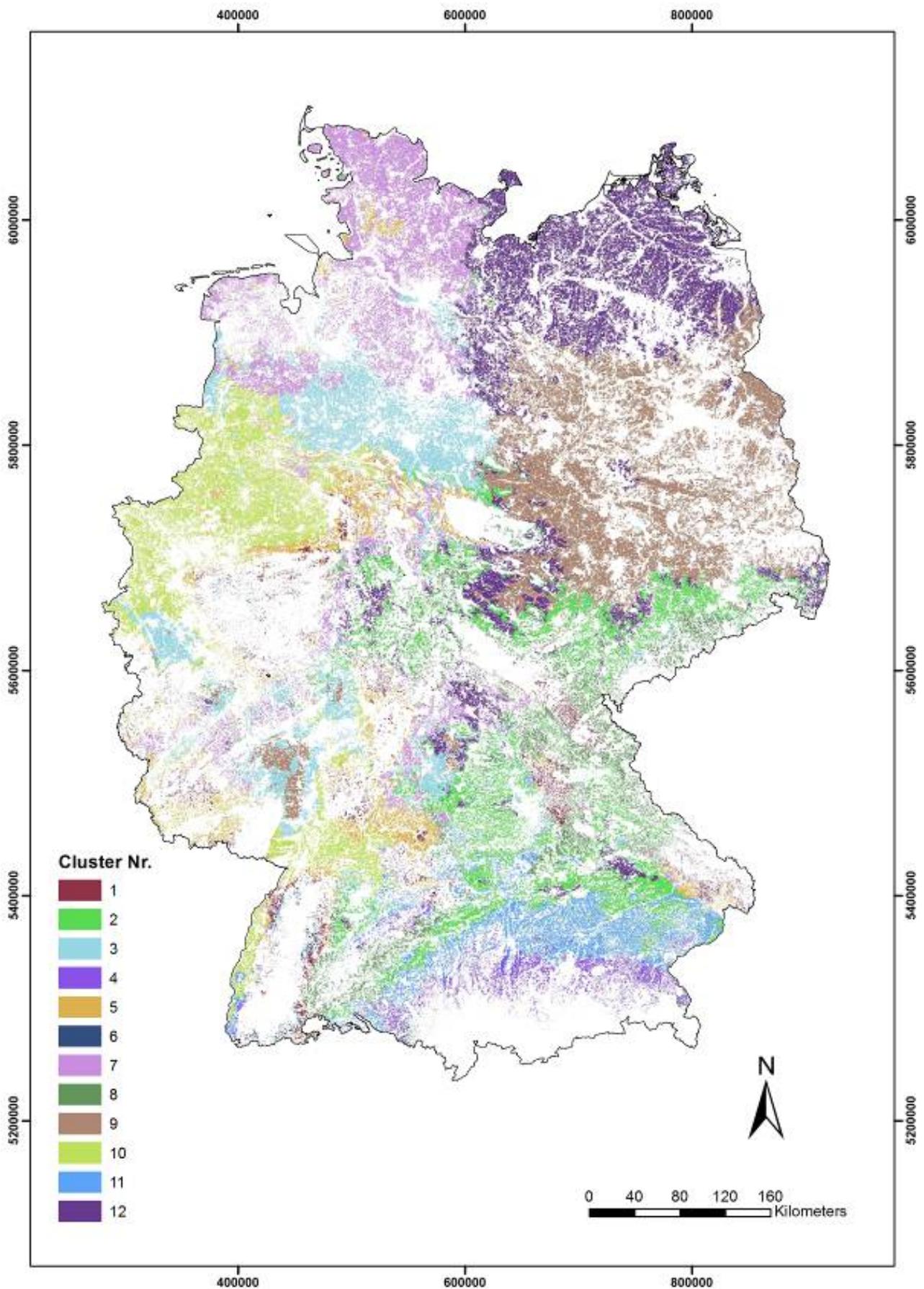


Abb. II.2-6: Verteilung der zwölf Klimacuster in Deutschland nach Hauptkomponentenanalyse (PCA) und anschließender Clusteranalyse von 19 Klimavariablen.

Die Anzahl der ausgewiesenen Cluster wurde dabei von den Bearbeitern festgelegt. Ein dazu gebräuchliches Verfahren zeigt auf, welche Clusterzahl als Minimum gewählt werden sollte, indem die Fehlerquadratsumme gegen die Klassenzahl graphisch aufgetragen wird. Ein signifikanter „Knick“ in dieser Funktion gibt dann die Mindestklassenzahl vor. In diesem Fall wurde ein Minimum von 8 Klassen ermittelt. Durch die vergleichende Darstellung der Ergebnisse mit unterschiedlichen Klassenzahlen (8, 12, 16 und 20 Klimacuster) erschien den Bearbeitern schließlich eine Klassenzahl von 12 als angemessen. Mit dieser Zahl wird ein Kompromiss zwischen höherer räumlicher Auflösung einerseits und nicht zu starker Ähnlichkeit einzelner Cluster (im Hinblick auf die Ausprägung der Klimavariablen) untereinander auf der anderen Seite angestrebt.

Für diese 12 Klassen wurden anschließend die Mittelwerte für alle 19 Eingangsparameter und die PC-Scores 1, 2 und 3 berechnet (Tab. II.2-23).

Tab. II.2-23: Mittelwerte der 19 Klimavariablen für die 12 Klimacuster in Deutschland.

Variable	Cluster No.											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
HR_MJ19.0 1	74,94	46,41	29,98	102,45	54,33	132,83	30,74	54,49	25,86	37,36	71,69	27,47
HR_MJ30.5 3	16,21	10,96	5,31	28,84	10,03	34,15	4,73	12,76	6,00	6,25	19,95	5,81
ER_MJ26.6 4	26,75	17,36	9,08	43,01	17,55	53,20	8,52	20,57	9,66	11,24	30,23	9,63
ER_MJ40.2 9	4,73	3,50	1,48	12,17	2,82	13,01	1,20	3,79	1,97	2,04	6,97	1,74
HR_SD19.0 1	101,5	35,34	30,77	75,89	72,29	158,5	49,95	56,21	15,41	51,78	51,93	19,63
HR_SD30.5 3	24,80	5,75	5,32	18,05	15,14	47,19	6,73	9,61	2,02	8,97	9,07	2,53
ER_SD26.6 4	40,61	10,07	9,32	28,51	25,68	70,05	13,01	17,87	4,10	15,42	16,19	4,90
ER_SD40.2 9	7,03	1,62	1,81	5,00	4,43	18,31	1,64	2,20	0,36	2,81	2,22	0,51
SER_NM11. 8	306,1	106,7	108,8	177,0	222,4	421,4	156,3	170,9	51,9	160,8	130,9	72,5
SER_NM16. 3	160,9	44,86	40,18	82,76	107,0	244,5	61,62	75,88	16,52	69,59	58,66	23,51
R2_SPR	836,1	714,7	675,7	922,5	779,8	965,6	708,6	784,0	576,3	748,5	814,5	631,1
R20_AUT	64,61	23,89	21,22	54,68	47,30	101,09	34,19	36,64	11,53	33,96	36,49	13,94
R20_SPR	48,26	35,69	21,84	78,35	35,20	87,35	21,50	40,63	21,22	25,30	55,18	21,76
R50_SPR	1,12	0,97	0,54	4,81	0,83	3,98	0,42	0,98	0,74	0,96	2,28	0,59
T_SPR	11,60	12,28	12,92	12,15	12,38	11,82	11,85	11,26	13,05	13,19	12,48	12,02
T_AUT	8,25	8,60	9,73	8,41	9,20	8,53	9,28	7,76	9,44	10,19	8,50	9,04
T_ANN	8,09	8,52	9,59	8,32	9,03	8,37	8,87	7,60	9,35	10,02	8,50	8,71
R_WIN	541,5	327,4	334,5	408,6	464,0	641,4	408,6	410,6	243,6	398,6	354,5	285,7
R_ANN	1042,4	731,6	692,7	1032,0	912,5	1304,7	816,0	859,9	556,7	806,7	859,8	626,5

PC1	8,53	0,31	-1,51	8,60	3,91	18,54	0,23	3,16	-3,37	0,57	3,63	-2,40
PC2	1,77	-1,26	1,04	-3,80	2,01	1,60	1,47	-1,24	-0,58	2,35	-2,55	-0,75
PC3	-1,38	-0,37	0,72	2,35	-0,12	2,16	-1,26	-2,37	0,84	1,53	1,00	-0,81
Anzahl Rasterzellen	29302	15866	12918	31028	65789	64402	16952	66094	23818	13213	72351	22072
	7	51	49	5	0		12	3	46	27	6	13

Zusätzlich werden die Werte der 19 Klimavariablen für die FOCUSsw R- und D-Szenarien ermittelt. Für jedes Szenario können dann ebenfalls die PCA-Scores berechnet werden und anschließend kann die Position jedes Szenarios in dem Raum ermittelt werden, der von den drei Hauptkomponenten aufgespannt wird. Die Euklidische Distanz eines FOCUS Szenarios zum Mittelpunkt eines Clusters charakterisiert die Repräsentativität des Faktors Klima (respektive der verwendeten Wetterzeitreihe) des betreffenden Szenarios in Bezug auf das Klimacluster (Tab. II.2-24).

Tab. II.2-24: Euklidische Distanz der FOCUS Wetterzeitreihen (R- und D-Szenarien) zu den Mittelpunkten der Klimacluster. Die vorletzte Zeile gibt die Clusternummer an, zu der das FOCUSsw-Szenario die geringste Euklidische Distanz aufweist (unterstrichene Werte).

Klimacluster Nr.	Runoff-Szenario				Drainage-Szenario					
	R1	R2	R3	R4	D1	D2	D3	D4	D5	D6
C1	7,5	36,9	16,2	21,1	10,2	10,0	10,9	9,8	12,4	21,4
C2	4,3	44,9	19,3	26,8	4,9	2,2	6,2	4,0	7,5	22,5
C3	5,5	45,2	19,1	26,6	6,6	<u>1,8</u>	3,4	3,5	5,4	20,7
C4	6,2	38,6	14,9	22,0	11,9	10,1	13,1	12,2	12,2	22,5
C5	4,4	40,3	16,4	22,8	7,5	5,5	6,3	5,7	8,1	19,9
C6	15,7	<u>28,0</u>	<u>14,4</u>	<u>15,7</u>	20,5	19,5	20,4	20,3	20,3	23,1
C7	5,7	44,1	19,4	26,2	5,0	3,4	4,4	<u>2,0</u>	7,5	21,5
C8	5,3	43,1	19,5	26,2	<u>4,5</u>	5,5	8,3	5,2	10,2	23,7
C9	6,8	47,5	20,6	28,6	6,9	2,6	<u>5,2</u>	4,7	<u>6,2</u>	<u>22,2</u>
C10	4,5	42,7	16,9	24,1	7,9	3,2	3,0	4,6	4,9	18,8
C11	<u>2,5</u>	42,3	17,0	24,6	7,5	4,9	8,7	7,3	8,6	22,1
C12	6,7	47,1	21,1	28,8	5,0	2,6	5,6	3,3	7,5	23,2
Geringste Distanz zu Cluster Nr.	11	6	6	6	8	3	10	7	10	10
Entspricht Perzentil im Cluster	88,5	100	98,2	98,7	99,2	88,8	95,9	94,2	99,8	100

Tab. II.2-24 zeigt die Euklidischen Distanzen der FOCUS-Wetterzeitreihen zu den Mittelpunkten der Klimacluster. Dasjenige Cluster, zu der das jeweilige Szenario die geringste Distanz aufweist, ist dem Szenario hinsichtlich der betrachteten Klimavariablen am ähnlichsten.

Zusätzlich wird aufgezeigt, welchem Perzentil diese Distanz innerhalb des entsprechenden Klimaclusters entspricht. Die Interpretation sei anhand des Szenario R1 verdeutlicht: Mit einer Euklidischen Distanz von 2,5 (Einheiten der PCA-Achsen) liegt der Centroid des Klimacluster Nr. 11 am nächsten zum Szenario R1. Die Distanz von 2,5 entspricht dem 88,5-Perzentil innerhalb

des Clusters, das heißt 88,5 % aller Rasterzellen dieses Clusters liegen näher zum Cluster-Centroid. Alle anderen Szenarien zeigen bezüglich des ihnen am nächsten gelegene Cluster einen noch geringeren Grad an Repräsentativität (D2 mit ähnlichem Perzentil wie R1, die Perzentile der übrigen Szenarien liegen bei 94 und darüber).

Allerdings kann die eigentliche Konservativität oder Repräsentativität der FOCUS-Szenarien nur anhand der Verteilung des Ergebnisses einer PEC-Berechnung beurteilt werden, da in der Kette Modelltreiber-PRZM/MACRO-STEPS zu viele Nicht-Linearitäten und Wechselwirkungen (z.B. mit Bodeneigenschaften) auftreten.

Für die Simulationsrechnungen zum Wirkstoffaustrag mit den Modellen MACRO und PRZM wird für jedes Klimacenter eine repräsentative Klimastation benötigt, die die Wetterzeitreihe als Input für die Simulation liefert. Die repräsentativen Klimastationen werden aus allen verfügbaren DWD-Stationsdaten ermittelt, indem für alle Stationen die zuvor beschriebenen Klimavariablen berechnet werden und daraus die Euklidische Distanz zu den Cluster-Mittelpunkten gebildet wird. Die 12 Stationen mit jeweils der geringsten Distanz wurden dann für alle weiteren Simulationen mit MACRO und PRZM (zur Generierung der Häufigkeitsverteilungen der PEC-Werte, s. Kap. I.3.2.5ff) bzw. werden im Tool GERDA für die Expositionsabschätzung eines Wirkstoffs herangezogen.

Tabelle II.2-25 zeigt die DWD-Klimastationen mit der geringsten Distanz zu den jeweiligen Cluster-Centroiden. Die Perzentile der Euklidischen Distanzen innerhalb des Clusters verdeutlichen, dass die Repräsentativität der jeweiligen DWD-Klimastationen aufgrund der größeren Nähe zum Cluster-Mittelpunkt wesentlich höher ist als das (in den PCA-Achsen) nächstgelegene FOCUS Szenario.

Tab. II.2-25: Verteilung der Euklidischen Distanz der Rasterzellen, die jeweils einem Klimacenter zugehörig sind, und der Euklidische Distanz des Cluster-Centroids zur repräsentativen DWD-Klimastation .

Cluster Nr.	10-Perzentil	Median	90-Perzentil	Mean	Maximum	Repräsentative DWD-Station (ID)	Euklidische Distanz	entspr. Perzentil
1	1,54	2,82	4,79	3,03	9,71	3271	2,35	32,7
2	0,68	1,35	2,05	1,37	4,22	853	0,19	0,3
3	0,53	1,14	1,82	1,18	4,50	2014	0,70	19,5
4	1,00	2,20	4,61	2,48	10,89	5111	1,86	37,9
5	1,01	1,87	2,97	1,97	6,64	755	0,70	3,5
6	3,26	5,83	8,51	6,06	43,60	5664	3,74	15,5
7	0,65	1,30	1,86	1,27	3,86	2167	0,51	5,2
8	0,98	1,84	2,99	1,93	6,99	3739	1,43	26,7
9	0,43	0,88	1,60	0,98	4,17	198	0,19	0,9
10	0,66	1,32	2,30	1,43	6,13	3031	0,84	18,9
11	0,73	1,59	2,58	1,66	6,38	3366	1,28	33,4
12	0,58	1,02	1,54	1,05	5,02	1757	0,53	7,5

Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Für die Bewertung des Faktors Klima wurde zunächst die räumliche Verteilung von 19 Klimavariablen in Deutschland GIS-basiert analysiert, die für die Verlagerung von Pflanzenschutzmitteln in Oberflächengewässer über die Eintragspfade Drainage, Runoff und Erosion maßgeblich sind (10 Klimavariablen relevant für Modellierung Runoff und Erosion mit PRZM, 8 Klimavariablen für Modellierung Drainage mit MACRO; außerdem Variable Jahresniederschlag). Über eine Hauptkomponentenanalyse (drei Achsen) der Klimavariablen in Verbindung mit einer anschließenden Clusteranalyse wurden zwölf Klimacuster für die Flächen mit Ackerland und Sonderkultur in Deutschland ausgewiesen und jedem Klimacuster eine Referenz-Klimastation des Deutschen Wetterdienstes (DWD) zugeordnet.

Parallel dazu wurden die Werte der 19 Klimavariablen für die FOCUSsw R- und D-Szenarien ermittelt. Für jedes Szenario kann damit dessen Position im Koordinatensystem der drei Hauptkomponenten-Achsen beschrieben werden und die Euklidische Distanz der FOCUSsw R- und D-Szenarien zu den zwölf Centroiden der Klimacuster berechnet werden. Dieses Maß charakterisiert die Protektivität der einzelnen FOCUSsw R- und D-Szenarien hinsichtlich des Faktors Klima (respektive der verwendeten Wetterzeitreihe) in Bezug auf die Klimacuster Deutschland.

- Die Euklidischen Distanzen zum Cluster-Centroid sind für die DWD-Referenzstationen in allen Fällen erheblich geringer als die entsprechenden Größen für die R- und D-Szenarien (s. Tab. II.2.24 und Tab. II.2.25). Dies verdeutlicht, dass die Wetterzeitreihen dieser Klimastationen wesentlich repräsentativer sind für die Ausprägung des Faktors Klima in Deutschland als die Wetterzeitreihen der vier R- bzw. sechs D-Szenarien im FOCUSsw-Ansatz. Die Szenarien R2, R3 und R4 zeigen ihre geringste Euklidische Distanz zum Clustercentroid von Cluster Nr. 6, welches sich durch eine besonders hohe Anzahl an Starkniederschlagsereignissen auszeichnet. Die kleinste Euklidische Distanz von R1 tritt bezüglich Cluster Nr. 11 auf, das eine relativ hohe Anzahl an Starkniederschlägen in der Frühjahrsperiode zeigt. Die Szenarien D3, D5 und D6 sind dem Klimacuster Nr. 10 am nächsten gelegen, das sich durch besonders hohe Temperaturmittelwerte auszeichnet (T_SPR, T_AUT und T_ANN). Die kleinste Euklidische Distanz zum Szenario D1 zeigt Cluster Nr. 8, zum Szenario D2 Cluster Nr. 3 und zu Szenario D4 Klimacuster Nr. 7. Cluster 3, 7 und 8 weisen im Vergleich zu den anderen Klimacustern keine besonderen, auffälligen Ausprägungen der untersuchten Klimavariablen auf.
- Die Repräsentativität eines Szenarios sagt jedoch zunächst nichts aus über dessen Konservativität (worst case-ness), d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass die bewertungsrelevante Zielgröße (ein PEC-Wert) über- oder unterschritten wird.
- Von den 8 Klimavariablen, die besonders sensitiv für den Eintragspfad Drainage sind, können die D-Szenarien nur hinsichtlich von zwei temperaturbezogenen Variablen in Bezug auf ihre Konservativität eindeutig eingeordnet werden. D1 und D4 stellen hierbei einen worst case dar im Vergleich zur deutschlandweiten Verteilung, D3, D5 und D6 entsprechen einer best-case Situation und D2 lässt sich nicht eindeutig zuordnen. Bezüglich der niederschlagsbezogenen Variablen, die besonders sensitiv für den Eintragspfad Drainage sind, lässt sich keines der D-Szenarien eindeutig, d.h. durchgängig für alle Variablen, als worst case oder best case einordnen. Dies gilt sowohl für die Kurz- als auch die Langperiode der jeweiligen Szenarien.
- Hinsichtlich der 10 Klimavariablen für Runoff und Erosion zeigen die FOCUSsw Szenarien R2, R3 und R4 fast durchgehend für alle Klimavariablen einen hohen Grad an Konservativität.

tät in Bezug auf die Gesamtverteilung in Deutschland. Das R4 Bodenszenario ist jedoch in den ackerbaulich relevanten Flächen in Deutschland nicht vertreten (siehe Kap. I.2.3.1).

II.3 Flächenanalyse Deutschland für den Faktor Gewässer und Einzugsgebiet

Zur Charakterisierung der Gewässerlandschaft in Deutschland im Hinblick auf die Eintrags- und Transportsituation von Pflanzenschutzmitteln aus ackerbaulicher Nutzung wurde eine Reihe von Parametern bzw. Eigenschaften der Einzugsgebiete und Gewässerstrukturen analysiert. Das weiterführende Ziel besteht darin, die Grundlage für repräsentative Gewässerszenarien zu erarbeiten, die später in einer Stufe 5 des GERDA Tools zur Parametrisierung der PEC-Berechnung herangezogen werden können. Für die Parametrisierung dieser generischen Einzugsgebiete ist die Kenntnis der Werteverteilungen der relevanten Parameter in den Gewässerlandschaften in Deutschland unabdingbar.

Die Analysen wurden auf Einzugsgebietsebene durchgeführt. Die Einzugsgebietsabgrenzungen wurden zu Beginn in mehreren Zwischenschritten aus dem Digitalen Höhenmodell (Auflösung 10 x 10 m) abgeleitet. Die Ergebnisse liefern Erkenntnisse zu realen Eintragungssituationen von PSM in Oberflächengewässer aus der ackerbaulichen Landnutzung. Zudem kann das Verdünnungsverhalten bzw. Transportweg nach dem Eintrag für generische Einzugsgebiete modelliert werden.

II.3.1 Verwendete Inputdaten

Die folgenden Geodaten wurden für die Analyse der Einzugsgebiete herangezogen.

- DGM 10 (Rasterdatensatz mit Auflösung 10 x 10 m; BKG, 2012)
- Fließrichtung (Rasterdatensatz mit Auflösung 10 x 10 m; berechnet aus DGM 10)
- Fließakkumulation (Rasterdatensatz mit Auflösung 10 x 10 m; berechnet aus Fließrichtung)
- Stream-Raster mit unterschiedlichen „Schwellenwerten“ (Rasterdatensätze mit Auflösung 10 x 10 m berechnet aus Fließakkumulation, mit unterschiedlicher Anzahl beitragender Zellen: Schwellenwert 1000, 50000 und 100000)
- Einzugsgebietsabgrenzungen (Vektordatensätze; basierend auf Stream-Raster mit Schwellenwert 50000 und 100000 beitragende Zellen)
- Abflussbahnen (Vektordatensätze hervorgegangen aus Stream-Raster, mit unterschiedlichen Schwellenwerten: 1000, 50000 und 100000 Zellen)
- Hangneigung in Grad (Rasterdatensatz mit Auflösung 10 x 10 m; berechnet aus DGM 10)
- Downstream length (Rasterdatensatz mit Auflösung 10 x 10 m; berechnet aus DGM 10)
- Mittlerer Jahresniederschlag (Rasterdatensatz mit Auflösung 1 x 1 km; berechnet aus täglich aufgelösten REGNIE-Daten, Zeitraum 1980 -2009; DWD 2012)
- Vieljährig gemittelte (1961 – 1990) jährliche Abflusshöhe (Rasterdatensatz mit Auflösung 1 x 1 km; BAFG, 2013)
- Vieljährig (1961 – 1990) mittlere kleinste 10-Tagesmittelwerte der Abflusspende (Rasterdatensatz mit Auflösung 1 x 1 km; BAFG, 2013)
- ATKIS-Gewässernetz (Vektordatensatz aus Basis DLM; BKG, 2012)
- ATKIS-Ackerfläche (Vektordatensatz aus Basis DLM; BKG, 2012)
- Klimacenter Deutschland (Vektordatensatz der 12 Klimacenter, s. Kap. II.2.4.2)
- Flächenanteile der Boden/Klimakombinationen an der Bodenform (s. Kap. II.1.4).

II.3.2 Methodik

Zunächst wurden als Grundlage der Analysen die Einzugsgebietsabgrenzungen berechnet (Einzelheiten s. Anhang A8). Um die Sensitivität der Parameter auf unterschiedliche EZG-Größen hin zu untersuchen wurden zwei verschiedene Abgrenzungen erzeugt. Für eine EZG-Abgrenzung wurde für die zugrunde liegende Erzeugung der Streamraster bzw. Abflussbahnen der Schwellenwert 50000 beitragende Zellen verwendet, für eine zweite wurde der Schwellenwert auf 100000 beitragende Zellen gesetzt. D.h. alle Rasterzellen mit einem Fließakkumulationswert von ≥ 50000 bzw. ≥ 100000 werden dabei als Stream/Abflussbahn definiert. Als Ergebnis wurden 38.743 Einzugsgebiete (mit Akkumulationswert ≥ 50000) bzw. 19.660 Einzugsgebiete (mit Akkumulationswert ≥ 100000) ausgegrenzt.

Für die anschließenden Analysen wurden nur die Einzugsgebiete herangezogen, die nach ATKIS-Vektordaten ein Gewässer enthalten (linien- und polygonhafte Fließgewässer und Gräben). Folgende Eigenschaften/Parameter wurden dann im weiteren Verlauf für alle Einzugsgebiete analysiert:

- Flächengröße des EZG
- Anteil Ackerfläche insgesamt im EZG
- Anteil Ackerfläche „nicht angrenzend an den Gewässerlauf“
- Gewässernetzdichte
- Formfaktor (Längserstreckung/Quererstreckung)
- Mittlere Distanz zum Outlet
- Fließstrecke Hauptgerinne bzw. maximale Fließstrecke
- Mittleres Sohlgefälle
- Mittlerer Jahresniederschlag
- Mittlere Abflusshöhe
- Mittlere Niedrigwasserabflussspende
- Gesamtfläche des Einzugsgebietes oberhalb des Ausflusses
- Flächenanteile der Boden-Klima-Kombinationen innerhalb der EZG

In den nachfolgenden Passagen wird kurz beschrieben, wie die einzelnen Parameter ermittelt wurden. Neben der Ableitung der EZG-Abgrenzungen wird auch die Methodik zur Ermittlung der mittleren Distanz zum Outlet im Anhang näher erläutert (vgl. Anhang A8).

Flächengröße der EZG

Die Flächengröße konnte nach der Erzeugung der EZG direkt aus der Attributtabelle entnommen werden.

Anteil Ackerfläche

Zur Bestimmung des Ackerflächenanteils im Einzugsgebiet wurden zunächst die ATKIS-Ackerflächen mit den Einzugsgebieten verschnitten. Anschließend konnte die Flächengröße der verbleibenden Fläche in Bezug zur Gesamtfläche des EZG gesetzt werden, woraus sich der Anteil Ackerfläche in Prozent ergab.

Anteil Ackerfläche „nicht angrenzend“

Unter „nicht angrenzenden“ Ackerflächen werden Ackerflächen verstanden, die keine Grenzlinie besitzen, die direkt an ein Gewässer angrenzt. Diese Ackerflächen wurden aus den ATKIS-Datensatz selektiert. Dann wurde nach ihrer Verschneidung mit den EZG das Flächenverhältnis gebildet.

Gewässernetzdichte

Für die Ermittlung der Gewässernetzdichte wurden die ATKIS-Gewässer mit den EZG verschnitten und die Gesamtlänge pro EZG in Verhältnis zur Fläche des entsprechenden EZG gesetzt (Einheit: km/km²). Dabei wurden nur linienhafte Fließgewässer berücksichtigt, da die polygonhaften Fließgewässer (Flüsse ab einer Breite von 12 m) nach Umwandlung in Linienobjekte doppelt in die Berechnung einfließen würden (zwei Uferlinien). Somit wird die Gewässernetzdichte in EZG mit polygonhaften Fließgewässern unterschätzt. Für solche Gewässer sind Einträge von PSM über Runoff/Erosion jedoch nicht relevant, da das große Wasservolumen zu einer starken Verdünnung führt.

Formfaktor (Längs-/Quererstreckung)

Zur Bestimmung des Formfaktors „Länge/Breite“ wurde in ArcGIS die Funktion „Minimum Bounding Geometry“ angewandt. Mit der darin enthaltenen Option „Rectangle by width“ wird um die EZG Abgrenzungen jeweils ein Rechteck mit der geringstmöglichen Breite erzeugt. Die Angaben der Seitenlänge dieser Rechtecke wurden in die Attributtabelle übernommen und daraus das „Länge/Breite“-Verhältnis berechnet.

Mittlere Distanz zum Outlet

Für diesen Analyseschritt wurde zunächst das Raster „downstream-length“ aus dem DGM 10 flächendeckend berechnet. Diese Größe gibt die Distanz entlang der Abflussbahn bis hin zu einer Senke oder dem Rand des Höhenmodellrasters an.

Zur Identifizierung des Outlets der Einzugsgebiete wurden die Abflussbahnen mit den EZG-Rastern verschnitten (output type „point“). Für die Rasterzellen mit Abflussbahn erfolgte eine Abfrage der „downstream-length“; der Einzelpunkt mit dem geringsten Wert ist schließlich der Outlet.

Anschließend wurde das Abflussbahnnetz mit Schwellwert 1000 (sehr fein aufgelöst) in Punkte im Abstand von 100 m umgewandelt. Diese Punkte wurden mit einem 100 m Puffer um ATKIS-Gewässer ausgeschnitten. Dadurch sollte gewährleistet werden, dass die Abflussbahnen nur im Bereich von tatsächlich vorhandenen Gewässern für die weitere Analyse berücksichtigt werden. Für die verbleibenden Punkte wurde dann die „downstreamlength“ bestimmt. An jeden Punkt wurde dann die „downstreamlength“ des outlets in der Attributtabelle angefügt. Dadurch konnte jeweils die Differenz aus der „downstreamlength“ des Punktes und des Outlets gebildet werden. Anschließend wurden die Punkte nach der EZG-ID „dissolved“. Dabei wurde die „Differenz-mean“, „Differenz-min“ und „Differenz-max“ ermittelt. „Differenz-mean“ stellt schließlich die mittlere Distanz zum Outlet dar.

Fließstrecke Hauptgerinne

Als „Hauptgerinne“ wurde der Fließpfad mit „Differenz-max“ zum Outlet definiert (s. Erläuterung zu „Mittlere Distanz zum Outlet“).

Mittleres Sohlgefälle

Ebenso wie bei der Berechnung der mittleren Distanz zum Outlet wurden die Punkte der Abflussbahn im Abstand von 100 m verwendet. Diese Punkte wurden mit einem 100 m Puffer um die ATKIS-Gewässer ausgeschnitten, um zu gewährleisten, dass die Abflussbahnen nur im Bereich von tatsächlich vorhandenen Gewässern für die weitere Analyse berücksichtigt werden. Für alle Punkte wurde die aus dem DGM10 berechnete Hangneigung abgefragt. Für jedes EZG wurde schließlich der Mittelwert aus allen Punkt-Einzelwerten gebildet und als „mittleres Sohlgefälle“ definiert.

Mittlerer Jahresniederschlag

Aus dem Rasterdatensatz des mittleren Jahresniederschlags (1980 – 2009) wurde mittels „zonal statistics“ der Mittelwert aller Rasterzellen gebildet, die innerhalb eines EZG liegen.

Mittlere Abflusshöhe

Aus dem Rasterdatensatz der vieljährig (1960 – 1990) gemittelten Abflusshöhe wurde mittels „zonal statistics“ der Mittelwert aller Rasterzellen gebildet, die innerhalb eines EZG liegen.

Mittlere Niedrigwasserabflussspende

Aus dem Rasterdatensatz der vieljährigen (1961 – 1990) mittleren kleinsten 10 Tagesmittelwerte der Abflussspende wurde mittels „zonal statistics“ der Mittelwert aller Rasterzelle gebildet, die innerhalb eines EZG liegen.

Gesamtfläche des EZG oberhalb des Ausflusses

Für die EZG wurde eine zonale Statistik mit dem „Flow-accumulation Raster“ durchgeführt. Über den maximalen Wert der Flow-accumulation pro EZG erhält man die gesamte beitragende Fläche oberhalb des Ausflusses (eine Rasterzelle entspricht 100m²; die Anzahl der Rasterzellen dividiert durch 10000 ergibt somit die Fläche in km²).

Flächenanteile der Boden-/Klima-Kombinationen innerhalb der EZG

Die EZG-Abgrenzungen wurden mit der Karte der Boden-Klima-Kombinationen verschnitten. Die Flächenanteile der FST an den Boden-Klima-Kombinationen sind bekannt. Mit „inner join“ wurden diese mit den Boden-Klima-Kombinationen verknüpft und aus der Fläche der EZG-Klima-Kombination wurden die absoluten Flächengrößen der Boden-Klima-Kombinationen innerhalb jedes EZG berechnet.

II.3.3 Ergebnisse Analyse Einzugsgebiete

Bei der Analyse der Einzugsgebiete mit dem „Schwellenwert 50000 beitragende Zellen“ (nachfolgend EZG_5km²) wurden rund 38700 Einzugsgebiete erzeugt, die ATKIS-Gewässer enthalten. Bei der Analyse der Einzugsgebiete mit dem „Schwellenwert 100000 beitragende Zellen“ (nachfolgend: EZG_10km²) wurden rund 19700 Einzugsgebiete generiert. Einzugsgebiete im Randbereich des Bundesgebietes mit Flächenanteilen außerhalb wurden nicht mit einbezogen. Tabelle II.3-1 zeigt die Übersicht der ausgewerteten Parameter/Eigenschaften für die EZG_5km², Tabelle II.3-2 die Ergebnisse für die EZG_10km². Dargestellt sind jeweils das 25., 50., 75. und 90. Perzentil, der Mittelwert und die Standardabweichung.

Tab. II.3-1: Ergebnisübersicht der EZG-Analyse mit EZG-Abgrenzungen mit „Schwellwert 50000“ (EZG_5km², n=38743).

Parameter	25. Perz.	50. Perz.	75. Perz.	90. Perz.	MW	SD	Anzahl „Null“ ^a
EZG-Fläche [ha]	433,3	724,5	1174,7	1782,8	883,0	718,6	0
Gewässernetzdichte [km/km ²]	0,8	1,27	1,87	2,77	1,56	1,5	954
Länge/Breite-Verhältnis	1,47	1,79	2,29	3	2,23	5,1	0
Fließstrecke Hauptgerinne [m]	3188	5076	7298	10070	5595	3636,5	1116
mittlere Distanz zum Outlet [m]	1740	2764	4006	5582	3087	2049,8	1116
mittleres Sohlgefälle [°]	0,36	1,09	2,61	4,48	1,84	2,1	1055
mittlerer Jahresniederschlag [mm]	641,7	771,3	872,3	1041,4	796,5	227,0	2737
mittlere Abflusshöhe [mm/a]	159,8	275,7	392,1	566,3	315,8	244,0	2816
Abflussspende mittl10Tmw [l/(s*km ²)]	2,3	2,8	3,7	5	3,3	1,7	2784
Ackerflächenanteil [%]	12,0	33,7	55,2	72,2	35,4	26,0	0
Ackerflächenanteil nicht angrenzend [%]	5,4	18	32,7	46,4	21,1	18,0	0
EZG-Fläche „oberhalb“ [km ²]	0,0 ^b	0,0 ^b	64,25	392,11	n,b	n,b	0

^a) EZG ohne eine Wert für den betreffenden Parameter)

^b) Mehr als 50 % der ausgegrenzten Einzugsgebiete sind endständig (ohne oberliegendes Einzugsgebiet)

Die EZG_5km² sind im Mittel etwa 8,8 km² groß, die EZG_10km² im Mittel 17,4 km². Die Flächengröße variiert jedoch relativ stark (Standardabweichung: 7,2 km² bzw. 14,1 km²). EZG mit einer Größe von ≤1 ha wurden von der Analyse ausgeschlossen, da in diesem Größenbereich von einer fehlerhaften Berechnung der EZG-Abgrenzung ausgegangen werden kann. Auch alle weiteren untersuchten Parameter zeigen eine relativ hohe Streuung der Ergebnisse.

Insgesamt zeigt sich, dass die Eigenschaften, die nicht von der EZG-Flächengröße abhängig sind, bei beiden EZG-Abgrenzungen sehr ähnlich verteilt sind. Dies betrifft namentlich die Parameter Gewässernetzdichte, Länge/Breite-Verhältnis, mittleres Sohlgefälle, mittlerer Jahresniederschlag, mittlere Abflusshöhe/-spende, Ackerflächenanteil (gesamt und „nicht angrenzend“) sowie die EZG-Fläche „oberhalb“ gesamt.

Der mittlere Jahresniederschlag liegt für beide Einzugsgebietsabgrenzungen mit 797 mm bzw. 791 mm sehr dicht am bundesweiten Mittelwert von 809 mm, der aus dem flächendeckenden Niederschlagsraster ermittelt wurde. Der mittlere Ackerflächenanteil der EZG liegt bei rund einem Drittel (jeweils 35,4 %), was auch dem Anteil der Ackerfläche an der gesamten Bundesfläche nach Agrarstatistik entspricht.

Tab. II.3-2: Ergebnisübersicht der EZG-Analyse mit EZG-Abgrenzungen mit „Schwellwert 100000“ (EZG_10km², n=19660).

Parameter	25. Perz.	50. Perz.	75. Perz.	90. Perz.	MW	SD	Anzahl „Null“ ^a
EZG Fläche [ha]	809,7	1427,1	2321,8	3541,3	1735,5	1415,8	0
Gewässernetzdichte [km/km ²]	0,8	1,23	1,78	2,54	1,47	1,4	417
Länge/Breite-Verhältnis	1,46	1,79	2,28	2,98	2,21	5,3	0
Fließstrecke Hauptgerinne [m]	5092	7842	11049	15081	8518	5226,9	468
mittlere Distanz zum Outlet [m]	2767	4257	6049	8295	4672	2930,0	468
mittleres Sohlgefälle [°]	0,4	1,11	2,62	4,43	1,84	2,1	434
mittlerer Jahresniederschlag [mm]	639,2	767,1	867,6	1027,7	791,2	221,2	980
mittlere Abflusshöhe [mm/a]	157,8	270,7	383,4	548,8	309,1	235,0	1190
Abflussspende mittl10Tmw [l/(s*km ²)]	2,3	2,8	3,7	4,9	3,3	1,7	1012
Ackerflächenanteil [%]	14,0	34,3	53,9	69,8	35,4	24,6	0
Ackerflächenanteil nicht angrenzend [%]	7,1	19,2	32,2	44,8	21,4	16,9	0
EZG-Fläche „oberhalb“ [km ²]	0,0 ^b	0,0 ^b	13,26	83,46	n,b,	n,b,	0

^{a)} EZG ohne eine Wert für den betreffenden Parameter)

^{b)} Mehr als 50 % der ausgegrenzten Einzugsgebiete sind endständig (ohne oberliegendes Einzugsgebiet)

II.3.4 Breite/Tiefe-Verhältnis

Für die FOCUS_{sw} Gewässertypen „ditch“ und „stream“ wird ein Verhältnis von Gewässerbreite zu Gewässertiefe (B/T-Verhältnis) von 3.3:1 angenommen (s. Kap. II.5.1 und Tab. II.5-1). Für einen Vergleich dieser Annahme mit realen Werten wurde im Projekt GeoRisk (Kubiak et al., 2014) Literaturangaben zum B/T-Verhältnis für natürliche bzw. naturnahe kleinere Gewässer aus unterschiedlichen Regionen in Deutschland und angrenzenden Ländern recherchiert (Tab. II.3-3). Die Ergebnisse zeigen insgesamt eine große Spannweite für das B/T-Verhältnis; Angaben zur Abflusssituation (Niedrigwasser, MW, Hochwasser) zum Zeitpunkt der Aufnahme liegen nur in wenigen Fällen vor. Zusammenfassend ist festzuhalten, dass der Median des B/T-Verhältnisses für naturnahe Gewässer in der Größenordnung von 10 : 1 anzusetzen ist, das 90-Perzentil liegt über 15:1.

Tiktak et al. (2012) dimensionieren, nach GIS-Analyse allerGewässerstrecken in den Niederlanden (Massop et al., 2006), als Referenzgewässer für das niederländische Expositionszenario einen Graben (Trapez-Profil) mit einer Wasserspiegelbreite von 2,62 m und einer Wassertiefe von 0,23 m, das heißt mit einem Breite-/Tiefe-Verhältnis von 11,4.

Tab. II.3-3: Breite/Tiefe-Verhältnis in verschiedenen Gewässern nach Freilandhebungen (zit. n. Kubiak et al., 2014, Originalquellen s. dort; gekürzt).

Wasserkörper, Region (Quelle)	n	Breite/Tiefe-Verhältnis	
		Median	90-Perzentil
Gräben im Obstbaugebiet „Altes Land“ (Schäfers et al. 2006)	40	6,2	15,2
Flüsse Region Braunschweig (Pantel 2003)	40	8,7	26,5
Flüsse Region Braunschweig (Wogram in press, after Wogram 1996)	15	9,8	< 32,5
Flüsse in der Südpfalz (Schulz et al. 2007)	39	9,0	23,0
Gräben in Brandenburg (Oderbruch) (Golla et al. 2011)	39	5,6	7,6
Flüsse im Bodensee-Gebiet (Golla et al. 2011)	42	13,3	30,0
Flüsse in Sachsen, Obstbaugebiete (Golla et al. 2011)	13	9,7	14,0
Flüsse in Mecklenburg-Vorpommer, Obstbaugebiete (Golla et al. 2011)	8	13,7	27,0
Flüsse in Brandenburg. Obstbaugebiete (Golla et al. 2011)	13	11,7	33,3
Flüsse in Thüringen und Sachsen-Anhalt, Obstbaugebiete (Golla et al. 2011)	31	13,7	22,0
Fließgewässer Acherbauregion Braunschweiger Börde (Bereswill und Schulz, 2011)	9	10,0	20,3
Fließgewässer Weinbauregion Pfalz (Bereswill und Schulz 2011)	10	7,3	17,0
Flussabschnitte Frankreich (Loire, Rhone, Garonne) Mittel $Q=3,31$ (m^2/s), B/T für Q50 (Lamouroux and Capra 2002)	34	31,2	Max, 51
Kühbach (Bayern), Station Danzersäge, B/T=f(Q) für n=7 Abflussmessungen; $Q= 1 - 5$ m^2/s (Lamouroux et al. 1992)	1	11,1	B/T = $10,7 \cdot Q^{0,05}$
16 Flüsse in Frankreich; Q50(actual) = 0,90 m^2/s (Lamouroux et al. 1995)	16	26,1	Max, 39

II.4 Vergleich und Bewertung der in FOCUSsw und EXPOSIT berücksichtigten Prozesse

II.4.1 Übersicht der berücksichtigten Prozesse

Im Folgenden werden die Prozessbeschreibungen der PSM-Transport- und Umwandlungsprozesse, die in Bezug auf die Exposition von Oberflächengewässern relevant sind, zwischen FOCUSsw Step 3 und EXPOSIT 3.0 beta verglichen. Ferner werden die Prozessbeschreibungen in FOCUSsw und EXPOSIT jeweils dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik gegenübergestellt. Ausserdem werden die verschiedenen im Gewässer ablaufenden Prozesse (z.B. Diffusion, hydrodynamische Dispersion, Photolyse, Hydrolyse, Metabolitenbildung etc.) auf ihre Relevanz für die Konzentrationen im Gewässer überprüft. Dies dient auch dazu, die Entscheidungen über die Implementierung von Prozessen in das Tool GERDA zu begründen.

Generell sind drei Arten von Prozessbeschreibungen zu unterscheiden, zwischen denen die Übergänge allerdings fließend sind:

- physikalisch basiert (manchmal auch „mechanistisch“ genannt)
- empirisch
- konzeptionell.

Die meisten Pesticide-Fate-Modelle enthalten Prozessbeschreibungen mehr als eines Typs, so dass es rein „physikalisch basierte“ Pesticide-Fate-Modelle in der Praxis eigentlich nicht gibt.

Physikalisch basierte Prozessbeschreibungen basieren auf physikalischen Gesetzen oder Vereinfachungen davon. Beispiele sind die Richards-Gleichung oder die kinematische Welle, die in MACRO für den Wasserfluss in den Makroporen verwendet wird (beides Vereinfachungen, die nur unter bestimmten Randbedingungen gelten).

Empirische Prozessbeschreibungen beruhen auf experimentell gewonnenen Daten. Beispiele sind die Universal Soil Loss Equation USLE (Wischmeier und Smith, 1978) und die Modified Universal Soil Loss Equation MUSLE (Williams, 1975) oder auch die Ganzelmeier/Rautmann-Driftfunktionen (Rautmann et al., 2001), die auf Messwerten basierende Regressionsgleichungen darstellen.

Konzeptionelle Prozessbeschreibungen beruhen weder auf physikalischen Gesetzen noch auf gemessenen Daten, sondern sind „made up“, d.h. ausgedacht (was nicht automatisch negativ sein muss). Gelegentlich werden konzeptionelle Prozessbeschreibungen, um ihre Akzeptanz zu erhöhen, fälschlich als „empirisch“ deklariert, obwohl keine Messwerte dahinter stehen. Beispiele für konzeptionelle Prozessbeschreibungen sind der Tipping-Bucket-Ansatz für die Versickerung in PRZM und PELMO oder die von den meisten Pesticide-Fate-Modellen benutzte „root uptake factor“ für die Aufnahme von PSM über die Wurzeln.

Das Tool EXPOSIT ist eher als „Regelwerk“ denn als „Modell“ zu bezeichnen, weil eigentlich kein Prozess (abgesehen von der PSM-Dissipation in den ersten drei Tagen nach Applikation) tatsächlich simuliert wird, sondern ausschließlich mit fixen Regeln und Faktoren gearbeitet wird. Mit anderen Worten, es wird nicht simuliert, sondern „gesetzt“.

Tabelle II.4-1 gibt zunächst eine Übersicht, welche relevanten substanzspezifischen Prozesse in EXPOSIT und FOCUSsw Step 3 berücksichtigt werden. Die verwendeten Prozessbeschreibungen werden in den nächsten Abschnitten detailliert dargestellt.

Tab. II.4-1: Übersicht über die Prozesse, die für die Exposition von Oberflächengewässern relevant sind, und deren Berücksichtigung in EXPOSIT und FOCUSsw Step 3.

Prozess	Umwelt-kompartiment	berücksichtigt in EXPOSIT?	berücksichtigt in FOCUSsw?	Anmerkung
Sorption im Boden	Boden	ja, implizit über Klassen	ja, explizit	
Abbau im Boden	Boden	Ja	ja	
PSM-Austrag über Oberflächenabfluss	Boden	Ja	ja	
PSM-Austrag über Erosion	Boden	Ja	ja	
PSM-Austrag über Zwischenabfluss	Boden	Nein	nein	
PSM-Austrag über Drainage	Boden	Ja	ja	
Bildung von Metaboliten im Boden	Boden	Ja	ja	
Verflüchtigung von der Bodenoberfläche	Boden	Nein	in PRZM ja, in MACRO nein	
Aufnahme über die Wurzeln	Boden/Pflanze	Nein	ja	
Foliar washoff (Blattabwaschung)	Pflanze	Nein	ja	
Verflüchtigung von der Pflanzenoberfläche	Pflanze	Nein	nein (in PRZM vorhanden, aber in FOCUS nicht genutzt)	
Foliar dissipation	Pflanze	Nein	ja	
Sorption ans Gewässersediment	Gewässer	ja, implizit	ja	
Sorption an Makrophyten	Gewässer	Nein	nein (in TOXSWA vorhanden, aber in FOCUS nicht genutzt)	
Sorption an suspendierte Partikel	Gewässer	Nein	ja	
Abbau im Gewässer (Wasserschicht und Sediment)	Gewässer	Nein	ja	
Stoffaustausch zwischen Wasserschicht und Sediment	Gewässer	Nein	ja	
Bildung von Metaboliten im Gewässer	Gewässer	Nein	nein	Neue Vers. von TOXSWA soll auch Bildung von Metaboliten im Gewässer simulieren
PSM-Eintrag ins Grundwasser über Uferfiltration	Gewässer/Grundwasser	Ja	nein	

PSM-Einträge in Gewässer über Spraydrift	Gewässer	nein; Einträge über Spraydrift werden getrennt von Runoff und Drainage-Einträgen bewertet, da auch unterschiedliches Risikomanagement	ja	Spraydrift ist nicht Gegenstand dieses Projekts und wird hier nur der Vollständigkeit halber aufgeführt.
atmosphärische Deposition auf der Gewässeroberfläche aufgrund Verflüchtigung von der behandelten Fläche (Nahtransport)	Gewässer	Nein	nein	nicht in EXPOSIT, aber bei Bewertung der Einträge über Spraydrift berücksichtigt (EVA)
Verflüchtigung aus dem Gewässer	Gewässer	Nein	ja	
Diffusion im Gewässer	Gewässer	Nein	ja	
hydrodynamische Dispersion	Gewässer	Nein	ja	
geomorphologische Dispersion	Gewässer	Nein	nein	wird erst auf der Skala des Gewässernetzes bzw. Einzugsgebiets relevant

II.4.2 Prozessbeschreibungen - Umweltkompartiment Boden

II.4.2.1 Sorption im Boden

EXPOSIT: Sorption im Boden wird nicht explizit simuliert; sie wird allerdings an folgenden Stellen implizit berücksichtigt:

- Einstufung des jeweiligen Wirkstoffs in eine von 4 Klassen des „Grundwassergefährdungspotentials“; hierzu werden der Koc, die Wasserlöslichkeit und die DT50 benutzt.
- Das „Grundwassergefährdungspotential“ wird wiederum zur Berechnung bzw. Bemessung des Drainage-Austrags herangezogen (Gruppe I bekommt niedrigere Austräge zugewiesen als Gruppen II, III und IV).
- Die Klassen des „Grundwassergefährdungspotential“ werden ebenfalls dazu genutzt, eine bestimmte Reduktionseffizienz der Infiltrationsstrecke zuzuweisen.
- Einstufung des jeweiligen Wirkstoffs in eine von 12 Koc-Klassen zur Ermittlung des anzusetzenden prozentualen PSM-Runoff- und Erosionsaustrags

FOCUSsw Step 3: In beiden Modellen MACRO und PRZM wird nicht-lineare Sorption nach Freundlich simuliert. In den bis vor kurzem in FOCUSsw verwendeten Versionen von MACRO (4.3) und PRZM (3.21 beta) ist nur Gleichgewichtssorption möglich. Neuere Versionen von MACRO (ab 5.0) können auch kinetische Sorption nach dem Streck-Altfielder-Ansatz (Altfielder et al., 2000) simulieren. Die seit Juni 2012 in FOCUSsw eingesetzte PRZM-Version winprzm 4.51 ist ebenfalls in der Lage, kinetische Sorption zu simulieren (Mark Cheplick, persönliche Mitteilung, 11.09.2012), auch wenn in FOCUSsw von dieser Option kein Gebrauch gemacht wird.

Während MACRO und PRZM selbst nicht auf die Verwendung des Koc-Konzepts beschränkt sind (der Kf wird im Input-File für jedes numerical layer bzw. jeden Horizont direkt eingegeben), erlaubt die SWASH-Oberfläche von FOCUSsw derzeit nur die Eingabe von Koc bzw. Kom.

Der heutige Stand der Technik von Pesticide-Fate-Modellen, zumindest MACRO und PRZM, erlaubt es also, sowohl kinetische Sorption als auch Sorption, die nicht oder nicht ausschließlich vom OC-Gehalt des Bodens abhängt, zu simulieren. Ein neues Tool für die Zulassung sollte daher folgende Funktionalitäten beinhalten:

- Eingabe und Verarbeitung von Inputparametern für kinetische Sorption
- Eingabe und Verarbeitung von beliebigen Regressionsgleichungen (z.B. basierend auf pH, pKa, Tongehalt etc.) zur Berechnung des Freundlich-Koeffizienten Kf und des Freundlich-Exponenten n.

Die Freundlich-Isotherme ist empirischer Natur. Für sehr kleine und sehr große PSM-Konzentrationen wirft sie mathematische (Steigung gegen unendlich) bzw. physikalische Widersprüche (keine Sättigung) auf. Da sie jedoch im umweltrelevanten PSM-Konzentrationsbereich i.d.R. gute Anpassungen (an gemessene Werte) liefert, spricht nichts dagegen, die Freundlich-Isotherme auch weiterhin in Pesticide-Fate-Modellen zu verwenden.

II.4.2.2 Abbau im Boden

EXPOSIT: Der Inputparameter DT50 wird folgendermaßen verwendet:

- Abbau im Boden (first order) zwischen mehreren Applikationsereignissen und für den Zeitraum zwischen Applikation und Austragsereignis (immer 3 Tage nach der letzten Applikation).
- Einstufung des jeweiligen Wirkstoffs in eine von 4 Klassen des „Grundwassergefährdungspotentials“; hierzu werden der Koc, die Wasserlöslichkeit und die DT50 benutzt.

Als DT50 kann in EXPOSIT entweder eine Abbauhalbwertszeit unter Standardlaborbedingungen (20 °C) oder eine Feld-Dissipationshalbwertszeit angegeben werden. Es wird daher nicht ganz klar, ob die Verringerung des Vorrats im Boden zwischen Applikation und Austragsereignis den (mikrobiellen) Abbau oder die Dissipation insgesamt beinhaltet (Abbau, Leaching, Verflüchtigung, Photolyse und/oder Bildung von nichtextrahierbaren Rückständen) aus dem Oberboden darstellen soll. In EXPOSIT selbst findet keine Korrektur der aus der DT50 berechneten Abbauraten mit Bodenfeuchte oder Temperatur statt.

FOCUSsw Step 3: In MACRO und PRZM wird Abbau im Boden ebenfalls als Abbau erster Ordnung simuliert (PRZM ist außerdem in der Lage, einen Hockey-Stick-Abbau zu simulieren). Eine Standard-Laborhalbwertszeit wird in die SWASH-Oberfläche eingegeben. Die Abbauraten werden in beiden Modellen jeweils nach aktueller Temperatur (Q10-Ansatz in PRZM; mathematisch äquivalenter Ansatz in MACRO) und aktueller Bodenfeuchte (Walker-Formel) korrigiert. Die Referenzbedingungen und die Abhängigkeiten (Q10, Exponent der Walker-Formel) können in SWASH frei gewählt werden.

Der first-order Abbau ist eine stark vereinfachende Annahme, die in der Realität häufig nicht zutrifft. Statt dessen beobachtet man in der Realität oftmals einen zweiphasigen Abbau (vgl. FOCUS, 2006), wobei auf eine initiale schnelle Phase eine langsame folgt. Es gibt eine ganze

Reihe von kinetischen Modellen, die in der Lage sind, experimentell gemessenen zweiphasigen Abbau zu fitten (FOCUS, 2006):

- Hockey-stick (zweiphasiger first-order Abbau mit einem „hinge point“ (Gelenkpunkt))
- Bi-exponential (double first order in parallel DFOP)
- Bi-exponential (single first-order reversible binding SFORB)
- First Order Multi Compartment FOMC (Gustafson-Holden-Modell).

In statischen Systemen (Bodenabbau, Wasser-Sediment-System) sind alle diese Modelle problemlos einsetzbar. In einer Transport-Modellierung jedoch taucht ein logisches Problem auf, sobald die Abbaurrate eine Funktion der vergangenen Zeit ist. Während man direkt an der Bodenoberfläche den Applikationszeitpunkt als $t=0$ (Beginn der Abbaukinetik) verwenden kann, stellt sich die Frage, was man in tieferen Bodenhorizonten als $t=0$ verwenden soll. Neben der mathematischen Komplexität obiger Kinetiken stellt dieses logische Problem einen gravierenden Hinderungsgrund für die Implementierung zweiphasiger Abbaukinetiken in Transportmodelle dar.

Eine Alternative zu obigen Gleichungen, bei der die Abbaurrate nicht von der vergangenen Zeit abhängt, stellt die Michaelis-Menten-Kinetik dar. Diese geht für hohe Substratkonzentrationen asymptotisch gegen zero-order (Interpretation: begrenzte Reaktionsgeschwindigkeit des abbauenden Enzyms; makroskopische Konsequenz: begrenzte metabolische Kapazität der mikrobiellen Biomasse) und für niedrige gegen first-order. Die Michaelis-Menten-Kinetik wäre eine weitere zusätzliche Option für Pesticide-Fate-Modelle zur Simulation mikrobiellen Abbaus, ist allerdings noch nicht in die Pesticide-Fate-Modelle implementiert, die in der Zulassungspraxis eingesetzt werden.

Der in PRZM verwendete Q10-Ansatz und der äquivalente Ansatz in MACRO stellen eine mathematische Approximation der (empirisch gefundenen, aber physikalisch interpretierbaren) Arrhenius-Gleichung dar, die die Abhängigkeit der Ratenkonstante k einer chemischen Reaktion von der Temperatur und der Aktivierungsenergie beschreibt:

$$k = A * \exp(-E_A / RT) \quad (\text{Gl. II.4-1})$$

mit

k Ratenkonstante (s^{-1})

A präexponentieller Faktor

E_A Aktivierungsenergie ($J \text{ mol}^{-1}$)

R allgemeine Gaskonstante ($8,3144 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$)

T Temperatur (K)

Die Arrhenius-Gleichung gilt nur für chemische, nicht für biologische Reaktionen. Nach der Arrhenius-Gleichung steigt die Reaktionsgeschwindigkeit mit zunehmender Temperatur stetig an. Bei mikrobiellen Abbaureaktionen gilt es aber zu berücksichtigen, dass jede Art von Mikroorganismus einen bestimmten Temperaturbereich hat, in dem sie überleben und metabolisch aktiv sein kann. Der mikrobielle PSM-Abbau im Boden erfolgt überwiegend durch mesophile Organismen, die ihren Optimalbereich zwischen 20 und etwa 40 °C haben und bei höheren Temperaturen absterben. Unter sehr heißen sommerlichen Bedingungen an der Bodenoberfläche wäre also die Arrhenius-Gleichung für den PSM-Abbau nicht mehr anwendbar. Ebenso sollte sich der mikrobielle Abbau bei tiefen Temperaturen überproportional verlangsamen und am Gefrierpunkt schließlich zum Erliegen kommen. In MACRO ist tatsächlich eine solche

Korrektur eingebaut: Die Abbaurrate verringert sich unterhalb von 5 °C linear auf den Wert Null am Gefrierpunkt.

Die Walker-Formel (Walker, 1974) ist eine empirische Formel, die die Abhängigkeit der Abbaurrate vom Feuchtestatus des Bodens beschreibt.

$$F_w = \left(\frac{\theta}{\theta_{ref}} \right)^B \quad (\text{Gl. II.4.2})$$

mit

F_w Bodenfeuchte-Korrekturfaktor für die Abbaurrate

θ volumetrische Bodenfeuchte ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$)

θ_{ref} Referenzbodenfeuchte, unter der die DT50 im Labor ermittelt wurde ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$)

B empirischer Exponent (dimensionslos), meist gesetzt auf 0.7 nach Literaturanalyse von Gottesbüren (1991)

Die Walker-Formel hat mehrere Schwächen:

- Die Formel bezieht sich auf die Bodenfeuchte und nicht auf die Wasserspannung, welche die physiologisch relevante Größe ist. Die Wasserspannung ist aber schwieriger zu messen als die Bodenfeuchte und stark nichtlinear. Ausserdem ist in PRZM überhaupt keine Wasserretentionskurve enthalten, so dass man hier ohnehin die Bodenfeuchte benutzen müsste.
- Bei sehr niedriger Bodenfeuchte geht der Abbau trotzdem weiter, auch wenn die mikrobielle Aktivität zum Erliegen gekommen sein müsste.
- Bei sehr hoher Bodenfeuchte steigt die Abbaurrate in der Walker-Formel weiterhin an, obwohl der aerobe Abbau sich aufgrund von Sauerstoffmangel in Wirklichkeit verlangsamen müsste.

In der Praxis ist das theoretische Problem mit der Bodenfeuchte weniger gravierend:

- In PRZM sind keine Bodenfeuchten < Welkepunkt und > Feldkapazität möglich.
- In MACRO 4.3 steigt die Abbaurrate nicht mehr an, wenn der Grenzwassergehalt XMPOR überschritten wird, bei dem die Mikroporen gesättigt und die Makroporen leer sind.

Das Abbauverhalten von PSM bei hoher Bodenfeuchte lässt sich schlecht generalisieren, weil je nach Substanzeigenschaften auch anaerober oder hydrolytischer Abbau eine Rolle spielen könnte.

In der aktuellen Version von MACRO (5.2) ist eine modifizierte Form der Walker-Formel implementiert, die auf experimentellen Ergebnissen von Schroll et al. (2006) basiert:

$$F_w = 0 \text{ für } \theta \leq 0.5 \theta_w \quad (\text{Gl. II.4.3})$$

$$F_w = \left(\frac{\theta - 0.5\theta_w}{\theta_{100} - 0.5\theta_w} \right)^B \text{ für } 0.5 \theta_w < \theta \leq \theta_{100}$$

$$F_w = 1 \text{ für } \theta > \theta_{100}$$

wobei

θ_w Wassergehalt am permanenten Welkepunkt (pF 4.2)

θ_{100} Wassergehalt bei Feldkapazität (pF 2.0)

Diese Formel besagt, dass die maximale Abbaurrate bei Feldkapazität erreicht wird und sich bei höherer Bodenfeuchte nicht mehr ändert. Im trockenen Bereich kommt der Abbau bei einem Wassergehalt, der der Hälfte des Welkepunktwassergehalts entspricht, zum Erliegen.

Sowohl in MACRO 4.3 als auch 5.2 hängt die Abbauratenkonstante auch in den Makroporen vom Wassergehalt in den Mikroporen ab. Der Wassergehalt in den Makroporen hat keinen Einfluss auf die Abbauratenkonstante in den Makroporen.

II.4.2.3 PSM-Austrag über Oberflächenabfluss

EXPOSIT: Der PSM-Austrag mit dem Oberflächenabfluss wird (ebenso wie das Oberflächenabflussvolumen) nicht simuliert, sondern gesetzt: In Abhängigkeit von der Koc-Klasse des Wirkstoffs wird ein bestimmter relativer Austrag (in Prozent der zum Zeitpunkt des Regenereignisses vorhandenen Vorrats) zugewiesen. Dieser relative Austrag geht auf eine statistische Auswertung von 338000 PRZM-Simulationen für reale Substanzen und Anwendungen zurück (Reichenberger et al., 2007a) und wurde als 90-Perzentil des maximalen täglichen Runoff-Austrags in der Simulationsperiode für die jeweilige Koc-Klasse ermittelt. Hierbei ist zu beachten, dass sich der von Reichenberger et al. (2007a) ermittelte relative Austrag auf die Aufwandmenge bezog und nicht auf den zum Zeitpunkt des Austragsereignisses vorhandenen Vorrat (d.h. die Dissipation war im relativen Austrag bereits mit berücksichtigt). Die Art, wie der relative Austrag in EXPOSIT verwendet wird, führt also zu einer leichten Unterschätzung der Austräge, weil die Dissipation zwischen Applikation und Austragsereignis doppelt veranschlagt wird. Dies spielt jedoch nur für Substanzen mit sehr schneller Dissipation eine Rolle.

FOCUSsw Step3: Der PSM-Austrag mit dem Oberflächenabfluss wird mit dem Modell PRZM berechnet. Bis vor kurzem wurde in FOCUSsw die Version winprzm 3.21 beta verwendet; seit Juni 2012 wird die Version 4.51 benutzt. PRZM verwendet folgende konzeptionelle Formel („non-uniform extraction model“; Carsel et al., 2003), bei der die Runoffverfügbarkeit einer Verbindung mit der Tiefe abnimmt:

$$DRI_i = 0.7 \cdot \left(\frac{1}{2.0 \cdot Midtot_i + 0.9} \right)^2 \quad (\text{Gl. II.4-4})$$

mit

DRI_i runoffverfügbare Fraktion der gelösten Chemikalie im Kompartiment (Layer) i (dimensionslos)

$Midtot_i$ Tiefe (unter der Bodenoberfläche) des Mittelpunkts des Layers i (cm)

0.7 Effizienzfaktor

0.9 Tiefen-Reduktionskoeffizient.

Berechnungen werden für alle numerischen Layer i von der Bodenoberfläche bis zu einer Tiefe von 2 cm durchgeführt; die Dicke der Layer im Oberboden wird üblicherweise auf 0.1 cm gesetzt. Die runoffverfügbare Fraktion nimmt also von 70 % des gelösten Wirkstoffs im obersten Layer auf 3 % im 20. Layer ab. Unterhalb von 2 cm Tiefe ist in PRZM die Runoff-Verfügbarkeit von Chemikalien gleich Null. Der PSM-Runoff-Austrag aus Layer i ergibt sich dann als

$$J_{r,i} = DRI_i \cdot C_i \cdot Q \cdot 10 \quad (\text{Gl. II.4-5})$$

mit

$J_{r,i}$ Runoffaustrag des Wirkstoffs aus Kompartiment i ($\text{mg m}^{-2} \text{d}^{-1}$)

- C_i Konzentration des gelösten Wirkstoffs in der Wasserphase (mg L^{-1})
 Q Oberflächenabfluss (cm d^{-1})
 10 Einheiten-Korrekturfaktor.

Die Werte für den Effizienzfaktor und den Tiefen-Reduktionskoeffizienten wurden von den Modellentwicklern von PRZM mittels Sensitivitätsanalysen und Kalibrierung anhand von drei Runoff-Feldstudien für Atrazin in Georgia, Tennessee und Iowa ermittelt (Carsel et al., 2003). Auch wenn die Struktur der Formel nicht physikalisch oder experimentell begründet ist, erscheint das „non-uniform extraction model“ doch plausibel und liefert brauchbare Ergebnisse.

Oberflächenabfluss wird mit einer Modifikation des empirischen USDA Soil Conservation Service (SCS) Curve Number Ansatzes beschrieben (Haith and Loehr, 1979):

$$Q = \frac{(P + SM - 0.2S)^2}{P + SM + 0.8S} \quad \text{für } (P + SM - 0.2 S) > 0 \quad (\text{Gl. II.4-6})$$

$$Q = 0 \quad \text{für } (P + SM - 0.2 S) \leq 0$$

wobei

- Q Oberflächenabfluss (cm d^{-1})
 P Niederschlag als Regen, abzüglich Interzeption durch Kulturpflanzen (cm d^{-1})
 SM Schneeschmelze (cm d^{-1})
 S täglicher „watershed retention parameter“ (cm d^{-1}); 0.2 S wird auch als „initiale Abstraktion“ (Anfangsverlust) bezeichnet.

Der tägliche „watershed retention parameter“ (Einzugsgebiets-Retentions-Parameter) S wird ermittelt als

$$S = 2.54 \left(\frac{1000}{CN} - 10 \right) \quad (\text{Gl. II.4-7})$$

mit

- CN SCS runoff curve number ($0 < CN \leq 100$)
 2.54 Einheitenkorrekturfaktor (Umrechnung von inches in cm).

Curve Numbers sind eine Funktion von Bodentyp, Bodenart, Entwässerungseigenschaften des Bodens, Kulturpflanze und Bewirtschaftungspraxis (Carsel et al., 2003). Je höher die Curve Number, desto häufiger tritt Oberflächenabfluss auf und desto höher ist das Runoff-Volumen pro Ereignis. In PRZM werden die CN täglich als kontinuierliche Funktion des Wasserstatus in den oberen Layern (0-10 cm) des Bodens angepasst. Runoff Curve Numbers sind für die sog. „antecedent moisture condition II“ (mittlerer Bodenfeuchtestatus) für verschiedene Kulturpflanzen und „soil hydrologic groups“ im PRZM 3.12.1 Manual tabelliert (Carsel et al., 2003). Wenn die Curve Number für moisture condition II (CN II) bekannt ist, sind dadurch auch die Curve Numbers für condition I (trockener Boden; CN I) und III (feuchter Boden; CN III) bestimmt.

CN III und CN I werden in PRZM 4.51 aus CN II folgendermaßen berechnet (siehe FOCUS-PRZM 3.1.1 Change Log, PRZMSW3_1_1Changeloc.doc, erhalten von Chris Lythgo (EFSA) am 05.06.2012):

$$CN \text{ III} = 23.0 * CN \text{ II} / (10.0 + 0.13 * CN \text{ II}) \quad (\text{Gl. II.4-8})$$

$$CN\ I = 4.2 * CN\ II / (10.0 - 0.058 * CN\ II)$$

Die aktuelle CN wird dann, basierend auf dem Bodenfeuchtestatus der obersten 10 cm, zwischen CN I und CN II bzw. zwischen CN II und CN III linear interpoliert (Mark Cheplick, pers. Mitteilung, 18.04.2012). CN I und CN III selbst werden jedoch im Modell nicht erreicht. Die maximale in PRZM erreichbare Curve Number ist die bei Feldkapazität (CN_FC). Wenn die ersten 10 cm homogen sind und die gleichen Eigenschaften aufweisen (das ist in FOCUS und FOOTPRINT gegeben), vereinfacht sich die Formel zu:

$$CN_FC = CN\ II + (CN\ III - CN\ II) * (FC - WP) / (FC + WP) \quad (Gl. II.4-9)$$

mit

CN_FC Curve Number bei Feldkapazität (maximaler in PRZM erreichbarer Wert)

CN III Curve Number bei antecedent moisture condition III (wird in PRZM nicht erreicht)

CN II Curve Number bei antecedent moisture condition II (mittlere Bodenfeuchte); CN II ist Input im .inp file und hängt ab von Kultur, Boden und Entwicklungsstadium der Kultur

FC Wassergehalt bei Feldkapazität (maximaler in PRZM erreichbarer Wert)

WP Wassergehalt am Permanenten Welkepunkt (minimaler in PRZM erreichbarer Wert)

Die Curve Numbers und damit Runoff-Anfälligkeit steigen von Gruppe A (leichte, sandige Böden) zu Gruppe D (schwere, tonige Böden) an. Es ist zu beachten, dass obwohl PRZM den Effekt der Schneeschmelze in der Runoffgleichung berücksichtigt, die CN nicht angepasst werden, um die Effekte der Schneedecke auf die Oberflächenabflussbildung zu berücksichtigen (Carsel et al., 2003). Der Effekt der Temperatur wird jedoch berücksichtigt, sofern die Simulation der Bodentemperatur in PRZM aktiviert ist: Wenn die mittlere Bodentemperatur in den obersten 2 cm 0.0 °C ist (PRZM simuliert keine Bodentemperaturen < 0 °C), wird der Boden als gefroren betrachtet und die Curve Number auf 100 gesetzt, d.h. es kann keine Infiltration mehr stattfinden (Mark Cheplick, pers. Mitteilung, 10.06.2011).

II.4.2.4 Das Problem des Curve-Number-Ansatzes

Die im vorhergehenden Abschnitt geschilderte Implementierung des SCS Curve-Number-Ansatzes in PRZM ist allerdings konzeptionell nicht korrekt. Der Curve Number-Ansatz wurde in den 60er und Anfang der 70er Jahre vom USDA Soil Conservation Service (SCS) zur Vorhersage von Gewässerabflussspitzen entwickelt (Soil Conservation Service, 1972) und berechnet eigentlich *nicht* den Oberflächenabfluss, sondern den *Direktabfluss* im Gewässer (= Gewässerabfluss minus Basisabfluss).

Eine ausführliche Diskussion der falschen Implementierung des Curve Number-Ansatzes in PRZM und anderen Modellen ist in Reichenberger et al. (2007a, Abschnitt 5.1) zu finden; nachfolgend daraus ein Auszug:

„Der Curve Number Ansatz wird in PRZM (wie auch in anderen Runoff- und Erosionsmodellen) in mehrfacher Hinsicht inkorrekt angewandt, wie von Garen und Moore (2005) sehr gut dargelegt wird:

Beim Curve Number-Ansatz handelt es sich um empirisches Modell mit einem Parameter (S). Der Ansatz wurde vom USDA Soil Conservation Service für kleine Einzugsgebiete entwickelt, um "Runoff" im hydrologischen Sinn vorherzusagen, genauer: die Reaktion des Gewässerabflusses auf größere Regenereignisse. Diese Reaktion des Gewässerabflusses umfasst alle Abflusskomponenten, die rasch in den Vorfluter übertreten (den sog. Direktabfluss):

- Oberflächenabfluss durch Infiltrationsüberschuss (infiltration excess surface runoff),
- Oberflächenabfluss durch Sättigungsüberschuss (saturation excess surface runoff),
- Zwischenabfluss (lateral subsurface flow, interflow),
- Regen direkt auf die Oberfläche des Fließgewässers (channel runoff)
- Makroporenfluss zu Drainagen (sofern vorhanden).

Diese Konzeption des Curve Number-Ansatzes wird auch in der Bezeichnung des Parameters S ("watershed retention parameter") in der SCS Runoff-Gleichung [Gl. II.4-6 im hier vorliegenden Bericht] sichtbar. In Kapitel 10 des SCS (jetzt NRCS) National Engineering Handbook (NRCS, 2004) steht klar: "In flood hydrology baseflow is generally dealt with separately, and all other types are combined into direct runoff, which consists of channel runoff [Regen direkt auf Fließgewässer], surface runoff, and subsurface flow in unknown proportions. The curve number method estimates this combined direct runoff."

In Modellen wie PRZM, EPIC oder SWAT wird nun der vom Curve Number-Ansatz vorhergesagte "Runoff" (im Sinne von Direktabfluss) als Oberflächenabfluss („surface runoff“) fehlinterpretiert. Weiterhin wird als Ursache des Oberflächenabflusses nur Infiltrationsüberschuss betrachtet. Als Folge dieser beiden Fehlinterpretationen wird von allen Arten des Direktabflusses nur der erste ("infiltration excess runoff" oder "Hortonian runoff") berücksichtigt.

Dieser Prozess ist, im Gegensatz zu Zwischenabfluss und "saturation excess runoff", unabhängig von Skala und Hangposition. Dadurch wiederum wurde der Curve Number-Ansatz auch in Punktmodellen wie PRZM und EPIC implementiert. Im Prinzip ist der Curve Number-Ansatz aber auf der Plot- und der Feldskala nicht valide. Zusammengefasst wird der Curve Number-Ansatz in vielen Modellen daher aus folgenden Gründen inkorrekt angewandt:

- i. Der gesamte Direktabfluss wird dem Oberflächenabfluss durch Infiltrationsüberschuss (Hortonian runoff) zugeschrieben, obwohl Oberflächenabfluss durch Sättigungsüberschuss oder Zwischenabfluss in vielen Fällen von größerer Bedeutung sein dürften.
- ii. Die Konzeption der Curve Number-Methode zum ausschließlichen Einsatz auf Einzugsgebietsskala wird ignoriert und der Ansatz fälschlicherweise auf Feldskala angewandt (dies gilt nicht für SWAT, aber für PRZM und EPIC).
- iii. Der Curve Number-Ansatz wurde entwickelt, um die Reaktion des Abflusses von Gewässern auf einzelne, größere Regenereignisse vorherzusagen. In PRZM, SWAT und anderen Modellen wird er benutzt, um kontinuierliche tägliche Runoff-Zeitreihen mit oft kleinen Wasserflüssen vorherzusagen, was nicht der vorgesehenen Anwendung entspricht (NRCS, 2004b).

Die Konsequenz von 1) ist, dass für Bodentypen, in denen Zwischenabfluss und Makroporenfluss zu Drainagen eine wichtige Rolle spielen, der Oberflächenabfluss und als Folge (sofern kein Ausgleich durch weitere Modellfehler stattfindet) der Sedimentertrag nach MUSLE/MUSS und der damit verbundene Austrag an partikelgebundenen PSM überschätzt werden. Aus diesem Grund wurde im EU-Projekt FOOTPRINT, in dem ebenfalls mit PRZM gearbeitet wird, die Zuweisung der soil hydrologic groups zu den betroffenen Bodentypen so geändert, dass die in PRZM produzierten Runoffvolumina und gelösten PSM-Austräge tatsächlich nur den Oberflächenabfluss (infiltration excess runoff + saturation excess runoff) widerspiegeln. Die PSM-Austräge über den Zwischenabfluss und über Drainagen werden dann mit MACRO berechnet.

(Ende Auszug aus Reichenberger et al., 2007a, Abschnitt 5.1).

II.4.2.5 PSM-Austrag über Erosion

Während Erosionsereignissen können Wirkstoffe, abgesehen von Austrägen in gelöster Form im Oberflächenabfluss, das Feld auch adsorbiert an erodiertes Oberbodenmaterial verlassen.

EXPOSIT: PSM-Austrag über Erosion wird in EXPOSIT genauso gehandhabt wie der Runoff-Austrag: In Abhängigkeit von der Koc-Klasse des Wirkstoffs wird ein bestimmter relativer

Erosions-Austrag (in Prozent des zum Zeitpunkt des Regenereignisses vorhandenen Vorrats) zugewiesen. Dieser relative Austrag geht auf eine statistische Auswertung von 338.000 PRZM-Simulationen für reale Substanzen und Anwendungen zurück (Reichenberger et al., 2007a) und wurde als 90-Perzentil des maximalen täglichen Erosions-Austrags in der Simulationsperiode für die jeweilige Koc-Klasse ermittelt. Hierbei ist zu beachten, dass sich der von Reichenberger et al. (2007a) ermittelte relative Austrag auf die Aufwandmenge bezog und nicht auf den zum Zeitpunkt des Austragsereignisses vorhandenen Vorrat (d.h. die Dissipation war im relativen Austrag bereits mit berücksichtigt). Die Art, wie der relative Austrag in EXPOSIT verwendet wird, führt also zu einer leichten Unterschätzung der Austräge, weil die Dissipation zwischen Applikation und Austragsereignis doppelt veranschlagt wird.

FOCUSsw Step3: Der PSM-Austrag wird über Erosion ebenfalls mit dem Modell PRZM berechnet, das folgende Prozessbeschreibung verwendet. Erosion ist ein selektiver Prozess, so dass erodiertes Bodenmaterial, im Vergleich zu dem Oberboden, von dem es erodiert wurde, an kleineren Partikeln und organischer Substanz (dem Hauptsorbenten für nichtionische Wirkstoffe) angereichert ist. In PRZM wird das Anreicherungsverhältnis r_{om} für organische Substanz nach folgender empirischer Gleichung berechnet (die auf experimentellen Daten für die Anreicherung von Stickstoff und Phosphor im erodierten Sediment beruht; Menzel, 1980):

$$\ln(r_{om}) = 2 - 0.2 \ln(1000 X_e/A) \quad (\text{Gl. II.4-10})$$

Größere Erosionsereignisse sind folglich weniger selektiv und resultieren in geringerer Anreicherung organischer Substanz im erodierten Material. Der PSM-Erosionsaustrag aus dem Feld wird berechnet als

$$J_e = \frac{X_e \cdot r_{om} \cdot S_1}{10 \cdot A} \quad (\text{Gl. II.4-11})$$

mit

J_e Erosionsaustrag des Wirkstoffs ($\text{mg m}^{-2} \text{d}^{-1}$)

S_1 Konzentration des adsorbierten Wirkstoffs in der Festphase (mg kg^{-1}) im obersten Layer

10 Einheiten-Korrekturfaktor.

Der Ertrag erodierten Sediments (die Masse erodierten Bodenmaterials, die das Feld verlässt) durch Flächen- und Rillenerosion wird in PRZM mit der empirischen Modified Universal Soil Loss Equation (MUSLE; Williams, 1975) oder einer ihrer Modifikationen (MUSS, MUST) berechnet. MUSS wurde speziell für kleine Einzugsgebiete (< 100 ha) entwickelt und wird in den PRZM-Rechnungen im Rahmen der FOCUS surface water scenarios verwendet.

$$\text{MUSLE:} \quad X_e = 1.586 (V_r q_p)^{0.56} A^{0.12} K L S C P \quad (\text{Gl. II.4-12})$$

$$\text{MUSS:} \quad X_e = 0.79 (V_r q_p)^{0.65} A^{0.009} K L S C P \quad (\text{Gl. II.4-13})$$

mit

X_e Sedimentertrag während des Ereignisses (t d^{-1})

V_r Volumen des Oberflächenabflusses während des Ereignisses (mm d^{-1})

q_p „peak storm runoff rate“ (mm h^{-1})

A Feldgröße (ha)

- K* Bodenerodierbarkeitsfaktor (dimensionslos)
- LS* kombinierter Hanglängen-Hangneigungsfaktor (dimensionslos)
- C* Bodenbedeckungsfaktor = Bewirtschaftungsfaktor (dimensionslos)
- P* Erosionsschutzpraxis-Faktor (dimensionslos).

Während *A*, *K*, *LS*, *C* und *P* durch den Benutzer eingegeben werden, wird q_p intern in PRZM berechnet, unter der Verwendung des Runoffvolumens und eines „unit peak discharge“ (eine ausführliche Beschreibung des Berechnungsverfahrens ist in Carsel et al. (2003) zu finden). Es wird dabei angenommen, dass die Niederschlagsintensität bestimmten „design storm distributions“ oder Niederschlagsregimes folgt. PRZM stellt dem Benutzer vier Niederschlagsregimes zur Auswahl; eine direkte Eingabe von Parametern für ein benutzerdefiniertes Niederschlagsregime ist nicht möglich. Laut FOCUS (2001) ist für Mitteleuropa Typ II, der den größten Teil der USA ohne die Atlantikküste, die Pazifikküste und die südlichen Regionen abdeckt, das am besten geeignete Niederschlagsregime. Für eine weitere Diskussion der MUSLE und ihrer Varianten sei auf Abschnitt 5.1 in Reichenberger et al. (2007a) verwiesen.

II.4.2.6 PSM-Austrag über Zwischenabfluss

Zwischenabfluss (lateral subsurface runoff oder Interflow) findet an Hängen statt, an denen eine durchlässige Bodenlage über einer weniger durchlässigen (z.B. einem Bt- oder Sd-Horizont oder einer periglaziären Lage) liegt oder der Boden anisotrop ist (höhere laterale als vertikale Leitfähigkeit). Interflow findet zwar unter der Bodenoberfläche statt, kann aber am Hangfuß wieder aus dem Boden austreten (Exfiltration) und wird dann zu saturation excess runoff. Zwischenabfluss ist ein komplexer Prozess: Es treten z.B. bevorzugte Fließwege („pipes“) und Niederschlags-Schwellenwerte auf, oberhalb derer der Zwischenabfluss sprunghaft ansteigt (Tromp-van Meerveld und McDonnell, 2006a, 2006b).

Der Einfluss der Hangneigung auf den Zwischenabfluss ist aufgrund der Komplexität des Prozesses und des Einflusses der Bodenfeuchte auf die Fließrate schwierig abzuschätzen. Unter sonst gleichen Bedingungen sollte aber eine größere Hangneigung zu einem schnelleren Fließen hangabwärts und zu einer geringeren Zeitverzögerung gegenüber dem Oberflächenabfluss führen.

In Bezug auf die Rolle des Zwischenabflusses für den Eintrag von PSM in Gewässer lässt sich feststellen, dass der Transport im Zwischenabfluss für stark sorbierende Wirkstoffe weit weniger bedeutend sein dürfte als Transport im Oberflächenabfluss, da im Zwischenabfluss Substanzen nur gelöst oder adsorbiert an Kolloide verlagert werden können. Allerdings fand Klein (2005) im Zwischenabfluss z.T. ähnlich hohe gelöste Wirkstoffkonzentrationen wie im Oberflächenabfluss. Für schwach und mäßig sorbierende Substanzen stellt daher der Zwischenabfluss, zumindest in gewässernahen Bereichen, einen potenziellen Eintragspfad für PSM in Oberflächengewässer dar.

Weder in **EXPOSIT** noch in **FOCUS_{sw}** wird PSM-Austrag über Zwischenabfluss berücksichtigt. Im EU-Projekt FOOTPRINT (Dubus et al., 2009) wurden jedoch Zwischenabfluss und damit verbundener PSM-Austrag mit MACRO simuliert. Im System der FOOTPRINT Soil Types weisen die Böden, bei denen die vertikale Sickerung Richtung Grundwasser eingeschränkt oder unterbunden ist (die FOOTPRINT Hydrologic Groups O, P, Q, R, S, T, U, V, W, X, Y) entweder Drainagen (Q, U, V, Y) oder Zwischenabfluss (O, P, R, S, T, W, X) auf (s. Kap. II.1.1). Zwischenabfluss wird in MACRO technisch auf die gleiche Weise simuliert wie Abfluss in Drainagen, nur die Parametrisierung ist verändert. In einem Tool für die Expositionsabschätzung für Oberflächengewässer wäre es also grundsätzlich einfach, auch Zwischenabfluss zu berücksichtigen.

II.4.2.7 PSM-Austrag über Drainage

EXPOSIT: PSM-Austrag über Drainagen wird nicht simuliert, sondern gesetzt: In Abhängigkeit von der Klasse des „Grundwassergefährdungspotentials“ oder kurz „Gefährdungsgruppe“ werden dem Wirkstoff ein Gesamtaustrag und eine Stoßbelastung zugewiesen, und zwar getrennt für die Periode Frühjahr/Sommer und die Periode Herbst/Winter. Die PEC_{initial} im Gewässer wird auf Basis der Stoßbelastung (in % der Aufwandmenge AWM_{korr}, korrigiert um die Interzeption und die Dissipation nach drei Tagen) berechnet. Die Einordnung in eine „Gefährdungsgruppe“ erfolgt nach Tab. II.4-2.

Tab. II.4-2: Definition der Klassen des Grundwassergefährdungspotentials in EXPOSIT (aus UBA, 2011)

Wirkstoff-Eigenschaften	Gefährdungsgruppe (Klasse des Grundwassergefährdungspotentials)			
	I	II	III	IV
Koc (L/kg)	>> 500	<500	<<500	< 100
DT50 (d)	>100	> 21	<21>	< 21
Wasserlöslichkeit (mg/L)	< 1	< 100	>> 100	>> 100

Es wird deutlich, dass diese Einteilung nicht den gesamten Parameterraum abdeckt, der von den drei Parametern aufgespannt wird. Die Einordnung eines bestimmten Wirkstoffs in eine Klasse ist also nicht immer eindeutig möglich. Abgesehen davon ist der Parameter Wasserlöslichkeit aus Sicht der Autoren des vorliegenden Berichts nach redundant: Die Wasserlöslichkeit eines Wirkstoffs spielt für sein Sorptionsverhalten im Boden in der Praxis keine Rolle, weil sich die Konzentration von Wirkstoffen in Lösung in der Umwelt i.d.R. weit unterhalb der Löslichkeitsgrenze bewegen. Das Sorptionsgleichgewicht im Boden wird somit ausschließlich alleine durch die Sorptionsparameter (Freundlich-Koeffizient K_f und Freundlich-Exponent) und die aktuelle Gesamtkonzentration des Wirkstoffs bestimmt.

FOCUSsw Step 3: PSM-Austrag über Drainage wird explizit mit dem Modell MACRO simuliert. Bis vor kurzem wurde in FOCUSsw die Version MACRO 4.3 verwendet; seit Juni 2012 wird die Version 5.2 benutzt.

Drainagefluss ist zwar kein Pesticide-Fate-Prozess; zum besseren Verständnis muss die Prozessbeschreibung in MACRO hier jedoch kurz erläutert werden. In MACRO (sowohl 4.3 als auch 5.x) wird Drainflow folgendermaßen beschrieben (s. Larsbo und Jarvis, 2003): Lateraler Fluss von gesättigten Bodenschichten (Layern) zur Drainage ist als Sink in der vertikalen Fließgleichung angegeben. Damit ein Layer zum Drainagefluss beitragen kann, müssen die Makroporen gesättigt sein. Wenn sowohl Makro- als auch Mikroporen gesättigt sind, tragen auch die Mikroporen zum Drainagefluss bei.

Es wird angenommen, dass oberhalb der Drainagen bis zur Bodenoberfläche voll durchlässiges Füllmaterial liegt, das unter Atmosphärendruck steht („seepage face“-Randbedingung). Dadurch kann jeder Layer mit gesättigten Makroporen oberhalb der Drainagetiefe zum Drainagefluss beitragen, z.B. kann auf einer Pflugsohle aufgestautes Wasser lateral Richtung Seepage Face und dann direkt in die Drainage fließen. Die Fließraten von gesättigten Layern oberhalb der Drainagetiefe werden mittels Seepage Potential Theory (Youngs, 1980; Leeds-Harrison et al., 1986) berechnet. Hingegen werden die Fließraten von gesättigten Layern unterhalb der Drainagetiefe mittels des ersten Terms der Hooghoudt-Drainagegleichung berechnet (Hooghoudt, 1940). Alle Gleichungen sind in Larsbo und Jarvis (2003) zu finden.

Der PSM-Fluss zur Drainage aus einer bestimmten Fließdomäne (d.h. Mikro- oder Makroporen) eines bestimmten Layers ergibt sich einfach als das Produkt von Wasserfluss und gelöster PSM-Konzentration in dieser Domäne dieses Layers.

Die Prozessbeschreibung für Drainagefluss in MACRO ist physikalisch basiert und benötigt im Vergleich zum ungedrängten Boden nur zwei zusätzliche Parameter: Drainageabstand und Drainagetiefe. Der einzige Schwachpunkt ist, dass die Annahme eines Füllmaterials unter Atmosphärendruck vermutlich nicht für alle Drainagesysteme zutrifft.

II.4.2.8 Bildung von Metaboliten im Boden

EXPOSIT: Eine Expositionsabschätzung für im Boden gebildete Metaboliten kann manuell vorgenommen werden. Die Berechnung ist analog zu der für den Parent. Durch Multiplikation mit dem Verhältnis der molaren Massen von Metabolit und Parent und der molaren maximalen Bildungsrate („maximum occurrence fraction“) wird eine „Aufwandmenge“ für den Metaboliten berechnet. Außerdem wird, da die Bildung des Metaboliten graduell und nicht unmittelbar erfolgt und damit kein „Applikationstermin“ bestimmbar ist, der Abstand zwischen „Applikation“ und Runoffereignis auf Null gesetzt.

Zur Frage „formation fraction“ vs. „maximum occurrence fraction“: Erstere ist das Massen- oder das molare Verhältnis zum Parent, in dem der Metabolit beim Abbau des Parent *gebildet* wird. Letztere ist das Verhältnis zwischen der maximalen während einer Laborabbaustudie *gemessenen* Konzentration des Metaboliten zur Initialkonzentration des Parent. Solange der Metabolit selbst einem Abbau unterliegt, ist die maximum occurrence fraction immer kleiner als die formation fraction (bei gleicher Einheit natürlich).

FOCUSsw Step 3: Die Bildung von Metaboliten wird in PRZM und MACRO explizit formuliert. Beide Modelle verwenden für die Reaktion Parent → Metabolit das Konzept der "formation fraction", das außer dieser nur noch die DT50 des Parent benötigt. Um einen Parent mit einem Metaboliten zu simulieren, werden drei MACRO-Simulationsläufe benötigt:

- 1) MACRO-Simulation für den Parent mit dem üblichen Drainage- und/oder Leaching-Output
- 2) MACRO -Simulation für den Parent mit dem Abbau des Parent in jeder Domäne jedes Layers für jeden Simulationstag als Output (file driving.bin)
- 3) MACRO-Simulation für den Metaboliten mit dem driving.bin als Input und dem üblichen Drainage- und/oder Leaching-Output.

Hingegen kann PRZM in einem Simulationslauf einen Parent mit zwei (parallelen oder sequentiellen) Metaboliten rechnen.

II.4.2.9 Verflüchtigung von der Bodenoberfläche

EXPOSIT: Verflüchtigung (Volatilisation) von PSM von der Bodenoberfläche wird nicht berücksichtigt.

FOCUSswStep 3: Von den beiden in FOCUSsw eingesetzten Modellen MACRO und PRZM kann nur PRZM Volatilisation simulieren. Für die Simulation von volatilen Substanzen mit MACRO wird empfohlen, als Korrektur für den fehlenden Prozess die Aufwandmenge entsprechend zu reduzieren.

PRZM simuliert explizit Diffusion von PSM in der Gasphase im Boden, Volatilisierung von der Bodenoberfläche und den Transport der verflüchtigten Substanz durch die Pflanzendecke. Die Prozessbeschreibung ist komplex (vor allem im Vergleich zur simplen Hydrologie in PRZM, vgl. Carsel et al., 2003), benötigt aber nur drei Substanzparameter:

- DAIR (molekularer Diffusionskoeffizient der Substanz in der Luft).
- HENRYK (dimensionslose Henry-Konstante bei Referenztemperatur); PRZM berücksichtigt die Temperaturabhängigkeit der Henry-Konstante mittels Clausius-Clapeyron-Gleichung und benutzt eine interne Referenztemperatur von 25 °C (= 298.15 K); folglich muss der Wert für HENRYK im .inp file für 25 °C gelten, wenn das Ergebnis korrekt sein

soll; die Methode der Korrektur von HENRYK ist im PRZM Manual nicht dokumentiert und musste durch Einsicht in den Quellcode ermittelt werden.

- ENPY (Verdampfungsenthalpie der Substanz).

DAIR und ENPY werden in FOCUSsw auf einen Standardwert fixiert, so dass als einziger substanzspezifischer Parameter die Henry-Konstante übrigbleibt. Da in FOCUSsw Step3 keine Deposition berechnet wird, wird Volatilisation hier ausschließlich als Sink betrachtet.

II.4.2.10 Aufnahme über die Wurzeln

EXPOSIT: Aufnahme von PSM über die Wurzeln wird nicht berücksichtigt.

FOCUSsw Step 3: sowohl in MACRO als auch in PRZM wird Aufnahme von PSM über die Wurzeln als passiver Prozess mit Hilfe eines simplen „plant uptake factor“ (PUF) simuliert.

$$U = f * S * C \quad (\text{Gl. II.4-14})$$

mit

- U PSM-Aufnahme aus einem bestimmten Layer (PRZM) oder einer bestimmten Domäne eines Layers (MACRO)
- f plant uptake factor (zwischen 0 und 1)
- S Wurzelwasseraufnahme aus einem bestimmten Layer (PRZM) oder einer bestimmten Domäne eines Layers (MACRO)
- C PSM-Konzentration in Lösung im Layer bzw. der Domäne des Layers.

Ein Wert des Faktors von Null bedeutet, dass gar keine Aufnahme über die Wurzel stattfindet. Ein Wert von 1 hingegen bedeutet, dass die Substanz ungehindert wie ein inerter Tracer mit dem Transpirationsstrom aufgenommen wird.

In FOCUS (2001) wird empfohlen, den Faktor für systemische Substanzen (d.h. Substanzen, die in der Pflanze verlagert werden) auf 0.5 und für nichtsystemische auf Null zu setzen. Allerdings können auch nichtsystemische PSM von der Wurzel mit dem Transpirationsstrom aufgenommen werden. Sie bleiben dann zwar im Wurzelgewebe hängen und werden nicht in den Spross verlagert, aber sie sind dem Kompartiment Boden entzogen. Man kann daher einen Wert von 0,5 für alle nichtionischen PSM vertreten (Dubus et al., 2009).

Bisher herrschte die allgemeine Einschätzung, dass die Aufnahme von PSM über die Wurzel in MACRO und PRZM nur einen sehr geringen Anteil an der Massenbilanz hat und die Wahl des Wertes des plant uptake factors nicht ins Gewicht fällt. Diese Annahme bleibt allerdings zu testen.

Bei der Risikobewertung für das Grundwasser wird ebenfalls Aufnahme des Wirkstoffs über die Wurzel mit Hilfe des PUF berücksichtigt. Demnach ist bei der Tier 1- Bewertung generell ein Wert von 0 einzusetzen, zur Entlastung können dann experimentelle Daten für den PUF eingestellt werden (European Commission 2014). Ein Studiendesign wird derzeit auf europäischer Ebene erarbeitet (Hingston, J., Klunder, M., Schriever, C., EUregPUF Workshop on plant uptake of pesticides in FOCUS leaching models for the pesticide registration process in the EU (2nd September 2013, York), workshop report, 2013). Unabhängig vom betrachteten Kompartiment, Grundwasser oder Oberflächengewässer sollte für die Expositionsbeurteilung ein einheitlicher PUF eingestellt werden.

II.4.3 Prozessbeschreibungen - Umweltkompartiment Pflanze

EXPOSIT berücksichtigt generell keine Prozesse für das Umweltkompartiment Pflanze. Die Interzeption von PSM durch die Kulturpflanze wird als endgültiger Sink betrachtet. Diese Annahme ist nicht konservativ, wird aber möglicherweise durch konservative Annahmen an anderer Stelle wieder ausgeglichen.

II.4.3.1 Crop interception (Interzeption des Wirkstoffs auf der Kulturpflanzenoberfläche)

In PRZM wird für Sprayapplikationen auf die Kulturpflanze (Chemical Application Method, CAM = 2) die Interzeptionsfraktion automatisch als gleich dem aktuellen Bodenbedeckungsgrad der Kulturpflanze berechnet. Im Modell MACRO (stand-alone) muss die Interzeptionsfraktion hingegen manuell eingegeben werden (Parameter ZFINT). In FOCUS_{sw} (FOCUS, 2001) wird die Interzeptionsfraktion ZFINT für Spray-Applikationen in MACRO berechnet als das Verhältnis des aktuellen Blattflächenindex (LAI) zum maximalen Blattflächenindex (LAIMAX), multipliziert mit der maximalen Interzeptionsfraktion.

In den FOCUS_{gw}-Szenarien (FOCUS, 2000; FOCUS, 2009) wird im Gegensatz zu FOCUS_{sw} und GERDA die PSM-Interzeption vorab extern berechnet und von der Applikationsrate abgezogen. Die PSM-Applikation in FOCUS_{gw}-PRZM erfolgt dann als Spray auf den Boden und nicht auf die Pflanze. Die Default-Werte für PSM-Interzeption im FOCUS_{gw}-Report (FOCUS, 2000) und die aktuelleren Werte in EFSA (2014) sind nicht unmittelbar mit denen in PRZM für CAM = 2 und damit auch in GERDA berechneten Interzeptionswerten zu vergleichen, weil sich die Werte in FOCUS_{gw} und EFSA (2014) auf Entwicklungsstadien der Kultur und nicht auf Datumsangaben beziehen. Ein Vergleich zwischen den Werten des maximalen Deckungsgrads (Maximum Canopy Coverage, COVMAX) für die gleichen Kulturen in FOCUS_{sw} und GERDA wäre zielführender; wobei dafür festzuhalten ist, dass die COVMAX-Werte in FOCUS_{sw} und GERDA ähnlich bis identisch sind (s.a. Kap. I.4.4.3).

Für Granulat oder Einarbeitung in den Boden ist in FOCUS die Interzeptionsfraktion Null.

II.4.3.2 Foliar washoff (Blattabwaschung)

FOCUS_{sw} Step 3: Foliar washoff wird von MACRO und PRZM auf die gleiche Art und Weise simuliert, nämlich als exponentielle Abwaschung während eines Niederschlagsereignisses als Funktion der Niederschlagsmenge:

$$M = M_0 * \exp(-FEXTRC * R) \quad (\text{Gl. II.4-15})$$

mit

M PSM-Vorrat auf dem Blattwerk nach einem Regenereignis

M₀ PSM-Vorrat auf dem Blattwerk vor dem Regenereignis

FEXTRC foliar extraction coefficient (MACRO: mm⁻¹; PRZM: cm⁻¹)

R Niederschlagsmenge während des Ereignisses (MACRO: mm; PRZM: cm)

FOCUS_{sw} schlägt als Default-Wert für FEXTRC 0,5 cm⁻¹ (PRZM) bzw. 0,05 mm⁻¹ (MACRO) vor.

II.4.3.3 Verflüchtigung von der Pflanzenoberfläche

FOCUSsw Step 3: PRZM simuliert Volatilisation von Blattoberflächen mit einem simplen first-order Ansatz. Diese Funktionalität wird jedoch in FOCUSsw nicht benutzt. Stattdessen wird in FOCUSsw sowohl in PRZM als auch in MACRO foliar dissipation simuliert (s.u.).

II.4.3.4 Foliar dissipation

FOCUSsw Step 3: Foliar dissipation ("Verschwinden von der Blattoberfläche") beinhaltet in FOCUSsw Verflüchtigung und Abbau z.B. durch Photolyse, aber nicht foliar washoff. Foliar dissipation wird in PRZM und MACRO als first-order-Prozess simuliert. Als Default-Wert für die foliar DT50 wird von FOCUSsw 10 Tage vorgeschlagen. Wenn für einen Wirkstoff experimentelle Daten verfügbar sind, die eine deutlich andere foliar DT50 anzeigen, kann dieser Wert anstelle des Default-Werts verwendet werden.

II.4.4 Prozessbeschreibungen - Umweltkompartiment Gewässer

Das Modell EXPOSIT berücksichtigt generell keine Prozesse im Umweltkompartiment Gewässer (Wasserschicht und/oder Sediment); es wird nur die PECinitial betrachtet.

II.4.4.1 Sorption ans Gewässersediment

EXPOSIT bietet dafür zwei Optionen:

- a) Der gesamte partikulär gebundene PSM-Eintrag wird dem Gewässersediment zugeschlagen.
- b) Der gesamte partikulär gebundene PSM-Eintrag wird der Wasserschicht zugeschlagen.

Option b) wird genau dann verwendet, wenn der verfügbare ökotoxikologische Endpunkt Sorption ans Gewässersediment implizit beinhaltet (d.h. die Studie in Gegenwart eines Sediments durchgeführt wurde).

FOCUSsw Step3 verwendet dafür das Modell FOCUS_TOXSWA 2.2.1, das Sorption ans Sediment (Gleichgewichtssorption, Freundlich-Isotherme) explizit simuliert. Partikulär gebundene PSM-Einträge werden während des Eintragsereignisses den oberen Layern des Sediments zugeschlagen, unterliegen dann aber den verschiedenen im Gewässer ablaufenden Prozessen (Sorption, Abbau, Diffusion).

II.4.4.2 Sorption an Makrophyten

FOCUSsw Step3: Die in FOCUS_TOXSWA 3.3.1 zugrundeliegende ausführbare Datei TOXSWA 2.0 kann lineare Sorption an Makrophyten simulieren. In den FOCUSsw-Szenarien sind Makrophyten allerdings nicht enthalten.

II.4.4.3 Sorption an suspendierte Partikel

FOCUS TOXSWA 3.3.1 simuliert nichtlineare Sorption (Freundlich-Isotherme) an suspendierte Partikel. Die Konzentration suspendierter Partikel in den FOCUS surface water bodies wird als zeitlich konstant angenommen.

II.4.4.4 Abbau im Gewässer

FOCUS_TOXSWA 3.3.1 simuliert first-order-Abbau sowohl in der Wasserschicht als auch im Sediment, wobei unterschiedliche Abbauhalbwertszeiten für Wasserschicht und Sediment verwendet werden können. TOXSWA 2.2.1 berücksichtigt den Effekt der Temperatur auf die Abbaugeschwindigkeit mittels der Arrhenius-Gleichung. Die Temperatur wiederum bezieht TOXSWA aus einer Wetterinputdatei mit dem Monatsmittel der Lufttemperatur für jeden Simulationsmonat. Die Natur des Abbaus (mikrobiell oder abiotisch) wird nicht spezifiziert. Die in TOXSWA eingegebenen Halbwertszeiten sollten also biologischen Abbau, Photolyse und Hydrolyse beinhalten.

Photolyse und Hydrolyse werden in TOXSWA 3.3.1 nicht explizit simuliert (s.o.). Ob die Prozesse implizit berücksichtigt werden, hängt davon ab, wie die Abbauhalbwertszeiten in Wasser und Sediment experimentell bestimmt wurden. Eine Wasser-Sediment-Studie beinhaltet i.d.R. abiotische Hydrolyse, aber keine Photolyse (da üblicherweise im Dunkeln durchgeführt).

In Deneer et al. (2010) wurden die drei Prozesse Hydrolyse, Photolyse und biologischer Abbau untersucht und Vorschläge für ihre separate Modellierung in einer zukünftigen TOXSWA-Version erarbeitet.

Eine separate Simulation von abiotischer Hydrolyse und biologischem Abbau ließe sich einfach realisieren. Da abiotische Hydrolyse aber oft stark pH-abhängig ist, weil Oxoniumionen oder Hydroxidionen als Edukte an der Reaktion beteiligt sind (saure Hydrolyse bzw. alkalische Hydrolyse), muss für eine separate Simulation des hydrolytischen Abbaus der pH des Gewässers bekannt sein (oder nach dem Tagesrhythmus der photosynthetisch aktiven Organismen simuliert werden). Deneer et al. (2010) schlagen für eine zukünftige Version von TOXSWA die Simulation der abiotischen Hydrolyse als pseudo-first-order Prozess vor. Der Ratenkoeffizient muss sowohl pH- als auch Temperatur-abhängig sein.

Direkte und indirekte Photolyse sind als Prozesse deutlich komplizierter als Hydrolyse (Deneer et al., 2010). Im Hinblick auf eine Implementierung in TOXSWA kamen diese Autoren zu dem Schluss, dass indirekte Photolyse momentan noch nicht berücksichtigt werden kann, weil zu viele Faktoren eine Rolle spielen, direkte Photolyse aber als pseudo-first-order-Prozess (bei konstanter Einstrahlung) simulierbar ist. Die Ratenkonstante für den pseudo-first-order-Prozess muss entweder experimentell oder über das Absorptionsspektrum der Substanz bestimmt werden.

Die Autoren des hier vorliegenden Berichts sehen momentan keine dringende Notwendigkeit, eine explizite Simulation abiotischer Hydrolyse und Photolyse in das hier entwickelte Tool GERDA zu implementieren. Falls dies zukünftig doch für erforderlich gehalten werden, dann wird empfohlen, auf das angekündigte Update von TOXSWA warten, das die von Deneer et al. (2010) vorgeschlagenen neuen Funktionalitäten enthalten soll.

II.4.4.5 Stoffaustausch zwischen Wasser und Sediment

FOCUS_TOXSWA 3.3.1 kann sowohl advektiven als auch diffusiven Austausch zwischen Wasserschicht und Sediment simulieren (Beltman et al., 2006). In den FOCUS surface water scenarios findet aber nur diffusiver Austausch statt. Dies dürfte auch der weitaus wichtigere Prozess von beiden sein.

II.4.4.6 Bildung von Metaboliten im Gewässer

FOCUS_{sw} Step 3: Die gegenwärtig zum Einsatz kommende Version des Modell TOXSWA kann keine Bildung von Metaboliten im Gewässer simulieren.

Es ist jedoch bereits eine neue Version von TOXSWA programmiert worden, die Metabolitenbildung in Wasserschicht und Sediment simulieren kann. Diese Version soll in die Software FOCUS_TOXSWA integriert und, zusammen mit einer neuen Version von FOCUS_SWASH, im November 2012 der FOCUS_{sw}-Versionskontrolle bei der EFSA übergeben werden (Wim Beltman, persönliche Mitteilung, 21/08/2012).

II.4.4.7 PSM-Eintrag ins Grundwasser nach Uferfiltration

EXPOSIT: Die Simulation des PSM-Eintrags ins Grundwasser nach Uferfiltration ist eine Besonderheit von EXPOSIT. Den Autoren ist derzeit kein in der Zulassungspraxis eingesetztes Modell bekannt, das für diese Anwendung parametrisiert worden wäre. In EXPOSIT wird die PSM-Leaching-Konzentration im Uferfiltrat folgendermaßen abgeschätzt:

- a) Um die PEC_{initial} im Fließgewässer zu erhalten, wird die PEC_{initial} im Graben durch einen Verdünnungsfaktor 12,5 geteilt.
- b) Die PEC_{initial} des Uferfiltrats ergibt sich aus der Multiplikation des PEC_{initial} im Fließgewässer mit dem Komplement der Reduktionseffizienz („Eliminationsrate“) der Filterstrecke.

Die Reduktionseffizienz hängt von der „Grundwassergefährdungsgruppe“ ab. Für einige Substanzen, für die Messwerte der Filterleistung vorliegen, sind jedoch eigene Werte der Reduktionseffizienz tabelliert.

Der Ansatz weist nach Meinung der Autoren gewisse konzeptionelle Probleme auf: Zum einen wird zur Einteilung in die vier „Grundwassergefährdungsgruppen“ (s. Tab. II.4-2) die Abbauhalbwertszeit oder die DT₅₀ im Boden herangezogen. Für die PSM-Konzentration im Uferfiltrat spielt jedoch nicht der Abbau im Boden eine Rolle, sondern der Abbau im Gewässer und in der hyporheischen Zone. Die Halbwertszeit im Boden ist aber nicht auf den Abbau in der Wasserschicht, im Sediment oder der hyporheischen Zone übertragbar. Zum anderen stellt sich die Frage, inwieweit die PEC_{initial} als Peakkonzentration für das Grundwasser relevant ist. Normalerweise werden für Abschätzungen des Risikos für das Grundwasser durch Leaching die Jahresmittelkonzentrationen im Sickerwasser verwendet, weil die Durchgangszeit (transit time) von der Untergrenze des Bodens zum Aquifer, der zur Trinkwassergewinnung genutzt wird, als groß angenommen wird.

Es war nicht Aufgabenstellung des hier durchgeführten GERDA-Projekts, Vorschläge für eine Weiterentwicklung des EXPOSIT-Ansatzes zum PSM-Eintrag über Uferfiltration zu entwickeln. Für eine Verbesserung müsste man aus Sicht der Autoren zuerst für einige reale Standorte mit Uferfiltration mittels physikalisch basierter Modellierung transit times abschätzen und könnte darauf aufbauend generische Uferfiltrationsszenarien erstellen. Nur wenn sowohl das Abbauverhalten einer Substanz im jeweiligen Umweltmedium als auch die Durchgangszeit (transit time) durch das Medium (in diesem Fall Gewässersediment und hyporheische Zone) bekannt sind, lässt sich eine Reduktionseffizienz zuverlässig vorhersagen.

Ergänzend ist anzumerken, dass EXPOSITauch nicht den Anspruch erhebt, den Prozess der Uferfiltration in seiner Komplexität abzubilden. Da der Eintragspfad Uferfiltration in das Grund-

wasser jedoch relevant für die Zulassungsentscheidung ist, muss auch mit den regulatorisch verfügbaren Substanzdaten eine Risikoabschätzung vorgenommen werden.

FOCUSsw Step 3 betrachtet den Eintrag ins Grundwasser durch Uferfiltration nicht.

II.4.4.8 Atmosphärische Deposition auf der Gewässeroberfläche

Im Rahmen des nationalen Zulassungsverfahrens wird das Tool EVA 3 eingesetzt, um die Deposition auf der Gewässeroberfläche nach Verflüchtigung von Boden- und Vegetationsoberflächen zu berechnen. Die Modellierung mit EVA wird im Zulassungsprozess nötig, wenn der Dampfdruck einen bestimmten Schwellenwert überschreitet. Die Berechnung ist laut Dokumentation im Spreadsheet selbst rein empirisch (zul_umwelt_eva_prog.xlsx). Es werden in EVA 3 weder Volatilisations- noch Depositionsprozesse explizit simuliert. Die in EVA 3 verwendeten Depositionswerte und Abstandsfunktion wurden folgendermaßen gewonnen (vgl. Fent 2004, Siebert et al., 2002):

- 10 Substanzen mit unterschiedlichen Dampfdrücken wurden in zwei Kulturen im Windtunnel gestestet und Depositionswerte als Funktion der Entfernung vom Feldrand gemessen.
- Je nach Dampfdruck wurden die Substanzen verschiedenen Dampfdruckklassen zugeordnet und die 90-Perzentile der Deposition in 1 m Entfernung von der behandelten Fläche berechnet.
- Die exponentielle Abnahmefunktion der Deposition mit der Entfernung (0 bis 20 m) basiert auf 48 Messungen im Windtunnel.
- Da es faktisch keine Freilandexperimente zur Deposition nach Verflüchtigung gibt, war eine Validierung nur in 3 Feldexperimenten möglich. Für diese 3 Experimente wurde gute Übereinstimmung zwischen Modellergebnissen und Messwerten erzielt.

In FOCUSsw ist atmosphärische Deposition nicht enthalten.

Die Methodik und die Parametereinstellungen der Deposition wurden von EVA 3 für die Berechnung im Tool GERDA übernommen.

Es gibt allerdings einen Unterschied bei der Umsetzung in GERDA: EVA gibt die Gesamtdepositionen nach 24 Stunden aus, die um den Abbau, der in dieser Zeit im Gewässer stattfindet, reduziert wurden. Diese Korrektur ist für GERDA nicht sinnvoll, weil das Modell mit einer internen Auflösung von einer Stunde arbeitet und bereits automatisch den Abbau am Tag der Deposition berücksichtigt. Eine zusätzliche Reduzierung des Eintrags nach EVA ist deshalb unsinnig und würde lediglich zu einer mehrfachen Berücksichtigung von Abbauprozessen im Wasser führen.

Zum jetzigen Zeitpunkt wird es von den Autoren als ausreichend angesehen, die Depositionen laut EVA ins GERDA Tool zu übernehmen. Längerfristig kann die Verwendung eines physikalisch basierten Modellsystems wie z.B. Volt'Air (Bedos et al., 2009) gekoppelt mit den Modellen SurfAtm (Personne et al., 2009) und FIDES (Loubet et al., 2001; Loubet et al., 2006) zur Abschätzung der PSM-Deposition auf Oberflächengewässern (oder auch auf terrestrische Nicht-Ziel-Ökosysteme) in Erwägung gezogen werden.

II.4.4.9 Verflüchtigung aus dem Gewässer

FOCUS TOXSWA 3.3.1 simuliert die Volatilisation von PSM aus dem Gewässer. Außer den Substanzparametern zur Berechnung der Henry-Konstante (Dampfdruck und Wasserlöslichkeit mit ihrer jeweiligen Temperaturabhängigkeit) werden keine weiteren Eingabeparameter verlangt (Beltman et al, 2006). Die genaue Prozessbeschreibung ist in Adriaanse (1996) gegeben. Im Wesentlichen wird Volatilisation in TOXSWA als Austausch an der Grenzfläche zwischen zwei laminaren Schichten nach Liss und Slater (1974) simuliert.

$$J_{wa} = -k_l (c - c_l) = +k_g (c_{a,l} - c_a) \quad (\text{Gl. II.4-16})$$

mit

J_{wa} flächenspezifischer Massenfluss an der Grenzfläche zwischen Luft und Wasser (Masse / (Länge² * Zeit))

k_{lA} Austauschkoeffizient der Substanz in der Flüssigphase (Länge / Zeit)

k_g Austauschkoeffizient der Substanz in der Gasphase (Länge / Zeit)

c_a Konzentration der Substanz in der Luft (Masse / Länge³)

$c_{a,l}$ Gleichgewichtskonzentration der Substanz in der Gasphase an der Luft-Wasser-Grenzfläche (Masse / Länge³)

c Konzentration der Substanz in Lösung in der Wasserphase (Masse / Länge³)

c_l Gleichgewichtskonzentration der Substanz in Lösung an der Luft-Wasser-Grenzfläche (Masse / Länge³)

Das Verhältnis zwischen den Gleichgewichtskonzentrationen $c_{a,l}$ und c_l wird durch Henry's Law beschrieben:

$$c_{a,l} = K_H * c_l$$

mit

K_H Henry-Konstante (dimensionslos)

Die beiden Austauschkoeffizienten k_l und k_g werden nach Liss und Slater (1974) ermittelt, wobei keine der vom Nutzer eingegebenen Substanzparameter benutzt werden.

Die Güte der in TOXSWA verwendeten Prozessbeschreibung ist den Autoren nicht bekannt. Eine verbesserte Prozessbeschreibung ist in Arbeit und sollte im Laufe des Jahres 2012 veröffentlicht werden (W. Beltman, Alterra, Wageningen, persönl. Mitteilung, 20.03.2012).

II.4.4.10 Diffusion im Gewässer

FOCUS TOXSWA 3.3.1 verlangt als Input den Diffusionskoeffizienten der Substanz in Wasser. Es gibt einen default-Wert von 4.3E-05 m²d⁻¹, der für PSM mit einer molaren Masse von 200 bis 250 g/mol gültig sein sollte. Bei Bedarf kann ein genauerer Wert aus einer QSPR-Schätzung (Quantitative Structure-Property Relationship) verwendet werden. FOCUS TOXSWA 3.3.1 simuliert Diffusion an folgenden Stellen:

- diffusiver Austausch zwischen Wasserschicht und Sediment (nachdem in FOCUS_{sw} der advective Austausch deaktiviert ist, ist Diffusion der einzige Austauschprozess zwischen Wasser und Sediment)
- diffusiver Austausch zwischen den verschiedenen Sedimentlagen (hier gibt es in FOCUS auch advectiven Austausch, der aber vermutlich von geringer Bedeutung ist).

Sobald das Vorhandensein einer Sedimentschicht simuliert wird, ist der diffusive Austausch zwischen Wasserschicht und Sediment und zwischen den verschiedenen Sedimentlagen ein essentieller Prozess, ohne den das System nicht beschrieben werden kann. Auch in STEPS-3 (Klein, 2007) ist dieser Prozess enthalten. Diffusion im Gewässer wird daher in dem hier zu entwickelnden Tool GERDA implementiert.

II.4.4.11 Dispersion

Hier sind hydrodynamische und geomorphologische Dispersion als relevante Prozesse zu unterscheiden.

- *Hydrodynamische* Dispersion ist der Prozess der longitudinalen Abflachung und Verbreiterung eines Konzentrationspeaks einer gelösten Substanz im Verlauf des Transports in einem Fließgewässer. Hydrodynamische Dispersion wird durch unterschiedliche Fließgeschwindigkeiten des Wassers im Gerinne verursacht, bedingt durch Reibung an der Wand des Gerinnes und Speicherung (vgl. White et al., 2004).
- *Geomorphologische* Dispersion hingegen bezeichnet das Phänomen, dass Wassermoleküle, die gleichzeitig, aber an unterschiedlichen Punkten innerhalb eines Einzugsgebiets ins Gewässernetz eintreten, zu unterschiedlichen Zeiten am Auslass dieses Einzugsgebietes eintreffen (vgl. White et al., 2004; Rinaldo et al., 1991). Die Ursache hierfür sind unterschiedliche Fließstrecken und Fließgeschwindigkeiten von den verschiedenen Eintrittspunkten bis zum Gebietsauslass.

Während hydrodynamische Dispersion also bereits auf der Skala eines Gerinneabschnitts auftritt (z.B. der FOCUS_{sw} ditch oder stream), tritt geomorphologische Dispersion erst auf der Maßstabebene eines (im Regelfall verzweigten) Gewässernetzes in Erscheinung. Die geringe Phasenverschiebung in FOCUS_{sw} zwischen dem Drainage- oder Runoffzufluss vom Feld und dem Zufluss vom Upstream Catchment ist ebenfalls ein Ausdruck geomorphologischer Dispersion. Es stellt sich die Frage, ob man für das upstream catchment des FOCUS stream, das immerhin 1 km² groß ist, geomorphologische Dispersion nicht berücksichtigen müsste.

In FOCUS TOXSWA 3.3.1 wird hydrodynamische Dispersion in der Wasserschicht des stream und des ditch simuliert. Im pond spielt Dispersion keine Rolle, weil der Pond nur ein horizontales Segment besitzt und damit als horizontal komplett durchmischt behandelt wird.

Dispersion ist nicht zu verwechseln mit Verdünnung (Dilution), welche die Konsequenz der Vermischung eines mit einer Substanz belasteten Wasservolumens mit einem zusätzlichen, unbelasteten Wasservolumen darstellt. Dispersion führt zwar zu einem Abflachen des Peaks, aber nicht zu einer Verringerung der mittleren Konzentration im betrachteten Wasservolumen. Es ist daher nicht gerechtfertigt, aus dem bloßen Fließen (und damit Auftreten von hydrodynamischer Dispersion) einen Verdünnungsfaktor abzuleiten. Statt dessen könnte man allerdings einen „Peak-Abflachungsfaktor“ im Gewässersystem als Funktion der Fließstrecke oder der Zeit ableiten.

Nach Meinung der Autoren sollte prinzipiell, sobald ein fließendes Gewässer simuliert wird, hydrodynamische Dispersion berücksichtigt werden. Ebenso sollte, sobald ein Einzugsgebiet mit einem verzweigten Gewässernetz simuliert wird, geomorphologische Dispersion berücksichtigt werden. Die Art der Berücksichtigung des jeweiligen Prozesses kann der Komplexität des im Tool verwendeten Ansatzes angepasst werden. (Anmerkung: Allerdings ist einschränkend darauf hinzuweisen, dass auch bei der Entwicklung des Tools GERDA aus programmtechni-

schen und arbeitswirtschaftlichen Gründen bislang davon Abstand genommen worden ist, hydrodynamische und geomorphologische Dispersion in die PEC-Simulation für Fließgewässer aufzunehmen.)

II.4.5 Beschreibung der Gewässerszenarien und der Berechnung von PEC_{sw} und PEC_{sed}

Im Folgenden werden die in FOCUS_{sw} Step 3 und in EXPOSIT 3.0 beta verwendeten Ansätze und Gleichungen zur PEC-Berechnung in Oberflächenwasser und Sediment vergleichend gegenüber gestellt und jeweils hinsichtlich ihrer wissenschaftlichen und mathematischen Korrektheit untersucht und bewertet. Einführend werden zunächst die jeweiligen Designs der Szenarien erläutert.

II.4.5.1 Definition der Szenarien (Feld, Wasserkörper und Einzugsgebiet)

In EXPOSIT wird ein quadratisches Feld mit 1 ha Fläche angenommen. Der Wasserkörper in EXPOSIT 3.0 ist ein parallel zum behandelten Feld verlaufender Graben mit 100 m Länge, 1 m Breite und (bei trockenem Wetter) 30 cm Wassertiefe; das heisst, das stehende Volumen beträgt 30 m³. Der Graben ist aber so tief, dass er zusätzlich 100 m³ Oberflächenabflusswasser vom Feld aufnehmen kann; in diesem Falle beträgt die Wassertiefe dann 130 cm.

In FOCUS_{sw} (FOCUS, 2001) gibt es drei Typen von Szenarien: ditch (Graben), stream (Bach) und pond (Teich). Alle Wasserkörper haben einen rechteckigen Querschnitt (Länge, Breite und Tiefe s. Tab. II.4-3); das Wasservolumen ergibt sich aus der Geometrie des Wasserkörpers sowie gegebenenfalls weiterem Zufluss von der angrenzenden Fläche bzw. dem oberliegenden Einzugsgebiet (upstream catchment; Tab. II.4-5). Der FOCUS ditch ist von den Dimensionen her identisch mit dem EXPOSIT-Graben, tritt aber nur in Verbindung mit Drainageszenarien auf.

Tab. II.4-3: Die drei FOCUS-Wasserkörpertypen (FOCUS, 2001) und der EXPOSIT- Wasserkörper.

Wasserkörper-Typ	Breite	Gesamtlänge	Mindestwassertiefe	Mindestvolumen	Horizontaler Abstand von der Uferkante zum Wasserspiegel
	m	m	M	m ³	M
EXPOSIT-Graben	1	100	0.3	30	nicht relevant .
FOCUS Ditch	1	100	0.3	30	0,5
FOCUS Stream	1	100	0.3	30	1,0
FOCUS Pond	30	30	1	900	3,0

Alle drei Wasserkörpertypen haben die gleichen Eigenschaften in Bezug auf Sediment und suspendierte Partikel (Tab. II.4-4).

Tab II.4-4: Eigenschaften des Gewässersediments und der suspendierten Partikel in allen drei FOCUS water bodies.

Charakteristika	Wert
Concentration of suspended solids in water column (mg L ⁻¹)	15
Sediment layer depth (cm)	5

Organic carbon content (%)	5 (approx. 9 % organic matter)
Dry bulk density (kg m ⁻³)	800
Porosity (%)	60

Das Szenarienkonzept in FOCUS surface water (FOCUS, 2001) ist komplexer als dasjenige in EXPOSIT (s. Abb. II.4-3).

- Der Pond (Teich) hat die einfachste Anordnung. Jeder Pond (30 m * 30 m) erhält Drainage- oder Runoff-Wasser mit darin gelösten PSM von einem Feld von 0,45 ha, das zugleich das Einzugsgebiet des Ponds darstellt. In den Runoff-Szenarien erhält der Pond außerdem erodiertes Sediment und daran adsorbierte PSM von einem 20 m breiten Streifen, der an den Teich angrenzt (Anmerkung: es stellt einen konzeptionellen Fehler dar, anstatt des gesamten Feldes nur einen 20 m-Streifen zu verwenden; s. unten). Ferner erhält der Pond unbelasteten baseflow (Basisabfluss) von den 0,45 ha.
- Der Ditch (Graben) tritt nur in den Drainage-Szenarien auf. Der Ditch erhält Drainageflüsse von einem 1 ha großen Feld, das an den Graben angrenzt, und einem 2 ha großen upstream catchment (flussaufwärts gelegenes Einzugsgebiet), das aber unbehandelt ist. PSM-Einträge finden also nur vom 1 ha großen Feld statt. Ferner erhält der Graben unbelasteten Baseflow aus dem upstream catchment.
- Die Stream (Bach)-Szenarien sind die kompliziertesten. Der stream bezieht Drainagefluss oder Oberflächenabfluss von einem 1 ha großen Feld sowie einem 100 ha großen upstream catchment, von dem 20 % am gleichen Tag wie das Feld behandelt werden. Der Bach erhält also PSM-Drainage- oder Runoff-Einträge vom angrenzenden Feld und von 20 ha des upstream catchment. Die PSM-Einträge vom Feld erreichen den Bach zur gleichen Zeit wie die Einträge aus dem upstream catchment. In den Runoff-Szenarien erhält der Stream ausserdem erodiertes Sediment und daran adsorbierte PSM von einem 20 m breiten Streifen auf dem Feld, der an den Bach angrenzt (Anmerkung: es stellt einen konzeptionellen Fehler dar, anstatt des gesamten Feldes nur einen 20 m-Streifen zu verwenden; s. unten). Es findet kein Sedimenteintrag vom upstream catchment statt. Der Bach erhält unbelasteten Baseflow aus dem gesamten upstream catchment (100 ha).

Tab. II.4-5 gibt eine Übersicht zu den Flächenverhältnisse in den Szenarien.

Tab. II.4-5: Flächenverhältnisse für die FOCUS Runoff- und Drainage-Szenarien.

Typ	Feldgröße (ha)	Upstream catchment		Beitragende Fläche Abfluss		Beitragende Fläche PSM-Eintrag		
		Fläche insgesamt (ha)	Behandelte Fläche (ha)	Abflussvolumen insges. (ha)	Baseflow (ha)	Runoff-Eintrag (ha)	Erosions-Eintrag (ha)	Drainage-Eintrag (ha)
FOCUS_sw Runoff-Szenarien								
stream	1	100	20	101	100	21	0,2	
pond	0,45	-	-	0,45	0,45	0,45	0,06	
FOCUS_sw Drainage-Szenarien								
ditch	1	2	0	3	2*			1
stream	1	100	20	121	100			21
pond	0,45	-	-	0,45	0,45			0,45

*) in Szenario D2: 20

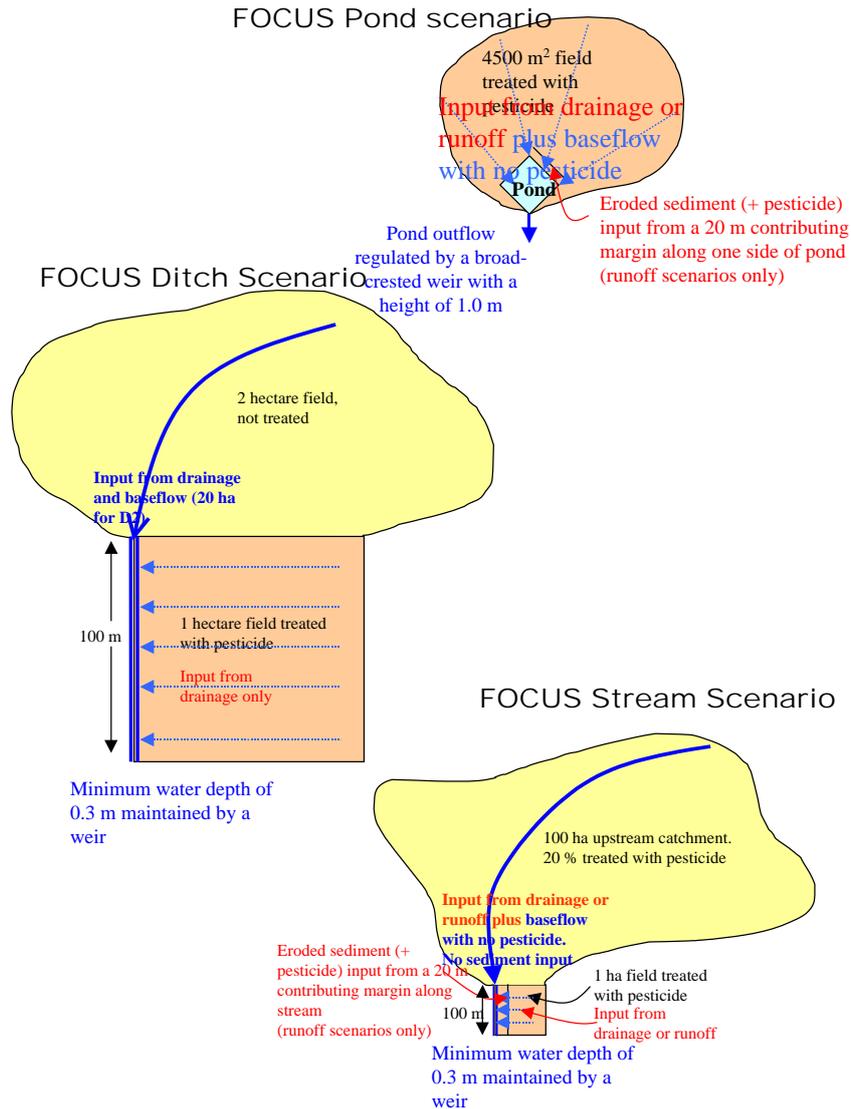


Abb. II.4-1: Konzept der FOCUS surface water bodies und ihrer Einzugsgebiete (FOCUS, 2001).

Zur Szenariendefinition in FOCUSsw sind folgende **Kritikpunkte** anzubringen:

- Es ist nicht einsichtig, warum in FOCUSsw das Szenario ditch nicht mit Oberflächenabfluss kombinierbar ist. Auch in flachen Gebieten mit Entwässerungsgräben kann Oberflächenabfluss auftreten.
- FOCUSsw beschränkt die Fläche, von der Erosionseinträge ins Gewässer eintreten, auf einen 20 m breiten Korridor in Nachbarschaft zum Pond bzw. zum Stream. Dies wird mit dem Argument begründet, dass erodiertes Sediment beim Transport über längere Distanzen dazu neigt, wieder abgelagert zu werden. Die von PRZM verwendeten MUSLE- und MUSS-Gleichungen zur Erosionsberechnung beinhalten jedoch bereits Deposition (im Gegensatz zur USLE, die eine nachgeschaltete sediment delivery ratio benötigt), weil sie durch Regression gegen gemessene Sedimentfrachten an Einzugsgebietsauslässen ermittelt wurden (Williams, 1975). Eine zusätzliche (doppelte) Berücksichtigung der Sedimentdeposition ist daher konzeptionell falsch. Die Konsequenz ist eine systematische Unterschätzung der PSM-Erosionseinträge in FOCUSsw, die jedoch nur für stärker sorbierende Substanzen von Bedeutung ist.

II.4.5.2 Modellierung des Gewässers

In EXPOSIT wird faktisch kein Gewässer simuliert.

In FOCUS TOXSWA 3.3.1 sind die Wasserkörper folgendermaßen angelegt (Beltman et al., 2006): Die Wasserkörper sind zweidimensional und bestehen aus zwei Untersystemen:

- i) dem Wasserkörper im Sinne von DIN 4049 (d.h. das Wasservolumen, das einen Hohlraum des Gewässerbetts ausfüllt)
- ii) dem Gewässersediment.

Da der Begriff „Wasserkörper“ in diesem Dokument bereits im Sinne von „FOCUS water body“ verwendet wird und ausserdem ein offizieller Begriff der Wasserrahmenrichtlinie ist, wird im Folgenden für das das Gewässerbett füllende Wasservolumen der (vorläufige) Begriff „Wasserschicht“ (in Anlehnung an water layer) verwendet.

Die Wasserschicht hat einen trapezförmigen Querschnitt (in FOCUS als Sonderfall rechteckig). Der Querschnitt wird als perfekt durchmischte angenommen, so dass PSM-Konzentrationen nur horizontal variieren. Die Wasserschicht enthält suspendierte Partikel und kann Makrophyten enthalten (in FOCUS wird diese Option aber nicht verwendet).

Das Gewässersediment besteht aus mehreren Lagen (diese sind wiederum unterteilt in mehrere numerische Layer), die miteinander in Austausch stehen. Die PSM-Konzentrationen im Sediment variieren also horizontal und vertikal. Die Eigenschaften des Gewässersediments können in TOXSWA zwischen den Lagen variieren, werden in FOCUS_{sw} jedoch konstant gehalten.

Der Abstand zwischen den horizontalen numerischen Segmenten in FOCUS variiert für die Wasserschicht zwischen 5 m (Stream) und 30 m (Pond; d.h. der Pond besteht nur aus einem horizontalen Segment) und für die Sedimentschicht zwischen 1 und 30 mm (für stark sorbierende Substanzen mit $K_{oc} > 30000$ L/kg wird eine noch feinere Diskretisierung benötigt).

TOXSWA berücksichtigt vier Arten von Prozessen (s. Kap. 6.2.3 in Beltman et al., 2006):

- Transport
 - in der Wasserschicht: Advektion, Dispersion
 - im Sediment: Advektion, Dispersion, Diffusion
 - Austausch zwischen Wasserschicht und Sediment: Advektion (in FOCUS_{sw} deaktiviert) und Diffusion
- Transformation
 - Abbau sowohl in der Wasserschicht als auch im Sediment
 - temperaturabhängig nach Arrhenius-Gleichung
- Adsorption
 - lineare Adsorption an Makrophyten (nicht in FOCUS)
 - Freundlich-Sorption ans Gewässersediment
 - Freundlich-Sorption an suspendierte Partikel
- Volatilisation
 - temperaturabhängige Henry-Konstante resultierend aus der Temperaturabhängigkeit von Wasserlöslichkeit und Dampfdruck jeweils nach Van't Hoff-Gleichung.

TOXSWA ist ein dynamisches Modell (d.h. es arbeitet mit Zeitschritten) und basiert auf Differentialgleichungen (d.h. alle Prozesse im Gewässer laufen gleichzeitig ab: Advektion, Diffusion, Sorption, Abbau etc.).

Das Modell TOXSWA zur Simulation von Pesticide Fate und Transport in Gewässern repräsentiert sicherlich den State of the Art. Klein (2007) konnte jedoch zeigen, dass das Modell STEPS-3 aus der Software STEPS-1-2-3-4 für die FOCUS-Szenarien nahezu identische PEC_{sw}- und PEC_{sed}-Werte liefert wie TOXSWA, obwohl es nur wesentlich einfachere und weniger Prozesse berücksichtigt. Diese Beobachtung deutet darauf hin, dass entweder einige von TOXSWA simulierte Prozesse (wie z.B. Advektion und Dispersion im Sediment) gegenüber den anderen nicht ins Gewicht fallen, oder dass sie zumindest in den FOCUS_{sw}-Szenarien keine wesentliche Rolle spielen.

II.4.5.3 PEC_{sw}-Berechnung Drainage

In EXPOSIT wird ein Standard-Drainageereignis festgesetzt, das drei Tage nach der PSM-Applikation stattfindet:

- Im Zeitraum November-März: 10 mm → 100 m³ pro Hektar
- Im Zeitraum April-Oktober: 1 mm → 10 m³ pro Hektar

Der damit verbundene PSM-Austrag richtet sich ebenfalls nach Saison und nach der „Gefährdungsgruppe“ (Tab. II.4-6).

Tab. II.4-6: Festsetzungen der Drainage- und PSM-Austragsereignisse in EXPOSIT.

Saison	Volumen des Drainageereignisses mm	resultierendes Wasservolumen im Graben m ³	Gesamtvolumen nach 1:2-Verdünnung (s. Text) m ³	Gefährdungsgruppe (s. Tab, II.5-2)	Stoßbelastung (PSM-Austrag während des Ereignisses) % der Aufwandmenge
Apr - Okt	1	40 (30 + 10)	80	I	0,00125
				II, III, IV	0,025
Nov - Mrz	10	130 (30 + 100)	260	I	0,0125
				II, III, IV	0,25

Die PEC_{sw_initial} für Drainage berechnet sich nach der Formel:

$$PEC_{sw_initial_D} = AWM_{korr} * (Stoßbelastung/100) / (Wasservolumen im Graben * 2 * 1000)$$

(Gl. II.4-17)

mit

PEC _{sw_initial_D}	PEC _{initial} im Graben (µg L ⁻¹) für den Eintragspfad Drainage
AWM _{korr}	um Interzeption und Dissipation korrigierte Aufwandmenge (g ha ⁻¹)
Stoßbelastung	Drainageaustrag vom Feld während des Ereignisses (% von AWM _{korr})
Wasservol. Graben	Summe aus Drainagevolumen und stehendem Volumen (m ³)
2	Verdünnungsfaktor
100	Einheitenkorrekturfaktor zur Umrechnung von % in Anteil
1000	Einheitenkorrekturfaktor zur Umrechnung von mg L ⁻¹ in µg L ⁻¹

Mit dem Verdünnungsfaktor 2 soll der Basisabfluss in einem (nicht näher definierten) upstream catchment abgebildet werden, weiterhin soll damit die Verdünnung infolge Abflusszunahme bei einem Niederschlagsereignis gegenüber dem Volumen des stehenden Grabens (für Berechnung Drifteintrag) Rechnung getragen werden. Die Festlegung dieses Verdünnungsfaktors auf den Wert „2“ war eine Expertenentscheidung unter Verwendung der Ergebnisse von Kördel und Klöppel (1996; S. 78 und 88) (schriftl. Mittlg. D. Großmann, UBA, Aug. 2014). Diese Festlegung ist nach Auffassung der Autoren aber inkonsistent: Eine Verdünnung kann (im Gegensatz zu Dispersion) nicht durch Fließen verursacht werden, sondern nur durch Vermischen des Grabenwassers mit einem zusätzlichen, PSM-unbelasteten Wasservolumen. Da aber im Gegensatz zu FOCUSsw der Graben in EXPOSIT kein upstream catchment aufweist, ist es unklar, woher die zusätzlichen 40 m³ bzw. 130 m³ kommen. Wenn ein Upstream catchment von 1 ha vorhanden wäre, würde aber auch nur das Drainagevolumen verdoppelt und nicht die 30 m³ stehendes Mindestvolumen im Graben.

FOCUSsw: In den 6 FOCUSsw-Drainageszenarien wird die PECsw für die Eintragspfade Drainage und Drift mit FOCUS_TOXSWA 2.2.1 simuliert. TOXSWA berechnet die Drainage-Einträge nicht selbst, sondern liest die von MACRO produzierte stündliche Zeitreihe der Drainage-Austräge und des Drainageflusses ein (m2t-Transferdatei).

Während Drainagefluss und Drainage-PSM-Einträge vom angrenzenden Feld gleichmäßig auf die Länge des Wasserkörpers verteilt werden, erreichen Drainagefluss und (im Fall des Bachs) der Drainage-PSM-Einträge aus dem upstream catchment den Bach am oberen, d.h. stromaufwärts gelegenen Ende. Die daraus resultierende Phasenverschiebung im Gewässer zwischen dem Zufluss aus dem Feld und dem Zufluss aus dem upstream catchment ist jedoch gering und zumindest auf den Abflussganglinien der Testsimulationen in Appendix F von FOCUS (2001) nicht zu erkennen, kann also höchstens wenige Stunden betragen. Da das Tool STEPS-3, in dem der Wasserkörper horizontal nicht segmentiert ist, nahezu identische Abflussganglinien am Auslass wie TOXSWA erzeugt (Klein, 2007), liegt die Schlussfolgerung nahe, dass die Phasenverschiebung zwischen Zuflüssen bzw. PSM-Einträgen aus dem Feld und aus dem upstream catchment vernachlässigbar ist.

TOXSWA simuliert die PECsw und PECsed jeweils für den Auslass des Wasserkörpers. Es werden sowohl Peak-Konzentrationen als auch time-weighted average concentrations (TWAC) ausgegeben.

Es wird in FOCUSsw nicht die ganze 20-jährigen Simulationszeitreihe von MACRO an TOXSWA weitergegeben und zur PECsw-Berechnung verwendet, sondern nur eine Periode von 16 Monaten, die nach Meinung von FOCUS (2001) als repräsentativ für die gesamten 20 Jahre betrachtet werden können. Die Gründe hierfür waren zum damaligen Zeitpunkt der Definition der FOCUSsw-Szenarien i) zu geringe Rechenkapazitäten und ii) Stabilitätsprobleme bei TOXSWA. Beides dürfte heute kein Problem mehr darstellen. Die Verwendung nur eines kurzen Ausschnitts der MACRO-Output-Zeitreihe (ebenso wie der PRZM-Zeitreihe) stellt einen gravierenden Schwachpunkt von FOCUS surface water dar. Denn wie von Klein (2007) demonstriert wird, können Zeitausschnitte von wenigen Monaten aus der Simulationsreihe nicht repräsentativ sein. Eine PECsw-Berechnung für die gesamte Simulationsperiode von MACRO und PRZM ist daher unerlässlich für eine zuverlässige Festlegung eines Protektionsniveaus der PECsw und PECsed in der Expositionsbewertung.

II.4.5.4 PEC_{sw}-Berechnung Surface Runoff und Erosion

EXPOSIT: Die PEC-Berechnung für Einträge über Oberflächenabfluss und Erosion erfolgt nach einem ähnlichen Konzept wie die PEC-Berechnung für Drainage. Es wird ein Standard-Oberflächenabflussereignis von 10 mm festgesetzt, das drei Tage nach der PSM-Applikation stattfindet.

PSM-Runoff- und Erosionseinträge können in EXPOSIT relativ zum PSM-Austrag aus dem Feld durch grasbewachsene Pufferstreifen zwischen Feldrand und Gewässer reduziert werden (Tab. II.4-7). Als Reduktionsmechanismen werden für die gelöste PSM-Fracht Infiltration und für die partikulär gebundene PSM-Fracht Sedimentation im Pufferstreifen angenommen. Die Reduktionseffizienzen für 10 m und 20 m Pufferbreite entsprechen den von der FOCUS Landscape and Mitigation Work Group (FOCUS, 2007) in einer Literaturlauswertung als 10. Perzentil (= 90th percentile worst case) ermittelten Reduktionseffizienzen für die Breitenklassen 10-12 m und 18-20 m. Die Reduktionsleistungen für 5 m Pufferbreite basieren auf einer Neuauswertung der Datengrundlage von FOCUS (2007) durch die Unterarbeitsgruppe "Runoff" des UBA/IVA.

Tab. II.4-7: In EXPOSIT 3.0 verwendete Reduktionseffizienzen in Abhängigkeit von der Breite des grasbewachsenen Pufferstreifens. Reduktionseffizienzen für 10 m und 20 m nach FOCUS (2007).

Breite des Pufferstreifens (m)	Reduktion des Runoffvolumens und der gelösten PSM-Fracht (%)	Reduktion der partikulär gebundenen PSM-Fracht (%)
5	40 %	40 %
10	60 %	80 %
20	80 %	95 %

Die PEC_{sw_initial} für Surface Runoff berechnet sich nach der Formel:

$$PEC_{sw_initial_R} = AWM_{korr} * Runoffeintrag / 100 / ((Wasservolumen \text{ im Graben}) * 2 * 1000)$$

mit

PEC _{sw_initial_R}	PEC _{initial} im Graben (µg L ⁻¹) für den Eintragspfad Runoff
AWM _{korr}	um Interzeption und Dissipation korrigierte Aufwandmenge (g ha ⁻¹)
Runoffeintrag	PSM-Runoffeintrag = PSM-Runoffaustrag vom Feld während des Ereignisses * (100 – Reduktionseffizienz _{Runoff}) (% von AWM _{korr})
Wasservol. Graben	Summe aus zufließendem Runoffvolumen (= abfließendes Runoffvolumen vom Feld * (100-Reduktionseffizienz _{Runoff})) und stehendem Volumen (m ³)
2	Verdünnungsfaktor
100	Einheitenkorrekturfaktor zur Umrechnung von % in Anteil
1000	Einheitenkorrekturfaktor zur Umrechnung von mg L ⁻¹ in µg L ⁻¹

Für den Fall, dass der ökotoxikologische Endpunkt für den Vergleich mit der PEC_{sw_initial} bereits Sorption ans Sediment beinhaltet, wird in EXPOSIT der PSM-Erosionseintrag (= PSM-Erosionsaustrag vom Feld während des Ereignisses * (100 – Reduktionseffizienz_{Erosion})) ins Gewässer noch zum PSM-Runoffeintrag dazugezählt. Andernfalls wird der PSM-Erosionseintrag nicht weiter berücksichtigt.

EXPOSIT 3 geht davon aus, dass der Wirkstoffanteil, der über Erosion in das Gewässer eintritt, nicht bioverfügbar ist. Dieser partikelgebundene Eintrag (Erosion) des Wirkstoffs müsste zunächst mobilisiert werden, um für die Risikobewertung von Belang zu sein. Soweit man eine schnelle und weitgehende Rücklösung des partikelgebundenen Anteils im Gewässer ausschließen kann (bzw. davon ausgehen kann, dass die Rücklösung auf der betrachteten Zeitskala von nachrangiger Bedeutung ist), geht es also um die Frage, bei welchen Organismen das Risiko einer Mobilisierung partikelgebundener Wirkstoff-Anteile besteht. Nach Ansicht des UBA kann faktisch ausgeschlossen werden, dass ein solcher Effekt bei Algen oder höheren Wasserpflanzen auftritt. Für Fische erscheint es aus Sicht des UBA momentan ebenfalls eher nicht wahrscheinlich, dass das Risiko durch einen remobilisierten Wirkstoffanteil bestimmt wird. Diese Möglichkeit besteht allerdings sicherlich bei Invertebraten, von denen viele ihre Nahrung aus dem Wasser filtern, so dass sie in einen intensiven engen Kontakt mit wirkstoffbeladenen Partikeln kommen können. Für EXPOSIT 3 wurde daher vom UBA ein taxonomisch begründeter Vorbehalt formuliert (schriftl. Mittlg. D. Großmann, Umweltbundesamt, 2014).

Der Verdünnungsfaktor von 2 bleibt konstant, unabhängig von der Reduktionsleistung des Pufferstreifens und dem resultierenden zufließenden Runoffvolumen. Ebenso wie für den Eintragspfad Drainage erscheint den Autoren die Festlegung eines konstanten Verdünnungsfaktors wissenschaftlich nicht konsistent (vgl. Diskussion in II.4.5.3).

FOCUS_{sw} – Step 3: In den 4 FOCUS_{sw}-Runoffszenarien wird die PEC_{sw} für die Eintragspfade Surface runoff, Erosion sowie Drift mit FOCUSTOXSWA 3.3.1 simuliert. TOXSWA berechnet die Runoff- und Erosions-Einträge nicht selbst, sondern liest die von PRZM produzierte und abschliessend von täglichen in stündliche Werte disaggregierte Zeitreihe der Runoff- und Erosions-Austräge und des Runoffvolumens ein (p2t-Transferdatei). Außerdem enthält das p2t-file noch eine Spalte „Infiltration“ mit Monatsmitteln der von PRZM berechneten Versickerung in 1 m Tiefe, multipliziert mit einem szenariospezifischen Faktor. Diese Komponente soll lateralen Zustrom von Zwischenabfluss zum Gewässer darstellen, PSM-Einträge über Zwischenabfluss werden aber in FOCUS_{sw} nicht berücksichtigt. Die ebenfalls enthaltene Spalte mit der Fracht des erodierten Sediments wird von TOXSWA nicht benutzt. PSM-Runoffeinträge werden im Zeitschritt des Eintrags der Wasserschicht, PSM-Erosionseinträge dem Gewässersediment zugeschlagen.

Während Runoffvolumen und gelöste (über Runoff) und partikuläre (über Erosion) PSM-Einträge vom angrenzenden Feld gleichmäßig auf die Länge des Wasserkörpers verteilt werden, erreichen Runoffvolumen und PSM-Runoffeinträge aus dem Upstream Catchment den Bach am oberen, d.h. stromaufwärts gelegenen Ende (Erosionseinträge aus dem Upstream Catchment durch Transport von Partikeln im Gewässer werden nicht modelliert). Die daraus resultierende Phasenverschiebung im Gewässer zwischen dem Zufluss aus dem Feld und dem Zufluss aus dem Upstream Catchment ist jedoch gering und zumindest auf den Abflussganglinien der Testsimulationen in Appendix F von FOCUS (2001) nicht zu erkennen, kann also höchstens wenige Stunden betragen. Da das Tool STEPS-3, in dem der Wasserkörper horizontal nicht segmentiert ist, fast die gleichen Abflussganglinien am Auslass erzeugt wie TOXSWA (Klein, 2007), liegt die Schlussfolgerung nahe, dass die Phasenverschiebung zwischen Zuflüssen/PSM-Einträgen aus dem Feld und dem upstream catchment vernachlässigbar ist.

TOXSWA simuliert die PEC_{sw} und PEC_{sed} jeweils für den Auslass des Wasserkörpers. In TOXSWA werden sowohl Peak-Konzentrationen als auch time-weighted average exposure concentrations (TWAEC) ausgegeben.

FOCUS_{sw} – Step 4: Die Simulation von grasbewachsenen Pufferstreifen als mitigation option ist in FOCUS_{sw} Step3 nicht vorgesehen. Dafür sind sogenannte Step 4-Simulationen vorgesehen, die man mit dem SWASH-Softwarepaket nicht generieren kann. Für Step 4-Simulationen wird üblicherweise das Tool SWAN verwendet (ECPA, 2008). SWAN multipliziert im Transfer-File mit dem PRZM-Output für TOXSWA (.p2t) die Spalten für die gelösten PSM-Fracht, die adsorbierte PSM-Fracht, die Sedimentfracht und das Runoffvolumen jeweils mit einem zeitlich konstanten Reduktionsfaktor, der aus der Eingabe des Benutzers berechnet wird. Das Runoffvolumen aus dem Upstream Catchment wird hierbei nur für die behandelten Felder reduziert, nicht für die unbehandelten. (Mathematisch wird allerdings in TOXSWA das Runoffvolumen im p2t file (mm/h) flächenproportional auf Feld und upstream catchment verteilt, und damit auch die Reduktion des Volumens gegenüber FOCUS Step 3-Läufen. Angesichts der geringen Größe des Feldes im Vergleich zum Upstream catchment fällt dies aber nicht ins Gewicht.)

Die Annahme, dass die unbehandelten Flächen (80 % des upstream catchments) keine Pufferstreifen aufweisen (wobei es Interpretationssache ist, ob diese Flächen Ackerflächen oder andere Landnutzungen repräsentieren), führt zu einer relativ hohen Verdünnung mit dem unveränderten Runoffvolumen dieser Flächen: Wenn für PSM-Runoff-Einträge und Runoff-Volumen die gleiche Reduktionseffizienz angenommen wird, ist die resultierende Reduktion der PEC_{initial} fast direkt proportional zur Reduktionseffizienz für Runoffeinträge und -volumen (Ter Horst et al., 2009).

An dieser Stelle ist auf ein Problem hinzuweisen: Die Reduktionseffizienz von Pufferstreifen ist in der Realität nicht nur eine Funktion der Breite des Pufferstreifens. Eine Literaturanalyse von Reichenberger et al. (2007b) und ebenso vorherige Literaturanalysen wie z.B. im FOCUS Landscape and Mitigation Report (FOCUS, 2007a, 2007b) kamen zu der Schlussfolgerung, dass grasbewachsene Pufferstreifen am unteren Rand der Parzelle im Allgemeinen effektiv in der Reduktion von PSM-Frachten im Oberflächenabfluss sind. Die gefundenen Effizienzen waren jedoch sehr stark variabel und nicht hinreichend durch die Breite der Pufferstreifen erklärbar. Es ist mittlerweile wissenschaftlicher Konsens, dass aufgrund der offensichtlichen Abhängigkeit der Effizienz von Pufferstreifen von der Größe des Runoff-Ereignisses (insbesondere des vom Feld einströmenden Runoff-Volumens) die hydrologische Reaktion (hydrological response) des Pufferstreifens explizit mit einem hydrologischen Modell wie z.B. VFSMOD simuliert werden muss (Sabbagh et al., 2009).

Analog zum Eintragspfad Drainage (vgl. Abschnitt II.5.5.3) wird in FOCUS_{sw} nicht die ganze 20-jährigen Simulationszeitreihe von PRZM an TOXSWA weitergegeben und zur PEC_{sw}-Berechnung verwendet, sondern nur eine Periode von 12 Monaten, die als repräsentativ angenommen wird. Die Lage der Periode hängt von der Applikationssaison und dem Szenario selbst ab (FOCUS, 2001). Die Gründe hierfür waren zum damaligen Zeitpunkt der Definition der FOCUS_{sw}-Szenarien i) zu geringe Rechenkapazitäten und ii) Stabilitätsprobleme bei TOXSWA. Beides dürfte heute kein Problem mehr darstellen. Die Verwendung nur eines kurzen Ausschnitts der MACRO-Output-Zeitreihe (ebenso wie der PRZM-Zeitreihe) stellt einen gravierenden Schwachpunkt von FOCUS surface water dar. Beispielsweise kommt es in FOCUS_{sw} für mindestens eine Kombination von Szenario und Applikationssaison vor, dass in der „repräsentativen Periode“ überhaupt kein Runoffereignis auftritt. Eine PEC_{sw}-Berechnung für die gesamte Simulationsperiode von MACRO und PRZM ist daher unerlässlich für eine verlässliche Vorhersage der PEC_{sw} und PEC_{sed}.

II.4.6 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen der Prozessbeschreibungen in EXPOSIT und FOCUSsw

II.4.6.1 PECsw-Berechnung Surface Runoff und Erosion

- Das Tool EXPOSIT ist eher als „Regelwerk“ statt als „Modell“ zu bezeichnen, weil eigentlich kein Prozess (abgesehen von der PSM-Dissipation in den ersten drei Tagen nach Applikation) tatsächlich simuliert wird, sondern ausschließlich mit fixen Regeln und Faktoren gearbeitet wird. Mit anderen Worten, die Runoff- und Drainage-Austräge ebenso wie die resultierenden PEC werden nicht simuliert, sondern „gesetzt“. Die Festlegung der Austräge stützt sich auf Versuchsergebnisse von Kördel und Klöppel (1994, 1996).
- Die Art, wie der relative PSM-Austrag über Oberflächenabfluss nach Reichenberger et al. (2007a) in EXPOSIT verwendet wird, führt zu einer leichten Unterschätzung der Austräge, weil die Dissipation zwischen Applikation und Austragsereignis doppelt veranschlagt wird.
- In FOCUSsw werden erheblich mehr Pesticide-Fate-Prozesse auf der behandelten Fläche und im Oberflächengewässer berücksichtigt als in EXPOSIT.
- Die Implementierung des SCS Curve-Number-Ansatzes in PRZM (und anderen Modellen wie EPIC oder SWAT) ist konzeptionell nicht korrekt. Der Curve Number-Ansatz wurde in den 1960er und Anfang der 1970er Jahre vom USDA Soil Conservation Service (SCS) zur Vorhersage von Gewässerabflussspitzen entwickelt (Soil Conservation Service, 1972) und berechnet eigentlich *nicht* den Oberflächenabfluss, sondern den *Direktabfluss* im Gewässer (= Gewässerabfluss minus Basisabfluss). In PRZM wird der vom Curve Number-Ansatz vorhergesagte "Runoff" (im Sinne von Direktabfluss) fälschlicherweise als Oberflächenabfluss („surface runoff“) interpretiert. Dies führt (mit der Parametrisierung der Curve Numbers nach FOCUS) zu einer Überschätzung von Oberflächenabfluss und damit auch von Bodenabtrag in FOCUSsw. Dies führt wiederum zu einer Überschätzung des gelösten bzw. partikulär gebundenen Wirkstoffaustrags. Allerdings wird die Überschätzung des Bodenabtrags durch den folgenden Punkt wieder mehr als kompensiert.
- FOCUSsw beschränkt die Fläche, die Erosionseinträge ins Gewässer liefert, auf einen 20 m breiten Korridor in Nachbarschaft zum Gewässer (FOCUSswpond bzw. stream). Dies wird damit begründet, dass erodiertes Sediment beim Transport über längere Distanzen dazu neigt, wieder abgelagert zu werden. Die von PRZM verwendeten MUSLE- und MUSS-Gleichungen zur Erosionsberechnung beinhalten jedoch bereits Deposition (Williams, 1975). Eine zusätzliche (doppelte) Berücksichtigung der Sedimentdeposition ist daher konzeptionell falsch. Die Konsequenz ist eine systematische Unterschätzung der PSM-Erosionseinträge in die FOCUSsw-Wasserkörper, was allerdings nur für stark sorbierende Substanzen von Bedeutung ist
- Zwischenabfluss wird in EXPOSIT gar nicht und in den FOCUSsw-Runoffszenarien nur approximativ ohne PSM-Eintrag berücksichtigt. Zwischenabfluss kann jedoch mit MACRO relativ einfach simuliert werden (s. Dubus et al., 2009) und könnte in zukünftigen Versionen von GERDA berücksichtigt werden.
- Die Einteilung in vier Gefährdungsgruppen zur Bestimmung der Drainageausträge in EXPOSIT deckt nicht den gesamten Parameterraum ab, der von den drei Parametern aufgespannt wird. Die Einordnung eines bestimmten Wirkstoffs in eine Klasse ist also nicht immer

eindeutig möglich. Abgesehen davon ist der Parameter Wasserlöslichkeit nach Meinung der Autoren redundant: Die Wasserlöslichkeit eines Wirkstoffs spielt für sein Sorptionsverhalten im Boden in der Praxis meistens keine Rolle, weil sich die Konzentrationen des Wirkstoffs in Lösung in der Umwelt i.d.R. weit unterhalb der Löslichkeitsgrenze bewegen.

- Während EXPOSIT keine Prozesse im Gewässer simuliert, sind die wichtigsten für PSM relevanten im Gewässer ablaufenden Prozesse in TOXSWA enthalten: Abbau, Sorption, Verflüchtigung, hydrodynamische Dispersion, Diffusion im Gewässer und im Sediment sowie diffusiver Austausch zwischen Wasserschicht und Sediment.
- Anmerkung: Dispersion ist nicht zu verwechseln mit Verdünnung (Dilution). Dispersion führt zwar zu einem Abflachen der Konzentrationsspitze, aber nicht zu einer Verringerung der *mittleren* Konzentration im betrachteten Wasservolumen. Es ist daher nicht gerechtfertigt, aus dem bloßen Fließen (und damit Auftreten von hydrodynamischer Dispersion) einen Verdünnungsfaktor abzuleiten. Statt dessen könnte man allerdings einen „Peak-Abflachungsfaktor“ als Funktion der Fließstrecke oder der Zeit ableiten.

Nach Meinung der Autoren sollte prinzipiell, sobald ein fließendes Gewässer simuliert wird, hydrodynamische Dispersion berücksichtigt werden (was in TOXSWA der Fall ist). Ebenso sollte, sobald ein Einzugsgebiet mit einem verzweigten Gewässernetz simuliert wird, geomorphologische Dispersion berücksichtigt werden. Die Art der Berücksichtigung des jeweiligen Prozesses kann der Komplexität des im Tool verwendeten Ansatzes angepasst werden. (Anmerkung: Allerdings ist einschränkend darauf hinzuweisen, dass auch bei der Entwicklung des Tools GERDA aus programmtechnischen und arbeitswirtschaftlichen Gründen bislang davon Abstand genommen worden ist, hydrodynamische und geomorphologische Dispersion in die PEC-Simulation für Fließgewässer aufzunehmen.)

II.4.6.2 Szenariendefinition und PEC-Berechnung

- Das Szenarienkonzept in FOCUSsw ist komplexer als das in EXPOSIT.
- In EXPOSIT wird ein quadratisches Feld mit 1 ha Fläche angenommen. Der Wasserkörper in EXPOSIT ist ein parallel zum behandelten Feld verlaufender statischer Graben mit 100 m Länge, 1 m Breite und (bei trockenem Wetter) 30 cm Wassertiefe. Das heißt, das stehende Volumen beträgt 30 m³. Der Graben ist aber so tief, dass er zusätzlich 100 m³ Oberflächenabflusswasser vom Feld aufnehmen kann. In diesem Falle beträgt die Wassertiefe dann 130 cm.
- In FOCUS surface water (FOCUS, 2001) gibt es drei Typen von Szenarien: ditch (Gaben), stream (Bach) und pond (Teich). Alle Wasserkörper haben einen rechteckigen Querschnitt, so dass sich das Volumen als Produkt von Länge, Breite und Tiefe ergibt (vgl. Tab. II.4-3). Der FOCUS-Ditch ist von den Dimensionen her identisch mit dem EXPOSIT-Graben, tritt allerdings nur in Verbindung mit Drainageszenarien auf.
- Zur Szenariendefinition in FOCUSsw sind folgende Kritikpunkte anzubringen:
 - Es ist nicht einsichtig, dass in FOCUSsw der Graben nicht mit Oberflächenabfluss kombinierbar ist. Auch in flachen Landschaften mit Entwässerungsgräben kann Oberflächenabfluss auftreten.
 - FOCUSsw beschränkt die Fläche, die Erosionseinträge ins Gewässer liefert, auf einen 20 m breiten Korridor in Nachbarschaft zum Pond bzw. zum Stream. Dies wird damit

begründet, dass erodiertes Sediment beim Transport über längere Distanzen dazu neigt, wieder abgelagert zu werden. Die von PRZM verwendeten MUSLE- und MUSS-Gleichungen zur Erosionsberechnung beinhalten jedoch bereits Deposition (Williams, 1975). Eine zusätzliche (doppelte) Berücksichtigung der Sedimentdeposition ist daher konzeptionell falsch. Die Konsequenz ist eine systematische Unterschätzung der PSM-Erosionseinträge in die FOCUS_{sw} water bodies, was allerdings nur für stark sorbierende Substanzen von Bedeutung ist.

- Beide Kritikpunkte wurden in der Anpassung der FOCUS water body types in FOOT-PRINT (Dubus et al., 2009) und im Tool GERDA berücksichtigt.
- Das Modell TOXSWA zur Simulation von Pesticide Fate und Transport in Gewässern repräsentiert sicherlich den State of the Art. Klein (2007) konnte jedoch zeigen, dass sein Modell STEPS-3 aus der Software STEPS-1-2-3-4 für die FOCUS-Szenarien nahezu identische PEC_{sw}- und PEC_{sed}-Werte liefert wie TOXSWA, obwohl es nur wesentlich einfachere und weniger Prozesse berücksichtigt, sowohl hinsichtlich Hydrologie als auch Pesticide Fate. Diese Beobachtung deutet darauf hin, dass entweder einige von TOXSWA simulierte Prozesse (wie z.B. Advektion und Dispersion im Sediment) gegenüber den anderen nicht ins Gewicht fallen, oder dass sie zumindest in den FOCUS_{sw}-Szenarien keine wesentliche Rolle spielen.
- Der Verdünnungsfaktor 2 in der Gleichung zur PEC_{sw}-Berechnung für Drainage und Runoff in EXPOSIT ist nach Auffassung der Autoren inkonsistent: Eine Verdünnung kann (im Gegensatz zu Dispersion) nicht durch Fließen verursacht werden, sondern nur durch Vermischen des Grabenwassers mit einem zusätzlichen Wasservolumen (ohne Wirkstoff). Da aber im Gegensatz zu FOCUS_{sw} der Graben kein (definiertes) upstream catchment aufweist, ist es unklar, woher die zusätzlichen 40 m³ bzw. 130 m³ Wasservolumen kommen. Wenn ein Upstream catchment von 1 ha vorhanden wäre, würde aber auch nur das Drainage- bzw. Runoffvolumen verdoppelt und nicht die 30 m³ stehendes Mindestvolumen im Graben. Die Verwendung eines Verdünnungsfaktors in den PEC_{sw}-Gleichungen von EXPOSIT ist daher aus Sicht der Autoren nicht nachvollziehbar.
- Hinsichtlich der Filterwirkung von grasbewachsenen Pufferstreifen (grassed edge-of-field buffer strips) ist folgendes anzumerken:
 - PSM-Runoff- und Erosionseinträge können in EXPOSIT im Vergleich zum Austrag aus dem Feld durch grasbewachsene Pufferstreifen zwischen Feldrand und Gewässer reduziert werden (Tab. II.4-7). Als Reduktionsmechanismen werden für die gelöste PSM-Fracht Infiltration und für die partikulär gebundene PSM-Fracht Sedimentation im Pufferstreifen angenommen.
 - Der Verdünnungsfaktor von 2 in der PEC-Gleichung von EXPOSIT bleibt konstant, unabhängig von der Reduktionsleistung des Pufferstreifens und des resultierenden zufließenden Runoffvolumens. Wie für Drainage ist daher die Interpretation des Verdünnungsfaktors für Runoff unklar und seine Berechtigung fraglich.
 - Die Simulation von grasbewachsenen Pufferstreifen als Risikomanagementoption ist in FOCUS_{sw} Step3 nicht vorgesehen. Dafür sind sogenannte Step 4-Simulationen notwendig, die man mit dem SWASH-Softwarepaket nicht generieren kann. Für FOCUS_{sw} Step 4-Simulationen wird üblicherweise das Tool SWAN verwendet, das im Auftrag der ECPA entwickelt wurde (ECPA, 2008). Die in SWAN getroffene Annahme, dass die unbehandelten Flächen (80 % des upstream catchments) keine Pufferstreifen aufweisen, führt zu einer relativ hohen Verdünnung mit dem unveränderten Runoffvolumen dieser Flä-

chen: Wenn für PSM-Runoff-Einträge und Runoff-Volumen die gleiche Reduktionseffizienz angenommen wird, ist die resultierende Reduktion der PEC_{initial} fast direkt proportional zur Reduktionseffizienz für Runoffeinträge und -volumen (Ter Horst et al., 2009).

- Die Reduktionseffizienz von Pufferstreifen ist in Wirklichkeit nicht nur eine Funktion der Breite des Pufferstreifens. Eine Literaturanalyse von Reichenberger et al. (2007b) und ebenso vorherige Literaturanalysen wie z.B. im FOCUS Landscape and Mitigation Report (FOCUS, 2007a, 2007b) kamen zu der Schlussfolgerung, dass grasbewachsene Pufferstreifen am unteren Rand der Parzelle im Allgemeinen effektiv in der Reduktion von PSM-Frachten im Oberflächenabfluss sind. Die gefundenen Effizienzen waren jedoch stark variabel und nicht hinreichend durch die Breite der Pufferstreifen erklärbar. Es ist mittlerweile wissenschaftlicher Konsens, dass aufgrund der offensichtlichen Abhängigkeit der Effizienz von Pufferstreifen von der Größe des Runoff-Ereignisses (insbesondere des vom Feld einströmenden Runoff-Volumens) die hydrologische Reaktion (hydrological response) des Pufferstreifens explizit mit einem hydrologischen Modell wie z.B. VFSSMOD simuliert werden muss (Sabbagh et al., 2009).
- Es wird in FOCUS_{sw} nicht die gesamte Simulationszeitreihe von MACRO (7 1/3 Jahre) bzw. PRZM (20 Jahre) an TOXSWA weitergegeben und zur PEC_{sw}-Berechnung verwendet, sondern nur eine Periode von 16 bzw. 12 Monaten, die nach Ansicht der FOCUS_{sw} Working Group als repräsentativ anzusehen ist, ohne dass in FOCUS (2001, 2007a, 2007b) dafür ein Beleg angeführt wird. Die Gründe hierfür waren zum Zeitpunkt der Definition der FOCUS-Szenarien (i) zu geringe Rechenkapazitäten und (ii) Stabilitätsprobleme des Programms. Beides dürfte heute kein Problem mehr darstellen. Die Verwendung nur eines kurzen Ausschnitts der MACRO- bzw. PRZM-Output-Zeitreihe stellt einen gravierenden Schwachpunkt von FOCUS surface water dar. Wie von Klein (2007) demonstriert wurde, können Zeitausschnitte von wenigen Monaten aus der Simulationsreihe nicht "repräsentativ" sein. Eine PEC_{sw}-Berechnung für die gesamte Simulationsperiode von MACRO und PRZM ist daher unerlässlich für eine zuverlässige Vorhersage der PEC_{sw} bzw. PEC_{sed}.

II.5 Sensitivitätsanalyse der Modellparameter und Eingabevariablen

Die Sensitivität der Modellparameter von MACRO 4.3 und PRZM ist bereits in mehreren Studien (z.B. Dubus et al., 2003a; Dubus und Brown, 2002; FEMVTF, 2001; Reichenberger, 2005) untersucht worden und hinreichend bekannt. Für MACRO sind darüber hinaus auch die für den Drainageaustrag entscheidenden Wettercharakteristiken ermittelt worden (Nolan et al., 2008). Erneute Sensitivitätsanalysen für MACRO und PRZM würden daher mit hoher Wahrscheinlichkeit keinen nennenswerten Erkenntnisgewinn bringen und sind daher im hier vorgestellten Projekt nicht vorgesehen. Stattdessen wird im Folgenden eine Synthese der Ergebnisse der bereits durchgeführten Sensitivitätsanalysen vorgenommen.

II.5.1 Klärung der Terminologie

Da die Begriffe „Sensitivität“, „Variabilität“ und „Unsicherheit“ von Parametern häufig missverständlich verwendet bzw. verwechselt werden, sollen diese Begriffe im Folgenden vorab kurz präzisiert werden.

II.5.1.1 Sensitivität

Die Sensitivitätsanalyse ist die Untersuchung, wie die *Variation im Output eines Modells* auf die verschiedenen *Variationen der Modellinputs* zurückgeführt werden kann (Saltelli et al., 2008). In früheren Untersuchungen wurden Sensitivitätsanalysen meist nach der Methode "ein Faktor auf einmal" (one at a time) durchgeführt, bei der für jeden Modelllauf der Wert eines einzigen Parameters verändert wird und man danach wieder zu einem Basisszenario (einer Ausgangssituation) zurückkehrt. Die Sensitivität wird berechnet als ROV (ratio of variation), d.h. dem Verhältnis zwischen der Änderung der Ziel-Outputvariable und der Änderung des Werts des Inputparameters. Diese Methode wird jedoch heute aus folgenden Gründen nicht mehr anerkannt, (vgl. http://en.wikipedia.org/wiki/Sensitivity_analysis#The_OAT_paradox):

- 1) Die Ergebnisse hängen stark von der Wahl des oder der Basisszenarien ab und können nicht auf andere Situationen extrapoliert werden.
- 2) Es ist unmöglich, den gesamten realistischen Parameterraum zu untersuchen. Je mehr Parameter in die Analyse einbezogen sind, desto größer wird dieses Problem.
- 3) Der Effekt von Korrelationen zwischen den Parametern kann nicht untersucht werden.
- 4) Der Effekt von Interaktionen zwischen den Parametern kann nicht untersucht werden, d.h. der Effekt des Zusammenspiels von Parametern auf die Zielvariable, oder anders ausgedrückt, der Einfluss des Wertes eines Parameters auf die Sensitivität eines anderen Parameters.

Saltelli et al. (2005) argumentieren, dass die Sensitivität eines Inputparameters in Form der Varianz ausgedrückt werden sollte, die dieser Parameter zur Gesamtvarianz der betrachteten Outputvariable beiträgt, und dass Maße wie ROV nur für lineare Modelle funktionieren.

Gemäß dem Vorschlag von Saltelli et al. (2005) wird im Folgenden definiert: die Sensitivität eines Parameters bezeichnet diejenige Varianz, mit der dieser Parameter zur Gesamtvarianz des Modelloutputs beiträgt. Diese Varianz kann durch eine Screening-Methode wie die von Morris (Campolongo et al., 2007) angenähert oder durch eine echt varianzbasierte Methode

wie extended FAST (extended Fourier Amplitude Sensitivity Testing; Saltelli, 1999) berechnet werden.

II.5.1.2 Epistemische Unsicherheit

Die epistemische Unsicherheit eines Parameters ("epistemic uncertainty") ist der Umstand, dass der *wahre Wert des Parameters nicht bekannt* ist. Sie resultiert aus unvollständigem Wissen (Moore, 2001), z.B. durch einen zu kleinen Stichprobenumfang oder einfach infolge des Fehlens von (Mess-)Werten.

Typische Beispiele für epistemische Unsicherheit von Parametern im Zusammenhang der Modellierung des Verhaltens und des Transports von PSM in der Umwelt sind das Fehlen der Lagerungsdichte oder der Bodenstruktur für ein zu modellierendes Bodenprofil.

Epistemische Unsicherheit kann durch zusätzliche Messungen reduziert werden.

II.5.1.3 Variabilität

Die Variabilität eines Parameters bezeichnet das Phänomen, dass der Wert eines *Parameters im Raum oder in der Zeit nicht konstant* ist. Typische Beispiele für Parametervariabilität sind

- Variabilität von Textur und Struktur innerhalb eines Feldes
- Variabilität von Sorptions- und Abbauparametern innerhalb eines Standorts oder zwischen verschiedenen Standorten
- Variabilität der Sensitivität (hier = Empfindlichkeit) gegenüber einem Wirkstoff zwischen verschiedenen Spezies einer taxonomischen Gruppe (z.B. Vögeln) oder zwischen verschiedenen Individuen einer Population

Es ist anzumerken, dass es auch von der Problemformulierung abhängt, was Variabilität und was epistemische Unsicherheit ist. Beispielsweise kann die Verteilung der Sensitivität gegenüber einem Giftstoff zwischen verschiedenen Vogelarten in manchen Fällen Variabilität (Evaluierung für alle Vogelarten) und in anderen Fällen epistemische Unsicherheit (Evaluierung für eine bestimmte Vogelart, für die keine Testergebnisse vorliegen) darstellen.

Im Gegensatz zur epistemischen Unsicherheit kann die Variabilität nicht durch zusätzliche Messungen reduziert werden (aber sie kann durch Messungen besser quantifiziert werden).

II.5.1.4 Schlussfolgerungen

Der Umstand, dass ein Parameter sensitiv ist, impliziert nicht automatisch, dass dadurch ein hohes Maß an Unsicherheit in den Modellergebnissen hervorgerufen wird. Wenn der wahre Wert des Parameters gut bekannt ist, wird der Parameter nur wenig Unsicherheit in den Modellergebnissen produzieren. Andererseits, wenn ein Parameter unsicher ist, aber wenig sensitiv, wird er ebenfalls nicht in größerem Umfang Unsicherheit in den Ergebnissen hervorgerufen. Die wichtigen Parameter sind also diejenigen, die zugleich sensitiv und unsicher sind.

Da die Variabilität eines Parameters nicht reduziert werden kann, muss sie, wenn sie erheblich und wenn der Parameter sensitiv ist, in der Modellierung berücksichtigt werden. Dies kann auf explizite Weise (z.B. Monte-Carlo-Simulation) oder implizite Weise (z.B. Simulation verschiedener Szenarien oder Faktorkombinationen) geschehen.

II.5.2 Synthese vorhandener Sensitivitätsanalysen für das Modell MACRO

MACRO (Larsbo und Jarvis, 2003; Larsbo et al., 2005) ist ein physikalisch basiertes, eindimensionales, numerisches Modell vom Typ „dual-permeability“ für den Wasserfluss und den Transport reaktiver Substanzen im Boden. Es wird sowohl in der Forschung über den Transport von Pflanzenschutzmitteln im Boden als auch in der Risikoabschätzung für Zulassungszwecke angewandt. Die besondere Stellung von MACRO ist darin zu sehen, dass es auch Wasserflüsse über *Makroporenfluss* und damit verbundenen PSM-Transport simuliert.

Exkurs: Der Fluss entlang bevorzugter Fließwege (preferential flow) beinhaltet alle Phänomene, bei denen Wasser und gelöste Substanzen sich entlang bestimmter Transportwege im Boden bewegen und dabei an einem Teil der porösen Matrix vorbeifließen (“all phenomena where water and solutes move along certain pathways, while bypassing a fraction of the porous matrix“; Hendrickx and Flury, 2001). Er kann grob unterteilt werden in (i) Makroporenfluss entlang Spalten, Rissen, leeren Wurzelkanälen und Regenwurmgingen (z.B. Schwartz et al., 1998; Flury et al., 1994) und (ii) finger flow, der in sandigen Böden auftritt (Ghodrati and Jury, 1990; Wang et al., 2003) und hauptsächlich durch die physikalischen Fluideigenschaften von Wasser verursacht wird (Jury et al., 2003).

Im Modell MACRO ist der Porenraum in zwei Fließdomänen (flow domains) unterteilt: Makroporen und Mikroporen. Zwischen beiden findet Austausch von Wasser und gelösten Stoffen statt. MACRO ist nicht auf die Anwendung auf Tonböden beschränkt, sondern kann für alle Bodenarten angewandt werden.

Die erste Version des Modells MACRO wurde 1991 veröffentlicht (Jarvis, 1991). Seitdem sind zahlreiche Validierungsstudien für MACRO durchgeführt worden (z.B. Reichenberger, 2005; Larsson und Jarvis, 1999). Die aktuelle Version ist MACRO 5.2 (veröffentlicht im Dezember 2010). Diese Version ist im Juni 2012 in FOCUSsw übernommen worden (vorher wurde die DOS-basierte Version 4.3 verwendet).

II.5.2.1 Sensitivität der Parameter für Boden-, Kultur- und Substanz-Eigenschaften

Dubus und Brown (2002) sowie Dubus et al. (2003) haben eine Sensitivitätsanalyse für vier PSM-Transportmodelle durchgeführt: MACRO, PRZM, Pelmo und PESTLA. Die Analyse bezog sich auf den Austragspfad Leaching, ist aber zu großen Teilen auf den Pfad Drainage übertragbar. Die Studie umfasste

- zwei Substanzen
 - PSM 1: $K_{oc} = 20 \text{ L/kg}$, $DT_{50} = 7.8 \text{ d}$ ($20 \text{ }^\circ\text{C}$)
 - PSM 2: $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT_{50} = 23.3 \text{ d}$ ($20 \text{ }^\circ\text{C}$)
- zwei Böden
 - Wick (sandiger Lehm)
 - Hodnet (toniger Lehm)
- zwei Methoden der Sensitivitätsanalyse
 - one-at-a-time; Sensitivitätsmaß: maximum absolute ratio of variation (MAROV)
 - Monte Carlo; Sensitivitätsmaß: standardisierter Rang-Regressionskoeffizient (SRRC)
- zwei Output-Größen:
 - kumulative Sickerung (Perkolation) unterhalb 1 m Bodentiefe

- o kumulativer Leachingaustrag unterhalb 1 m Bodentiefe.

Von den 43 untersuchten Parametern für das Modell MACRO (v. 4.1) sind die 15 sensitivsten Parameter nachfolgend in den Tabellen II.5-1 und II.5-2 dargestellt:

Tab. II.5-1: Die 15 sensitivsten Parameter in Bezug auf den Modelloutput "kumulative Perkolation" (nur one-at-a-time). Bodenparameter (überwiegend hydraulische) in blau, Parameter der Kultur in grün, andere Parameter in violett. (Substanzparameter hier nicht aufgeführt, weil die Substanzeigenschaften keinen Einfluss auf den Wasserfluss haben). Parameter, die von mehreren Faktoren abhängen, haben eine kombinierte Farbe. Zur Bezeichnung und Bedeutung der Parameter s. Text.

Rang (absteigend)	Boden 1 (Wick)	Boden 2 (Hodnet)
1	XMPOR	XMPOR
2	RPIN	RPIN
3	ROOTMAX	THETAINI
4	THETAINI	WILT
5	WILT	ROOTMAX
6	ZALP	TPORV
7	ZLAMB	ZALP
8	CTEN	CTEN
9	KSM	ZLAMB
10	TPORV	BETA
11	BETA	ZN
12	ZN	GAMMA
13	WATEN	LAIMAX
14	GAMMA	KSATMIN
15	LAIMAX	RINTEN

Tab. II.5-2: Die 15 sensitivsten Parameter in Bezug auf den Modelloutput "kumulativer Leachingaustrag". Bodenparameter (überwiegend hydraulische) in **blau**, Parameter der Kultur in **grün**, Substanzparameter in **rot**, andere Parameter in **violett**. Parameter, die von mehreren Faktoren abhängen, haben eine kombinierte Farbe. Ergebnisse für zwei unterschiedliche Pestizide. Zur Bezeichnung und Bedeutung der Parameter s. Text.

Rang (absteigend)	Boden 1 (Wick)		Boden 2 (Hodnet)	
	One-at-a-time	Monte Carlo	One-at-a-time	Monte Carlo
<u>Pesticide 1</u>				
1	DEG	DEG	DEG	DEG
2	FREUND	ZKD	TPORV	TRESP
3	ZKD	FREUND	TRESP	KSM
4	TRESP	TRESP	FREUND	ZN
5	XMPOR	ANNTAV	KSM	ASCALE
6	GAMMA	ZLAMB	XMPOR	FREUND
7	ANNTAV	FSTAR	ZN	TPORV
8	ZLAMB	EXPB	ASCALE	ZLAMB
9	ANNAMP	WILT	ANNTAV	ANNTAV
10	TPORV	XMPOR	ZLAMB	DIFF
11	EXPB	ZFINT	ROOTMAX	ZKD
12	KSM	GAMMA	WILT	KSATMIN
13	ZALP	ZM	RPIN	XMPOR
14	ASCALE	ZMIX	DIFF	ANNAMP
15	RINTEN	KSM	KSATMIN	CTEN

Rang (absteigend)	Boden 1 (Wick)		Boden 2 (Hodnet)	
	One-at-a-time	Monte Carlo	One-at-a-time	Monte Carlo
<u>Pesticide 2</u>				
1	FREUND	FREUND	TPORV	ASCALE
2	ZKD	ZKD	ZN	KSM
3	DEG	DEG	XMPOR	ZN
4	KSM	KSM	FREUND	DEG
5	TPORV	ZN	KSM	FREUND
6	ZN	TRESP	ASCALE	DIFF
7	GAMMA	ANNTAV	DEG	ZKD
8	TRESP	ZLAMB	DIFF	TPORV
9	ANNTAV	ASCALE	TRESP	ZLAMB
10	ZLAMB	EXPB	ZKD	TRESP
11	RINTEN	KSATMIN	KSATMIN	FRACMAC
12	XMPOR	RINTEN	GAMMA	RINTEN
13	ASCALE	GAMMA	ANNTAV	CTEN
14	CTEN	FRACMAC	ZLAMB	KSATMIN
15	EXPB	ROOTINIT	ROOTMAX	XMPOR

Man erkennt, dass die Reihenfolge der Parametersensitivität von der Substanz, vom Boden und der verwendeten Methode der Sensitivitätsanalyse abhängt.

Dennoch kann man für die Sensitivität in Bezug auf Leachingaustrag festhalten:

- Die Parameter, die Sorption und den Abbau der chemischen Substanz steuern, sind immer sensitiv :
 - ZKD (Freundlich-Adsorptionskoeffizient = K_f ; meistens berechnet aus dem K_{oc} der Substanz und dem Gehalt an organischem Kohlenstoff des jeweiligen Bodenhorizonts)
 - FREUND (Freundlich-Exponent = n_f)
 - DEG (Abbauratenkonstante; berechnet aus DT50)
 - TRESP (Exponent, der die Abhängigkeit der Abbauraten von der Temperatur steuert)
- Es gibt eine Reihe von sensitiven hydraulischen Parametern. Der Einfluss der hydraulischen Parameter steigt mit dem Auftreten von preferential flow und der Adsorption der chemischen Substanz.
 - XMPOR ("boundary water content" = Grenzwassergehalt; volumetrischer Wassergehalt des Bodens, wenn die Mikroporen gesättigt und die Makroporen leer sind; in %)
 - KSM ("boundary hydraulic conductivity" = Grenzwasserleitfähigkeit; hydraulische Leitfähigkeit des Bodens, wenn die Mikroporen gesättigt und die Makroporen leer sind; in mm/h)
 - ASCALE ("effective diffusion pathlength" = effektive Diffusionslänge; dieser Parameter kontrolliert den Austausch von Wasser und gelösten Stoffen zwischen der Mikro- und der Makroporendomäne; mm)
 - TPORV ("saturated water content" = gesättigter Wassergehalt; dies kann aufgrund eingeschlossener Luft weniger sein als die Gesamtporosität; in %)
 - ZN ("tortuosity / pore size distribution factor" = Tortuositäts-/Porengrößenverteilungsfaktor; kinematischer Exponent, der den Anstieg der hydraulischen Leitfähigkeit in den Makroporen mit zunehmender relativer Sättigung der Makroporen beschreibt; dimensionslos).
- Drei dieser fünf Parameter (XMPOR, KSM und ASCALE) beschreiben die Grenze oder den Austausch zwischen den beiden Domänen (Mikroporen und Makroporen). Die Tatsache, dass die totale gesättigte Leitfähigkeit (KSATMIN) weniger sensitiv ist als die gesättigte Leitfähigkeit der Mikroporen (KSM), erscheint auf den ersten Blick überraschend. Aber tatsächlich ist es logisch, dass das 'Anspringen' der Makroporen einen größeren Effekt hat als die Fließgeschwindigkeit in den Makroporen, die in jedem Fall wesentlich höher ist als die Fließgeschwindigkeit in den Mikroporen (d.h. in der Bodenmatrix).

Die dargestellte Sensitivitätsanalyse bezog sich zwar auf Leaching in 1 m Tiefe. Da aber Drainagen häufig in ähnlicher Tiefe liegen (nur Maulwurfsdrainagen liegen flacher), sind die Ergebnisse durchaus auf den Abfluss aus Drainageröhren übertragbar. Beim Drainagefluss kommt im Vergleich zu Leaching noch Folgendes hinzu: In MACRO findet Drainage nur dann statt, wenn die Makroporen gesättigt sind (Larsbo und Jarvis, 2003). Alle Layer mit gesättigten Makroporen tragen zum Drainagefluss bei (auch solche, die zu einem „perched water table“ gehören). Nur wenn die Mikroporen ebenfalls gesättigt sind, tragen diese auch zum Drainagefluss bei. Folglich wird für den Pfad Drainage der Einfluss der Parameter, die den Makroporenfluss und

den Austausch zwischen Mikro- und Makroporen beschreiben (ZN, Makroporosität (= TPORV – XMPOR), KSATMIN, KSM, ASCALE.), noch einmal größer sein als für den Pfad Leaching.

II.5.2.2 Sensitivität meteorologischer und klimatischer Variablen

In der Studie von Nolan et al. (2008) wurden die maßgeblichen klimatischen Einflussfaktoren für den PSM-Austrag über Leaching und Drainage quantifiziert. Folgende Kombinationen wurden simuliert:

- Leaching: Klimastation Oxford (mittlerer Jahresniederschlag 640 mm; Jahresmitteltemperatur 9.4 °C), UK: 720 Simulationen
 - 2 Applikationsperioden
 - Frühjahr (April – Mai)
 - Herbst (September – Oktober)
 - 5 Applikationsdaten pro Periode
 - 4 Böden (9 – 40 % Ton im Oberboden)
 - Cuckney
 - Hall
 - Ludford
 - Enborne
 - 3 PSM mit unterschiedlichen Eigenschaften
 - PSM 1: Koc = 20 L/kg, DT50(20 °C) = 8 d
 - PSM 2: Koc = 100 L/kg, DT50(20 °C) = 23 d
 - PSM 3: Koc = 220 L/kg, DT50(20 °C) = 88 d
 - 6 Wetterzeitreihen (mehrere synthetische Realisationen des gleichen Klimas).
- Leaching: Klimastation Zaragoza (mittlerer Jahresniederschlag 320 mm; Jahresmitteltemperatur 14.5 °C), Spanien: 720 Simulationen
 - 2 Applikationsperioden (s.o.)
 - 5 Applikationsdaten pro Periode
 - 4 Böden (s.o.)
 - 3 PSM mit unterschiedlichen Eigenschaften (s.o.)
 - 6 Wetterzeitreihen (mehrere synthetische Realisationen des gleichen Klimas).
- Drainage: Klimastation Oxford, UK: 900 Simulationen
 - 2 Applikationsperioden (s.o.)
 - 5 Applikationsdaten pro Periode
 - 5 Böden (13 - 56 % Ton im Oberboden)
 - Quorndon
 - Clifton
 - Brockhurst
 - Hanslope
 - Denchworth
 - 3 PSM mit unterschiedlichen Eigenschaften
 - 6 Wetterzeitreihen (verschiedene synthetische Realisationen des gleichen Klimas).

Die Simulationsergebnisse in Form von kumulativem PSM-Austrag wurden mit Hilfe von (i) Klassifikationsbäumen (classification trees) und (ii) Pearson-Korrelation ausgewertet, um Beziehungen zwischen der abhängigen Variable (kumulativer PSM-Austrag), 91 verschiedenen klimatischen Variablen sowie den Böden aufzuzeigen.

Blenkinsop et al. (2008) interpretierten die Ergebnisse von Nolan et al. (2008) wie folgt: Die klimatischen Faktoren, die den PSM-Austrag über Leaching und Drainage beeinflussen, sind zu einem gewissen Grad spezifisch für die jeweilige Boden/PSM-Kombination. Einige generelle Regeln können dennoch abgeleitet werden:

- Für Oxford, Leachingszenarien:
 - Es gab im Mittel einen starken Einfluss des Niederschlags im Winter sowohl nach Applikation im Frühjahr als auch im Herbst, vor allem für die beiden stärker adsorbierenden und persistenteren Substanzen.
 - Im Gegensatz dazu wurden die Leachingausträge der schwach sorbierenden Substanz eher von den Wetterbedingungen (Niederschlag und Temperatur) in den Tagen und Wochen nach der Applikation kontrolliert.
- Für Oxford, Drainageszenarien:
 - Im Wesentlichen stellten sich die gleichen klimatischen Faktoren als wichtig heraus wie für die Leachingszenarien.
 - Allerdings war der Einfluss der Wetterbedingungen kurz nach Applikation und des Zeitabstands größerer Niederschlagsereignisse (≥ 20 mm) zum Applikationstag deutlich größer.
- Für Zaragoza (nur Leaching):
 - Im Vergleich zu Oxford waren Temperatureffekte weiter verbreitet, und der Einfluss der Niederschlagsmenge im Winter stark reduziert. Dies könnte durch die im Mittel höheren Temperaturen in Zaragoza (14,5 °C Jahresmittel vs. 9,4 °C in Oxford) und die geringere Häufigkeit kleinerer Niederschläge (≤ 10 mm) in Zaragoza bedingt sein. Hierbei ist zu beachten, dass Zaragoza kein Mittelmeerklima mit hohen Winterniederschlägen, sondern ein ganzjährig trockenes semiarides Klima aufweist.
 - Der Einfluss von Lag-Zeiten (Zeitspanne nach der Applikation bis zum Eintreten eines Niederschlagsereignisses über einer bestimmten Schwelle oder eines bestimmten kumulativen Niederschlags) war größer als in Oxford; allerdings war die Beziehung zwischen Lag-Zeiten und PSM-Austrag nicht monoton (Artefakte bedingt durch die univariate Analyse sind nicht auszuschließen).
 - Ähnlich wie für Oxford waren die Wetterbedingungen unmittelbar nach der Applikation auf den stärker strukturierten Böden von Bedeutung.

Auf der Basis der Ergebnisse von Nolan et al. (2008) wählten Blenkinsop et al. (2008) die folgenden acht klimatischen Variablen als die relevantesten für die Ableitung der FOOTPRINT climate zones aus (Anmerkung: diese Variablen werden auch für die Repräsentativitätsanalyse für den Faktor Klima, Eintragspfad Drainagen, ausgewertet; s. Kap. II.2.2.1):

- Mitteltemperatur von April bis Juni (T_SPR)
- Mitteltemperatur von September bis November (T_AUT)
- mittlerer kumulativer Niederschlag von Oktober bis März (R_WIN)
- mittlerer Jahresniederschlag (R_ANN)

- Anzahl der Tage von April bis Juni mit Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 2 mm Niederschlag (R2_SPR)
- Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 20 mm Niederschlag (R20_SPR)
- Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 50 mm Niederschlag (R50_SPR)
- Anzahl der Tage von September bis November > 20 mm Niederschlag (R20_AUT).

Unter den von Blenkinsop et al. (2008) ausgewählten Variablen waren also zwei mit Mitteltemperatur, zwei mit kumulativem Niederschlag und vier mit der Anzahl von Niederschlagsereignissen, die eine bestimmte Schwelle überschritten. Die Auswahl dieser acht Variablen bedeutet bereits eine Dimensionsreduktion gegenüber den von Nolan et al. (2008) untersuchten 91 Variablen.

Die von Blenkinsop et al. (2008) vorgenommene Auswahl bezieht sich allerdings auf die Modelloutputgrößen Leaching und Drainage, während im hier vorliegenden Projekt nur die Sensitivität im Hinblick auf den PSM-Austrag über Drainage relevant ist. Im Folgenden wurden daher noch einmal die wichtigsten klimatischen Variablen für den Drainageaustrag aus Nolan et al. (2008) extrahiert.

Tabelle II.5-3 (leicht modifiziert aus Nolan et al., 2008) zeigt für jede der 30 Kombinationen von Applikationssaison, Boden und chemischer Substanz die klimatischen Variablen mit der *stärksten Korrelation* (Betrag des Pearson-Korrelationskoeffizienten) mit dem kumulativen PSM-Drainageaustrag. Die 8 Variablen, die am häufigsten in Tabelle II.5-3 auftreten, sind (in absteigender Reihenfolge):

- WRA_nov_apr (mittlere kumulative Niederschlagsmenge von November bis April)
- WRA_oct_apr (mittlere kumulative Niederschlagsmenge von Oktober bis April)
- WRA_oct_mar (mittlere kumulative Niederschlagsmenge von Oktober bis März)
- WRA_sep_apr (mittlere kumulative Niederschlagsmenge von September bis April)
- R10 (kumulativer Niederschlag in den ersten 10 Tagen nach PSM-Applikation)
- R20 (kumulativer Niederschlag in den ersten 20 Tagen nach PSM-Applikation)
- R365 (kumulativer Niederschlag in den ersten 365 Tagen nach PSM-Applikation)
- R14 (kumulativer Niederschlag in den ersten 14 Tagen nach PSM-Applikation).

Tab. II.5-3: Klimatische Variablen mit den jeweils größten Pearson-Korrelationskoeffizienten (Absolutbetrag) für jede der 30 Kombinationen von Applikationssaison, Boden und chemischer Substanz. Sofern nicht anders angegeben sind alle angegebenen Korrelationen signifikant ($p < 0.05$). Das 75. Perzentil des kumulativen PSM-Austrags der Gruppe ist (in Klammern) hinter der Nummer des Pestizids angegeben.

Rot eingerahmt: Gruppen, für die das 75. Perzentil des kumulativen Austrags das 75. Perzentil für die Grundgesamtheit von 885 Simulationen ($0,042 \text{ mg m}^{-2}$) überschreitet (15 der 900 Simulationen wurden wegen eines Regenereignisses von 59 mm am Applikationstag von der Analyse ausgeschlossen) (Quelle: Nolan et al., 2008, etwas modifiziert). Zur Bezeichnung und Bedeutung der Parameter s. Text.

Spring application					
Quorndon (topsoil: clay = 13 %; OC = 1,4 %)					
Pesticide 1 (<0,01 mg/m ²)		Pesticide 2 (<0,01 mg/m ²)		Pesticide 3 (<0,01 mg/m ²)	
R305	0,825	WRA_sep_apr	0,854	R365	0,936
R335	0,796	WRA_oct_mar	0,826	WRA_oct_apr	0,929
R365	0,770	WRA_nov_mar	0,824	WRA_nov_apr	0,906
R274	0,723	WRA_nov_apr	0,819	R335	0,904
R729	0,702	WRA_oct_apr	0,808	R305	0,857
Clifton (topsoil: clay = 19 %; OC = 2,1 %)					
Pesticide 1 (<0,01 mg/m ²)		Pesticide 2 (<0,01 mg/m ²)		Pesticide 3 (0,02 mg/m ²)	
R10	0,468	T365	-0,534	R1095	0,969
R20	0,394	T335	-0,511	R729	0,949
R14	0,362	T244	-0,499	R3650	0,806
R6 ($P=0,085$)	0,320	T719	-0,488	R365	0,675
T152 ($P=0,086$)	-0,319	L-20	0,476	L30	-0,660
Brockhurst (topsoil: clay = 26 %; OC = 1,5 %)					
Pesticide 1 (<0,01 mg/m ²)		Pesticide 2 (0,01 mg/m ²)		Pesticide 3 (0,04 mg/m ²)	
R10	0,503	R10	0,492	R3650	0,929
R20	0,442	C100	-0,483	R1095	0,850
R14	0,420	R20	0,474	L30	-0,824
C50	-0,364	L20	-0,469	R729	0,770
T122 ($P=0,058$)	-0,350	C50	-0,451	R5475	0,767
Hanslope (topsoil: clay = 41 %; OC = 1,9 %)					
Pesticide 1 (<0,01 mg/m ²)		Pesticide 2 (0,01 mg/m ²)		Pesticide 3 (0,09 mg/m ²)	
R10	0,491	R10	0,534	R729	0,850
R20	0,421	R20	0,478	WRA_nov_apr	0,848
R14	0,405	R61	0,470	R365	0,842
T122 ($P=0,054$)	-0,356	C100	-0,454	WRA_oct_apr	0,834
T1 ($P=0,057$)	-0,352	R14	0,432	R335	0,790
Denchworth (topsoil: clay = 56 %; OC = 1,9 %)					
Pesticide 1 (<0,01 mg/m ²)		Pesticide 2 (0,01 mg/m ²)		Pesticide 3 (0,07 mg/m ²)	
R10	0,485	R10	0,518	WRA_nov_apr	0,872
R20	0,413	R20	0,466	WRA_oct_apr	0,844
R14	0,396	R61	0,455	R365	0,819
T122 ($P=0,055$)	-0,354	C100	-0,453	R729	0,819

T1	(P=0,061)	-0,346	L20	-0,423	R335	0,769
Autumn application						
Quorndon (topsoil: clay = 13 %; OC = 1,4 %)						
Pesticide 1 (<0,01 mg/m²)		Pesticide 2 (<0,01 mg/m²)		Pesticide 3 (0,01 mg/m²)		
R152	0,826	WRA_sep_mar	0,781	WRA_oct_apr	0,959	
WRA_oct_mar	0,815	WRA_sep_apr	0,773	WRA_sep_apr	0,933	
WRA_oct_apr	0,799	WRA_oct_mar	0,747	WRA_nov_apr	0,920	
WRA_sep_apr	0,795	WRA_nov_mar	0,736	WRA_oct_mar	0,914	
WRA_nov_apr	0,782	R152	0,709	R152	0,859	
Clifton (topsoil: clay = 19 %; OC = 2,1 %)						
Pesticide 1 (0,03 mg/m²)		Pesticide 2 (0,02 mg/m²)		Pesticide 3 (0,03 mg/m²)		
T61	-0,644	WRA_oct_apr	0,891	R1095	0,860	
T91	-0,631	WRA_nov_apr	0,873	WRA_oct_apr	0,752	
WRA_nov_apr	0,622	WRA_oct_mar	0,866	R213	0,723	
R152	0,620	WRA_sep_apr	0,852	R183	0,677	
R305	0,613	R183	0,852	WRA_nov_apr	0,672	
Brockhurst (topsoil: clay = 26 %; OC = 1,5 %)						
Pesticide 1 (0,04 mg/m²)		Pesticide 2 (0,04 mg/m²)		Pesticide 3 (0,05 mg/m²)		
T61	-0,698	R213	0,879	R213	0,854	
T30	-0,672	R183	0,874	R244	0,854	
T91	-0,651	WRA_oct_apr	0,845	R1095	0,837	
T20	-0,629	R244	0,831	R274	0,831	
T1	-0,629	WRA_oct_mar	0,828	R365	0,817	
Hanslope (topsoil: clay = 41 %; OC = 1,9 %)						
Pesticide 1 (0,10 mg/m²)		Pesticide 2 (0,13 mg/m²)		Pesticide 3 (0,19 mg/m²)		
T61	-0,696	WRA_nov_apr	0,809	WRA_oct_mar	0,955	
T30	-0,665	WRA_sep_apr	0,805	WRA_sep_apr	0,946	
T1	-0,654	WRA_oct_mar	0,804	WRA_nov_apr	0,945	
T20	-0,634	WRA_oct_apr	0,798	R213	0,944	
T91	-0,624	WRA_nov_mar	0,795	WRA_oct_apr	0,943	
Denchworth (topsoil: clay = 56 %; OC = 1,9 %)						
Pesticide 1 (0,10 mg/m²)		Pesticide 2 (0,11 mg/m²)		Pesticide 3 (0,16 mg/m²)		
T61	-0,687	WRA_oct_mar	0,831	WRA_oct_mar	0,963	
T30	-0,643	WRA_sep_apr	0,831	WRA_sep_apr	0,953	
T1	-0,640	WRA_nov_apr	0,826	R183	0,949	
T91	-0,620	WRA_nov_mar	0,823	WRA_nov_apr	0,947	
T20	-0,612	WRA_oct_apr	0,816	WRA_oct_apr	0,947	

Die Farbcodierung der Zellen verdeutlicht Zugehörigkeit zu folgenden Variablen-Gruppen:

Winter rainfall	Short-term rainfall (< 91 days)	Long-term rainfall (>91 days)	Lag times to cumulative rainfall	Lag times to rainfall event	Short-term temperatures (≤ 91 days)	Long-term temperatures (>91 days)
-----------------	---------------------------------	-------------------------------	----------------------------------	-----------------------------	-------------------------------------	-----------------------------------

Aus Tab. II.5-3 ist ersichtlich, dass man 5 der 8 Variablen unmittelbar auf die von Blenkinsop et al. (2008) ausgewählten zurückführen kann:

- Die ersten vier Variablen lassen sich im Wesentlichen auf den mittleren Winterniederschlag R_WIN zurückführen.
- R365 ist äquivalent zum mittleren Jahresniederschlag R_ANN

Für die Variablen R10, R14 und R20 ist der Zusammenhang auf den ersten Blick weniger offensichtlich. Wenn man sich allerdings die Applikationsperioden in der Studie betrachtet (April-Mai, September-Oktober) wird klar, dass sich auch die von Blenkinsop et al. (2008) gewählten vier Variablen R2_SPR, R20_SPR, R50_SPR und R20_AUT auf das Niederschlagsgeschehen während und nach der Applikationsperiode beziehen. Für die Ableitung von Klimaszenarien muss man schließlich einen direkten Bezug der klimatischen Variablen auf einen bestimmten Applikationstermin vermeiden, wenn die Klimaszenarien generisch sein sollen. Der große Unterschied zwischen R10, R14 und R20 einerseits und R2_SPR, R20_SPR, R50_SPR und R20_AUT andererseits ist, dass die erstgenannten drei Variablen kumulative Niederschläge und die vier letztgenannten Überschreitungshäufigkeiten darstellen. (Hier ist zu beachten, dass Zielgröße in der Analyse von Nolan et al. der kumulative Austrag und nicht der Peak-Austrag war). Andererseits ist die Schwelle von R2_SPR mit 2 mm so niedrig, dass man R2_SPR auch als Maß für den kumulativen Niederschlag auffassen kann.

Ein Blick in die andere Richtung (d.h. von den 8 Variablen von Blenkinsop et al. auf Tabelle II.5-3 von Nolan et al.) zeigt, dass sich für alle 8 Variablen Entsprechungen in Tabelle II.5-3 finden:

- Mitteltemperatur von April bis Juni (T_SPR) → T122, T152
- Mitteltemperatur von September bis November (T_AUT) → T20, T30, T61, T91
- mittlerer kumulativer Niederschlag von Oktober bis März (R_WIN) → WRA_nov_apr, WRA_oct_apr, WRA_oct_mar, WRA_sep_apr
- mittlerer Jahresniederschlag (R_ANN) → R305, R335, R365, R729
- Anzahl der Tage von April bis Juni mit Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 2 mm Niederschlag (R2_SPR) → R20, R61
- Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 20 mm Niederschlag (R20_SPR) → L20
- Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 50 mm Niederschlag (R50_SPR) → L30 (mit Einschränkungen)
- Anzahl der Tage von September bis November > 20 mm Niederschlag (R20_AUT) → R152.

Die Analyse von Nolan et al. (2008) konnte nur einen Ausschnitt des möglichen realistischen Raums an Boden/Klima/Kultur/Substanz-Kombinationen umfassen:

- 1 Klima für Drainage, 2 für Leaching (keines davon feucht)
- 5 Böden für Drainage, 4 andere für Leaching
- 2 Applikationsperioden (wenn auch die wichtigsten)
- 1 Kultur (Winterweizen)
- 3 Substanzen mit schwacher bis mittlerer Adsorption.

Angesichts dieser Einschränkungen sowie der Tatsache, dass bei Nolan et al. (2008) der kumulative PSM-Austrag und nicht der maximale tägliche Austrag die Zielgröße war, wird

empfohlen, die Anzahl der klimatischen Variablen für die Repräsentativitätsanalyse für den Faktor Klima im hier vorgestellten Projekt nicht zu stark einzuengen.

Anmerkung: Im Hinblick auf eine mögliche Bewertung der FOCUS *Grundwasser*-Modellansätze ist an dieser Stelle zu betonen, dass für *Leaching* selbstverständlich der kumulative Austrag eindeutig die relevante Zielgröße darstellt; für Drainage sind jedoch die kurzzeitig auftretenden Austrags-Spitzen (peaks) relevanter.

Für die hier vorliegende Untersuchung wurde von den Autoren entschieden, die von Blenkinsop et al. (2008) ausgewählten 8 Variablen für die Repräsentativitätsanalyse für den Faktor Klima in Bezug auf PSM-Drainageausträge beizubehalten, auch wenn die Variablen ursprünglich für Drainage *und* Leaching gedacht waren. Ein Teil dieser Variablen (R20_SPR, R50_SPR, R20_AUT) ist zudem auch für die Repräsentativitätsanalyse für den Faktor Klima in Bezug auf Austräge über Surface Runoff und Erosion verwendbar.

Zwei generelle Anmerkungen:

- Klima und Wetter bezeichnen nicht dasselbe. *Wetter* ist über eine kurze Zeitspanne definiert (einige Tage oder Wochen) und stochastischer Natur, während *Klima* als langfristige Werte von Witterungselementen definiert ist (üblicherweise als Mittel über 30 Jahre). Klimatische Variablen sind also entweder Mittelwerte oder mit Hilfe von Extremwertstatistik berechnete Werte.
- Die vorstehenden Variablen beinhalten keine Information über die interannuelle Variabilität des Wetters. Um der interannuellen Variabilität des Wetters und der stochastischen Natur des Abstands zwischen Applikationszeitpunkt und dem ersten signifikanten Niederschlagsereignis Rechnung zu tragen, sind unter mittel- oder westeuropäischen Klimabedingungen nach Meinung der Autoren 10 Simulationsjahre das absolute Minimum. Eine Modulation, z.B. mit verschiedenen Applikationsraten in verschiedenen Jahren, ist mit einer Simulationsperiode von 10 Jahren nicht sinnvoll durchzuführen, da es unmöglich wäre, den Effekt der Applikationsrate und den Effekt der interannuellen Variabilität voneinander zu trennen. Ein derartiges Vorhaben erfordert mindestens 20 oder 30 Jahre an Simulationsjahren und Wetterzeitreihen.

II.5.2.3 Synthese der Sensitivitätsanalysen für MACRO (Eintragspfad Drainage)

- Die Parameter, die die Sorption und den Abbau der chemischen Substanz bestimmen, sind immer sensitiv.
- Weiterhin gibt es eine Reihe von sensitiven hydraulischen Parametern:
 - Der Einfluss der hydraulischen Parameter steigt mit zunehmendem Auftreten von Preferential Flow und zunehmender Adsorption der chemischen Substanz
 - Die Mehrzahl der sensitivsten hydraulischen Parameter beschreibt die Grenze oder den Austausch zwischen den beiden Fließdomänen (Mikroporen und Makroporen)
- Aus den klimatischen Variablen, die als wichtigste für den PSM-Austrag über Leaching und Drainage identifiziert wurden, werden von Blenkinsop et al. (2008) die acht folgenden für die Ableitung der FOOTPRINT climate zones ausgewählt. Unter diesen 8 Variablen sind zwei mit Mitteltemperatur, zwei mit kumulativem Niederschlag und vier mit der Anzahl von Niederschlagsereignissen, die einen bestimmten Schwellenwert überschreiten:

- 1) Mitteltemperatur von April bis Juni (T_SPR)
 - 2) Mitteltemperatur von September bis November (T_AUT)
 - 3) mittlerer kumulativer Niederschlag von Oktober bis März (R_WIN)
 - 4) mittlerer Jahresniederschlag (R_ANN)
 - 5) Anzahl der Tage von April bis Juni mit Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 2 mm Niederschlag (R2_SPR)
 - 6) Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 20 mm Niederschlag (R20_SPR)
 - 7) Anzahl der Tage von April bis Juni mit > 50 mm Niederschlag (R50_SPR)
 - 8) Anzahl der Tage von September bis November > 20 mm Niederschlag (R20_AUT)
- Für die Repräsentativitätsanalyse für den Faktor Klima und den Austragspfad Drainage in diesem Projekt wird, nach erneuter Analyse der Ergebnisse von Nolan et al. (2008), vorgeschlagen, die vorstehend aufgeführten 8 Variablen beizubehalten.
 - Um der interannuellen Variabilität des Wetters und der stochastischen Natur des Abstands zwischen Applikationszeitpunkt und dem ersten signifikanten Niederschlagsereignis Rechnung zu tragen, sind 10 Simulationsjahre das absolute Minimum. Eine Modulation z.B. mit verschiedenen Applikationsraten in verschiedenen Jahren ist mit einer Simulationsperiode von 10 Jahren nicht möglich und würde mindestens 20 oder 30 Jahre an Simulationsjahren und Wetterzeitreihen erfordern.

II.5.3 Synthese vorhandener Sensitivitätsanalysen für das Modell PRZM

Das Modell PRZM (Pesticide Root Zone Model; Carsel et al., 2003; FOCUS, 2001) ist ein ein-dimensionales numerisches Modell mit einer vereinfachten Beschreibung der Bodenhydrologie (Kapazitätsansatz oder „tipping bucket“). Die Originalversion des Modells PRZM erschien 1984 (Carsel et al., 1984). Seitdem wurde das Modell kontinuierlich weiterentwickelt. Die Windows-basierte Version 3.21 beta wurde bis vor kurzem im Rahmen der FOCUS surface water scenarios (FOCUS, 2001) als Runoff- und Erosionsmodell verwendet. Im Juni 2012 wurde sie in FOCUSsw durch Version 4.51 ersetzt.

Der Oberflächenabfluss wird in PRZM mittels des „SCS Curve Number“-Ansatzes (NRCS, 2004) simuliert. Für die Berechnung des Austrags von Boden durch Erosion vom Feld werden die Modified Universal Soil Loss Equation MUSLE (Williams, 1975) oder ihre Abwandlungen MUSS or MUST verwendet (Carsel et al., 2003). Der vertikale Transport von PSM im Boden wird über Konvektion und numerische Dispersion simuliert. Ebenso wie für MACRO wurden für PRZM mehrere Validierungsstudien durchgeführt (u.a. FEMVTF, 2001; Reichenberger, 2005).

II.5.3.1 Parametersensitivität

II.5.3.1.1 Sensitivitätsanalyse für die Parameter Koc und DT50 (Reichenberger et al., 2007a)

Diese Analyse wurde im Rahmen des EU-Projekts FOOTPRINT (Dubus et al., 2009) durchgeführt, aber im Rahmen des Projekts nicht veröffentlicht. Sie floss allerdings als Kapitel in den Bericht von Reichenberger et al. (2007a) ein. Das Ziel dieser Analyse war es, die Sensitivität der Parameter Koc (auf den Gehalt an organischem Kohlenstoff normierter Freundlich-Adsorptionskoeffizient) und DT50 (Halbwertszeit des Abbaus unter Standardbedingungen) in Bezug auf den

maximalen täglichen PSM-Austrag über Oberflächenabfluss und Erosion für den gesamten realistischen Parameterraum zu untersuchen. Auf diese Weise sollte ein optimales Koc/DT50-Raster für die PRZM-Simulationen zur Erstellung einer „premodelling“ Datenbank ermittelt werden.

Im Rahmen der Analyse wurden folgende Kombinationen aus Wirkstoffen und Böden untersucht:

- 44 Wirkstoffe:
 - 9 FOCUSsw Testsubstanzen A - I (verschiedene Kombinationen von Koc und DT50; ansonsten identisch; vernachlässigbare Flüchtigkeit)
 - 35 weitere Testsubstanzen als Erweiterung des Koc/DT50-Parameterraums von A - I (verschiedene Koc/DT50-Kombinationen, ansonsten identisch mit Substanzen A-I)
 - Spannweite der untersuchten Koc-Werte betrug $10 - 10^7$ L/kg
 - Spannweite der untersuchten DT50-Werte betrug 3 – 3000 Tage.
 - Alle Substanzen mit linearer Sorption (Freundlich-Exponent = 1).
- 4 FOCUSsw Runoff-Szenarien (vgl. Tab. II.5-4) mit einer typischen Kultur und Applikationssaison:
 - R1 (Weiherbach), Wintergetreide, Herbstapplikation
 - R2 (Porto), Mais, Frühjahrsapplikation
 - R3 (Bologna), Wintergetreide, Herbstapplikation
 - R4 (Roujan), Mais, Frühjahrsapplikation.

Tab. II.5-4: Wichtigste Runoff- und Erosionsrelevante Bodeneigenschaften der vier FOCUSsw Runoff-Szenarien (FOCUS, 2001).

Szenario	Standort	USDA soil hydrologic group	OC-Gehalt des obersten Horizonts (%)	USLE K (Boden-erodierbarkeitsfaktor)	Hangneigung (%)
R1	Weiherbach	C	1,2	0,42	3
R2	Porto	B-C	4,0	0,19	5
R3	Bologna	C	1,0	0,25	5
R4	Roujan	C	0,6	0,26	5

Die Gesamtzahl der Simulationen betrug $44 \times 4 = 176$ Simulationen. Die Simulationsperiode betrug 20 Jahre, mit immer derselben Kultur und mit PSM-Applikation in jedem Jahr (normaler FOCUSsw-Simulationslauf). Die maximalen täglichen Runoff- und Erosionsausträge in jedem Jahr wurden zusammen mit dem dazugehörigen Runoffvolumen/Sedimentertrag (= Austrag von Boden aus dem Feld) und dem dazugehörigen Datum extrahiert. Nach Normierung der Austräge auf die Applikationsrate (standardisiert 1 kg ha^{-1}) wurden deskriptive Statistiken der maximalen täglichen Austräge pro Jahr (Min, Max, Median, Mittelwert, Standardabweichung, 90. Perzentil (= angenähert durch den zweithöchsten Wert der 20-jährigen Ergebnisse) für jeden Simulationslauf berechnet.

Im Folgenden werden nur die wichtigsten Ergebnisse vorgestellt. Es wird unterschieden zwischen Abbildungen des Typs 1 (Koc fix, DT50 auf der Abszisse; vgl. Abb. II.5-1) und des Typ 2 (DT50 fix; Koc auf der Abszisse; vgl. Abb. II.5-2).

Die Hauptergebnisse aus den Abbildungen vom Typ 1 (Beispiel Abb. II.5-1) sind:

- Für Koc-Werte $\leq 100 \text{ L kg}^{-1}$ (Surface Runoff) und $\leq 1000 \text{ L kg}^{-1}$ (Erosion) war der Einfluss der DT50 auf die max. tägl. Runoff- und Erosionsausträge pro Jahr sehr gering. Hier ist zu beachten, dass DT50-Werte $< 3 \text{ d}$ nicht untersucht wurden.
- Die Koc-“Effektschwelle”, oberhalb der eine merkliche DT50-Abhängigkeit der Runoff- und Erosionsausträge besteht, steigt in der Reihenfolge Median $< 90.$ Perzentil $< \text{Maximum}$.
- Eine Erhöhung der DT50 von 300 auf 1000 Tage auf die max. tägl. Austräge hat im Allgemeinen nur geringe Wirkung.

Die wesentlichen Ergebnisse aus Abbildungen vom Typ 2 (Beispiel Abb. II.5-2) sind:

- Die maximalen täglichen Runoffausträge waren üblicherweise am höchsten für einen Koc von 100 L kg^{-1} . Ausnahmen sind die Mediane des Szenarios R1, wo die höchsten Austräge für Koc-Werte von 1000 und 5000 L kg^{-1} auftraten, und die 90. Perzentile und Maxima des OC-reichen Szenarios R2, wo die höchsten Austräge bei einem Koc von 10 L kg^{-1} auftraten.
- Für $\text{DT50} \geq 30$ Tage zeigen die Kurven der max. tägl. Runoffausträge oft eine irreguläre Abnahme der max. tägl. Runoffausträge pro Jahr mit ansteigendem Koc, mit einem Sattelpunkt oder sogar einem lokalen Maximum bei einem Koc von 10000 oder 50000 L kg^{-1} . Offensichtlich sind hier mindestens zwei entgegenwirkende Effekte beteiligt. Beispielsweise führt stärkere Sorption zu höheren Konzentrationen im Oberboden aufgrund von weniger Leaching, aber auch zu geringerer Verfügbarkeit für die Extraktion durch Oberflächenabflusswasser. Für stark sorbierende Wirkstoffe mit einer DT50 von 300 oder 1000 Tagen tritt ein zusätzlicher Akkumulationseffekt im Oberboden aufgrund von Verschleppung (carry-over) von Wirkstoff aus Applikationen in den vorangegangenen Jahren auf. Außerdem gehören nicht alle eingetragenen Datenpunkte in einer Kurve zum gleichen Runoff-Ereignis. Möglicherweise würden die beobachteten Irregularitäten aber verschwinden, wenn man nicht die Maximalwerte pro Jahr, sondern die Perzentile in den gesamten 20-jährigen Austragszeitreihen auswerten würde.
- Die maximalen täglichen Erosionsausträge beginnen bei einem Koc von etwa 5000 oder 10000 L kg^{-1} steil anzusteigen. Die Kurven verflachen wieder ab ca. $\text{Koc} = 1000000 \text{ L kg}^{-1}$.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die Sensitivitäten der Parameter Koc und DT50 in PRZM hinsichtlich des maximalen täglichen PSM-Austrags über Runoff und Erosion stark nicht-linear sind (besonders für Koc) und dass starke Interaktionen zwischen beiden auftreten (d.h. der Wert eines Parameters beeinflusst die Sensitivität des anderen Parameters).

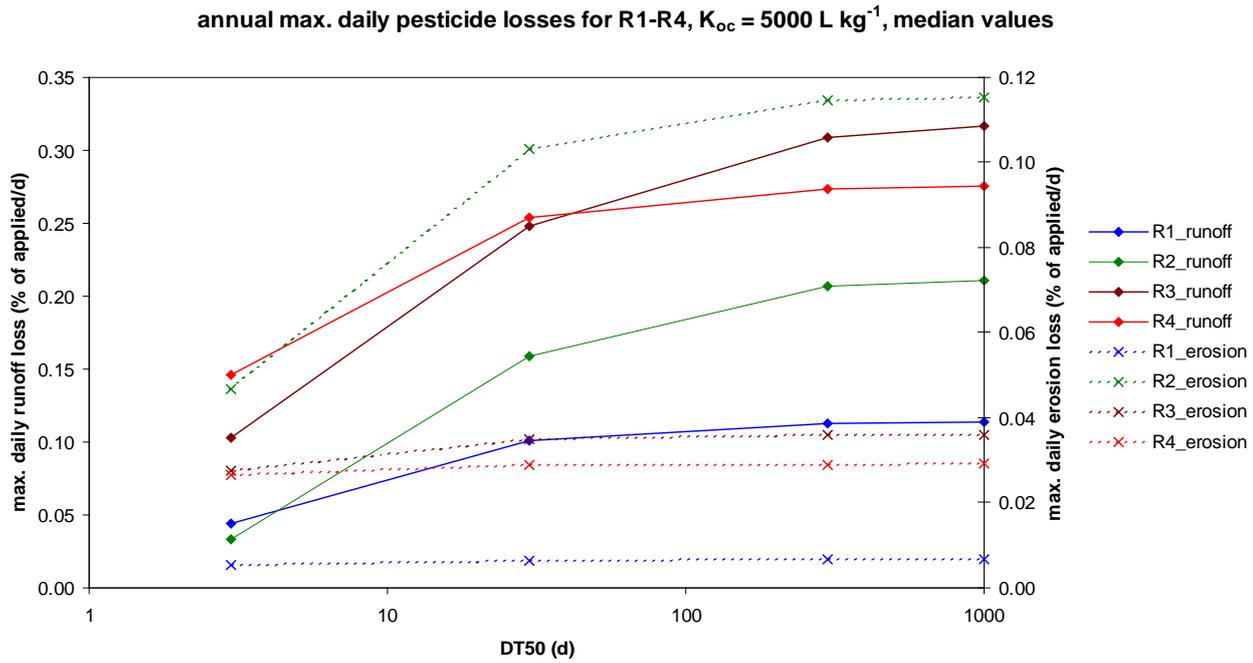


Abb. II.5-1: Median der jährlichen Maxima der täglichen PSM-Austräge für verschiedene FOCUS Runoff-Szenarien (R1-R4) und verschiedene Austragspfade (Runoff und Erosion) als Funktion der DT50 für einen bestimmten Koc (hier: 5000 L kg⁻¹).

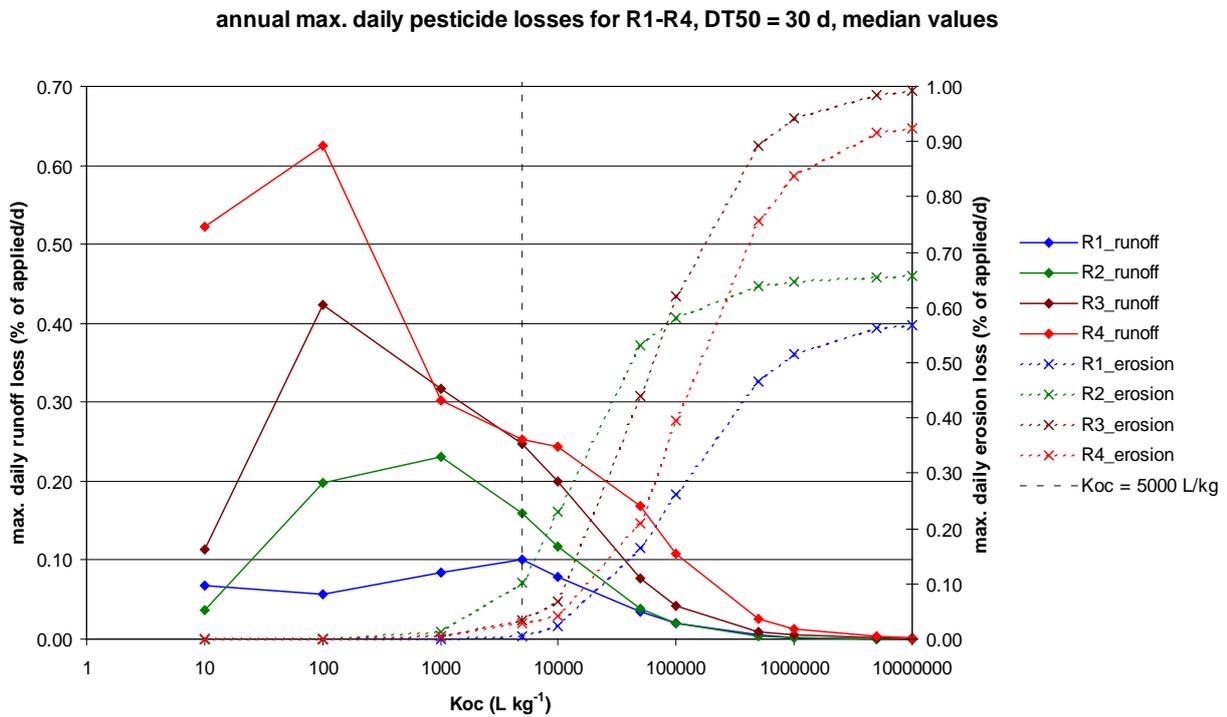


Abb. II.5-2: Median der jährlichen Maxima der täglichen PSM-Austräge für verschiedene FOCUS Runoff-Szenarien (R1-R4) und verschiedene Austragspfade (Runoff und Erosion) als Funktion des Koc für eine bestimmte DT50 (hier: 30 Tage).

II.5.3.1.2 Sensitivitätsanalyse von FEMVTF (2001)

Die Parametersensitivität in PRZM in Bezug auf kumulative PSM-Austräge über Surface Runoff und Erosion ist im Rahmen eines gemeinsamen Projekts von PSM-Herstellern und der US EPA (genannt FIFRA Environmental Model Validation Task Force, FEMVTF) für drei experimentelle Standorte, d.h. drei reale Bodenprofile, untersucht worden. Die Ergebnisse sind publiziert, in FEMVTF (2001; s. a. Anhang A5).

Zusammengefasst waren die sensitivsten Parameter, ermittelt nach der Plackett-Burman-Methode (Plackett und Burman, 1946), in Bezug auf die kumulativen PSM-Austräge über Surface Runoff und Erosion folgende, in absteigender Reihenfolge:

- Curve Numbers (CN) für den von der Kultur bedeckten Boden und für unbedeckten Boden (zwischen Ernte und Auflaufen)
- Linearer Adsorptionskoeffizient K_d (nichtlineare Adsorption war in der in der Studie verwendeten PRZM-Version nicht verfügbar)
- Abbauratenkoeffizienten ($= \ln(2)/DT50$)
- Lagerungsdichte (wichtigster Inputparameter für die Berechnung des Wassergehalts bei Feldkapazität und am Welkepunkt).

II.5.3.1.3 Parametrische und nichtparametrische Sensitivitätsanalyse von Reichenberger (2005)

In den Sensitivitätsanalysen von Reichenberger et al. (2007a; s. Abschnitt 5.3.1.3) und FEMVTF (2001; Abschnitt 5.3.1.2) ist der Einfluss des Wetters (der sog. „driving data“) in PRZM für die Verlagerung von PSM nicht untersucht worden. Die im Folgenden beschriebene Studie von Reichenberger (2005) wurde als Unsicherheitsanalyse konzipiert. Aufgrund ihres varianzbasierten Ansatzes (vgl. Kap. II.3.1) kann sie jedoch auch als Sensitivitätsanalyse genutzt werden. Eines der Ziele der Studie war es, die Unsicherheit im PRZM-Output zu quantifizieren, die von den verschiedenen Unsicherheitsquellen beigetragen wird, in Form des Beitrags zur Varianz des Outputs. Die berücksichtigten Unsicherheitsquellen waren folgende:

- Interannuelle Variabilität des Wetters (Auftreten von Starkniederschlagsereignissen, feuchten und trockenen Perioden etc.)
- Unsicherheit der Substanzeigenschaften (K_{oc} , Freundlich-Exponent, DT50), wobei diese Unsicherheit eher Variabilität als epistemische Unsicherheit widerspiegelte
- Wahl des Applikationsdatums
- Parametrisierung der Bodenszenarien (Curve Numbers, OC-Gehalt, Lagerungsdichte etc.)

In der Analyse von Reichenberger (2005) wurden dazu folgende Inputs variiert:

- 10 Klimaszenarien mit unterschiedlichen Wiederkehrintervallen von Starkregenerereignissen
- 11 bis 30 (d.h. alle verfügbaren) Wetterjahre pro Klimaszenario (die verschiedenen Wetterjahre wurden einzeln simuliert)
- 5 Bodenszenarien mit unterschiedlicher Anfälligkeit für Oberflächenabfluss
- 6 Anwendungen von 3 Wirkstoffen:
 - Dichlorprop-P ($K_{oc} = 21 \text{ L kg}^{-1}$, $n_f = 1$, $DT50 = 19 \text{ d}$), Wintergetreide/Frühjahrsapplikation und Wintergetreide/Herbstapplikation

- Isoproturon ($K_{oc} = 71 \text{ L kg}^{-1}$, $nf = 0.88$, $DT50 = 11 \text{ d}$), Wintergetreide/Frühjahrsapplikation und Wintergetreide/Herbstapplikation
- Terbutryn ($K_{oc} = 775 \text{ L kg}^{-1}$, $nf = 0.76$, $DT50 = 56 \text{ d}$), Mais/Frühjahrsapplikation und Wintergetreide/Herbstapplikation

Die 9 Parameter mit der größten Parametersensitivität wurden mittels Latin Hypercube Sampling (LHS) variiert, mit realistischen Spannbreiten und Verteilungen der Parameter ($n = 70$). Insgesamt wurden

6 Anwendungen \times 5 Böden \times 233 Wetterjahre \times 70 LHS-Ziehungen = 489300 Simulationen durchgeführt. Die Simulationsperiode betrug 2 Jahre. Das Wetterjahr wurde dupliziert, um sicherzustellen, dass das wahre Maximum des täglichen PSM-Austrags, der aus der Anwendung resultiert, erfasst wird. Die PSM-Anwendung fand nur im ersten Simulationsjahr statt.

Tab. II.5-5: Untersuchte Variablen und Spannbreiten für das Latin Hypercube Sampling (LHS) für Unsicherheitsanalyse des Modells PRZM (Reichenberger, 2005).

Inputvariable	Verteilungstyp	Spannbreite relativ zum Basisszenario
CN (während der Anbauperiode)	Uniform	+/- Unterschied zur nächsten hgroup
CN (Brache)	Uniform	+/- Unterschied zur nächsten hgroup
Lagerungsdichte (bulk density) BD	Uniform	+/- $0,1 \text{ g cm}^{-3}$ ¹⁾
organische Substanz OM	Uniform	+/- 1/3 des Basisszenarios ¹⁾
Applikationstermin	Uniform	+/- 10 d ²⁾
normalisierter Freundlich-Koeffizient K_{oc}	log-normal, abgeschnitten ³⁾	*/: Faktor 2
Freundlich-Exponent nf	normal, abgeschnitten ³⁾	+/- 20 % des Basisszenarios ¹⁾
Abbau- bzw. Dissipationsrate	log-normal, abgeschnitten ³⁾	*/: Faktor 2
Hangneigung ⁴⁾	Uniform	+/- 5 % Hangneigung

1) Alle Bodenhorizonte wurden mit der gleichen Differenz / dem gleichen Faktor variiert.

2) Abweichung vom Applikationstermin, der mit dem FOCUS Pesticide Application Timer (PAT) berechnet wurde

3) Abschneiden (truncation) am 2,5-Perzentil (unteres Ende) und am 97,5-Perzentil (oberes Ende)

4) wird in PRZM nur für Erosionsberechnungen benutzt; kein Einfluss auf die Runoff-Rechnungen

Die Zielvariablen waren:

- maximaler täglicher PSM-Runoffaustrag über die Simulationsperiode von 2 Jahren, relativ zur Aufwandmenge;
- maximaler täglicher PSM-Erosionsaustrag über die Simulationsperiode von 2 Jahren, relativ zur Aufwandmenge,

Die Zielvariablen waren somit nicht identisch mit der Studie FEMVTF (2001), in der kumulative Austräge betrachtet wurden. Es ist zu erwarten, dass der Einfluss des Parameters DT50 auf die maximalen Austräge (die normalerweise wenige Tage oder höchstens Wochen nach Applikation auftreten) deutlich geringer sein wird als auf die kumulativen Austräge.

Zuerst wurde untersucht, welcher Anteil der Varianz der Zielgrößen auf die verschiedenen variierten Faktoren entfällt (Kombination aus Substanz, Kultur und Applikationssaison), Bodenszenario, Klimaszenario, Wetterjahr, sensitive Modellparameter.

Die folgenden Diagramme der Abb. II.5-3 bis II.5-6 vergleichen beispielhaft die Häufigkeitsverteilung des max. täglichen PSM-Runoffaustrags auf verschiedenen Aggregationsstufen:

- verschiedene Anwendungen (Abb. II.5-3),
- verschiedene Böden für die gleiche Anwendung (Abb. II.5-4),
- verschiedene Klimate für den gleichen Boden und die gleiche Anwendung (Abb. II.5-5),
- verschiedene Wetterjahre für das gleiche Klima, den gleichen Boden und die gleiche Anwendung (Abb. II.5-6).

Da die Zielvariablen nicht homoskedastisch verteilt waren (d.h. die verschiedenen Gruppen, z.B. die 6 Anwendungen, weisen nicht die gleiche Varianz auf), war es nicht möglich, eine ANOVA (Analysis of Variance) durchzuführen. Es war jedoch möglich, die Varianzen "manuell" zu trennen. Die Varianzen (genauer: die Quadratsummen der Residuen) der zwei Zielvariablen wurden für verschiedene Aggregationsstufen in die Varianz *zwischen* Gruppen ("between-group variance") und die Varianz *innerhalb* von Gruppen ("within-group variance") aufgetrennt (Tabelle II.5-6).

Tabelle II.5-6 ist folgendermaßen zu lesen: Wenn alle 489.300 Simulationsläufe zusammen in einer Gruppe sind, beträgt die Varianz innerhalb dieser Gruppe 100 % der Gesamtvarianz, und die Varianz zwischen Gruppen ist Null (da es ja nur eine einzige Gruppe gibt). Wenn die Simulationsläufe in die 6 Anwendungen (s.u.) aufgeteilt werden, wird ein Teil der Varianz innerhalb der früheren Gruppe von allen Simulationsläufen zu Varianz *zwischen* den 6 verschiedenen Anwendungen (im Fall von Runoff: 1,47 % der Gesamtvarianz). Der andere Anteil der Gesamtvarianz (hier: 98,53 %) bildet die Summe der Varianz *innerhalb* der 6 Anwendungen. Je mehr Varianz innerhalb von Gruppen in diesem Disaggregationsschritt eliminiert wird, desto unterschiedlicher sind die simulierten Austräge der 6 Anwendungen voneinander (vgl. Abb. II.5-3).

Tab. II.5-6: Eliminierte Varianz innerhalb der Gruppen mit abnehmendem Aggregierungsgrad (Erläuterung s. Text).

Agg.-grad	Beschreibung	Varianz wird eliminiert zwischen	relative eliminierte Varianz ¹⁾ innerhalb der Gruppen	
			Runoff-austrag (%)	Erosions-austrag (%)
5	alle Läufe zusammen in einer Gruppe	-	0	0
4	Anwendungen einzeln	6 Anwendungen	1,47	8,46
3	Anwendungen + Böden einzeln	5 Böden	6,52	14,17
2	Anwendungen + Böden + Klimaszenarien einzeln	10 Klimaszenarien	4,20	2,80
1	Anwendungen + Böden + Klimaszenarien + Wetterjahre einzeln	verfügbaren Wetterjahren	50,98	35,81
0	alle Läufe einzeln	70 Läufe innerhalb jedes LHS	36,84	38,76

¹⁾ Reduktion der Summen der quadrierten Residuen innerhalb der Gruppen (QSZ) / gesamte Summe der quadrierten Residuen (TSS)

Das gleiche gilt für die nächsten Disaggregierungsschritte. Die Varianz *innerhalb* von Gruppen, die in einem Disaggregierungsschritt eliminiert wird, ist äquivalent zum relativen Unsicherheitsbeitrag des jeweiligen Faktors, der in diesem Disaggregierungsschritt benutzt wird (z.B. Bodenszenario oder Klimaszenario), bzw. zur Sensitivität dieses Faktors, je nach Bedeutung bzw. Interpretation der Variation des Inputs.

Die Auftrennung der Varianzen (Tab. II.5-6) nach der beschriebenen Methode ergibt:

- Sowohl für Oberflächenabfluss als auch für Erosion war die Unsicherheit, die durch die verschiedenen Wetterjahre, d.h. die interannuelle Variabilität des Wetters verursacht wurde (vgl. Abb. II.5-6), bei weitem größer als die Unsicherheit, die durch die Wahl des Klimaszenarios verursacht wurde. **Daraus folgt, dass es vorteilhafter ist, weniger Klimaszenarien zu rechnen, aber so viele Wetterjahre wie möglich für jedes Klimaszenario.**
- Für den Austragspfad Runoff war die Unsicherheit, die durch die jährliche Variabilität des Wetters verursacht wurde, außerdem größer als die von den variierten sensitiven Modellparametern (CN, OM, Koc, m) verursachte Unsicherheit. Für den Pfad Erosion waren die Größen der beiden Unsicherheitsquellen vergleichbar. **Man muss daher stets im Gedächtnis behalten, dass die nicht-parametrische Sensitivität in Bezug auf PSM-Austräge über Oberflächenabfluss und Erosion in PRZM mindestens so groß ist wie die parametrische Sensitivität.**

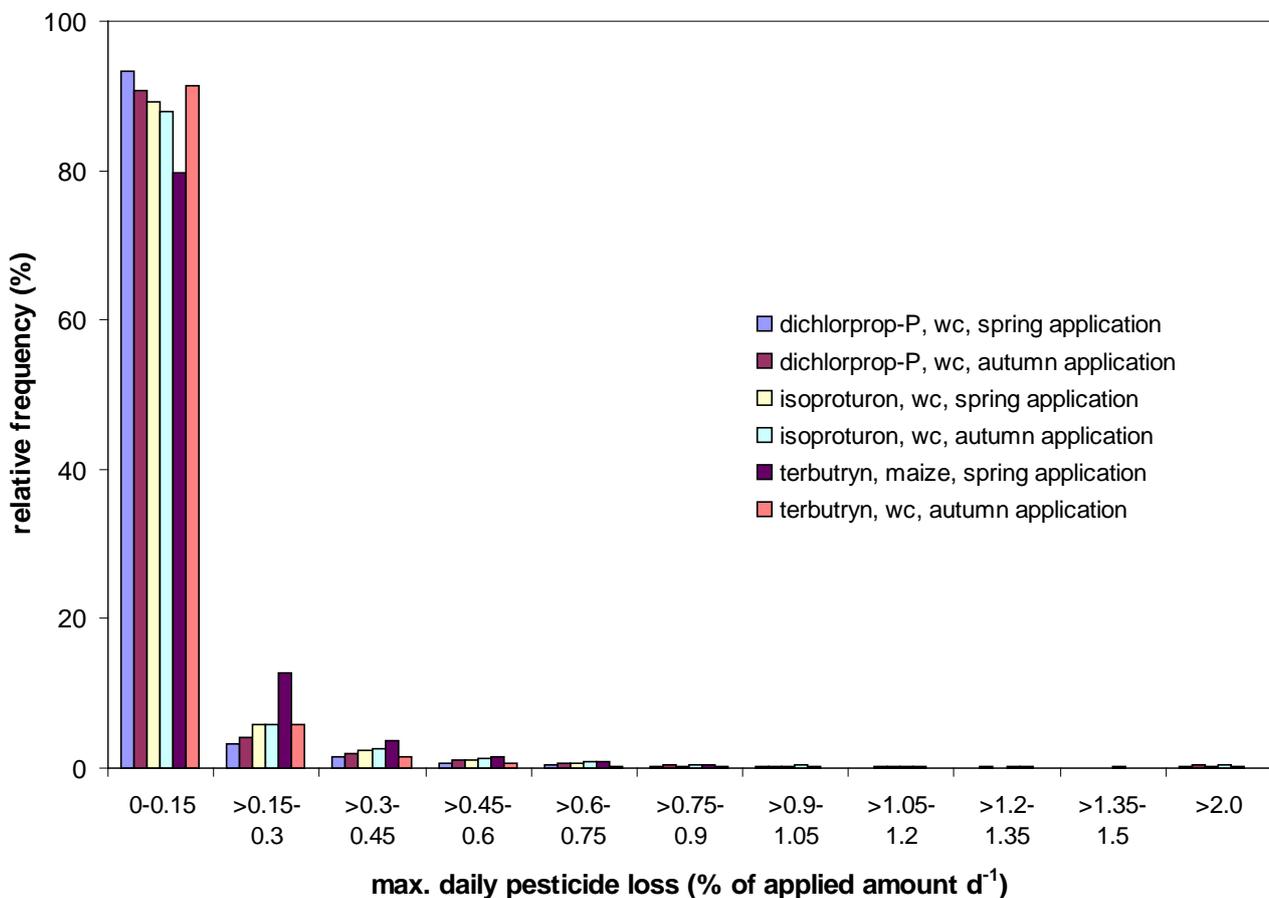


Abb. II.5-3: Häufigkeitsverteilung der max. täglichen PSM-Austräge über Surface Runoff für alle 6 in der Unsicherheitsanalyse simulierten Anwendungen. n = 81550 für jede Anwendung (5 Böden × 10 Klimaszenarien mit insgesamt 233 Wetterjahren × 70 LHS-Läufe); wc = Wintergetreide (Reichenberger, 2005).

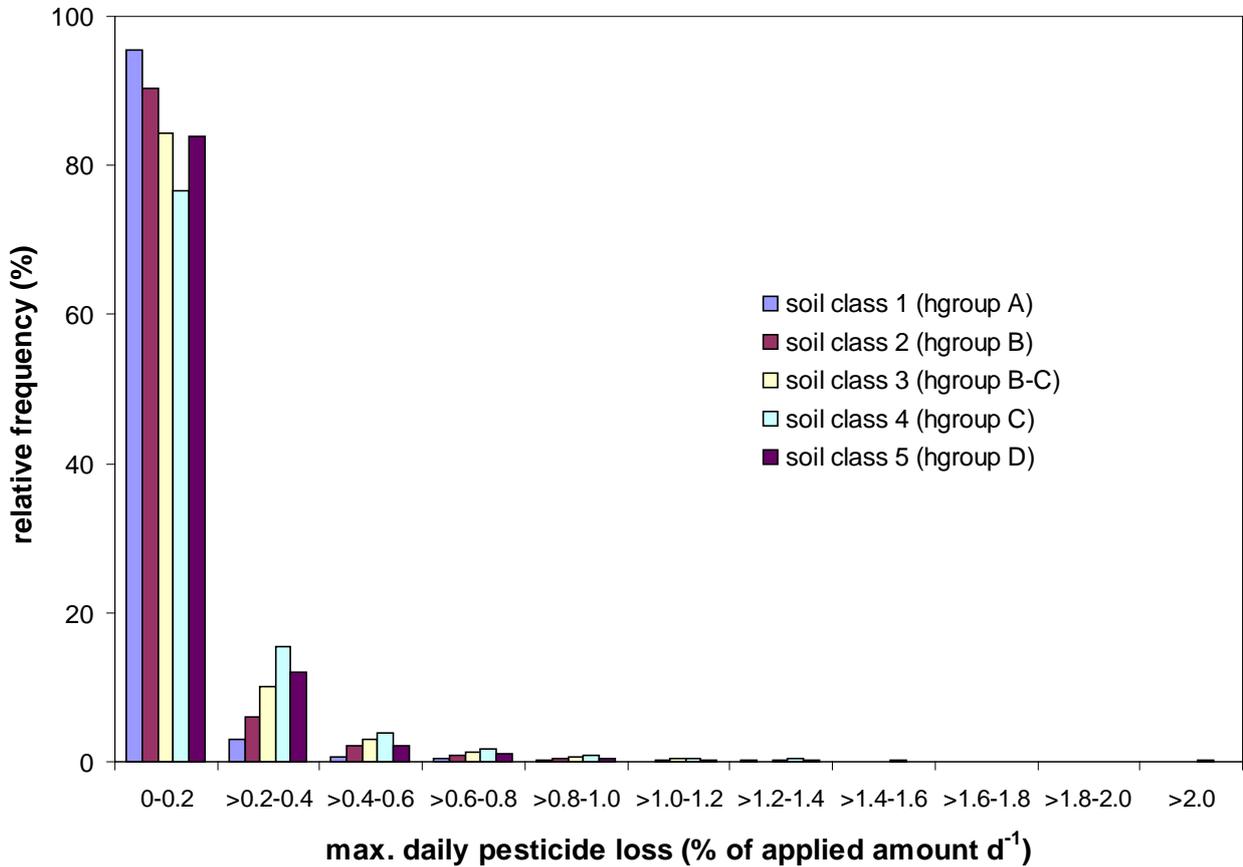


Abb. II.5-4: Häufigkeitsverteilung der max. täglichen PSM-Austräge über Surface Runoff für Terbutryn in Mais (Frühjahrsapplikation) und die 5 verschiedenen Böden; n = 16310 für jeden Boden (10 Klimaszenarien mit insgesamt 233 Wetterjahren × 70 LHS-Läufe)(Reichenberger,2005).

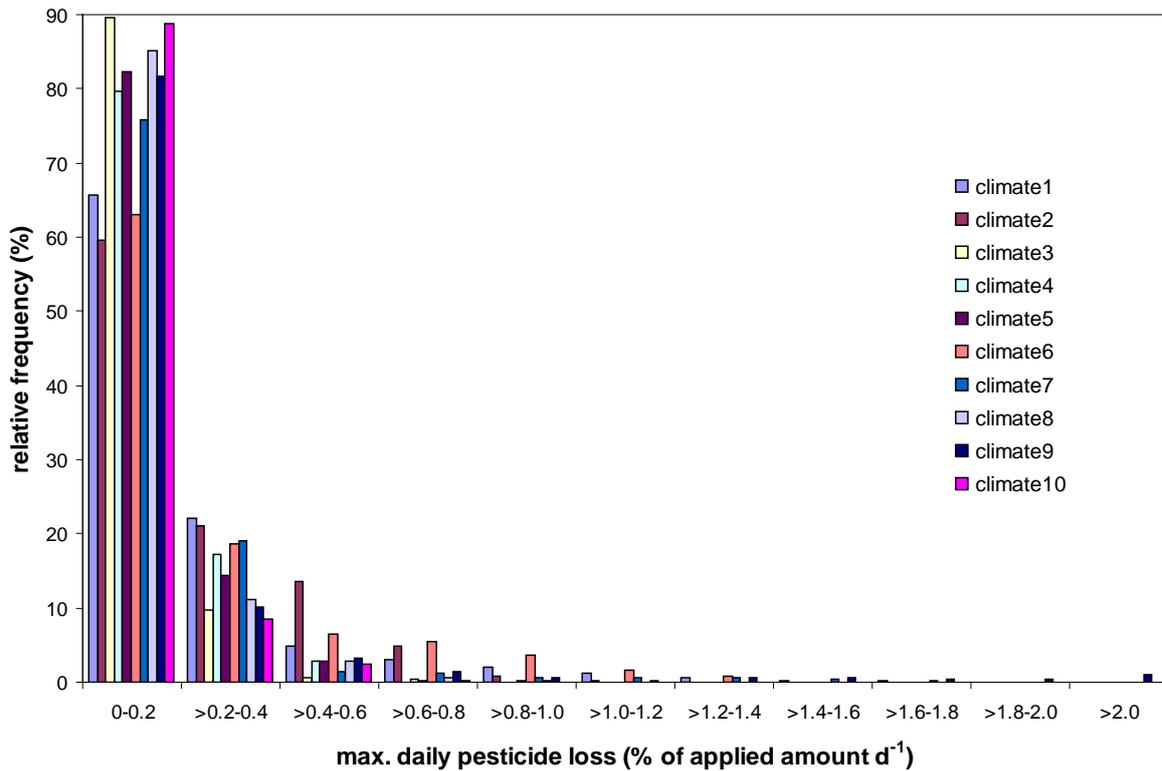
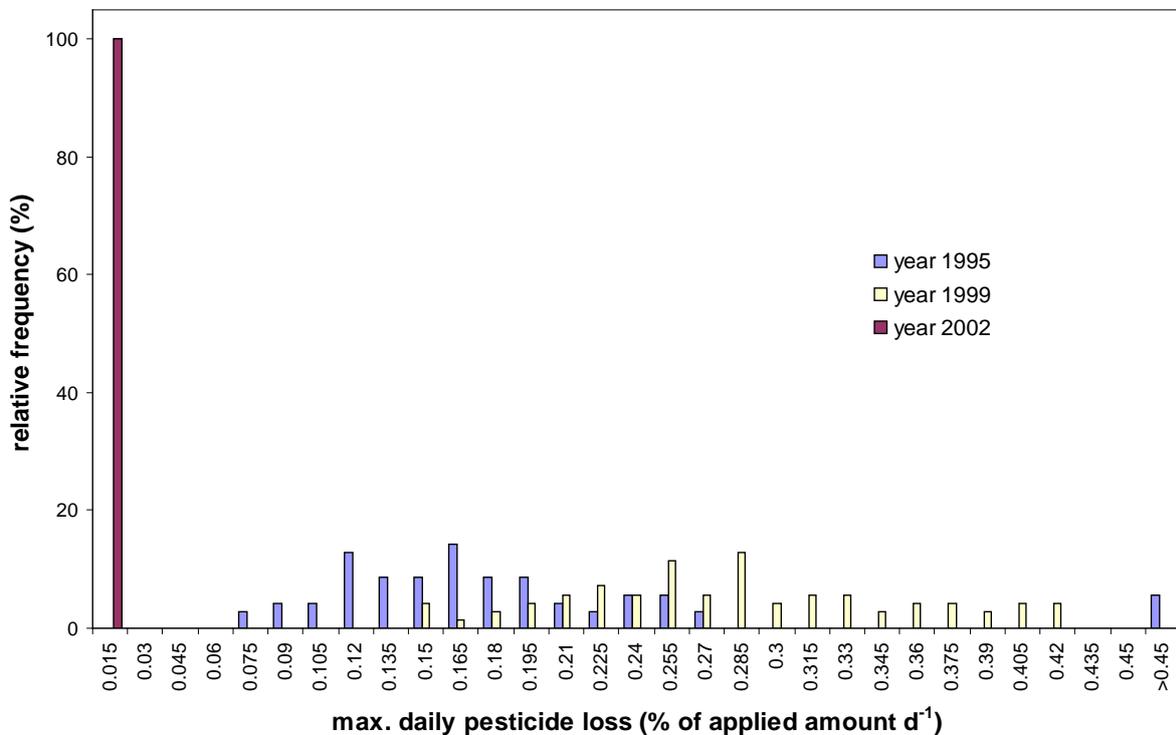


Abb. II.5-5: Häufigkeitsverteilung der max. täglichen PSM-Austräge über Surface Runoff für Terbutryn in Mais (Frühjahrsapplikation), Bodenklasse 4 (hydrologic group C) und die 10 Klimaszenarien; n = 770-2100 für jedes Klimaszenario (11-30 verfügbare Wetterjahre × 70



LHS-Läufe) (Reichenberger, 2005).

Abb. II.5-6: Häufigkeitsverteilung der max. täglichen PSM-Austräge über Surface Runoff für Terbutryn in Mais (Frühjahrsapplikation), Bodenklasse 4 (hydrologic group C), Klimaszenario 3 (Saarbrücken) und 3 ausgewählte Wetterjahre (von 22 simulierten Jahren) mit extrem niedrigen (2002), extrem hohen (1999) und mittleren (aber mit extremen Ausreißern

von bis zu 1,2 % der Aufwandmenge d¹; 1995) Runoffausträgen von Terbutryn. n = 70 für jedes Jahr (70 LHS-Läufe) (Reichenberger, 2005).

Das Beispieldiagramm Abb. II.5-6 zeigt nicht nur die Unterschiede der maximalen täglichen Terbutryn-Runoffausträge zwischen den 3 ausgewählten Wetterjahren (bei gleichem Klima, Boden und Anwendung), sondern auch die Variation innerhalb jedes Wetterjahres aufgrund der LHS-variierten sensitiven Modellparameter. Diese Variation unterscheidet sich von Jahr zu Jahr. Für das „worst case“-Jahr 1999 wurden max. tägliche Terbutryn-Austräge von 0,14 – 0,42 % der applizierten Menge berechnet. Für das intermediäre Jahr 1995, das jedoch einige extreme Ausreißer aufwies, schwankten die simulierten max. täglichen Terbutryn-Austräge zwischen 0,07 und 1,21 % (Mittelwert = 0,20 %, Median = 0,16 %), und für das nahezu „best case“ Jahr 2002 zwischen Null und 7,6E-06 %. Für das Jahr 2001 wurden für alle 70 LHS-Läufe Austräge von Null berechnet. Man sieht, dass unter bestimmten Umständen die LHS-variierten Modellparameter die simulierten maximalen täglichen PSM-Austräge beträchtlich beeinflussen können (s. Tabelle II.5-6).

Um die sensitivsten der LHS-variierten Modellparameter zu bestimmen, wurde eine multiple lineare Regressionsanalyse (MLR) mit allen 8 (für Runoff) bzw. 9 (für Erosion) Modellparametern für alle 6990 simulierten LHS-Blocks (je 70 Läufe) durchgeführt. Für jede Regression wurden die standardisierten Regressionskoeffizienten (SRC) aller 8 bzw. 9 Variablen nach ihrem Betrag absteigend geordnet, und die Ränge wurden für jede Anwendung gemittelt. Die MLR ergab, dass (mit einer Ausnahme) der sensitivste Inputparameter immer die Runoff Curve Number während der Anbauperiode war (Tab. II.5-7). Die Auswahl der USDA Soil Hydrologic Group (welche die Curve Numbers bestimmt) muss daher sehr sorgfältig getroffen werden, weil dies, zusammen mit dem Wetter, die Häufigkeit und die Größe von Oberflächenabflussereignissen bestimmt.

Tab. II.5-7: Sensitivste PRZM-Parameter in Bezug auf max. tägliche PSM-Austräge.

Wirkstoff	Kultur	Applikations- zeitraum	Aus- trags- pfad R/E ¹⁾	Sensitivste Modell- parameter		LR ²⁾ mean r ²	2LR ³⁾	n (valid) ⁴⁾ von 1165
				Rang 1	Rang 2			
Dichlorprop- P	Winterge- treide	Frühjahr	R	CN in_crop ⁵⁾	appl. date	0,186	0,295	978
		Herbst	R	CN in_crop	appl. date	0,220	0,321	902
Isoproturon	Winterge- treide	Frühjahr	R	CN in_crop	OM	0,255	0,333	1040
		Herbst	R	CN in_crop	OM	0,285	0,332	1017
Terbutryn	Mais	Frühjahr	R	CN in_crop	K _{oc}	0,543	0,669	1070
	Winterge- treide	Herbst	R	CN in_crop	K _{oc}	0,431	0,575	1059
Dichlorprop- P	Winterge- treide	Frühjahr	E	CN in_crop	appl. date	0,050	0,118	848
		Herbst	E	CN in_crop	appl. date	0,063	0,141	771
Isoproturon	Winterge- treide	Frühjahr	E	CN in_crop	Freundlich m ⁶⁾	0,059	0,122	998
		Herbst	E	CN in_crop	K _{oc}	0,080	0,134	944
Terbutryn	Mais	Frühjahr	E	Slope	K _{oc}	0,251	0,347	1071
	Winterge-	Herbst	E	CN in_crop	slope	0,116	0,327	1061

	treide							
--	--------	--	--	--	--	--	--	--

- 1) R = Oberflächenabfluss (surface runoff), E = Erosion
- 2) Einfache lineare Regression mit dem sensitivsten Modellparameter für die LHS-Blocks mit valider MLR.
- 3) Lineare Regression mit den zwei sensitivsten Modellparametern für die Blocks mit valider MLR.
 r^2 gibt einen groben Hinweis auf die Varianz, die von diesen beiden Modellparametern erklärt wird.
- 4) Multiple lineare Regressionen mit einem Bestimmungskoeffizienten $r^2 \geq 0,15$ wurden als valide betrachtet
- 5) Curve Number während der Anbauperiode (Auflaufen bis Ernte)
- 6) Freundlich-Exponent

Die zweitsensitivsten Modellparameter differierten zwischen den drei Wirkstoffen und den zwei Austragspfaden, waren aber meistens die Parameter, die die Sorption steuern (Koc, Freundlich exponent, OM). Für den schwach sorbierenden und sehr mobilen Wirkstoff Dichlorprop-P war jedoch der Applikationstermin sensitiver als sorptionsbestimmende Parameter. Für Erosionsausträge des relativ stark sorbierenden und persistenten Wirkstoffs Terbutryn war die Hangneigung wichtig, da sie die Größe von Erosionsereignissen stark beeinflusst.

II.5.3.2 Synthese der Sensitivitätsanalysen für PRZM

- Die Varianz, die durch die interannuelle Variabilität des Wetters zur Varianz der Ziel-Outputvariablen (maximaler täglicher PSM-Austrag über Runoff bzw. Erosion) beigetragen wird, ist bei weitem größer als die durch die Wahl des Klimaszenarios beigetragene Varianz. Daraus folgt, dass es vorteilhafter ist, weniger Klimaszenarien zu rechnen, aber so viele Wetterjahre wie möglich für jedes Klimaszenario.
- Die nichtparametrische Sensitivität in Bezug auf maximale tägliche PSM-Austräge über Oberflächenabfluss und Erosion in PRZM ist mindestens so groß wie die parametrische Sensitivität.
- Die sensitivsten Parameter in PRZM in Bezug auf maximale tägliche PSM-Austräge über Oberflächenabfluss und Erosion sind
 - die Curve Number während der Anbauperiode (da PSM-Applikation meist während oder kurz vor dieser Periode erfolgt)
 - das Applikationsdatum
 - die Parameter, die die Adsorption steuern (Koc, Freundlich-Exponent, Gehalt an organischem Kohlenstoff)
 - nur für Erosion: die Faktoren, die die Größe von Erosionsereignissen steuern (von diesen wurde nur die Hangneigung in dieser Analyse berücksichtigt).

II.5.4 Sensitivitätsanalysen für den FOCUSsw-Gesamtansatz und EXPOSIT

II.5.4.1 Einführung

Die Sensitivität der Modellparameter von MACRO und PRZM ist in den vorstehenden Abschnitten beschrieben. Ergänzend wurde auch die Sensitivität des FOCUS-Gesamtpakets (Step 3) als Ganzes untersucht.

Dazu wurde eine mehrteilige Sensitivitätsanalyse durchgeführt, die auch Vergleichsrechnungen zwischen FOCUSsw und EXPOSIT beinhaltet. Der Umfang und Aufbau der Sensitivitätsanalyse sind in Tab. II.6.-8 dargestellt.

Im Wesentlichen sind drei verschiedene Analysen zu unterscheiden:

- Sensitivitätsanalyse für EXPOSIT 3.0
- Sensitivitätsanalyse für das FOCUSsw-Standardpaket, d.h. FOCUS Step3; im Folgenden mit „FOCUS standard“ bezeichnet
- Sensitivitätsanalyse für ein modifiziertes FOCUSsw (außerhalb von SWASH oder SWAN); im Folgenden mit „FOCUS modified“ bezeichnet.

In der Analyse für „FOCUS standard“ wurden Standardsimulationen mit FOCUS Step3 zur Untersuchung folgender Faktoren durchgeführt:

- Sorption im Boden
- Sorption ans Gewässersediment
- Abbau im Boden
- Abbau im Gewässer und im Sediment
- Verflüchtigung
- Blattabwaschung (foliar washoff)
- Aufnahme durch die Pflanze über die Wurzel
- Applikationsrate
- Applikationsmonat
- Wahl des Szenarios

Die Standardsimulationen wurden für alle der 15 Kombinationen aus FOCUS-Szenario und Wasserkörper für jeweils eine Kultur durchgeführt (Wintergetreide, mit Ausnahme von R2,Mais).

„FOCUS modified“ beinhaltet zusätzlich zu den in „FOCUS standard“ modifizierten Inputvariablen, eine Reihe von Faktoren, die in FOCUS Step 3 fixiert sind, z.B.

- Upstream catchment
 - Fläche
 - Baseflow
 - Anteil behandelter Fläche
- Dimensionen der Wasserkörper
 - Breite
 - Wehrhöhe
- Sediment
 - Schichtmächtigkeit (Dicke)
 - gravimetrischer Gehalt an organischer Substanz
- Größe der Flächen, die zum Erosionseintrag in den Wasserkörper beitragen(20 m breiter Streifen vs. ganzes Feld)

- Pesticide Application Timer (FOCUS PAT), präziser: die Regel, nach der der PAT den Termin der Applikation bestimmt
 - Schwelle „>= X mm kumulativer Niederschlag in den 10 Tagen nach Applikation“
→ Variieren von X
 - Schwelle „<= Y mm täglicher Niederschlag in der Periode von 2 Tagen vor bis 2 Tagen nach Applikation → Variieren von Y
- Pufferstreifen (Step4 nach SWAN)
- Länge der Simulationsperiode von TOXSWA
 - Drainage: die in FOCUS ausgewählten 16 Monate vs. die gesamte MACRO-Output-Zeitreihe von 7 1/3 Jahren
 - Oberflächenabfluss und Erosion: die in FOCUS verwendeten 12 Monate vs. die gesamte PRZM-Output-Zeitreihe von 20 Jahren

Auf diese Weise sollte der Einfluss der zahlreichen Annahmen und Festsetzungen erfasst werden, die in FOCUS_{sw} getroffen werden. Die Kenntnis der sensitivsten Inputvariablen des FOCUS-Gesamtpakets ist darüber hinaus bei der Konzeption des Tools GERDA hilfreich, um Fehler zu vermeiden, die in FOCUS gemacht wurden.

Tab. II.5-8: Aufbau der Sensitivitätsanalyse für FOCUS_{sw} und EXPOSIT.

Modell (-paket)	Standard (std) / modifiziert (mod)	Eintragspfad (D = Drainage, RE = Runoff & Erosion)	Wasserkörper (d = ditch, s = stream, p = pond)	Anzahl der variierten Faktoren k ¹⁾	Anzahl der Simulationsläufe n ²⁾
EXPOSIT	-	D	-	4	100
	-	RE	-	5	120
FOCUS	std	D	d	12	260
			s	12	260
			p	12	260
		RE	s	12	260
			p	11	240
FOCUS	mod	D	d	22	460
			s	22	460
			p	20	420
		RE	s	26	540
			p	23	480

¹⁾ Ohne sog. „slave factors/parameters“, die eine Funktion eines oder mehrerer anderer variierten Faktoren/Parameter sind

²⁾ $n = (k+1) * 20$

II.5.4.2 Methodik

II.5.4.2.1 Morris-Methode

Die „Morris Sensitivity Screening“-Methode (im Folgenden kurz „Morris-Methode“) wurde von Morris (1991) vorgeschlagen und von Campolongo et al. (2007) modifiziert. Sie wurde z.B. in den globalen Sensitivitätsanalysen für VFSSMOD verwendet (Muñoz-Carpena et al., 2010; Fox et al., 2010). Die Methode bietet eine Reihe von Vorteilen:

- sie benötigt relativ wenige Simulationen (Sparsamkeit),
- sie liefert aussagekräftige und leicht interpretierbare Ergebnisse,
- sie ist global, d.h. sie bezieht sich auf dem gesamten Parameterraum und nicht nur auf einen Punkt (im Gegensatz zur klassischen „One at a time“ (OAT)-Analyse).

Nachteile der Morris-Methode sind:

- die Ergebnisse hängen stark von den Inputverteilungen ab (dies gilt allerdings für alle Arten von Sensitivitätsanalysen),
- je breiter die Inputverteilung, desto größer ist die Sensitivität,
- nur unkorrelierte Inputverteilungen sind möglich (oder aber slave factors, die komplett von einem oder mehreren anderen Faktoren abhängen),
- sie ist nicht quantitativ; dafür ist eine extended FAST (Saltelli, 1999) erforderlich.

Das Sampling funktioniert folgendermaßen:

- Anlage von Trajektorien
 - r Trajektorien ($r \geq 10$) werden durch den k -dimensionalen Faktorraum gelegt (Faktoren sind meist Modellparameter, aber nicht notwendigerweise).
 - Von einem Punkt (= Simulationslauf) zum nächsten innerhalb einer Trajektorie wird immer nur ein Faktor variiert. Im Gegensatz zur „klassischen“ OAT-Analyse kehrt man jedoch nicht zu einem „Basisszenario“ zurück.
 - Eine Trajektorie hat die Länge $k+1$, wobei k die Anzahl der variierten Faktoren darstellt.
- Ziehung von Quantilen
 - Es werden immer die gleichen p Quantile aus den Input-Verteilungen gezogen, wobei p typischerweise 4, 6 oder 8 ist.
 - Beispielsweise werden für $p = 8$ immer die Quantile mit den kumulativen Wahrscheinlichkeiten 0,0625, 0,1875, 0,3125, 0,4375, 0,5625, 0,6875, 0,8125 und 0,9375 gezogen.
- Oversampling
 - In Campolongo et al. (2007) wird in Abschnitt 3.1 eine Methode beschrieben, um den „besten“ Satz von r Trajektorien (den Satz mit der maximalen Euklidischen Distanz zwischen den Trajektorien im Faktorraum) zu finden. Es wird zuerst eine große Anzahl von Trajektorien gezogen (z.B. 1000) und anschließend in einem „Oversampling“ der beste Satz von r Trajektorien durch Maximierung des Kriteriums ermittelt.
 - Die Oversampling-Methode von Campolongo et al. (2007) ist allerdings sehr rechenintensiv und für große k nicht mehr praktikabel. Ruano et al. (2012) schlagen eine weniger rechenintensive Methode des Oversamplings vor, die nur unwesentlich schlechtere Ergebnisse hinsichtlich der Maximierung der Distanz zwischen den Trajektorien liefert wie die von Campolongo et al. (2007). Eine weitere Oversampling-Methode wird gerade von Rafael Muñoz-Carpena und Bob Rooney (Univ. Florida) entwickelt. In dieser Studie wurde das Oversampling nach Ruano et al. (2012) durchgeführt.
 - Zumindest in der uns vorliegenden Version der Methode von Ruano et al. (2012) erfolgt die Maximierung der Euklidischen Distanzen zwischen den Trajektorien anhand der kumulativen Wahrscheinlichkeiten der Quantile. Erst danach werden die Verteilungen invertiert, d.h. die tatsächlichen Werte der Faktoren aus der Verteilung abgegriffen.

Im Morris-Postprocessing werden folgende Rechnungen durchgeführt: (1) Berechnung der sog. Elementary Effects EE, (2) Berechnung der Morris-Maße.

Der Elementary Effect EE berechnet sich als $(y_{n+1} - y_n)/\delta$, d.h. als Änderung des Modelloutputs von einem Punkt der Trajektorie zum nächsten, dividiert durch die Konstante delta, mit $\delta = p/(2p - 2)$. Delta kann als mittlere Größe des Sprungs in der Skala der kumulativen Verteilung des variierten Faktors verstanden werden. Die tatsächliche Größe der Änderung des variierten Faktors wird nicht beachtet, nur das Vorzeichen der Änderung.

Die endgültigen Morris-Maße sind

- μ : Mittelwert der EE für den jeweiligen Faktor
- μ^* : Mittelwert der $\text{abs}(EE)$ für den jeweiligen Faktor
- δ : Standardabweichung der EE für den jeweiligen Faktor.

μ^* ist ein Maß für die Gesamtsensitivität eines Inputfaktors (Parameter, Variable oder sonstiges), d.h. seines Betrags zur Gesamtvarianz. Campolongo et al. (2008) empfehlen die Verwendung von μ^* statt μ als Maß für die Sensitivität, um im Falle einer nicht-monotonen Reaktion des Modells auf die Veränderung des Faktors eine gegenseitige Annullierung von positiven und negativen EE zu vermeiden.

δ ist ein Maß für die Interaktion des jeweiligen Faktors mit anderen Inputfaktoren (higher-order effects).

II.5.4.2 Variierte Faktoren und zugewiesene Verteilungen

EXPOSIT Drainage

Varierte Faktoren (es wurden die gleichen Verteilungen benutzt wie in „FOCUS standard“, s. Tabelle II.5-9):

- Koc
- DT50soil
- Wasserlöslichkeit
- Applikationsmonat

Die “Grundwassergefährdungsgruppe” wurde als slave factor definiert, da sie sich aus anderen Substanzeigenschaften ergeben sollte. In der Oberfläche von EXPOSIT 3.0 ist keine Formel für die “Grundwassergefährdungsgruppe” vorhanden. Außerdem machen die für die 4 Gruppen angegebenen, z.T. widersprüchlichen Parameterbereiche der DT50 eine sinnvolle Einbindung der DT50 in eine Vorhersage der “Grundwassergefährdungsgruppe” unmöglich. Da in Bezug auf Drainageausträge kein Unterschied zwischen Gruppe II, III und IV besteht, wurde folgende einfache Formel zur Bestimmung der “Grundwassergefährdungsgruppe” gewählt:

WENN (Koc > 500 L/kg UND Wasserlöslichkeit < 100 mg/L), DANN Gruppe I, SONST Gruppe (II, III, IV)

EXPOSIT R+E

Varierte Faktoren (für die ersten vier Faktoren wurden die gleichen Verteilungen benutzt wie in FOCUSstd, s. Tabelle II.5-9):

- Koc

- DT50soil
- Wasserlöslichkeit
- Applikationsmonat
- Pufferstreifenbreite (uniform, 0-25 m)

FOCUSstd

Die variierten Faktoren und ihre Verteilungen sind in Tabelle II.5-9 zu finden.

FOCUSmod

Die variierten Faktoren und ihre Verteilungen sind in den Tabellen II.5-10 und II.5-11 zu finden.

Tab. II.5-9: Inputfaktoren, die in den FOCUS-standard-Analysen variiert wurden.

Inputvariable		Einheit	Verteilungstyp	truncation limits		distribution parameters		final parameters for sampling		
name	description			Min	max	mean	geomean	par 1	par 2	par3
Koc	Koc	L/kg	lognormal, truncated (0,01; 0,99)	1	1000000		1000	$\mu = 6,907755$	$\sigma = 2,96936$	wt = 1
degHLsoil	degradation half-life soil	d	lognormal, truncated (0,01; 0,99)	1	1000		31,62278	$\mu = 3,453878$	$\sigma = 1,48468$	
nf	Freundlich exponent nf	-	normal, truncated (0,025; 0,975)	0,75	1,05	0,9		$\mu = 0,9$	$\sigma = 0,076532$	
degHLwc	degradation half-life water column	d	lognormal, truncated (0,01; 0,99)	1	1000		31,62278	$\mu = 3,453878$	$\sigma = 1,48468$	
degHLsed	degradation half-life sediment	d	lognormal, truncated (0,01; 0,99)	1	1000		31,62278	$\mu = 3,453878$	$\sigma = 1,48468$	
foliarWC	foliar washoff coefficient	1/cm	lognormal, truncated (0,025; 0,975)	0,05	5		0,5	$\mu = -0,693147$	$\sigma = 1,17481$	
PUF	plant uptake factor	-	uniform	0	1	0,5		left = 0	right = 1	wt = 1
vp	vapour pressure at reference temperature	mPa	log-uniform	1,0e-5	1,0e-1			left = 1,0e-5	right = 1,0e-01	wt = 1
watersolub	water solubility at reference temperature	mg/L	lognormal, truncated (0,01; 0,99)	1,0e-4	1,0e+6		10	$\mu = 2,302585$	$\sigma = 4,94893$	
apprate	application rate	g/ha	lognormal, truncated (0,025; 0,975)	10	10000		$\frac{316,2277}{8}$	$\mu = 5,756463$	$\sigma = 1,762215$	
scenario_nr	ID of FOCUS scenario	-	discrete							
appmonth	application month	-	uniform	0,5	12,499	6,5		left = 0,5	right = 12,499	wt = 1

Tab. II.5-10: Inputfaktoren, die in den FOCUS-modified-Analysen zusätzlich zu FOCUS-standard variiert wurden - Teil 1.

domain	Input variable		unit	distributi-on type	truncation limits (values)		distribu-tion params	final parameters for sampling		
	name	description			min	max		geomean	par 1	par 2
Upstream catchment	area_up	area of upstream catchment	ha	log-uniform	s: 40	s: 140		left = 40	right = 140	wt = 1
					d: 1	d: 20		left = 1	right = 20	wt = 1
	ratioaqb	ratio of area-specific baseflow to standard value of resp,FOCUS scenario	-	log-uniform	s: 0,5	s: 2		left = 0,5	right = 2	wt = 1
					d: 0,5	d: 2		left = 0,5	right = 2	wt = 1
Ftreated_up	treated area fraction	fraction	uniform	stream: 0	s: 1		left = 0	right = 1	wt = 1	
				ditch: 0	d: 1		left = 0	right = 1	wt = 1	
Dimensions of water body	width_wb ¹⁾	width	m	lognormal, truncated (0,025; 0,975)	s: 0,848528	s: 1,697056	s= 1,2	$\mu = 0,182322$	$\sigma = 0,176827$	
					d: 0,848528	d: 1,697056	d= 1,2	$\mu = 0,182322$	$\sigma = 0,176827$	
					p: 9,486833	p: 94,86833	p= 30	$\mu = 3,401197$	$\sigma = 0,58740$	
	crestheight	height of weir crest above channel bottom	m	lognormal, truncated (0,025; 0,975)	s: 0,353553	s: 0,707107	s= 0,5	$\mu = -0,693147$	$\sigma = 0,176827$	
					d: 0,282843	d: 0,565685	d= 0,4	$\mu = -0,916291$	$\sigma = 0,176827$	
					p: 0,316228	p: 3,162278	p= 1,0	$\mu = 0$	$\sigma = 0,58740$	
Sediment	zwb	sediment thickness (TOXSWA parameter zwb)	m	lognormal, truncated (0,025; 0,975)	0,05	0,2	0,1	$\mu = -2,302585$	$\sigma = 0,353653$	
	OM	OM-Gehalt (gravimetrisch)	fraction	lognormal, truncated (0,025; 0,975)	0,009	0,90	0,09	$\mu = -2,407946$	$\sigma = 1,17481$	

1) Der Parameter wicrestrc (Breite der Krone des Wehrs) wurde nach anfänglichen Abstürzen wegen unerlaubter Werte und numerischer Instabilität als Slave factor definiert: wicrestrc = width_wb – 0,5 m

Tab. II.5-11: Inputfaktoren, die in den FOCUS-modified-Analysen zusätzlich zu FOCUS-standard variiert wurden - Teil 2.

domain	Input variable		unit	distribution type	truncation limits (values)		distribution params	final parameters for sampling		
	name	description			min	max	geomean	par 1	par 2	par 3
Erosion rules	leerwc	Margin of treated plot, contributing eroded sediment with sorbed substances (leerwc; TOXSWA parameter for stream)	m	dichotomic; either FOCUS value (20 m) or the correct one (100 m)	20	100				
	arerpo	Size of area surrounding the pond, contributing eroded sediment with sorbed substance (arerpo; TOXSWA parameter for pond)	ha	dichotomic= either FOCUS value (0,06 ha) or the correct one (0,45 ha)	0,06	0,45				
	HL	hydraulic length (HL; PRZM parameter)	m	dichotomic; coupled to leerwc / arerpo (not included in sampling)	20	s: 100 p: 70				
Pesticide application timer	X	threshold „>= X mm in the 10 days following application“	mm	Uniform	0		20	left = 0	right = 20	wt = 1
	Y	threshold “<= Y mm of rain each day in the period from 2 days before to 2 days after application	mm	Uniform	0		4	left = 0	right = 4	wt = 1
Runoff/erosion mitigation	redefeff_Q	reduction efficiency for surface runoff volume	fraction	Uniform	0		0,99	left = 0	right = 0,99	wt = 1
	redefeff_R	reduction efficiency for dissolved pesticides	fraction	Uniform	0		0,99	left = 0	right = 0,99	wt = 1
	redefeff_E	reduction efficiency for eroded sediment and and particle-bound pesticides	fraction	uniform	0		0,99	left = 0	right = 0,99	wt = 1

GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

Simulationspe- riode TOXSWA	txwperiod	length of TOXSWA simulation period	months	dichotomic; either FOCUSstd value or full MACRO/PRZM period	D: 16 R+ E: 20	D: 88 R+E: 240
--------------------------------	-----------	---------------------------------------	--------	--	-------------------	-------------------

II.5.4.2.3 Output-Variablen

Die Morris-Maße wurden für folgende Outputvariablen berechnet:

EXPOSIT: „PEC initial Graben“ (PEC_{sw,max}) in µg/L.

Die „PEC ohne sorptive Festlegung Graben“ wurde nicht untersucht.

FOCUS:

- Globales Maximum (Stundenwert) der Konzentration in der Wasserschicht des Gewässers (PEC_{sw,max}; in µg/L)
- Time Weighted Average Concentrations in der Wasserschicht (TWAC_{sw}; µg/L) für die Perioden 1 , 2, 4, 7, 14, 21, 28, 42, 50, 100 Tage
- Globales Maximum (Stundenwert) der Konzentration im Gewässersediment (PEC_{sed,max}; in µg/kg Trockenmasse)
- Time Weighted Average Concentrations im Gewässersediment (TWAC_{sed}; in µg/kg Trockenmasse) für die Perioden 1 , 2, 4, 7, 14, 21, 28, 42, 50, 100 Tage

Die FOCUS_Outputvariablen wurden aus dem TOXSWA summary file (.sum) ausgelesen.

Die Zahl der untersuchten Outputvariablen betrug also 1 für EXPOSIT und 22 für FOCUS.

II.5.4.2.4 Technische Umsetzung

Von Rafael Muñoz-Carpena und Bob Rooney von der University of Florida wurde uns ein Paket von Matlab-Skripten zur Verfügung gestellt, das folgendes ermöglicht

- Einlesen der Verteilungen der Inputvariablen im SIMLAB 2.2-Format (.fac)
- Sampling nach der effizienteren (weniger rechenaufwendigen) Methode von Ruano et al. (2012)
- Sampling nach der Original-Methode von Campolongo et al. (2007)
- Ausgabe der gezogenen Sätze von Inputvariablen im SIMLAB 2.2-Format (.sam)
- Postprocessing der Modellergebnisse nach der Methode von Campolongo et al. (2007)

Die Simulationsketten selbst wurden von Footways mit Hilfe von Perl-Skripten aufgesetzt:

- Einlesen der .sam files und Umwandlung der Inputvariablen in Modellparameter
- Simulationsläufe der jeweiligen Modelle im Batchbetrieb
- Kopplung von MACRO und TOXSWA über m2t-files, unter Benutzung des Tools m2t.exe (Stenemo, 2012)
- Kopplung von PRZM und TOXSWA über p2t-files
- Auslesen des TOXSWA-Outputs (.sum) bzw. Ergebniszellen von EXPOSIT und Erzeugung der finalen Ergebnisdatei (.out) als Input für das Morris-Postprocessing

Graphen von μ^* vs. sigma für jede Kombination von Modelloutputvariable und Analyse (Zeile in Tab. II.5-8) wurden mit Hilfe von R (www.r-project.org/) erzeugt.

II.5.4.2.5 Numerische Probleme

EXPOSIT und MACRO

Mit EXPOSIT und MACRO traten keine Probleme auf.

PRZM

In PRZM trat nur ein Fehler auf: PRZM stürzt ab, wenn die dimensionslose Henrykonstante HENRYK Werte in der Größenordnung 10^{-2} erreicht. Mark Cheplick (Waterborne Env.), der Manager des PRZM-Codes, bestätigte, dass es sich um einen Bug im PRZM-Code handelt. Die Verteilung des Dampfdrucks wurde auf ein Maximum von 10^{-4} Pa = 0,1 mPa begrenzt. Sehr hohe Henrykonstanten können so nicht mehr auftreten.

TOXSWA

Mit TOXSWA trat eine ganze Reihe von Abstürzen mit verschiedenen Fehlermeldungen auf, so dass die Inputverteilungen immer wieder angepasst (d.h. vor allem verengt) werden mussten. Die Verteilungen in Tabellen II.5-9, II.5-10 und II.5-11 stellen die Ergebnisse dieser iterativen Anpassung dar. Selbst mit den finalen angepassten Verteilungen traten bei einigen Analysen einzelne Abstürze auf. Da für das Morris-Postprocessing vollständige Trajektorien unerlässlich sind, wurden Trajektorien mit vereinzelt abstürzenden Simulationsläufen per Hand modifiziert. Dies verschlechtert zwar die Abdeckung des Parameterraums und kann außerdem Korrelation zwischen Inputfaktoren hervorrufen, war aber die einzige Möglichkeit, komplette Trajektorien zu erhalten. Eine ausreichende Aussagekraft der Morris-Ergebnisse sollte dennoch gewährleistet sein, weil sicherheitshalber das Doppelte der Mindestanforderung von 10 Trajektorien simuliert wurde.

Die (nach Behebung technischer Probleme) mit TOXSWA beobachteten Fehler sind in Tabelle II.5-12 aufgeführt.

Tab. II.5-12: In TOXSWA aufgetretene Fehler aufgrund numerischer Probleme.

Fehlermeldung	Ursache	betroffene Analysen (nach Optimierung der Verteilungen)	Abhilfe	Anmerkungen
Direction of water flow erroneous; water flows in upstream direction	zu geringer Abfluss, um uniformen Fluss in Ditch oder Stream oberhalb der backwater curve (Adriaanse und Beltman, 2009) aufrechtzuerhalten	FOCUSmod_D_d, FOCUSmod_RE_s	Baseflow erhöhen (durch area_up oder ratioaqb) oder Geometrie ändern (Breite, Wehrhöhe)	Szenario D2 ist sehr anfällig für diesen Fehler aufgrund des niedrigen Baseflow
Froude number > 0.9	zu hohe Fließgeschwindigkeit: Abbruch, weil die Annahmen der kinematischen Welle bei superkritischem Fluss (Froude number > 1) nicht mehr gewährleistet sind	FOCUSmod_RE_s	Fläche des Upstream catchments verringern	
Fehler in der PSM-Massenbilanz im Sediment > 1 %	Rundungsfehler bei der numerischen Lösung der Freundlich-Sorption	FOCUSmod_D_d, FOCUSmod_D_s, FOCUS_std_D_s	Freundlich-Exponent erhöhen (Fehler kann ab etwa $n_f \leq 0.85$ auftreten)	relatives Kriterium führt auch dann zu Absturz, wenn der absolute Fehler sehr gering ist (bei Konzentrationen nahe Null)
Positivity condition 5 (brdd ≥ 0) not fulfilled; take smaller time step for sediment layer	zu kleiner Kf für fein diskretisiertes Sediment; Verkleinerung des Zeitschritts nicht mehr möglich	prinzipiell alle	txw template wechseln (fein oder grob diskretisiertes Sediment)	Skript wurde so modifiziert, dass das Kriterium für die Auswahl des templates nicht mehr der Koc, sondern der Kf ist; der umgekehrte Fehler (Kf zu groß für grob diskretisiertes Sediment ist bereits aus FOCUS (2001) bekannt.
The length of the segments in the water layer is too large to execute the run.	Diskretisierung des Längssegmente zu grob für eine numerische Lösung bei der gegebenen Geometrie; tritt auf bei zu engem Breite/Wehrhöhe-Verhältnis	FOCUSmod_D_s	Erhöhung des Verhältnisses Breite/Wehrhöhe	
Absturz ohne Fehlermeldung; in Debug-Version der Entwickler: „bottom slope - friction slope = 0“	unklar; Problem vermutlich im „backwater curve“-Abschnitt zwischen dem uniform-flow-Abschnitt und dem Wehr	FOCUSmod_RE_s, FOCUSmod_D_s	keine direkte Abhilfe gefunden	

Für die Analyse FOCUS modified R+E stream kam es auch mit den finalen angepassten Inputverteilungen zu 165 Abstürzen unter 540 Simulationen. Die Fehler teilten sich wie folgt auf (vgl. Tabelle II.5-12):

- Abstürze wegen zu hoher Fließgeschwindigkeit: 50, davon 43 mit der langen Simulationsperiode
- Abstürze wegen zu wenig Abfluss: 41, davon 16 mit der langen Simulationsperiode
- Abstürze ohne Fehlermeldung: 69
- Fehler in der PSM-Massenbilanz im Sediment $> 1\%$: 4
- The length of the segments in the water layer is too large to execute the run: 1

Aus den obigen Fehlern lassen sich diese Schlussfolgerungen ziehen:

- Das Basisabfluss- und Peakabflussgeschehen ist zwischen den vier Runoff-Stream-Szenarien zu unterschiedlich, um diese mit den gleichen Inputverteilungen von area_up, ratioaqb, width_wb und crestheight modellieren zu können.
- Die 20-jährigen p2t-Zeitreihen außerhalb der 12-monatigen in FOCUSStep 3 benutzten Perioden enthalten Runoff-Peaks, die selbst bei einer FOCUSStep3-ähnlichen Parametrisierung von area_up, ratioaqb, width_wb und crestheight zu einem zu hohen Abflussvolumen und damit zu einer zu hohen Fließgeschwindigkeit und letztendlich zum Absturz von TOXSWA führen.

Die Analyse FOCUS modified R+E stream wurde daher (in Absprache mit dem UBA) abgebrochen und als gescheitert gewertet.

Im Report von Adriaanse und Beltman (2009) zur Hydrologie/Hydraulik in FOCUS-TOXSWA finden sich diese Empfehlungen:

- "Looking back it was unnecessary to introduce the simplification of a constant water depth for the entire reach of the edge-of-field watercourse. For each Q at $x = 0$ and for all times, the entire water depth profile is calculated in the auxiliary channel anyway, and this profile can simply be used in the numerical solution of the water conservation equation of the edge-of-field watercourse."
- "We strongly recommend dropping the assumption of a constant water depth $h(x)$ in the watercourse as (i) it is unnecessary, (ii) it is unrealistic (especially in FOCUS streams with high discharges) and (iii) it forms an additional condition that may prevent the numerical solution of the water balance conservation equation from correctly representing the water flow ($Q_{x=l}$ may become negative, which is incorrect if $P=E=S=0$)."
- "We suggest ... implementing a mathematically correct description for a gradually varied flow in front of a weir that is also spatially varied, i.e. where water may enter and leave a flow along its course."

Vorschläge für eine verbesserte Lösung der Hydrologie in TOXSWA mit weniger und weniger starken Annahmen (womit hoffentlich eine Verbesserung der numerischen Stabilität einhergehen würde) bestehen also. Das anstehende Update von FOCUS-TOXSWA wird allerdings keine Änderung der Hydrologie beinhalten, weil dafür eine neue EFSA Work Group nötig wäre (Adriaanse, persönl. Mitteilung, 26.02.2013).

II.5.4.3 Ergebnisse und Diskussion der Sensitivitätsanalyse des FOCUSsw-Gesamtansatz und EXPOSIT

II.5.4.3.1 Übersicht

Ergebnisse liegen vor für alle Analysen bis auf die Analyse FOCUS mod R+E stream, die nicht erfolgreich beendet werden konnte.

Alle Morris-Outputs (Tabellen und Plots) für alle Analysen und Outputvariablen sind im Archiv Plots_tables_Morris_20130310.rar zu finden. In Anhang A9 sind als Beispiel die Diagramme für die Outputvariablen PECsw,max und PECsed,max dargestellt.

Die Applikationsrate wurde für EXPOSIT nicht variiert, was man im Nachhinein aus Konsistenzgründen hätte tun sollen.

Tabelle II.5-13 (s. u.) zeigt die fünf sensitivsten Parameter (höchste Werte von μ^*) für alle Analysen, beispielhaft für die Outputvariablen PECsw,max und PECsed,max.

Die Ergebnisse für die anderen 20 Outputvariablen (TWACsw und TWACsed verschiedener Periodenlänge; siehe Plots_tables_Morris_20130310.rar), die in den FOCUS-Analysen untersucht wurden, sind im Wesentlichen ähnlich zu denen für die maximale PEC. Vor allem für FOCUSmod (z.B. FOCUSmod_RE_p) können sich mit zunehmender Periodenlänge (von 1 h bis 100 Tage) die Rangfolgen der Faktoren verschieben. Der Bestand der sensitivsten 5 bis 6 Faktoren bleibt jedoch konstant.

In den Morris-Plots in Anhang A9 wird sichtbar: Während die Morris Measures (und damit die Varianzen) von PECsw,max und PECsed,max für den Eintragspfad Drainage in der gleichen Größenordnung liegen, sind für Oberflächenabfluss und Erosion die Morris Measures für PECsed,max deutlich größer als für PECsw,max.

Allgemein lässt sich aus Tabelle II.5-13 ableiten:

- Die Applikationsrate ist immer einer der sensitivsten Faktoren. (Das ist selbstverständlich, erleichtert aber auch die Einschätzung der Sensitivität der anderen Faktoren.)
- Mit Ausnahme von FOCUSmod_D_p (nur zwei Szenarien zur Auswahl) und FOCUSmod_RE_p (nur ein Szenario vorhanden), ist in den FOCUS-Analysen die Wahl des Szenarios (scenario_nr) immer unter den sensitivsten Faktoren. Die Wahl des Szenarios beinhaltet die Szenarioparametrisierung (Boden, Baseflow, Kulturtermine etc.) und die Wetterzeitreihe.
- Mit Ausnahme von FOCUSmod_RE_p (für Variable PECsw,max) taucht unter den 5 sensitivsten Faktoren immer der Koc der Substanz auf.
- Die Abbauhalbwertszeit im Boden (degHLsoil) spielt im Mittel eine geringere Rolle als der Koc und hat in den FOCUS Drainage-Szenarien eine höhere Sensitivität als in den FOCUS R+E-Szenarien
- Die Abbauhalbwertszeiten in Wasser und Sediment (degHLwc und degHLsed) sind im Allgemeinen weniger sensitiv als degHLsoil.

Tab. II.5-13: Die sensitivsten fünf Faktoren¹⁾der verschiedenen Sensitivitätsanalysen.

Analyse	Output-Variable	Rang 1	Rang 2	Rang 3	Rang 4	Rang 5
EXPOSIT_D ²⁾		Koc	appmonth	watersolub	degHLsoil	n.a. ³⁾
EXPOSIT_RE ²⁾		Koc	largeurBE	degHLsoil	-	-
FOCUSstd_D_d	PEC _{sw,max}	apprate	Koc	scenario_nr	degHLsoil	appmonth
FOCUSstd_D_s		apprate	scenario_nr	Koc	appmonth	degHLsoil
FOCUSstd_D_p		apprate	Koc	degHLsoil	appmonth	scenario_nr
FOCUSstd_RE_s		apprate	Koc	scenario_nr	appmonth	foliarWC
FOCUSstd_RE_p		Koc	appmonth	apprate	-	-
FOCUSmod_D_d		apprate / scenario_nr		Koc	degHLsoil	FtreatedUp
FOCUSmod_D_s	apprate	scenario_nr	Ftreated_up	Koc	Twxperiod	
FOCUSmod_D_p	apprate	degHLsoil	degHLwc	Koc	PUF	
FOCUSmod_RE_s	----- no results -----					
FOCUSmod_RE_p	txwperiod	Crestheight	widthwb	appmonth	apprate	
FOCUSstd_D_d	PEC _{sed,max}	apprate	Koc	degHLsoil	degHLsed	scenario_nr
FOCUSstd_D_s		apprate	Koc	scenario_nr	degHLsoil	degHLsed / appmonth
FOCUSstd_D_p		apprate	Koc	degHLsoil	appmonth	scenario_nr
FOCUSstd_RE_s		apprate	scenario_nr	appmonth	Koc	degHLsoil
FOCUSstd_RE_p		apprate	appmonth / Koc		degHLsed	degHLsoil
FOCUSmod_D_d		apprate	Koc	degHLsoil / scenario_nr		degHLsed
FOCUSmod_D_s	apprate	scenario_nr	FtreatedUp	OM	Koc	
FOCUSmod_D_p	apprate	degHLsoil	degHLwc	degHLsed	Koc	
FOCUSmod_RE_s	----- no results -----					
FOCUSmod_RE_p	txwperiod	Apprate	Koc	widthwb	appmonth	

1) Die Faktoren mit den höchsten Werten von μ^* . Nur Faktoren mit $\mu^* \gg 0$ werden dargestellt.

2) Die Applikationsrate wurde für EXPOSIT nicht variiert.

3) n.a. = not applicable. Es gab nur 4 variierte Faktoren für EXPOSIT_D.

Substanzparameter = rot, Applikationsparameter = lila, Gewässerparameter = blau, Szenarioparameter = grün

Faktoren mit sehr nahe beieinander liegenden Werten von μ^* bekamen in der Darstellung den gleichen Rang zugewiesen.

II.5.4.3.2 EXPOSIT

Die Applikationsrate wurde nicht variiert, da in EXPOSIT ihr Effekt linear ist. Man hätte sie aber aus Konsistenzgründen mit einbeziehen sollen. Es ist zu vermuten, dass wie in FOCUS die Applikationsrate mit der sensitivste Faktor gewesen wäre (im Sinne von μ^* bzw. dem approximierten Beitrag zur Gesamtvarianz).

Für den Pfad Drainage waren Koc und Applikationsmonat die sensitivsten der 4 Inputfaktoren. Da bekanntermaßen in EXPOSIT der Drainageeintrag ins Gewässer direkt nur von der Applikationsrate, der DT50, der Applikationssaison und der „Grundwassergefährdungsgruppe“ abhängt, hängt die Sensitivität der variierten Faktoren stark von der Berechnung des slave factors

„Grundwassergefährdungsgruppe“ ab. Die hohe Sensitivität von Koc und Wasserlöslichkeit resultiert aus der verwendeten Zuordnungsregel (vgl. II.3.4.2.2):

WENN (Koc > 500 L/kg UND Wasserlöslichkeit < 100 mg/L), DANN Gruppe 1, SONST Gruppe (2, 3, 4)

Für den Pfad Oberflächenabfluss und Erosion war der Koc weitaus am sensitivsten, weit vor den anderen beiden Einflussfaktoren Pufferstreifenbreite (largeurBE) und DT50 im Boden (degHLsoil). Hierzu ist zu sagen, dass die Verteilung des Koc in den vorliegenden Sensitivitätsanalysen den gesamten möglichen Wertebereich (d.h. alle Substanzen) widerspiegelt und NICHT die Variabilität des Koc für eine einzelne Substanz. Applikationsmonat und Wasserlöslichkeit werden bekanntlich in EXPOSIT für die Berechnung der PEC_{sw,RE} nicht benutzt.

II.5.4.3.2 FOCUSstd

- Die vier Faktoren Koc, Applikationsmonat, Applikationsrate und die Wahl des Szenarios (scenario_nr) sind praktisch immer unter den 5 sensitivsten Faktoren (außer bei FOCUSstd_RE_p, wo es nur ein Szenario gibt und scenario_nr nicht existiert).
- Für den Pfad Drainage gehört außerdem immer die Abbauhalbwertszeit im Boden (degHLsoil) zu den 5 sensitivsten Faktoren.
- Der Freundlich-Exponent nf taucht nie unter den 5 sensitivsten Faktoren auf. Zum einen wird die Bedeutung des Freundlich-Exponenten vermutlich etwas unterschätzt, weil TOXSWA nur eine enge Verteilung erlaubt (für $nf \leq 0,85$ treten Abstürze auf, für $nf \leq 0,75$ immer Absturz). Andererseits ist auch der real auftretende Wertebereich von nf relativ schmal, vor allem im Vergleich zur Spannbreite von z.B. Koc und Applikationsrate, so dass vermutlich auch mit dem vollen Wertebereich von nf der Beitrag von nf zur Varianz nicht ins Gewicht fallen würde.

II.5.4.3.2 FOCUSmodified

Drainage:

- Auch für FOCUSmodified zählen die Faktoren Koc und Applikationsrate stets zu den sensitivsten fünf.
- Im Vergleich zu FOCUSstd ist in FOCUSmod der Applikationsmonat aus den sensitivsten Faktoren herausgefallen. Stattdessen treten der Szenarioparameter FtreatedUp (behandelter Flächenanteil des Upstream Catchments) und (für den Pond) der Gehalt an organischer Substanz des Gewässersediments (OM) auf.

Runoff + Erosion:

- Für FOCUSmod_RE_p verschieben sich die sensitivsten Faktoren deutlich.
 - Der sensitivste Faktor ist jetzt mit Abstand txwperiod (Länge der Simulationsperiode; 12 vs. 240 Monate)
 - Danach folgen für PEC_{sw} crestheight (Wehrhöhe) und widthwb (Breite des Wasserkörpers). Diese bestimmen das Wasservolumen des Ponds.
 - Für PEC_{sed} ist nur widthwb unter den sensitivsten Faktoren. Widthwb bestimmt die Grundfläche des Ponds und damit die Oberfläche der Sedimentschicht.

- Applikationsrate und Applikationsmonat verbleiben unter den fünf sensitivsten Faktoren.
- Für PECsed liegt der Faktor arerpo (Fläche, die erodiertes Sediment beisteuert; 0.06 vs. 0.45 ha) an sechster Stelle des Sensitivitätsrankings. Der Effekt der konzeptionell falschen Annahme in FOCUSsw, dass nur ein 20 m breiter Streifen Erosionseinträge liefert, ist also durchaus von Bedeutung.
- Die Sensitivitäten der Reduktionseffizienzen für Oberflächabfluss (redefeff_Q), gelöste PSM (redefeff_R) und partikulär gebundene PSM (redefeff_E) der Pufferstreifen (mit fixen Reduktionsfaktoren nach Step4 wie in SWAN) sind nur untergeordnet. Dies kann allerdings z.T. daran liegen, dass diese Faktoren unabhängig voneinander variiert wurden. Vielleicht wäre es geschickter gewesen, redefeff_R und redefeff_E als slave factors von redefeff_Q auszu-drücken.

Für den FOCUSmod_RE_s liegen leider keine Ergebnisse vor. Es ist aber ein ähnlich starker Einfluss von txwperiod zu vermuten (vgl. II.3.4.2.5).

II.5.4.5 Schlussfolgerungen

Zunächst ist anzumerken, dass ein Faktor genau dann wichtig ist, wenn er sensitiv UND unsicher/variabel ist. Beispielsweise ist die Applikationsrate sensitiv, aber in einem regulatorischen Assessment nicht unsicher (weil vorgegeben).

Aus den Ergebnissen der durchgeführten Sensitivitätsanalysen nach Morris lassen sich folgende Schlüsse ziehen:

- Die Sensitivität der in FOCUSStep3 fixierten Szenarioparameter (FtreatedUp, OM, widthwb, crestheight) ist z.T. erheblich. Dies wirft die Frage nach der Variabilität und Unsicherheit dieser Faktoren in Wirklichkeit und nach der Relevanz und Repräsentativität der FOCUS-Szenarien in Bezug auf Gewässer- und Einzugsgebietscharakteristiken auf.
- FOCUSStep3-Läufe mit nur 12 Monaten Gewässersimulation sind nicht repräsentativ für langjährige Zeitreihen. Dies ist bereits bekannt (Klein, 2007).
- Die derzeitige Version von TOXSWA (FOCUS_TOXSWA 2.2.1) ist nur in einem relativ engen Parameterraum stabil. Am stabilsten ist ein Verhältnis Breite/Wehrhöhe von ca. 2,5 bis 3.
- Anwendungen von TOXSWA auf Fließgewässer mit Breite-Tiefe-Verhältnis ca. >4 und/oder ohne Stauregelung sind mit der vorliegenden Version nicht möglich.
- Die 20-jährigen p2t-Zeitserien außerhalb der 12monatigen in FOCUSStep 3 benutzten Perioden enthalten Runoff-Peaks, die selbst bei einer FOCUSStep3-ähnlichen Parametrisierung von area_up, ratioaqb, width_wb und crestheight zu einem zu hohen Abflussvolumen und damit zu einer zu hohen Fließgeschwindigkeit und letztendlich zum Absturz von TOXSWA führen. Das heißt, die 20 Jahre, die man mit TOXSWA in FOCUS eigentlich simulieren sollte, um repräsentative PECsw-/PECsed-Ergebnisse zu bekommen, können gar nicht, zumindest nicht mit allen Szenarien, gerechnet werden.
- Eine Anwendung von TOXSWA im Rahmen des Tools GERDA würde eine ausgedehnte Kalibrierung der Szenarien hinsichtlich Gewässergeometrie und Einzugsgebietscharakteristiken erfordern und wäre immer noch absturzanfällig für große Abflussereignisse oder

GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

Boden-Klima-Kombinationen mit niedrigem Baseflow. Für das Tool GERDA (Stufe 3 und 4) wird daher STEPS-1-2-3-4 verwendet.

II.6 Einschätzung zur Notwendigkeit der Berücksichtigung des Eintragspfads Zwischenabfluss im Tool GERDA

II.6.1 Einführung

Der PSM-Eintragspfad Zwischenabfluss (lateral subsurface flow, interflow) ist im System der FOOTPRINT Soil Types (Dubus et al., 2009) enthalten. Er wird von Footways z.B. im Tool Proziris (Burns et al., 2014) standardmäßig mit MACRO simuliert und zur Expositionsabschätzung für Oberflächengewässer verwendet. In der Zulassung von Wirkstoffen in der EU bzw. Pflanzenschutzmitteln in Deutschland wird Zwischenabfluss bisher nicht berücksichtigt. Ziel dieses Kapitels ist es, eine Einschätzung zu erarbeiten, ob Zwischenabfluss im Tool GERDA (zumindest in zukünftigen Versionen) in der Berechnung von PEC_{sw} und PEC_{sed} für Oberflächenabfluss und Erosion berücksichtigt werden muss oder nicht.

Unabhängig von den mit MACRO simulierten PSM-Austrägen über Zwischenabfluss stellt sich die Frage der Konnektivität hinsichtlich Zwischenabfluss in der Landschaft: Während ein gedräntes Feld mit funktionsfähigen Drainagen immer eine unmittelbare Anbindung zum Gewässernetz besitzt, ist die Identifikation von Flächen, von denen PSM-Einträge über Oberflächenabfluss, Erosion oder Zwischenabfluss in das Gewässernetz gelangen können, weniger einfach (Stichworte "critical source areas" und "connectivity"; z.B. Frey et al., 2009; Doppler et al., 2012). Doppler et al. (2012) kommen zum Schluss: „Our findings concerning connectivity suggest that the question whether an area is connected to the stream cannot be answered with yes or no. The question should rather be how well an area is connected to the stream.“

Im Falle eines edge-of-field-Szenarios (Feld unmittelbar an Oberflächengewässer angrenzend) ist eine gute Konnektivität für Zwischenabfluss mit hoher Wahrscheinlichkeit gegeben, aber für das Upstream Catchment des FOCUS Gewässerszenarios stream, das immerhin 1 km² Fläche besitzt, nicht unbedingt. Die nachfolgend dargestellte Simulationsstudie wurde allerdings, gemäß der in FOCUS_{sw} verwendeten Annahme, dass das hydrologische Signal des 1 ha großen Feldes auf das Upstream Catchment hochmultipliziert werden kann, unter Annahme guter Konnektivität hinsichtlich Zwischenabfluss für das gesamte Upstream Catchment des Stream durchgeführt.

II.6.2 Material und Methoden

In einem ersten Schritt wurden für alle 35 ackerbaulich relevanten FSTs, die Zwischenabfluss aufweisen, MACRO-Simulationen durchgeführt und mit STEPS PEC_{sw}/PEC_{sed} im Modus „interflow only“ berechnet. Die PSM-Einträge in Gewässer über Zwischenabfluss wurden hierbei genauso behandelt wie Drainageeinträge. Das Simulationsdesign war analog zu den MACRO-Simulationen zur Erzeugung der CDFs für den Eintragspfad Drainage (vgl. Kap. I.3.2.5):

- 360 Klima/FST-Kombinationen
- 2 Kulturen (Silagemais und Winterweichweizen)
- 12 Koc/DT50-Kombinationen
- 12 Applikationsmonate

Die Gesamtzahl der MACRO-Simulationen für Zwischenabfluss und der anschließenden STEPS-Simulationen betrug also jeweils 103680. Anschließend wurden analog zu Kap. I.3.2.5 jeweils

288 räumliche CDFs für die Deskriptoren Median[annual PEC_{sw,max}] und Median[annual AUC_{sw}] für den Modus „interflow only“ erzeugt. Analog zu den CDFs für Drainage erscheint die Fläche der Boden-Klima-Kombinationen ohne Interflow als Achsenabschnitt (72,7 % der Gesamtfläche). Außerdem wurden Median[annual PEC_{sw,max}] und Median[annual AUC_{sw}] für „interflow only“ aller 103680 Kombinationen gegen die entsprechenden Größen für Oberflächenabfluss + Erosion (RE) in Scatterplots aufgetragen.

Im zweiten Schritt wurden die Ergebnisse der 103680 MACRO-Simulationen noch einmal mit STEPS (diesmal mit der in Perl implementierten Version auf dem Footways-Cluster) verarbeitet: Die Einträge über Zwischenabfluss wurden technisch wieder genauso behandelt wie Drainage-Einträge. Diesmal allerdings wurde die PEC-Berechnung für die drei Eintragspfade Zwischenabfluss, Oberflächenabfluss und Erosion zusammen durchgeführt (Modus „Runoff + Erosion + Interflow (REI)“). Im Anschluss wurden wiederum CDFs für Median[annual PEC_{sw,max}] und Median[annual AUC_{sw}] erzeugt:

- CDFs aus PEC_{sw_REI} (Runoff + Erosion + Interflow)
 - nur für die Böden mit Zwischenabfluss;
 - die Fläche der Boden-Klima-Kombinationen ohne Zwischenabfluss (72,7 %) erscheint wieder als Achsenabschnitt
- kombinierte CDFs für Median[annual PEC_{sw,max}] und Median[annual AUC_{sw}]:
 - enthalten alle Boden-Klima-Kombinationen (kein Achsenabschnitt)
 - Verwendung von PEC_{sw_REI} für die Böden mit Zwischenabfluss (FOOTPRINT Hydrologic Groups O, P, R, S, T, W, X)
 - Verwendung von PEC_{sw_RE} (Runoff + Erosion) für die Böden ohne Zwischenabfluss (FHGs L, M, N, Q, U, V, Y)

Schließlich wurden Median[annual PEC_{sw,max}] und Median[annual AUC_{sw}] für „Runoff + Erosion + Interflow (REI)“ aller 103680 Kombinationen gegen die entsprechenden Größen für den Oberflächenabfluss + Erosion (RE) in Scatterplots aufgetragen.

II.6.3 Ergebnisse und Diskussion

Vorbemerkung („Disclaimer“): Zum Zeitpunkt dieser Analyse wurde im Projekt GERDA als zeitliches Perzentil noch der *Median* der 30 Simulationsjahre verwendet statt des *80. Perzentils*, das erst zu einem späteren Zeitpunkt der Projektbearbeitung als Bewertungs-Perzentil festgelegt wurde. Die Übertragbarkeit der nachfolgend in diesem Kapitel vorgestellten Ergebnisse auf andere zeitliche Perzentile, insbesondere auf das jetzt in der Software GERDA verwendete 80. zeitliche Perzentil, ist zwar wahrscheinlich zulässig, kann aber nicht garantiert werden. Wenn man sicher gehen wollte, müsste man die Übertragbarkeit auf andere zeitliche Perzentile in einem Folgeprojekt prüfen.

II.6.3.1 Variante „nur Interflow“(I) vs. „Variante Oberflächenabfluss +Erosion“(RE)

Diese Variante dient hauptsächlich dazu, die quantitative Bedeutung des Prozesses Zwischenabfluss (interflow, lateral subsurface flow) hinsichtlich zu erwartender PSM-Konzentrationen im

Gewässer im Vergleich zu den Prozessen Oberflächenabfluss (surface runoff) und Erosion abschätzen zu können.

II.6.3.1.1 Scatterplots „nur Interflow“ vs. „Runoff + Erosion“ (RE)

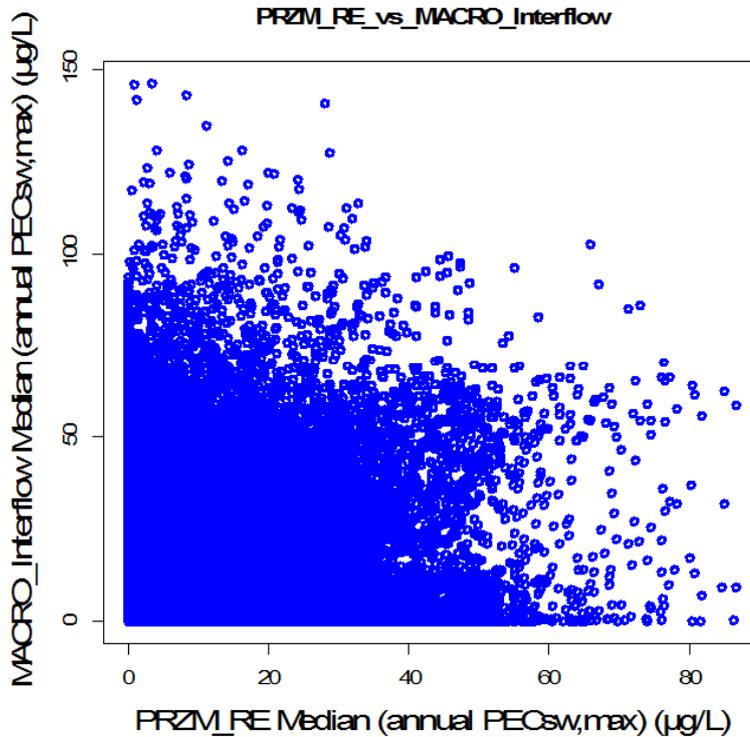


Abb. II.6-1: Scatterplot der PECsw,max (nur Zwischenabfluss) gegen die PECsw,max (Oberflächenabfluss + Erosion) für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt. x-Achse: Median (annual PECswmax, runoff + erosion), y-Achse: Median (annual PECswmax, interflow only).

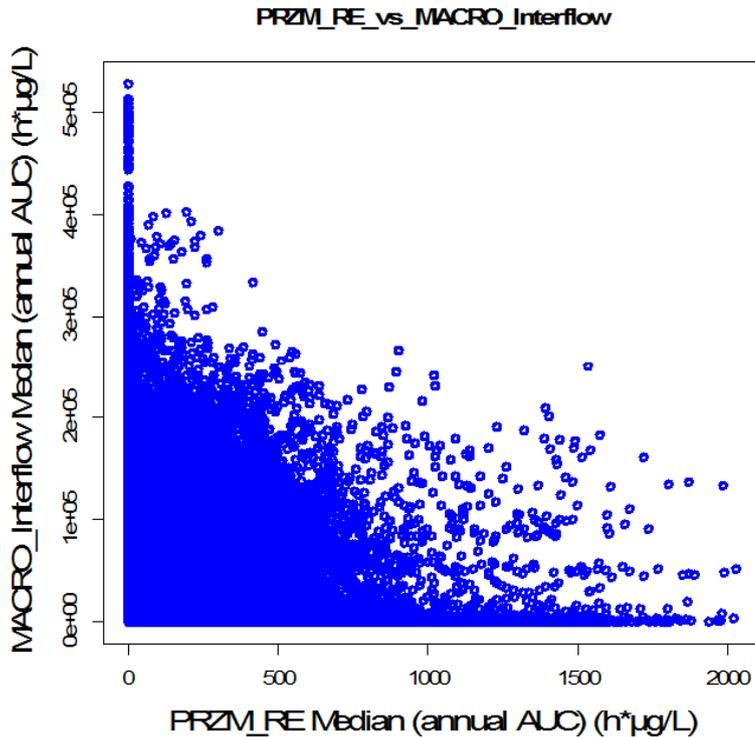


Abb. II.6-2: Scatterplot der AUCsw (nur Zwischenabfluss) gegen die AUCsw (Oberflächenabfluss + Erosion) für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt. x-Achse: Median (annual AUCsw, runoff + erosion), y-Achse: Median (annual AUCsw, interflow only).

In Abb. II.6-1 und II.6-2 sind der Median der annual PECsw,max bzw. der Median der annual AUC für den Eintragspfad Zwischenabfluss (MACRO + STEPS) gegen die entsprechenden Größen für den Eintragspfad Oberflächenabfluss + Erosion (PRZM + STEPS) aufgetragen. Die Datenpunkte entsprechen den 103680 MACRO- und PRZM-Simulationen für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt.

Die aus PSM-Einträgen über Interflow resultierenden Konzentrationen im Gewässer und die aus Einträgen über Runoff und Erosion resultierenden sind zu einem gewissen Grad indirekt proportional. Das liegt zum einen an der Standorthydrologie des FST (Neigung zu Oberflächenabfluss), zum anderen am Sorptionsverhalten der modellierten Substanz (Einträge über Zwischenabfluss steigen mit abnehmendem Koc). Während die Werte von Median[annual PECsw,max] zwischen Runoff und Interflow vergleichbare Größenordnungen erreichen, sind die Werte von Median[annual AUCsw] für Interflow oft wesentlich höher als für Oberflächenabfluss.

II.6.3.1.2 Vergleich der CDFs für „nur Zwischenabfluss“ (I) mit den CDFs für „Drainage“ (D) und für „Runoff +Erosion“ (RE)

Wenn man die CDFs von PECsw,RE und PECsw,drainage mit PECsw,interflow vergleicht, erhält man einen Anhaltspunkt über die relative Bedeutung von Interfloweinträgen im Vergleich zu Runoff, Erosion und Drainage. Allerdings gilt das Interesse letzten Endes nicht dem PECsw,interflow (Zwischenabfluss tritt ja nicht isoliert auf), sondern der Frage, wie Einträge über Zwischenabfluss die PECsw,RE beeinflussen (siehe folgendes Kap. II.6.3.2).

Aufgrund der enormen Anzahl von CDFs (jeweils 288 räumliche CDFs für die Deskriptoren Median[annual PECswmax] und Median[annual AUCsw] für den Modus „interflow only“)

können hier nur ausgewählte Beispiele (insgesamt 6 Beispiele, zu jedem Beispiel 3 CDFs, Abb. II.6-3 bis II.6-21) gezeigt und diskutiert werden. Die im Folgenden dargestellten CDFs beziehen sich auf diese drei Beispielapplikationen:

- $K_{oc} = 10, 100$ oder 1000 L/kg → Beispiele 1) bis 3)
- Für alle Beispiele: DT50 (Boden) = 30 d; Kultur: Winterweizen; Applikationsmonat: Oktober

Für jede der drei Beispielapplikationen werden jeweils drei CDFs für zwei Zielgrößen dargestellt:

- Median[annual PEC_{sw,max}] oder Median[annual AUC_{sw}] → Beispiele xA) bis xB)

Für jede der sechs Kombinationen (3 Beispielapplikation x 2 Zielgrößen) werden jeweils drei CDFs dargestellt:

- CDF für den Eintragspfad Zwischenabfluss (I); die Fläche der Böden ohne Zwischenabfluss (72,7 % gemäß FST-klassifizierter BUEK) bildet den Achsenabschnitt
- CDF für Oberflächenabfluss + Erosion (RE)
- CDF für den Eintragspfad Drainage (D); die Fläche der ungedrängten Böden (70,2 % gemäß FST-klassifizierter BUEK) bildet den Achsenabschnitt.

Beispiel 1A): $K_{oc} = 10$ L/kg, DT50 = 30 d, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober, Zielgröße: PEC_{sw,max}

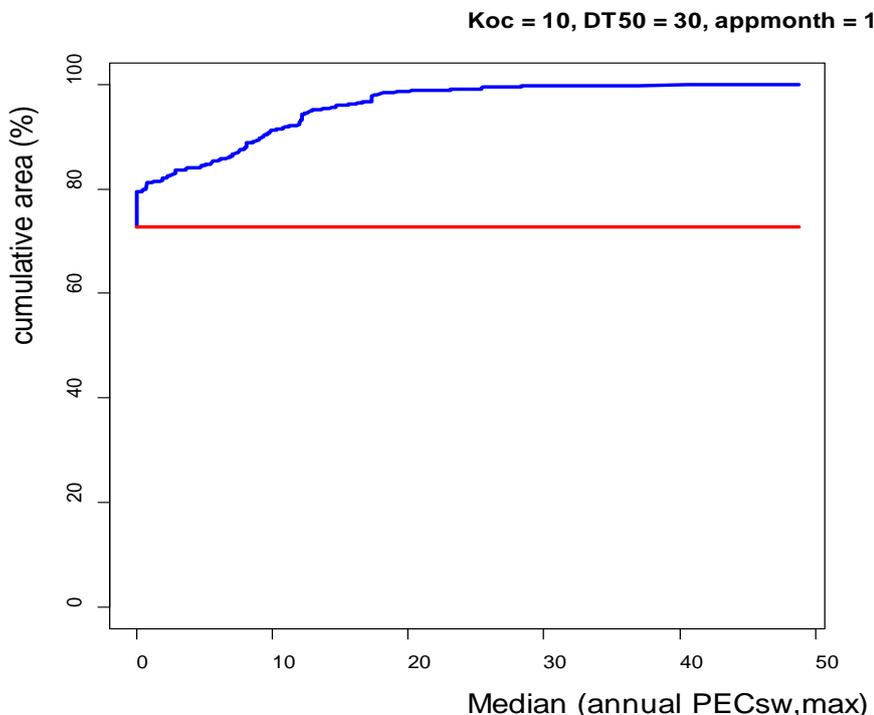


Abb. II.6-3: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für den Eintragspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: $K_{oc} = 10$ L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

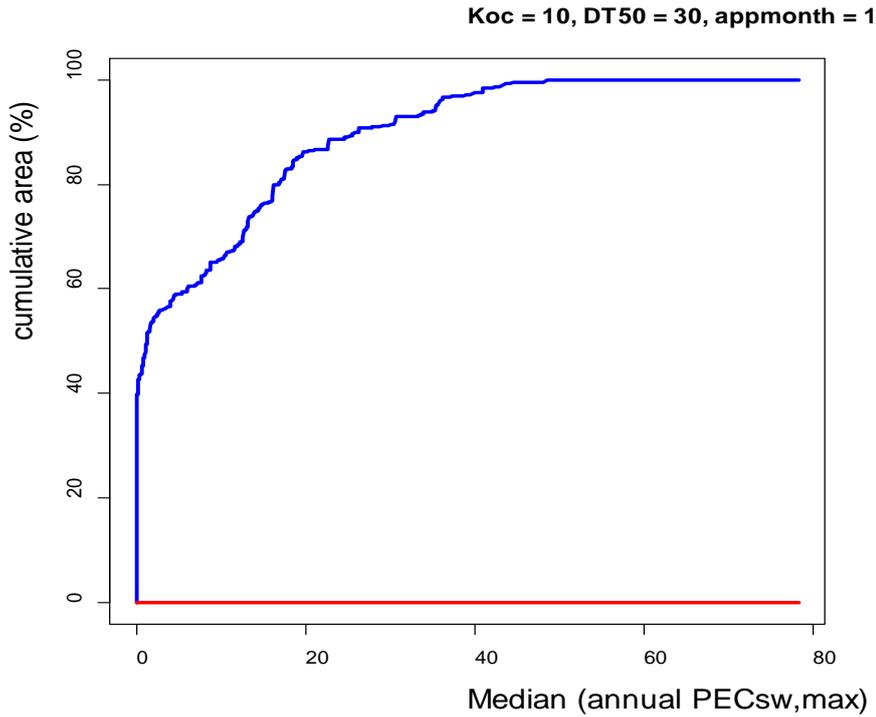


Abb. II.6-4: CDF der Median[annual PECsw,max] für den Eintragspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

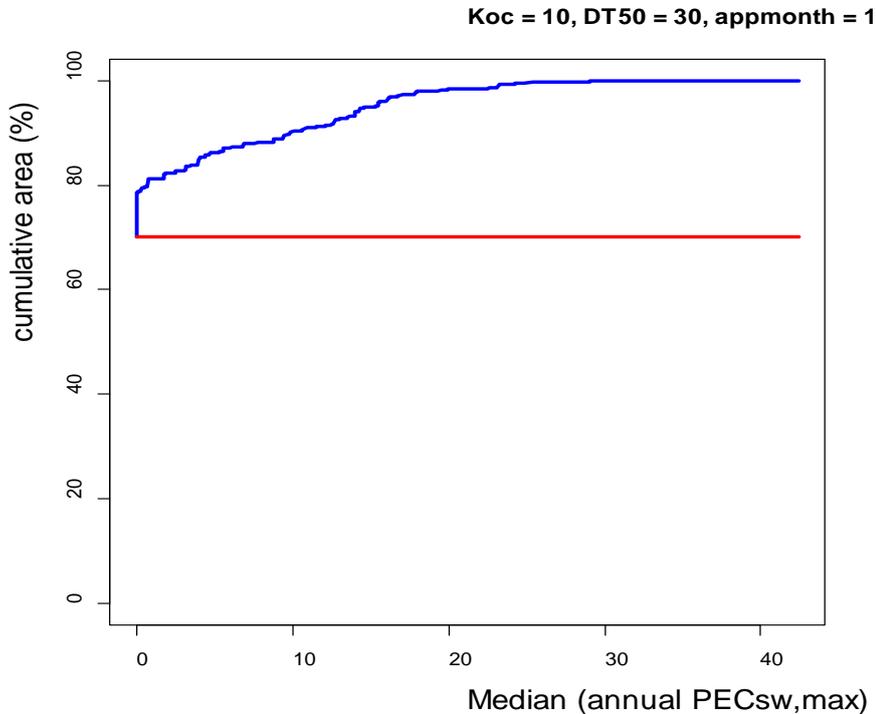


Abb. II.6-5: CDF der Median[annual PECsw,max] für den Eintragspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

Für Koc = 10 L/kg und die Zielgröße Median[annual PECsw,max] sind die Verläufe der drei CDFs untereinander sehr ähnlich (abgesehen vom Achsenabschnitt). Ggf. sind hier die 12

Klimazonen ausschlaggebend für den Kurvenverlauf. Der Wertebereich des Median[annual PEC_{sw,max}] ist ebenfalls ähnlich zwischen den drei CDFs, wobei für Oberflächenabfluss + Erosion die höchsten Werte von Median[annual PEC_{sw,max}] erreicht werden.

Beispiel 1B): $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober, Zielgröße: AUC_{sw}

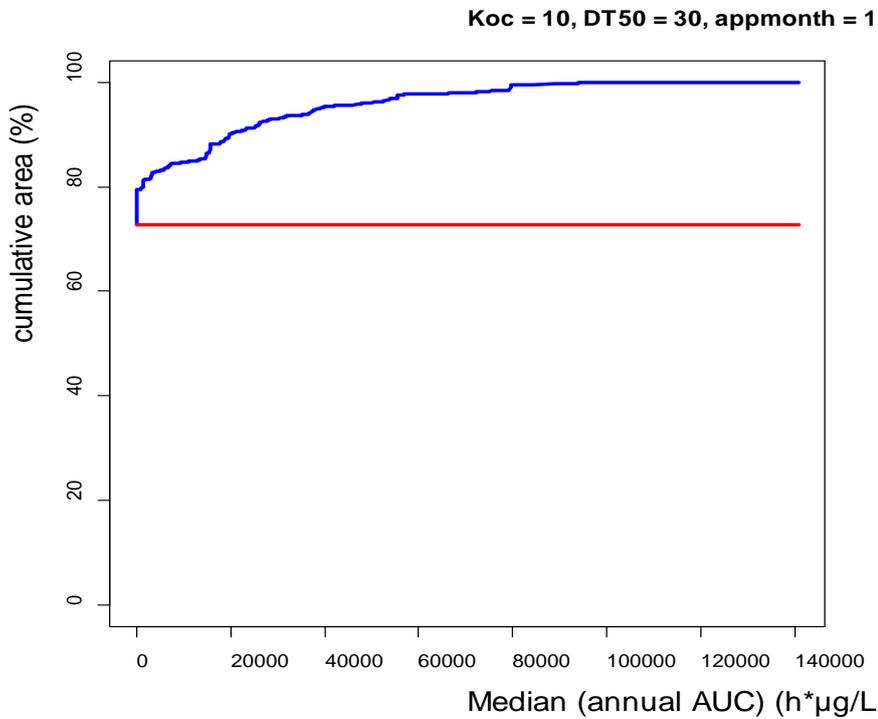


Abb. II.6-6: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für den Eintragspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

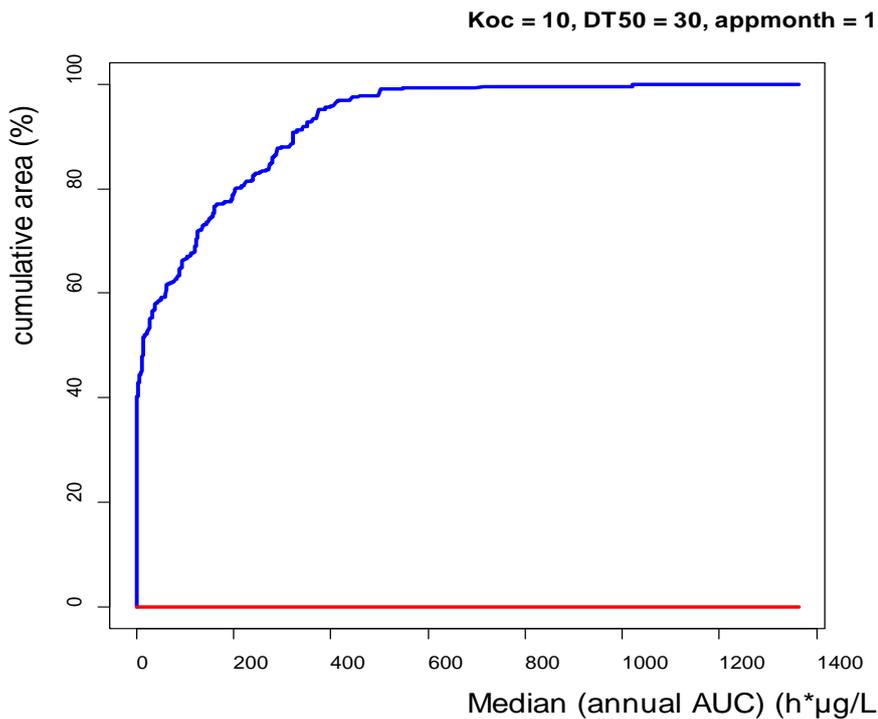


Abb. II.6-7: CDF der Median[annual AUCsw] für den Eintragspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

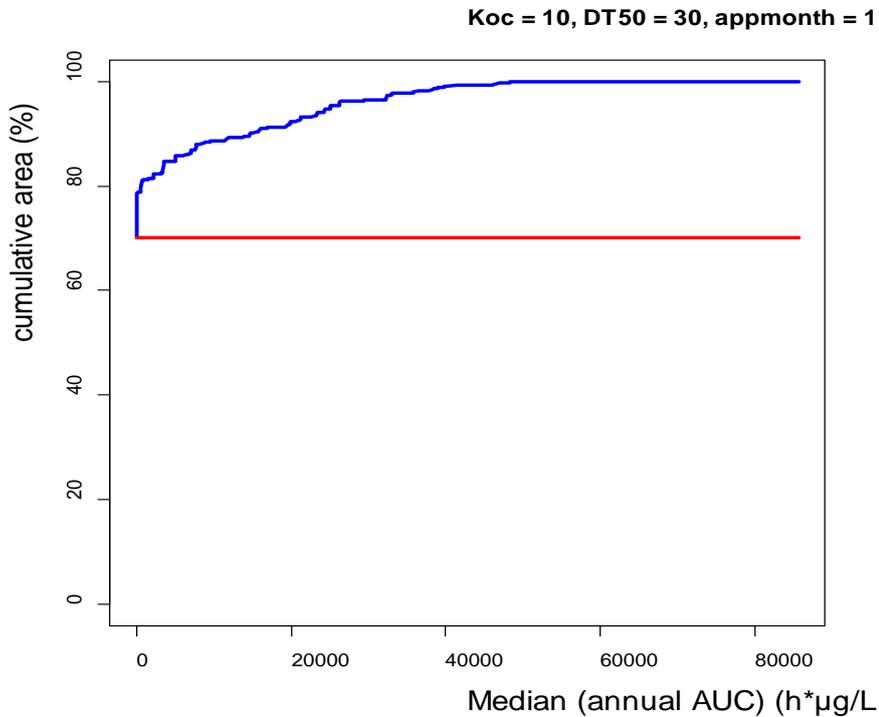


Abb. II.6-8: CDF der Median[annual AUCsw] für den Eintragspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

Für $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$ und die Zielgröße Median[annual AUCsw] sind die Verläufe der drei CDFs immer noch ähnlich. Die Maximalwerte sind allerdings für den Eintragspfad Runoff + Erosion um zwei Größenordnungen niedriger als für Zwischenabfluss und Drainage. Eine Erklärung hierfür könnte die Tatsache sein, dass der kumulative PSM-Eintrag über Runoff und Erosion durch die Anzahl der auftretenden Oberflächenabflussereignisse und (in PRZM) durch den PSM-Vorrat in den obersten 2 cm bzw. 0,1 cm des Bodens limitiert ist.

Beispiel 2A): $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober, Zielgröße: PEC_{sw,max}

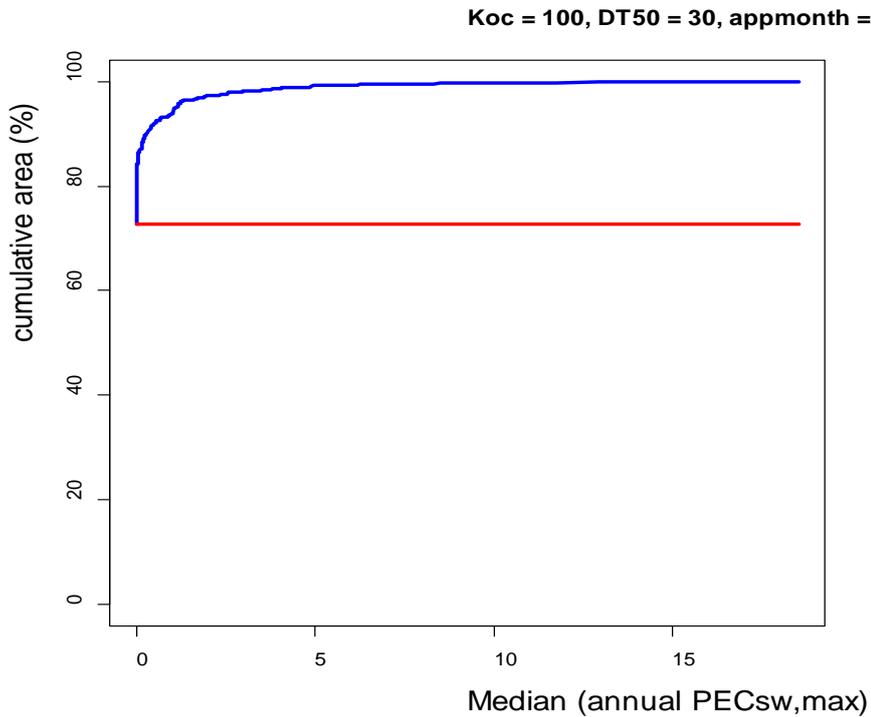


Abb. II.6-9: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für den Eintragspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

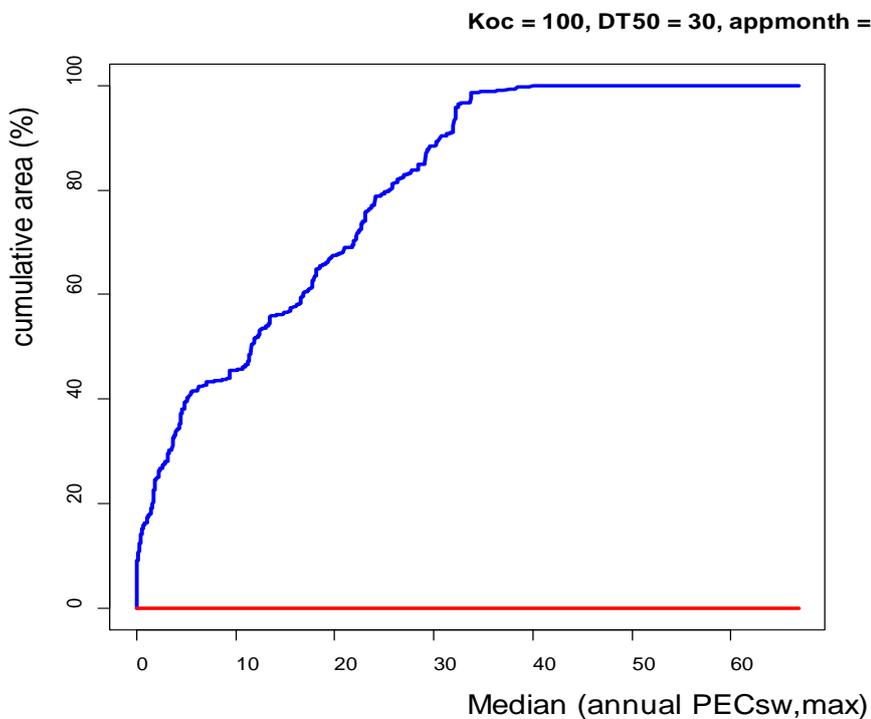


Abb. II.6-10: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für den Eintragspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

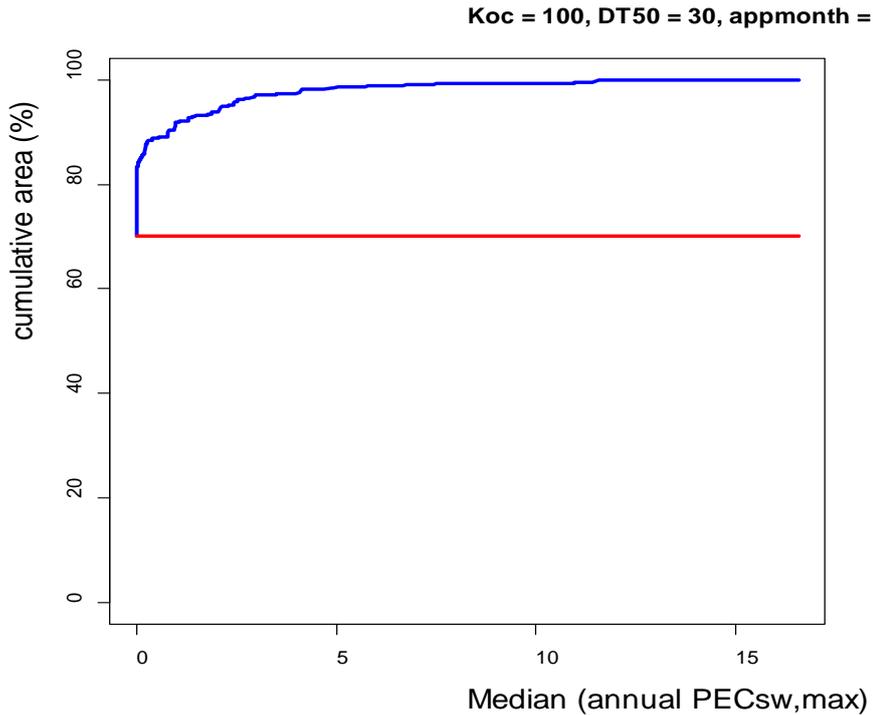


Abb. II.6-11: CDF der Median[annual PECsw,max] für den Eintragspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 100 L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

Für $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$ und die Zielgröße Median[annual PECsw,max] sind Verlauf und Wertebereich der CDFs für Drainage und Zwischenabfluss ähnlich (steiler Anstieg und sehr flaches Ausklingen bis 15 bis 20 $\mu\text{g/L}$, d.h. sehr geringe Flächen mit hohen Werten). Die CDF für Runoff + Erosion hebt sich deutlich ab: langsames Ansteigen bis Median[annual PECsw,max] = ca. 35 $\mu\text{g/L}$, dann Knick und sehr flaches Ausklingen.

Beispiel 2B): $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober, Zielgröße: AUC_{sw}

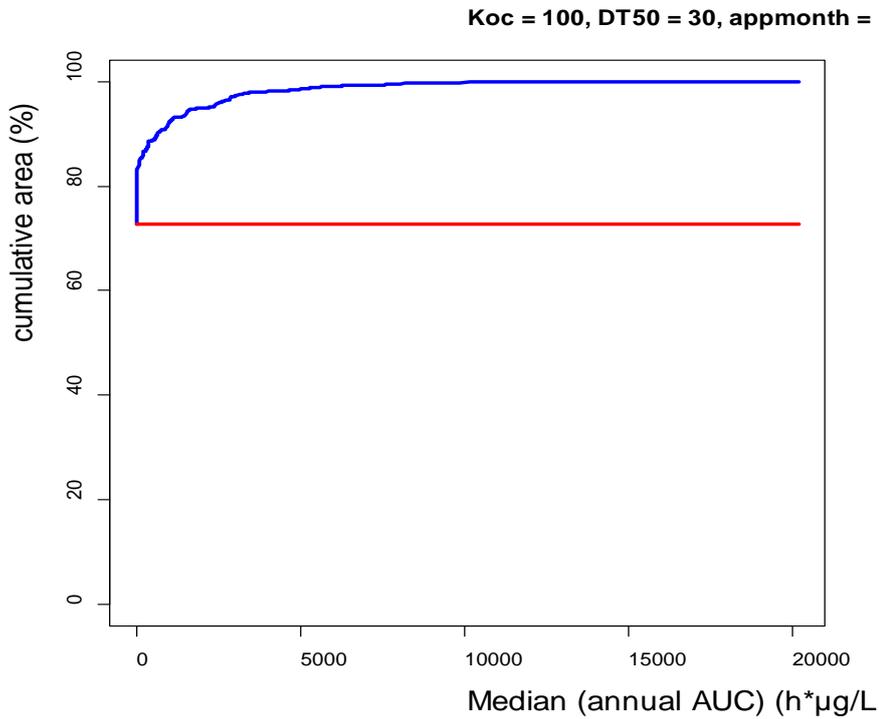


Abb. II.6-12: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für den Eintragspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

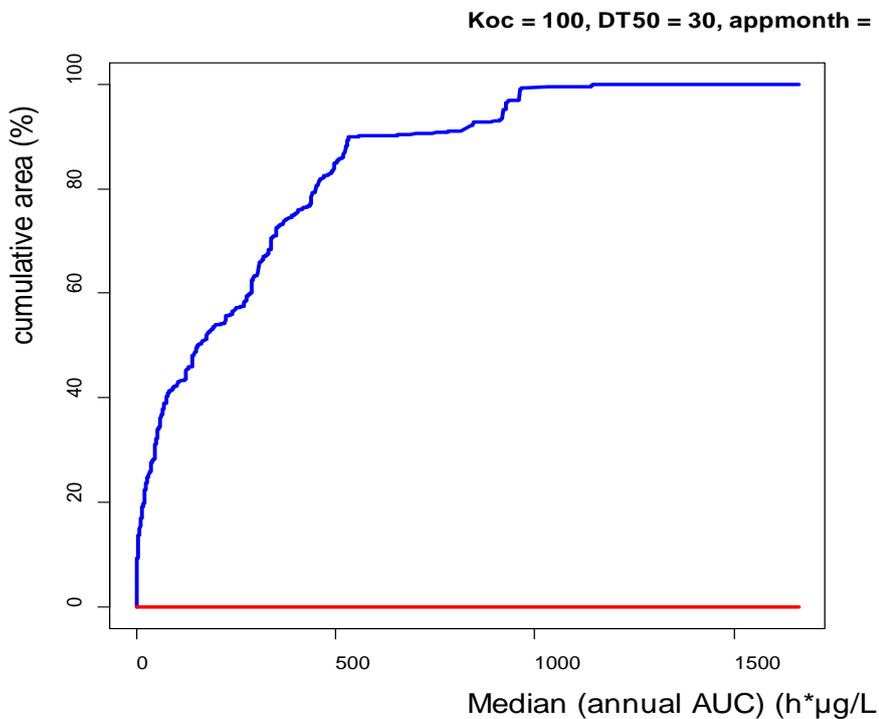


Abb. II.6-13: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für den Eintragspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

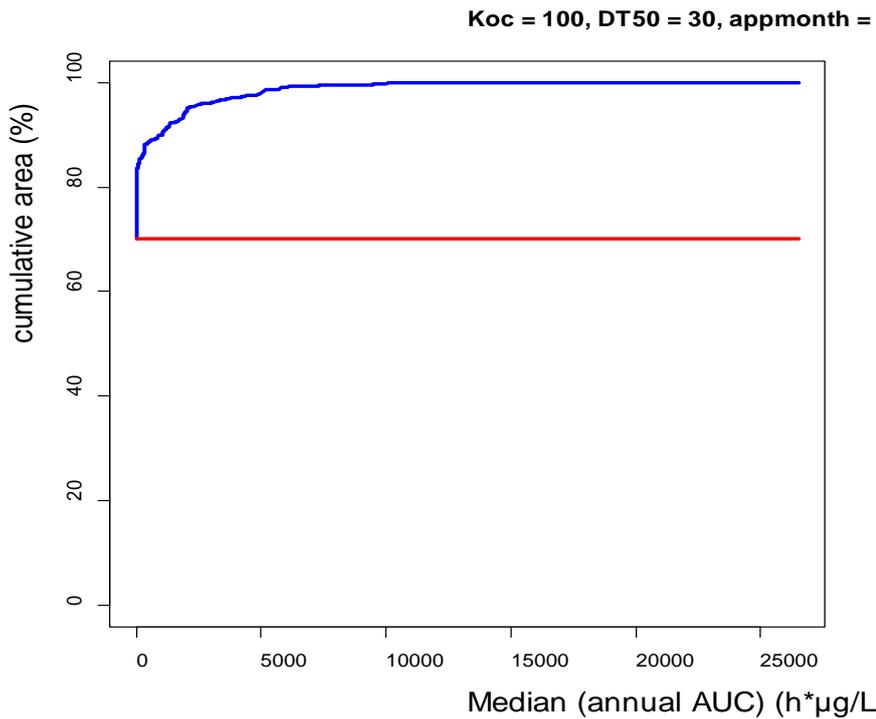


Abb. II.6-14: CDF der Median[annual AUCsw] für den Eintragspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 10 L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

Für Koc = 100 L/kg und die Zielgröße Median[annual AUCsw] sind Kurvenverlauf und Wertebereich für Drainage und Zwischenabfluss ähnlich, wenn auch die Werte für Drainage leicht höher sind.

Die CDF für Runoff und Erosion unterscheidet sich von den anderen beiden vor allem durch die unregelmäßige Form und das Fehlen eines ausgeprägten Tailings. Die Werte für Runoff + Erosion liegen höher als für Koc + 100 L/kg.

Beispiel 3A) $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober, Zielgröße: PEC_{sw,max}

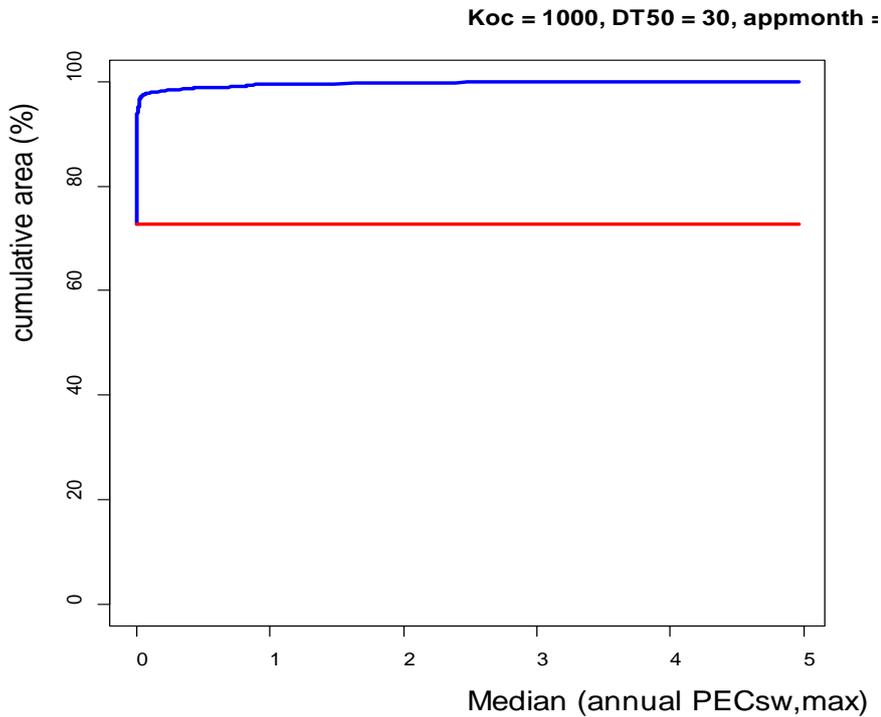


Abb. II.6-15: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für den Eintragspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

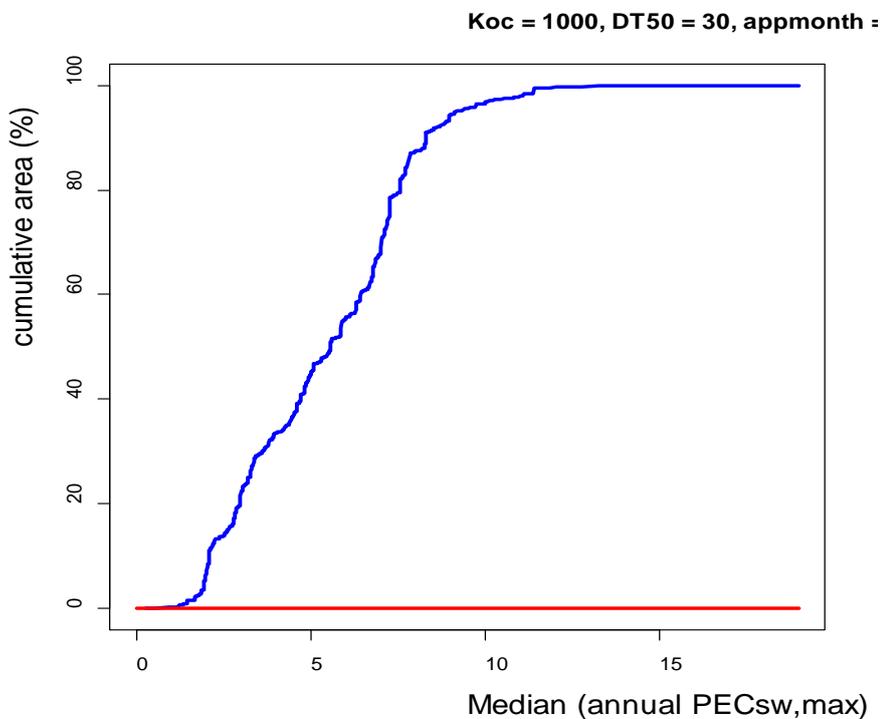


Abb. II.6-16: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für den Eintragspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

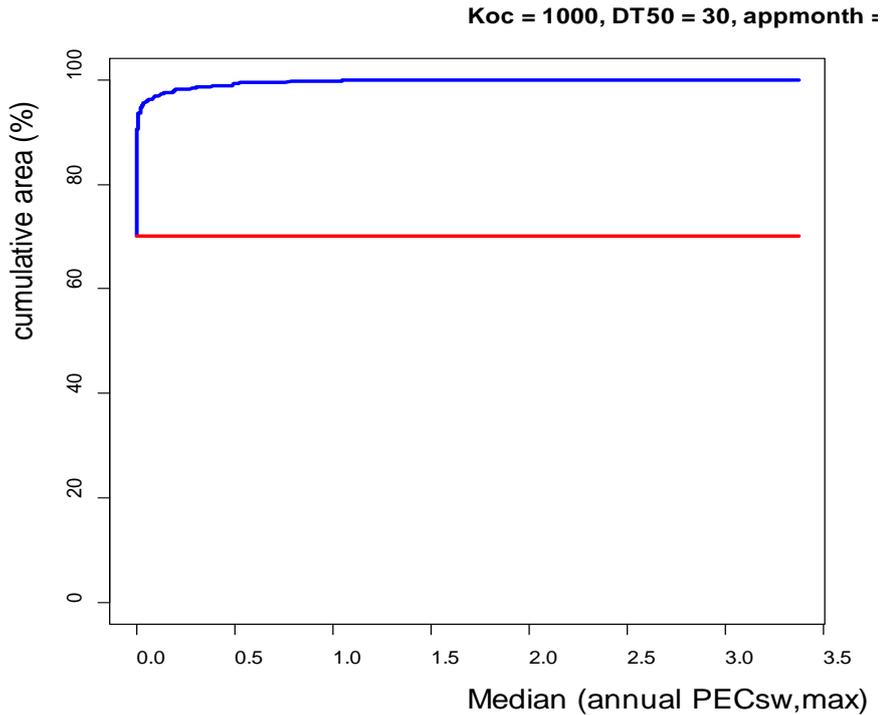


Abb. II.6-17: CDF der Median[annual PECsw,max] für den Eintragspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

Für $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$ und die Zielgröße Median[annual PECsw,max] sind der Verlauf der drei CDFs ähnlich wie für $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$: steiler Anstieg mit sehr flachem Ausklingen für Drainage und Zwischenabfluss, langsamer Anstieg mit Knick für Runoff + Erosion. Die Wertebereiche sind jedoch um einen Faktor 3 bis 4 niedriger als für $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$.

Beispiel 3B): $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober, Zielgröße: AUC_{sw}

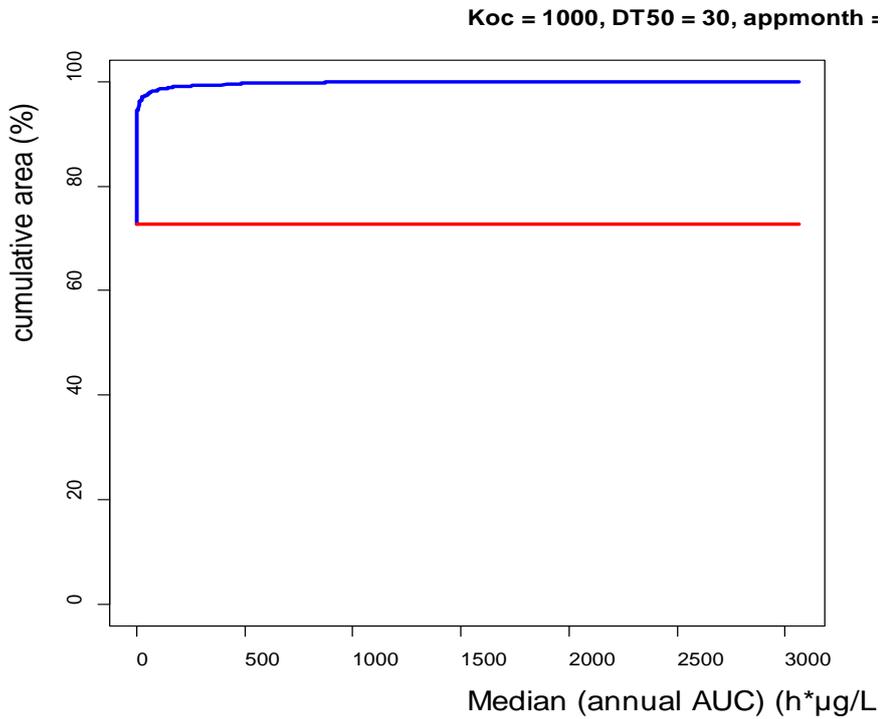


Abb. II.6-18: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für den Eintragspfad Zwischenabfluss (I). Beispiel: $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

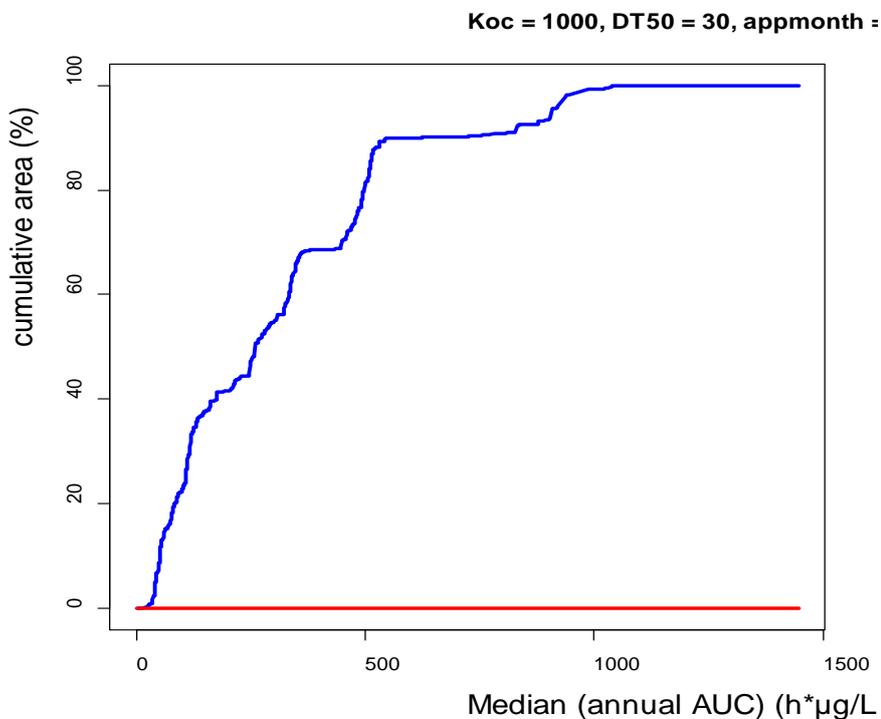


Abb. II.6-19: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für den Eintragspfad Oberflächenabfluss + Erosion (RE). Beispiel: $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

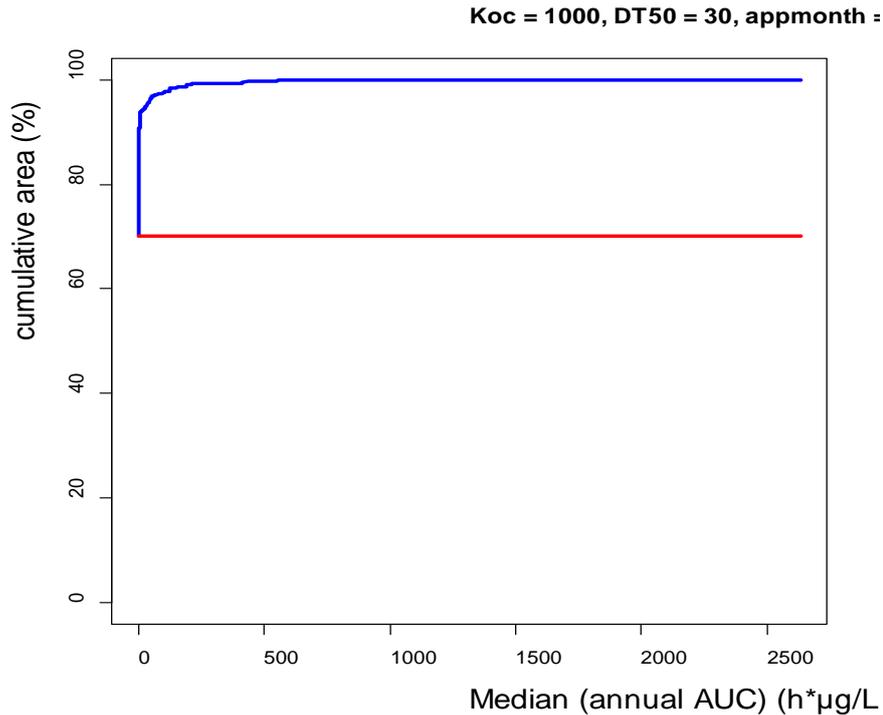


Abb. II.6-20: CDF der Median[annual AUCsw] für den Eintragspfad Drainage (D). Beispiel: Koc = 1000 L/kg, DT50 = 30 d, Kultur: Winterweizen, Applikationsmonat: Okt.

Für $K_{oc} = 1000$ L/kg und die Zielgröße Median (annual AUC_{sw,max}) sind Verlauf und Wertebereich der CDFs für Drainage und Zwischenabfluss ähnlich (steiler Anstieg und sehr flaches Ausklingen, d.h. sehr geringe Flächen mit hohen Werten). Die CDF für Runoff + Erosion steigt irregulär und eher langsam an. Während die Werte und Kurvenverlauf der CDFs für Oberflächenabfluss + Erosion zwischen $K_{oc} = 100$ und $K_{oc} = 1000$ L/kg sehr ähnlich sind, liegen die Werte für Drainage und Zwischenabfluss wesentlich niedriger als für $K_{oc} = 100$ L/kg.

Zusammenfassung zum Vergleich der CDFs „nur Zwischenabfluss“ mit CDFs „Drainage“ und „Runoff + Erosion“

Für beide Zielgrößen Median[annual PEC_{sw,max}] und Median[annual AUC_{sw}] ist festzustellen:

- Die Werte für Zwischenabfluss und Drainage nehmen mit steigendem K_{oc} stark ab.
- Für jede K_{oc} -Stufe sind die Werte für Zwischenabfluss und Drainage jedoch sehr ähnlich (hierbei ist zu beachten, dass es sich um unterschiedliche Böden handelt).
- Die relative Bedeutung von Drainage und Zwischenabfluss im Vergleich zu Oberflächenabfluss + Erosion schwindet mit zunehmenden K_{oc} .

Weiterhin ist für die zwei Zielgrößen im Einzelnen festzuhalten:

- Median[annual PEC_{sw,max}]:
 - Median[annual PEC_{sw,max}]: Werte für Runoff + Erosion nehmen von $K_{oc} = 10$ zu $K_{oc} = 100$ L/kg leicht zu und dann wieder ab. Dies ist konsistent mit den Ergebnissen von Reichenberger et al. (2007a)
 - Für schwach sorbierende Stoffe ($K_{oc} = 10$) sind Zwischenabfluss und Drainage von ähnlicher Wichtigkeit wie Oberflächenabfluss.

- Median[annual AUCsw]:
 - Median[annual AUCsw]: Werte für Runoff + Erosion nehmen von $K_{oc} = 10$ zu $K_{oc} = 100$ L/kg leicht zu und sind zwischen $K_{oc} = 100$ und $K_{oc} = 1000$ L/kg fast identisch. Dies ist ebenfalls konsistent mit den Ergebnissen von Reichenberger et al. (2007a)
 - Für schwach sorbierende Stoffe ($K_{oc} = 10$ L/kg) sind Zwischenabfluss und Drainage wichtiger als Oberflächenabfluss.
 - Für mäßig schwach sorbierende Stoffe ($K_{oc} = 100$ L/kg) sind Zwischenabfluss und Drainage von ähnlicher Wichtigkeit als Oberflächenabfluss.

II.6.3.2 Variante „Oberflächenabfluss + Erosion + Interflow“ (REI) vs. Variante „Oberflächenabfluss + Erosion“ (RE)

Die Hauptfrage hier ist: Sind PEC_{sw} (Runoff + Erosion + Interflow) = $PEC_{sw,REI}$ höher oder niedriger als PEC_{sw} (Runoff + Erosion) = $PEC_{sw,RE}$, oder ändert sich die PEC_{sw} nicht signifikant durch das Hinzunehmen des Eintragspfads Zwischenabfluss? Die Frage ist nicht trivial, weil ja durch den Zwischenabfluss nicht nur PSM ins Gewässer gelangen, sondern auch zur Verdünnung beitragendes Wasser.

II.6.3.2.1 Scatterplots „Runoff + Erosion + Interflow“ (REI) vs. „Runoff + Erosion“ (RE)

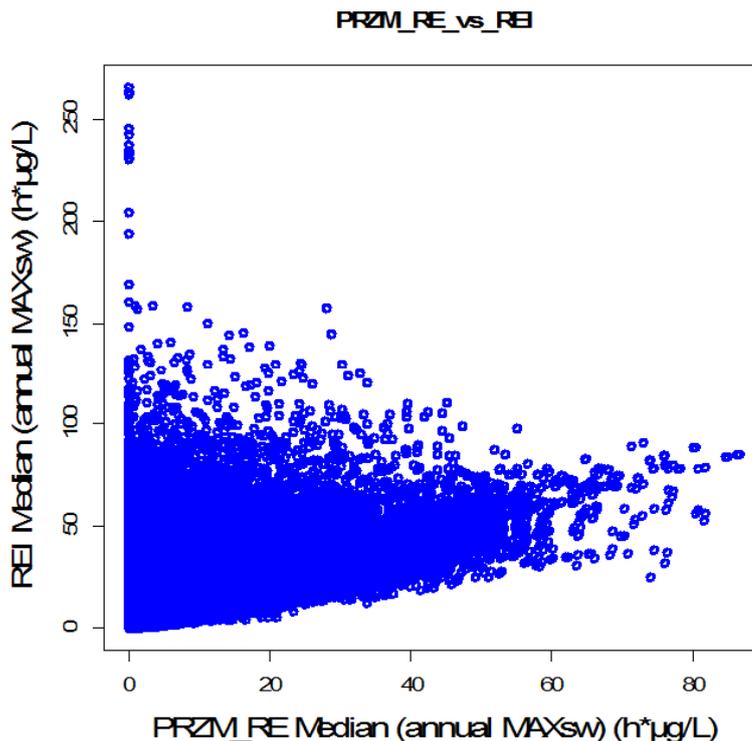


Abb. II.6-21: Scatterplot der $PEC_{sw,max}$ (Oberflächenabfluss + Erosion + Zwischenabfluss, REI) gegen die $PEC_{sw,max}$ (Oberflächenabfluss + Erosion, RE) für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt. x-Achse: Median (annual $PEC_{sw,max}$, RE), y-Achse: Median (annual $PEC_{sw,max}$, REI).

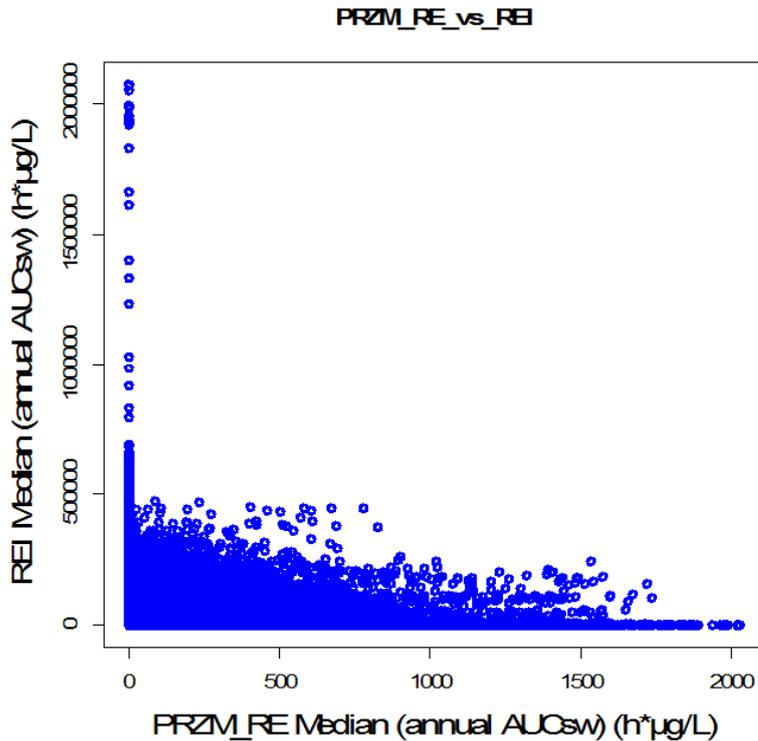


Abb. II.6-22: Scatterplot der AUCsw (Oberflächenabfluss + Erosion + Zwischenabfluss, REI) gegen die AUCsw (Oberflächenabfluss + Erosion, RE) für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt. x-Achse: Median (annual PECswmax, RE), y-Achse: Median (annual PECswmax, REI).

In Abb. II.6-21 und II.6-22 sind der Median der annual PECsw,max bzw. der Median der annual AUC für die kombinierten Eintragspfade Zwischenabfluss + Oberflächenabfluss + Erosion (MACRO + PRZM + STEPS) gegen die entsprechenden Größen für den Eintragspfad Oberflächenabfluss + Erosion (PRZM + STEPS) aufgetragen. Die Datenpunkte entsprechen den 103680 MACRO- und PRZM-Simulationen für die 35 FSTs, in denen Zwischenabfluss auftritt.

Der Scatterplot für Median[annual PECsw,max] zeigt eine vage dreieckige Punktwolke, die nach oben unscharf und nach unten relativ scharf begrenzt ist. Die Punkte sind auf beiden Seiten (und auch auf) der gedachten 1:1-Linie zu finden. Der Median[annual PECsw,max_REI] kann für niedrige Werte des Median[annual PECsw,max_RE] von letzterem erheblich abweichen, wobei die maximalen absoluten Abweichungen nach oben höher sind als nach unten. Für höhere Werte der Median[annual PECsw,max RE] nehmen die relativen und absoluten Abweichungen ab. Nach den Ergebnissen des vorhergehenden Abschnitts ist zu vermuten, dass Abweichungen nach oben vor allem für schwach sorbierende Substanzen auftreten und Abweichungen nach unten hauptsächlich für stark sorbierende: Für stark sorbierende Substanzen sind die Einträge über Interflow niedrig, und es kommt daher nur noch der Verdünnungseffekt des Zwischenabflusses zum Tragen.

Der Scatterplot für Median[annual AUCsw] zeigt eine annähernd hyperbolische Punktwolke mit einigen sehr hohen Abweichungen der AUCsw,REI nach oben für sehr niedrige AUCsw,RE. Diese stellen vermutlich Kombinationen von sehr schwach sorbierenden Substanzen mit zwischenabfluss-dominierten Böden dar. Die Tatsache, dass die AUCsw,REI oft höher liegen als die AUCsw,RE, ist konsistent mit der Beobachtung aus dem vorhergehenden Abschnitt, dass die

AUC_{sw,RE} nach oben stärker begrenzt ist als AUC_{sw,I}: Der kumulative PSM-Eintrag über Runoff und Erosion ist durch die Anzahl der auftretenden Oberflächenabflussereignisse und (in PRZM) durch den PSM-Vorrat in den obersten 2 cm bzw. 0,1 cm des Bodens limitiert.

II.6.3.2.2 CDFs für die kombinierten Eintragspfade Zwischenabfluss, Runoff und Erosion (nur für Böden mit Zwischenabfluss)

Abbildungen II.6-23 bis II.6-28 zeigen für die gleichen drei Beispielapplikationen wie in Kap. II.6.3.1 die CDFs für die kombinierten Eintragspfade Zwischenabfluss, Oberflächenabfluss und Erosion (REI) für die beiden Zielgrößen Median[annual PEC_{sw,max}] und Median (annual AUC_{sw}). Diese CDFs (Runoff + Erosion + Interflow) beinhalten nur die Ergebnisse der 35 Böden mit Zwischenabfluss. Die Fläche der Boden-Klima-Kombinationen ohne Zwischenabfluss (72,7 %) erscheint als Achsenabschnitt. Diese CDFs können mit den CDFs für Oberflächenabfluss + Erosion (RE) verglichen werden, um die Höhe der erhaltenen Werte der Median[annual PEC_{sw,max}] und Median[annual AUC_{sw}] einordnen zu können.

- Für die Zielgröße Median[annual PEC_{sw,max}] und Koc = 10 L/kg ist der Wertebereich der REI-CDF (Abb. II.6-23) ähnlich wie für RE (Abb. II.6-4).
- Für Median[annual AUC_{sw}] und Koc = 10 L/kg liegen die Werte für REI (Abb. II.6-24) um zwei Größenordnungen höher als für RE (Abb. II.6-7).
- Für Median[annual PEC_{sw,max}] und Koc = 100 L/kg steigt die CDF für REI gleichmäßig bis 40 µg/L an (Abb. II.6-25), während die CDF für RE bei 35 µg/L einen Knick aufweist und dann sehr flach bis knapp 70 µg/L ausklingt (Abb. II.6-10).
- Für Median[annual AUC_{sw}] und Koc = 100 L/kg liegen die Werte für REI (Abb. II.6-26) um eine Größenordnung höher als für RE (Abb. II.6-13).
- Für Median[annual PEC_{sw,max}] und Koc = 1000 L/kg ist der Wertebereich der REI-CDF (Abb. II.6-27) ähnlich wie für RE (Abb. II.6-16).
- Für Median[annual AUC_{sw}] und Koc = 1000 L/kg liegen die Werte für REI (Abb. II.6-26) bis etwas über das 90. Perzentil ähnlich zu den Werten für RE (Abb. II.6-19). Danach wesentlich langsames Ausklingen für REI (bis rund 10000 µg/L * h).

Insgesamt scheint die Interpretation des Vergleichs der REI-CDFs mit den RE-CDFs schwierig, weil die Grundgesamtheit nicht die gleiche ist (35 FSTs vs. 102 FSTs). Der Vergleich der kombinierten REI/RE-CDFs (nächster Abschnitt) mit den RE-CDFs scheint zielführender.

Beispiel 1A): $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober,
Zielgröße: PEC_{sw,max}

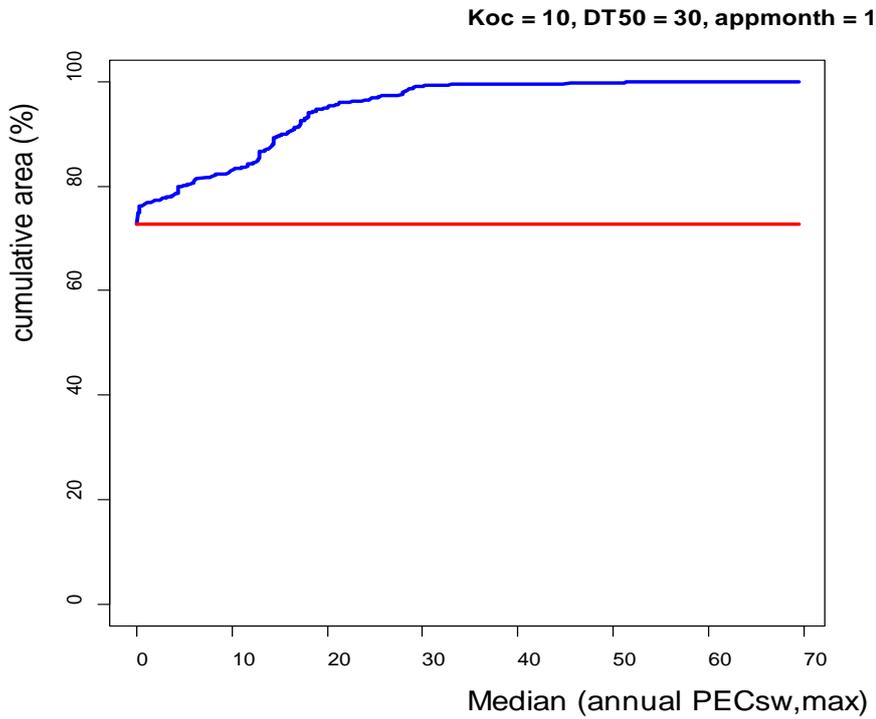


Abb. II.6-23: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Appl.-Monat: Okt.

Beispiel 1B): $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober,
Zielgröße: AUCsw

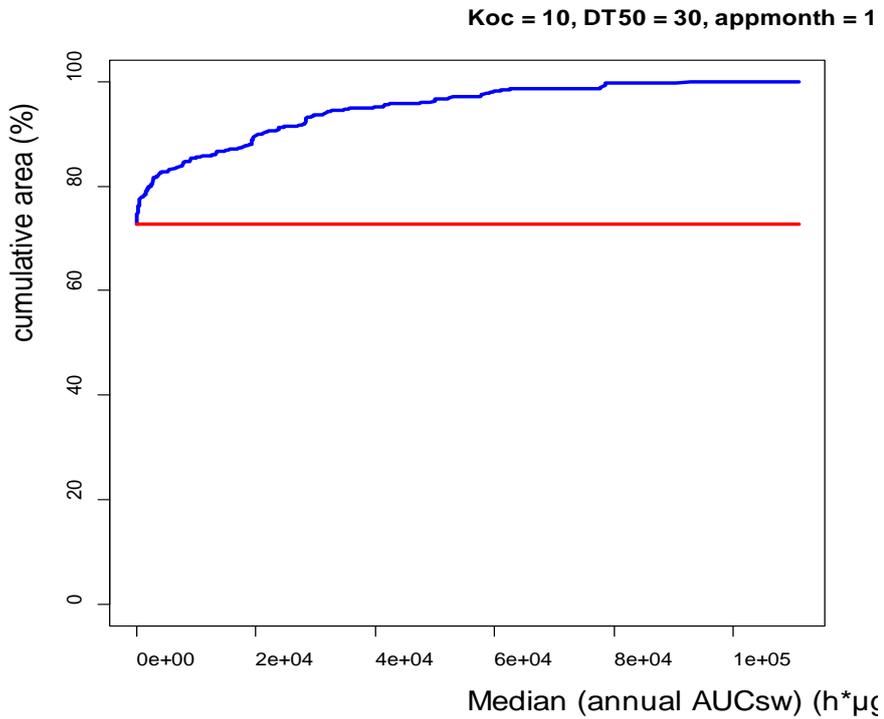


Abb. II.6-24: CDF der Median[annual AUCsw] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Appl.-Monat: Okt.

Beispiel 2A): $Koc = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober,
Zielgröße: PEC_{sw,max}

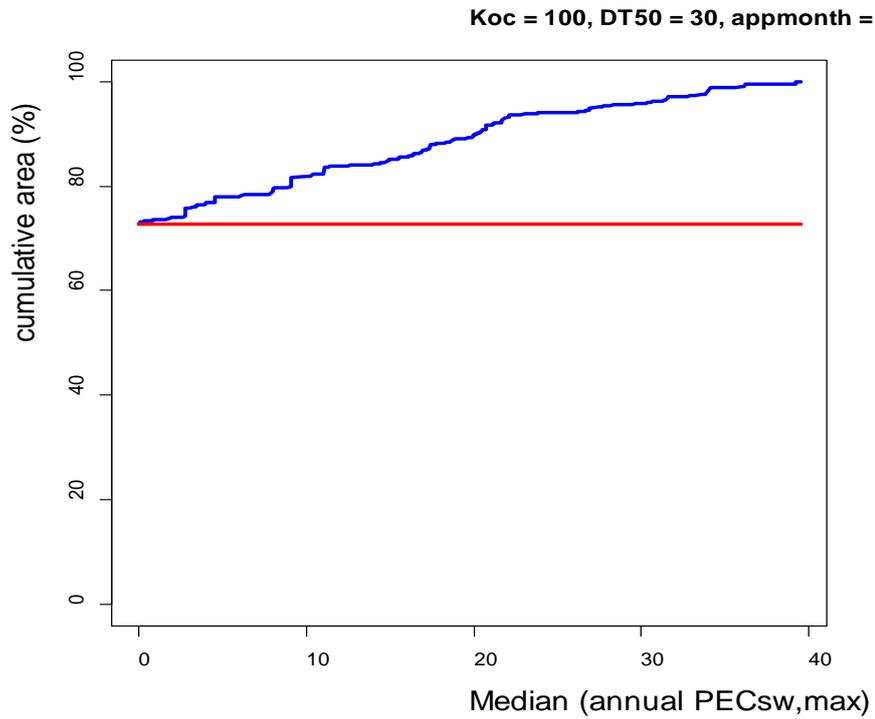


Abb. II.6-25: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: $Koc = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Appl.-Monat: Okt.

Beispiel 2B): $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober,
Zielgröße: AUC_{sw}

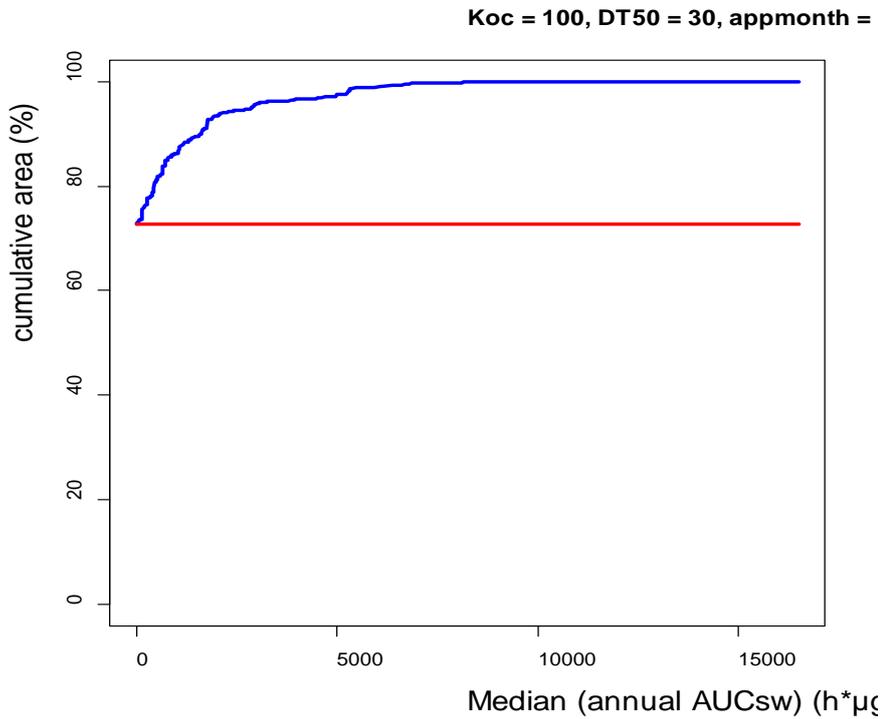


Abb. II.6-26: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: Winterweizen, Appl.-Monat: Okt.

Beispiel 3A): $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Okt., Zielgröße: PEC_{sw,max}

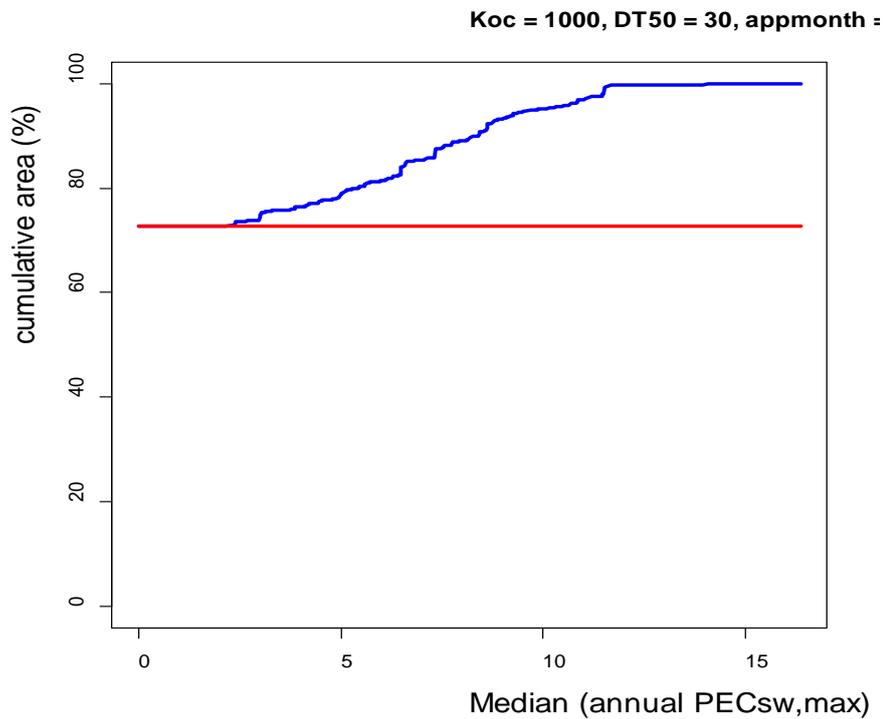


Abb. II.6-27: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur: WW, Appl.-Monat: Okt

Beispiel 3B): $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT_{50} = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Okt.,
Zielgröße: AUC_{sw}

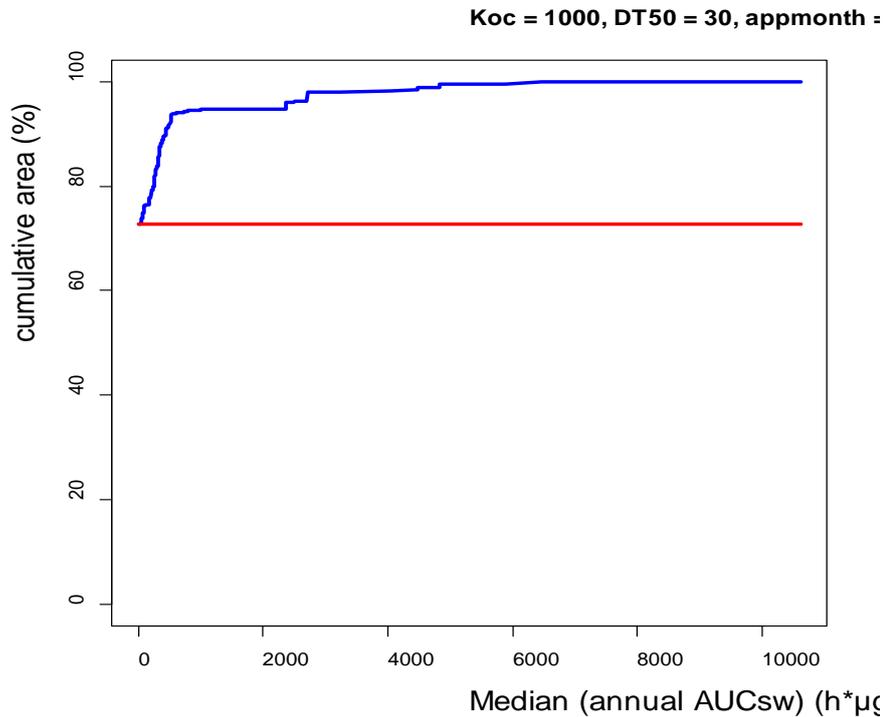


Abb. II.6-28: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss (REI). Beispiel: $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT_{50} = 30 \text{ d}$, Kultur: WW, Appl.-Monat: Okt.

II.6.3.2.3 Kombinierte CDFs (REI/RE)

Abbildungen II.6-29 bis II.6-34 zeigen kombinierte CDFs für die gleichen drei Beispielapplikationen wie in Kap. II.6.3.1 Die kombinierten CDFs zeigen Median[annual PEC_{sw,max}] bzw. Median[annual AUC_{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Das heißt, für die 67 Böden ohne Zwischenabfluss wird PEC_{sw} (RE) dargestellt und für die 35 Böden mit Zwischenabfluss PEC_{sw} (REI).

Die kombinierten CDFs können mit den Original-CDFs für PEC_{sw,max} (RE) und AUC_{sw} (RE) verglichen werden.

- Für die Zielgröße Median[annual PEC_{sw,max}] und $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$ sind Verlauf und Wertebereich der kombinierten REI/RE-CDF (Abb. II.6-29) sehr ähnlich wie für die RE-CDF (Abb. II.6-4).
- Für Median[annual AUC_{sw}] und $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$ sind Verlauf und Wertebereich der kombinierten REI/RE-CDF (Abb. II.6-30) deutlich anders als für die RE-CDF (Abb. II.6-7): Die Kurve knickt erst bei etwa 80 % ab und steigt dann konvex weiter an. Die erreichten Maximalwerte liegen zwei Größenordnungen höher als für die RE-CDF. Die oberen 20 % der CDF bestehen ausschließlich aus Böden mit Zwischenabfluss.
- Für Median[annual PEC_{sw,max}] und $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$ sind Verlauf und Wertebereich der kombinierten REI/RE-CDF (Abb. II.6-31) ähnlich wie für die RE-CDF (Abb. II.6-10).
- Für Median[annual AUC_{sw}] und $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$ ist der Verlauf der kombinierten REI/RE-CDF (Abb. II.6-32) immer noch unähnlich zur RE-CDF (Abb. II.6-13), aber nicht mehr so

stark abweichend wie für $K_{oc} = 10$ L/kg. Die REI-CDF ähnelt dem Komplement einer Hyperbel. Die erreichten Maximalwerte liegen eine Größenordnung höher als für die RE-CDF. Die oberen 10 % der CDF bestehen ausschließlich aus Böden mit Zwischenabfluss.

- Für Median[annual PEC_{sw,max}] und $K_{oc} = 1000$ L/kg sind Verlauf und Wertebereich der kombinierten REI/RE-CDF (Abb. II.6-33) ähnlich wie für die RE-CDF (Abb. II.6-16). Die REI-CDF steigt jedoch etwas flacher an.
- Für Median[annual AUC_{sw}] und $K_{oc} = 1000$ L/kg ist der Verlauf der kombinierten REI/RE-CDF (Abb. II.6-34) bis etwa $1000 \mu\text{g/L} \cdot \text{h}$ ähnlich zur RE-CDF (Abb. II.6-19). Danach steigt die REI-CDF allerdings weiter langsam bis über $10000 \mu\text{g/L} \cdot \text{h}$ an, während die RE-CDF bei rund $1500 \mu\text{g/L} \cdot \text{h}$ endet. Nur noch die oberen 5 % der CDF bestehen ausschließlich aus Böden mit Zwischenabfluss.

Zusammengefasst lässt sich festhalten:

- Die Verläufe und Wertebereiche der kombinierten CDFs (REI/RE) für Median[annual PEC_{sw,max}] unterscheiden sich nur wenig von den originalen CDFs (RE).
- Die Rankings der Boden-Klima-Kombinationen für Median[annual PEC_{sw,max}] und den gleichen K_{oc} sind unterschiedlich zwischen den kombinierten und den RE-CDFs, aber nicht systematisch.
- Die Verläufe und Wertebereiche der kombinierten CDFs (REI/RE) für Median[annual AUC_{sw}] unterscheiden sich jedoch stark von den originalen CDFs (RE), wobei die Unterschiede mit zunehmendem K_{oc} abnehmen.
- Mit zunehmendem K_{oc} rutschen die Boden-Klima-Kombinationen mit Zwischenabfluss in den AUC-CDFs nach unten.

Beispiel 1A): $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober,
Zielgröße: PEC_{sw,max}

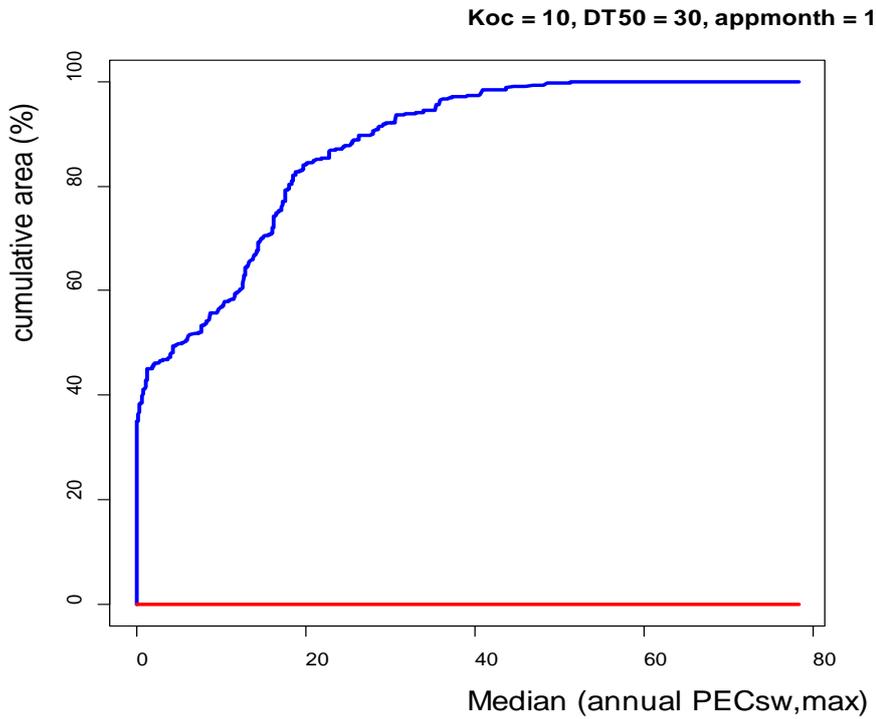


Abb. II.6-29: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, WW, Okt.

Beispiel 1B): $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober,
Zielgröße: AUC_{sw}

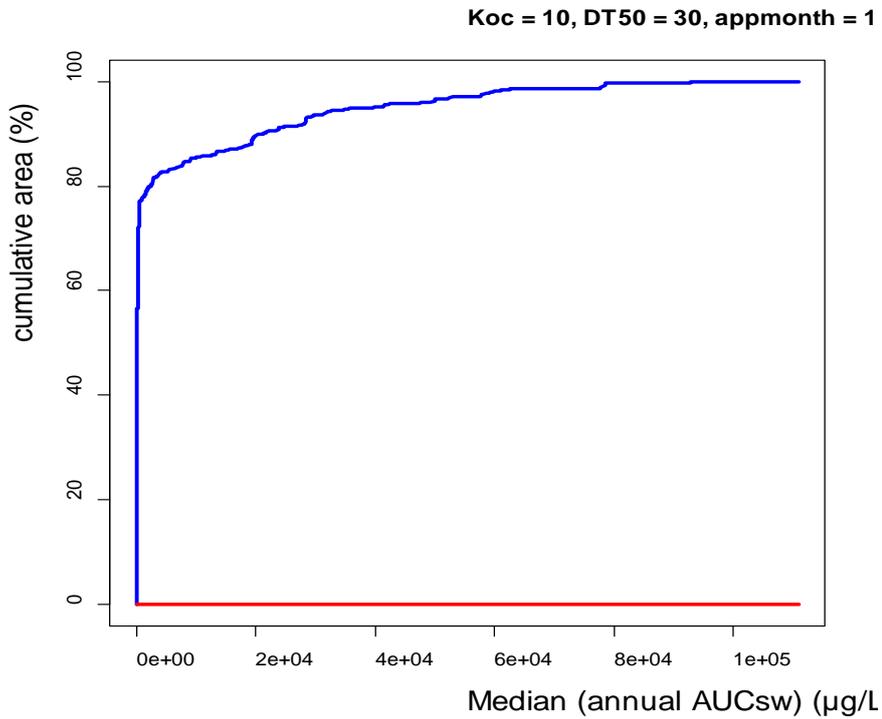


Abb. II.6-30: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: $K_{oc} = 10 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, WW, Okt.

Beispiel 2A): $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober,
Zielgröße: PEC_{sw,max}

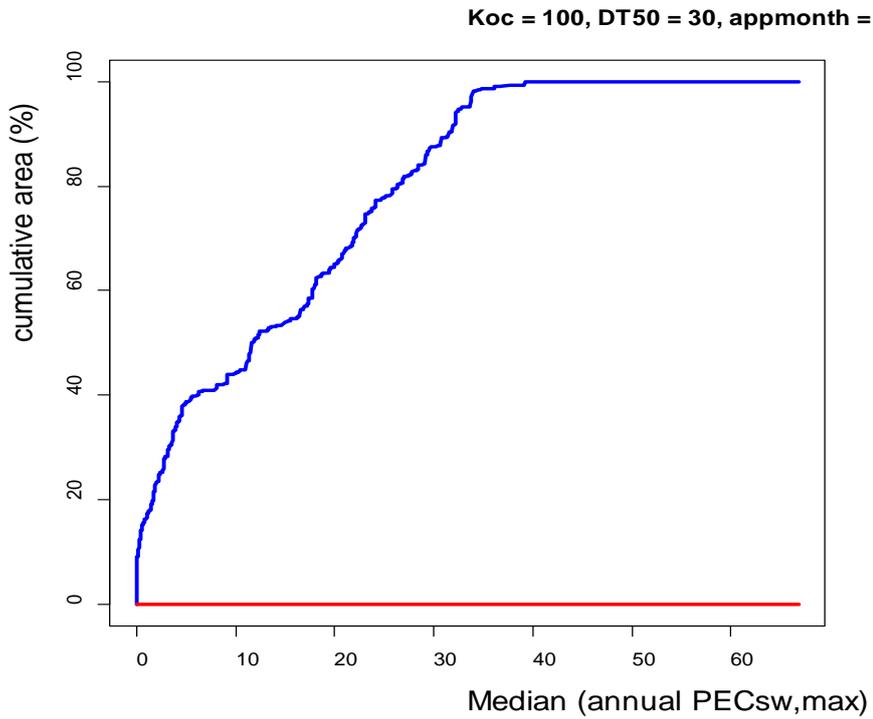


Abb. II.6-31: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, WW, Okt.

Beispiel 2B): $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Oktober,
Zielgröße: AUC_{sw}

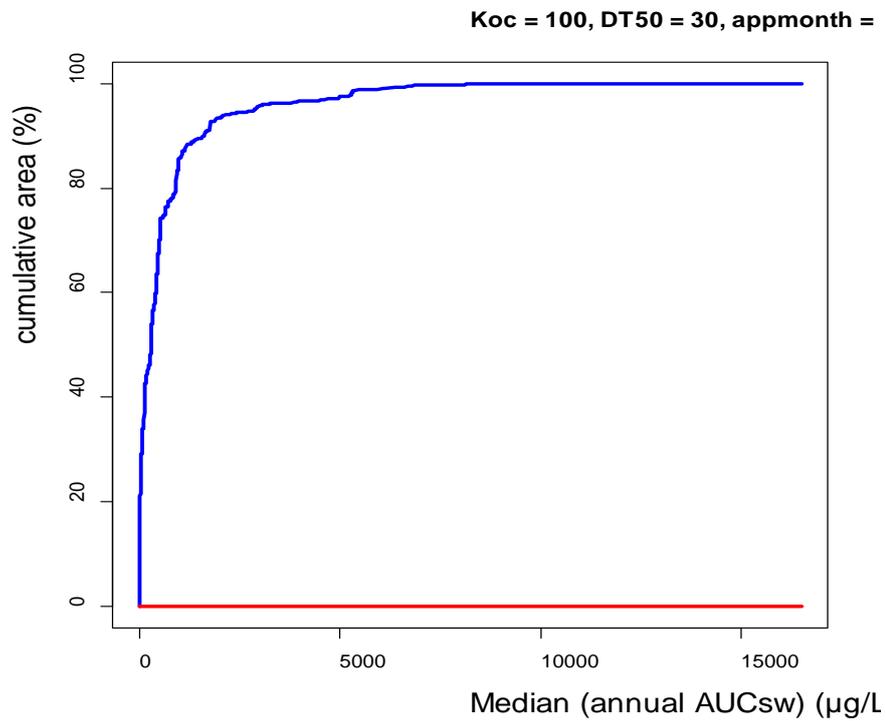


Abb. II.6-32: C DF der Median[annual AUC_{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: $K_{oc} = 100 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, WW, Okt.

Beispiel 3A): $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Okt.,
Zielgröße: PEC_{sw,max}

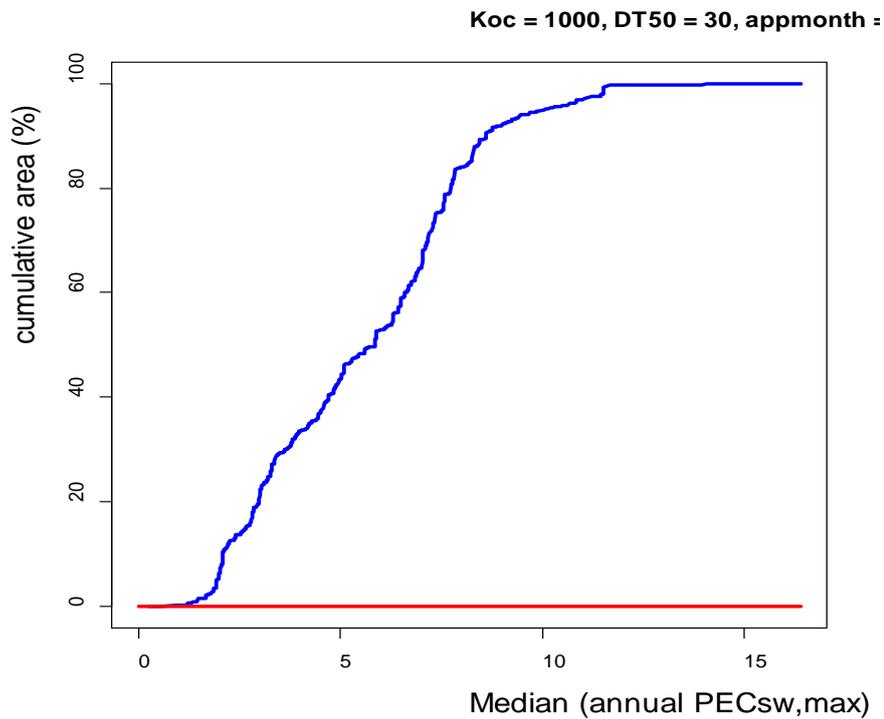


Abb. II.6-33: CDF der Median[annual PEC_{sw,max}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, WW, Okt

Beispiel 3B): $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, Kultur= WW, Appl.-Monat = Okt.,
Zielgröße: AUC_{sw}

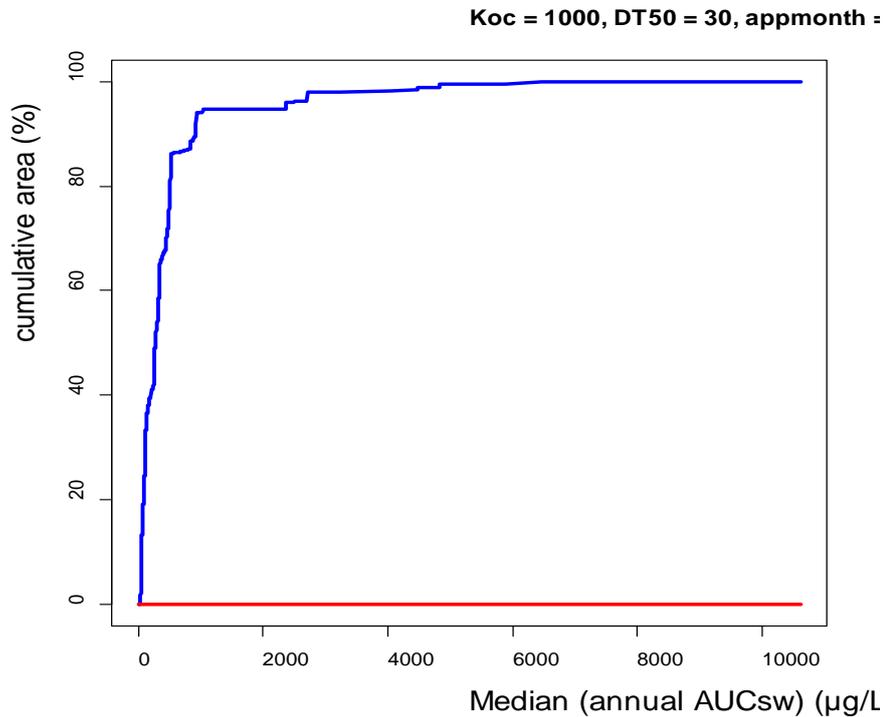


Abb. II.6-34: CDF der Median[annual AUC_{sw}] für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE). Beispiel: $K_{oc} = 1000 \text{ L/kg}$, $DT50 = 30 \text{ d}$, WW, Okt

II.6.3.4 Schlussfolgerungen und Ausblick

Die im vorliegenden Kapitel II.6 durchgeführte modellbasierte Analyse des Eintragspfads Zwischenabfluss ergab:

- Vergleich Zwischenabfluss (I) vs. Oberflächenabfluss + Erosion (RE)
 - Die aus PSM-Einträgen über Interflow resultierenden Konzentrationen im Gewässer und die aus Einträgen über Runoff und Erosion resultierenden sind zu einem gewissen Grad indirekt proportional. Das liegt zum einen an der Standorthydrologie des FST (Neigung zu Oberflächenabfluss), zum anderen am Sorptionsverhalten der modellierten Substanz (Einträge über Zwischenabfluss steigen mit abnehmendem K_{oc}). Während die Werte von Median[annual PEC_{sw,max}] zwischen Oberflächenabfluss und Interflow vergleichbare Größenordnungen erreichen, sind die Werte von Median[annual AUC_{sw}] für Interflow oft wesentlich höher als für Oberflächenabfluss.
 - Die relative Bedeutung von Drainage und Zwischenabfluss im Vergleich zu Oberflächenabfluss + Erosion schwindet mit zunehmenden K_{oc} .
- Vergleich Runoff + Erosion + Zwischenabfluss (REI) vs. Oberflächenabfluss + Erosion (RE)
 - Der Median (annual PEC_{sw,max} REI) kann für niedrige Werte des Median (annual PEC_{sw,max} RE) von letzterem erheblich abweichen, wobei die maximalen absoluten Abweichungen nach oben höher sind als nach unten. Für höhere der Median (annual PEC_{sw,max} RE) nehmen die relativen und absoluten Abweichungen ab. Abweichungen

nach oben treten vermutlich vor allem für schwach sorbierende Substanzen auf und Abweichungen nach unten hauptsächlich für stark sorbierende: Für stark sorbierende Substanzen sind die Einträge über Interflow niedrig, und es kommt daher nur noch der Verdünnungseffekt des Zwischenabflusses zum Tragen.

- Die AUC_{sw,REI} liegen oft wesentlich höher als die AUC_{sw,RE}. Dies lässt sich dadurch erklären, dass der kumulative PSM-Eintrag über Runoff und Erosion durch die Anzahl der auftretenden Oberflächenabflussereignisse und (in PRZM) durch den PSM-Vorrat in den obersten 2 cm bzw. 0,1 cm des Bodens limitiert ist. Hingegen kann Zwischenabfluss in MACRO immer auftreten, wenn die Makroporen eines Layers gesättigt sind, und ist nicht auf Runoffereignisse beschränkt.
- Vergleich kombinierte CDFs (REI/RE) mit originalen CDFs (RE)
 - Die Verläufe und Wertebereiche der kombinierten CDFs für die Eintragspfade Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE) für Median[annual PEC_{sw,max}] unterscheiden sich nur wenig von den originalen CDFs (RE).
 - Die Rankings der Boden-Klima-Kombinationen für Median[annual PEC_{sw,max}] und den gleichen Koc sind unterschiedlich zwischen den kombinierten und den RE-CDFs, aber nicht systematisch.
 - Die Verläufe und Wertebereiche der kombinierten CDFs (REI/RE) für Median[annual AUC_{sw}] unterscheiden sich jedoch stark von den originalen CDFs (RE), wobei die Unterschiede mit zunehmendem Koc abnehmen.
 - Mit zunehmendem Koc rutschen die Boden-Klima-Kombinationen mit Zwischenabfluss in den AUC-CDFs nach unten.

Implikationen für die Expositionsabschätzung mit Tool GERDA

Sollten sich die Ergebnisse der vorstehenden Analyse auch auf das 80. zeitliche Perzentil übertragen lassen, müsste aus fachlichen Gründen Zwischenabfluss in GERDA eigentlich berücksichtigt werden, zumindest für schwach sorbierende Substanzen. Eine solche Anpassung ist im Rahmen des hier vorgestellten Projekts nicht mehr zu leisten, könnte aber in einem Folgeprojekt vorgenommen werden. Eine Version von „GERDA mit Zwischenabfluss“ würde sich von der derzeitigen Version in folgenden Punkten unterscheiden:

- Statt der bisherigen CDFs für Oberflächenabfluss + Erosion (RE) würde die neue Version kombinierte CDFs für Oberflächenabfluss, Erosion + Zwischenabfluss wo vorhanden (REI/RE) enthalten. Das heißt, für die 67 Böden ohne Zwischenabfluss (FOOTPRINT Hydrologic Groups L, M, N, Q, U, V, Y) würde in der CDF wie bisher PEC_{sw,max} bzw. AUC_{sw} (RE) dargestellt, aber für die 35 Böden mit Zwischenabfluss (FHGs O, P, R, S, T, W, X) PEC_{sw,max} bzw. AUC_{sw} (REI).
- STEPS müsste in GERDA so konfiguriert werden, dass es für die 35 Böden mit Zwischenabfluss MACRO- und PRZM-Zeitreihen gleichzeitig einliest und PEC_{sw,REI} produziert. Dies bedeutet, dass, wenn einer der 35 FSTs beim Ziehen aus der CDF zur Simulation ausgewählt wird, dieser FST außer mit PRZM auch noch mit MACRO gerechnet werden muss. Dies würde die Rechenzeit von GERDA erhöhen.

Außerdem ist zu beachten, dass die in GERDA mit VFSSMOD simulierten Pufferstreifen (VFS) zwar Runoff- und Erosionseinträge ins Gewässer reduzieren, aber auf Zwischenabfluss keinen Effekt haben. Der Einfluss von VFS auf die PEC_{sw,REI} ist geringer als der Einfluss auf PEC_{sw,RE}.

Die Reduzierung der $PEC_{sw,max}$ in Bezug auf Stufe 3 würde in Stufe 4-Simulationsläufen mit Pufferstreifen also für die 35 Böden mit Zwischenabfluss geringer ausfallen als jetzt.

Es stellt sich allerdings die Frage, ob ein Hang mit einem Feld, grasbewachsenen Pufferstreifen, einem Gewässer am Hangfuß und Auftreten von Zwischenabfluss wirklich adäquat mit vier nur lose miteinander gekoppelten Modellen (MACRO, PRZM, VFSSMOD, STEPS) modelliert werden kann:

- (i) In der Realität würde der Zwischenabfluss auch unter dem Pufferstreifen hindurchfließen und ggf. das Infiltrationsgeschehen im VFS beeinflussen.
- (ii) Diese Fließstrecke unter dem Pufferstreifen hindurch würde zu einer Dämpfung des hydraulischen Signals des Zwischenabflusses führen, das im Gewässer ankommt.
- (iii) Außerdem tritt Sorption des PSM am Bodenmaterial unter dem VFS auf.
- (iv) Schließlich erscheint es wahrscheinlich, dass bei der Modellierung Fehler in der Wasserbilanz auftreten (vgl. Diskussion mit Rafael Muñoz-Carpena zum Thema „lateral subsurface flow from the VFS to the water body, Anhang A11“). Um einen solchen Hang mit Feld, VFS, Gewässer und Zwischenabfluss korrekt zu simulieren, bräuchte man mindestens ein 2D-Hillslope-Modell (vgl. Kommentar von Rafael Muñoz-Carpena: „The subsurface pathways analysis would require 2D/3D approaches that are beyond the scope of the surface pesticide regulatory framework.“).

Zusammengefasst erscheint die Modellierung von Zwischenabfluss für Stufe3-Simulationen unproblematisch. In Kombination mit VFS-Simulationen (Stufe4) ergeben sich jedoch erhebliche fachliche Probleme (Wasserbilanz, Wechselwirkung zwischen VFS und Zwischenabfluss), deren Lösung (2D-Hillslope-Modell) für den regulatorischen Kontext wahrscheinlich momentan zu aufwändig wäre.

II.7 Bewertung von VFSSMOD zur Modellierung der Risikominderung durch Filterstreifen

II.7.1 Hintergrund und Aufgabenstellung

Die Verwendung von Gewässerrandstreifen als Risikominderungsmaßnahmen in der regulatorischen Praxis kann nach verschiedenen Ansätzen bewertet werden:

- Default-Werte für vordefinierte Abstände zum Oberflächenwasserkörper,
- Dynamische Modellierung mittels Simulationsverfahren (wie bspw. VFSSMOD).
- Erarbeitung einer zusammenfassenden Darstellung von Unsicherheiten bei der Einbeziehung der Minderungsleistung von Randstreifen in der Regulatorik sowie der Akzeptanz in der Praxis.

Das Modellkonzept von GERDA kann verschiedene nationale Risikomanagementoptionen berücksichtigen. Die mögliche Verminderung des Stoffeintrags durch off-field-Maßnahmen wie grasbewachsene Pufferstreifen (grassed buffer strips) und sog. grassed waterways (grasbewachsene Fließpfade) kann quantitativ mit dem Modell VFSSMOD (Vegetated Filter Strip MODELing system; Muñoz-Carpena und Parsons, 2011) beschrieben werden. In-field-Maßnahmen zur Verminderung von Oberflächenabfluss und Erosion (z.B. Mulchsaat, Direktsaat) können in PRZM parametrisiert werden.

Eine Literaturanalyse von Reichenberger et al. (2007) und ebenso vorherige Literaturanalysen wie z.B. im FOCUS Landscape and Mitigation Report (FOCUS, 2007a, 2007b) kamen zu der Schlussfolgerung, dass grasbewachsene Pufferstreifen am unteren Rand der Parzelle im Allgemeinen effektiv in der Reduktion von PSM-Frachten im Oberflächenabfluss sind. Die gefundenen Effizienzen waren jedoch stark variabel und nicht hinreichend durch die Breite der Pufferstreifen erklärbar. Es ist mittlerweile wissenschaftlicher Konsens, dass aufgrund der offensichtlichen Abhängigkeit der Effizienz von Pufferstreifen von der Größe des Runoff-Ereignisses (insbesondere des vom Feld einströmenden Runoff-Volumens) die hydrologische Reaktion (hydrological response) des Pufferstreifens explizit mit einem hydrologischen Modell wie z.B. VFSSMOD simuliert werden muss (z.B. Sabbagh et al., 2009).

Für Uferstreifen (riparian buffers) kamen Reichenberger et al. (2007) aufgrund der analysierten Literatur zur Schlussfolgerung, dass diese aus verschiedenen Gründen (z.B. wegen des Auftretens von konzentriertem, turbulentem Abfluss) als wesentlich weniger effektiv anzusehen sind als grasbewachsene Pufferstreifen am unteren Rand der Parzelle. Mittlerweile gibt es auch Daten zur Effektivität von mit Wald bestandenen Pufferstreifen (forest buffers), z.B. die Studie von Passeport (2010). Im Prinzip lassen sich alle 3 genannten Typen von Pufferstreifen mit VFSSMOD simulieren.

Für FOCUS Step4-Simulationen wurden im Auftrag der ECPA bereits Szenarien für VFSSMOD erarbeitet (Brown et al., 2012). Diese Vorarbeiten legen es nahe, auch in GERDA eine Kopplung zwischen PRZM und VFSSMOD zu implementieren und Szenarien für grasbewachsene Pufferstreifen und ggf. Uferstreifen (riparian buffers) zu definieren und zu parametrisieren. Für die Modellierung mit VFSSMOD kann auf zahlreiche Publikationen zu VFSSMOD (z.B. Muñoz-Carpena et al., 2010) zurückgegriffen werden.

II.7.2 Einführung VFSSMOD und SWAN-VFSSMOD

II.7.2.1 VFSSMOD

VFSSMOD (z.B. Muñoz-Carpena und Parsons, 2011; <http://abe.ufl.edu/carpena/vfssmod/>) ist ein Modell zur dynamischen Simulation von grasbewachsenen Pufferstreifen (vegetated filter strips, VFS).

Während eines Regen-Oberflächenabfluss-Ereignisses simuliert VFSSMOD die dynamischen hydrologischen Transportprozesse, die im VFS auftreten.

Hierfür benutzt VFSSMOD Anfangsbedingungen (Wassergehalt des Bodens, Vegetationsbedeckung) und Randbedingungen (Regen, Runoff-Zufluss vom Feld) und berechnet Ausfluss-Hydrographen und Pollutographen (Sediment, PSM, sonstige gelöste Stoffe) für das Ereignis, sowie Wasser- und Massenbilanzen am Ende des Ereignisses.

Es existieren verschiedene Versionen von VFSSMOD

- vfm.exe: command line
- VFSSMOD-W: Windows-Oberfläche + vfm.exe
- SWAN-VFSSMOD (entwickelt von ECPA für FOCUS Step4) mit VFSSMOD als .dll

Die Hauptcharakteristiken von VFSSMOD sind:

- 1 Simulation = 1 Oberflächenabflussereignis
- mechanistische Simulation von Infiltration und Sedimentation
- seit 2009: Reduktion der PSM-Fracht über multiple Regressionsgleichung (Sabbagh et al., 2009).

Ein Modul zur mechanistischen Simulation des Transport chemischer Substanzen, das anstelle der o.g. Regressionsgleichung verwendet werden kann, wurde entwickelt (Perez-Ovilla, 2010). Das Modul ist jedoch eine reine Forschungs-Version und zu parameteraufwändig, um in standardisierten regulatorischen Anwendungen eingesetzt werden zu können. Die multiple Regressionsgleichung wird daher mittelfristig vermutlich nicht ersetzt werden.

VFSSMOD berechnet die folgenden Ergebnis-Variablen:

- deltaQ: relative Reduktion des gesamten Wasserzuflusses (einströmender Oberflächenabfluss + Regen auf den VFS)
- deltaR: relative Reduktion des einströmenden Oberflächenabflusses
- deltaE: relative Reduktion der Sedimentfracht
- deltaP: relative Reduktion der PSM-Fracht

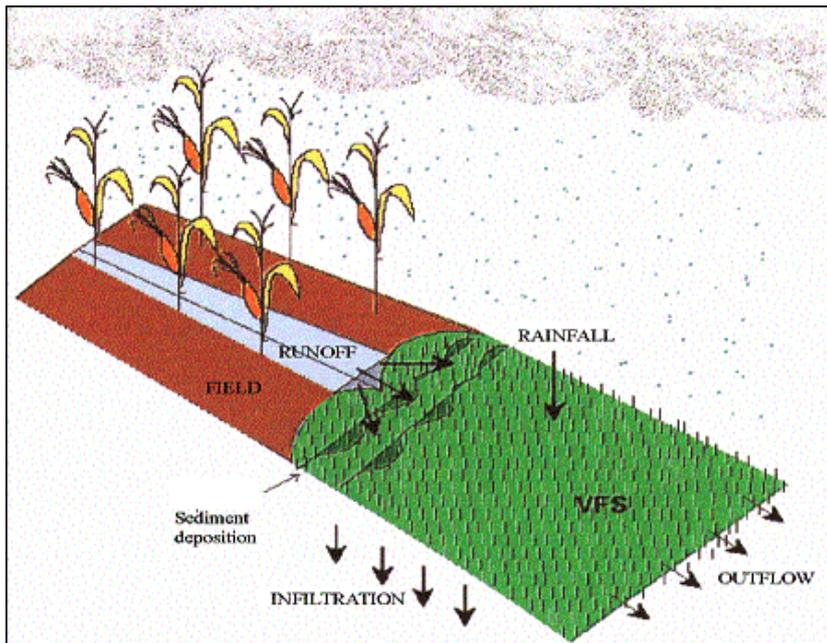


Abb. II.7-1: Grundprinzip von VFSMOD.

Ausweitung auf Langzeitsimulationen: Eine VFSMOD-Simulation beinhaltet nur ein einziges Runoff-Event. VFSMOD ist jedoch bereits in Rahmenwerken zur Langzeitsimulation für higher-tier-Risikoabschätzungen (US EPA und SWAN 3.0; s.u.) mit PRZM gekoppelt worden. Langzeitsimulationen benötigen realistische Anfangsbedingungen für jeden Runoff-Event der PRZM-Output-Zeitreihe (Bodenfeuchte, PSM-Rückstände, Zustand der Vegetation).

II.7.2.2 SWAN-VFSMOD

SWAN wurde von ECPA (hauptsächlich Bayer) entwickelt, um FOCUSStep4-Simulationen zu ermöglichen. Zwei Versionen wurden bisher veröffentlicht: SWAN 1.x (ECPA, 2008) und SWAN 3.0 (ECPA, 2012).

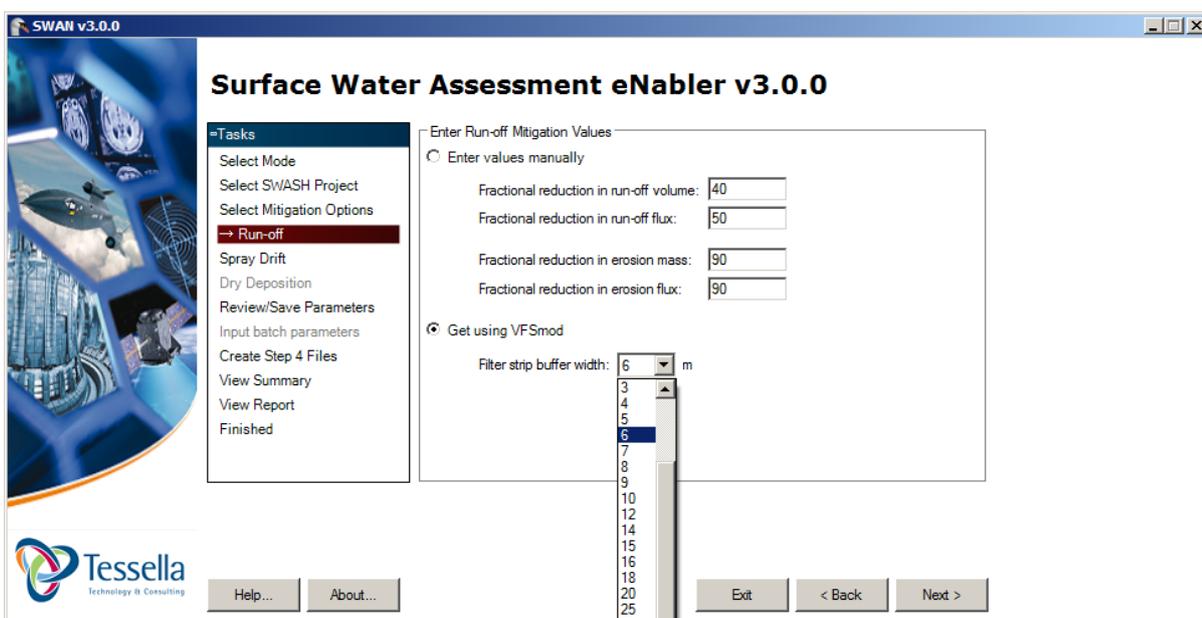


Abb. II.7-2 Eingabefenster für Runoff mitigation in SWAN 3.0.

- SWAN 3.0 enthält zwei Optionen für die Minderung von Runoff- und Erosionseinträgen in Oberflächengewässer
 - a) benutzerdefinierte fixe (= event-unabhängige) Effizienzen von VFS (Funktionalität aus v.1)
 - b) dynamische Simulation von VFS (SWAN-VFSMOD).
- Langzeitsimulation in SWAN 3.0: Da i.d.R. mehrere Runoff-Ereignisse in PRZM gerechnet und damit in die PEC-Berechnung mit TOXSWA eingehen, sind auch mehrere VFSMOD-Runs für eine TOXSWA-Rechnung erforderlich. Diese Langzeitsimulation hat SWAN 3.0 wie folgt gelöst:
 - a) Langzeitsimulation der Bodenfeuchte im Vorfeld mit dem Tool ThetaFAO (Muñoz-Carpena, 2012a)
 - b) Carryover von Rückständen von einem Runoff-Event zum nächsten (Muñoz-Carpena, 2012b)
 - c) allerdings: es wird keine Alterung (z.B. Verschlammung) des Pufferstreifens simuliert. Der VFS ist immer in perfektem Zustand.
- Vorteil von SWAN-VFSMOD: realistischere Simulation der Effizienz von VFS als mit fixen Werten.
- Nachteil: SWAN-VFSMOD kann nicht die Grundprobleme von FOCUS_{sw} beheben, v.a. die mangelnde Repräsentativität der mit TOXSWA simulierten 12-Monats-Periode.
- weitere kritische Annahme von SWAN (1.x und 3.0):
 - a) Die unbehandelte Fläche des Upstream Catchments des Stream (80 % von 100 ha) hat keine Pufferstreifen → relativ hohe Verdünnung mit dem unveränderten Runoffvolumen dieser Flächen
 - b) Für die fixen Effizienzen (SWAN 1.x und 3.0) stellten Ter Horst et al. (2009) in Testrechnungen fest: Wenn für PSM-Runoff-Eintrag und Runoffvolumen die gleiche Reduktionseffizienz angenommen wird, ist für den FOCUS Stream die resultierende Reduktion der PEC_{sw,initial} fast direkt proportional und sogar fast identisch zur Reduktionseffizienz für PSM-Runoffeintrag und Runoffvolumen (Ter Horst et al., 2009).
 - c) Für den dynamischen Berechnungsmodus von SWAN-VFSMOD, wo ΔP üblicherweise größer ist als ΔR , ist die Abhängigkeit der Reduktion von PEC_{sw,initial} von ΔP und ΔR noch zu bestimmen (siehe folgendes Kap. II.7.3)

II.7.3 Analytische Herleitung von ΔPEC_{sw} für FOCUS stream und pond

Ziel der folgenden Rechnung war es, für das FOCUS-stream- und das FOCUS-Pond-Szenario jeweils eine approximative Beziehung zwischen der relativen Reduktion der PEC_{sw,max} in TOXSWA (oder STEPS-3) und den VFSMOD-Outputs (bzw. den benutzerdefinierten fixen Reduktionseffizienzen) ΔR und ΔP abzuleiten. Anders ausgedrückt, wie viel relative Reduktion von PEC_{sw,max} (ΔPEC_{sw}) bekommt man für gegebene Werte von ΔP (relative Reduktion des Runoff-Volumens) und ΔR (relative Reduktion der erodierten Sedimentfracht)?

II.7.3.1 Analytische Herleitung von deltaPECsw für den FOCUS stream

II.7.3.1.1 Einführung

Ter Horst et al. (2009) schätzten die PEC_{sw,max} für FOCUS Step4-Simulationen (SWAN mit fixen Puffereffizienzen) für den FOCUS stream analytisch mit den folgenden Annahmen ab:

- Basisabfluss und stehendes Wasservolumen des Stream (ca. 30000 L) sind vernachlässigbar gegenüber dem Oberflächenabflussvolumen, das in den Stream eintritt.
- Gleiches gilt für den lateralen unterirdischen Zufluss vom 1-ha Feld und vom Up-stream Catchment, der aus der von PRZM berechneten Perkolationsrate in 1 m Tiefe, über den Monat gemittelt und mit einem szenariospezifischen Faktor multipliziert (0,03 für R2 und R3, 0,1 für R1 und R4), berechnet wird. Diese Komponente stellt langsamen Zwischenabfluss (Interflow) dar. Paulien Adriaanse (persönliche Mitteilung, 2014) wies darauf hin, dass das Volumen dieses lateralen Zuflusses in FOCUS nicht immer vernachlässigbar ist.
- Gleiche Reduktionseffizienz für Oberflächenabfluss und gelöste PSM-Fracht.
- Der Wirkstoff ist nicht extrem stark sorbierend, so dass PSM-Erosionseinträge (partikulär gebunden) im Vergleich zu den PSM-Runoffeinträgen (gelöst) klein sind und Rückdiffusion vom Gewässersediment nicht zu höheren PEC_{sw} führt als der gelöste PSM-Runoffeintrag.

Die resultierende Gleichung war:

$$PEC_{sw,max,step4} = \frac{21(1 - frvf)M}{80V + 21(1 - frvf)V} \quad (\text{Gl. II.7-1})$$

mit

M PSM-Runoffaustrag aus dem Feld (PRZM-Output)

V Oberflächenabflussvolumen, das das Feld verlässt (PRZM-Output)

frvf fraktionale Reduktion sowohl des Oberflächenabflussvolumens (frv = deltaR/100) als auch der gelösten PSM-Fracht im Oberflächenabfluss (frf = deltaP/100) durch den Pufferstreifen

Nach Auftragen der relativen Reduktion von PEC_{sw,max} gegen frvf kamen Ter Horst et al. (2009) zu dem Schluss, dass in SWAN die relative Reduktion der PEC_{sw,max} im Vergleich zu einer Standard-FOCUS Step3-Simulation näherungsweise gleich der Reduktionseffizienz des Pufferstreifens für Oberflächenabflussvolumen und gelöste PSM-Fracht frvf ist.

II.7.3.1.2 Analytische Herleitung einer Beziehung

Im Folgenden wird versucht, den Spezialfall von Ter Horst et al. (2009) zu generalisieren:

- 1) Die Annahme wird entfernt, dass die relative Reduktion des Oberflächenabflussvolumens (frv) gleich der relativen Reduktion der gelösten PSM-Fracht (frf) ist, weil dies für VFSSMOD üblicherweise nicht der Fall ist,
- 2) Die SWAN-Annahme wird entfernt, dass der behandelte Anteil des Upstream Catchment gleich dem Anteil ist, der mit grasbewachsenen Pufferstreifen (VFS) ausgestattet ist.

Die Grundidee ist, die PEC_{sw,max,step4} (PRZM-VFSSMOD-TOXSWA) abzuleiten und sie mit PEC_{sw,max,step3} (PRZM-TOXSWA) in Beziehung zu setzen, um die relative Reduktion von PEC_{sw,max} (deltaPEC_{sw}) auszurechnen.

Im allgemeinen Fall, für nicht sehr stark sorbierende Substanzen (bspw. für $K_{oc} \leq 10000$ L/kg) und unter Vernachlässigung von Baseflow, lateralem Zufluss vom Feld und stehendem Wasservolumen des Stream, kann $PEC_{sw,max,step3}$ angenähert werden als

$$PEC_{sw,max,step3} = \frac{(Ac * ft + Af)M}{(Ac + Af)V} \quad (Gl. II.7-2)$$

mit

- M PSM-Runoffaustrag aus dem Feld (PRZM-Output; $mg\ m^{-2}\ h^{-1}$)
 V Oberflächenabflussvolumen, das das Feld verlässt (PRZM-Output; $mm\ h^{-1}$)
 Af Fläche des behandelten Feldes (ha)
 Ac Fläche des Upstream Catchment (ha)
 ft Anteil des Upstream Catchment, der am gleichen Tag mit dem simulierten Wirkstoff behandelt wird

$PEC_{sw,max,step4}$ (nach Reduktion des Oberflächenabflussvolumens und der gelösten PSM-Fracht durch grasbewachsene Pufferstreifen (VFS)) ist dann gegeben als

$$PEC_{sw,max,step4} = \frac{((Ac * ftb + Af)(1 - frf) + Ac * (ft - ftb))M}{((Ac * fb + Af)(1 - frv) + (1 - fb)Ac)V} \quad (Gl. II.7-3)$$

mit

- frf fraktionale Reduktion der gelösten PSM-Fracht im Oberflächenabfluss ($frf = \Delta P/100$)
 frv fraktionale Reduktion des Oberflächenabflussvolumens ($frv = \Delta R/100$)
 fb Anteil des Upstream Catchment, der mit VFS ausgestattet ist (in SWAN als $fb = ft = 0,2$ angenommen)
 ftb Anteil des Upstream Catchment, der mit dem simulierten PSM behandelt wird UND mit VFS ausgestattet ist

ΔPEC_{sw} wird analog zu ΔP und ΔR wie folgt definiert:

$$\Delta PEC_{sw} = \frac{PEC_{sw,max,step3} - PEC_{sw,max,step4}}{PEC_{sw,max,step3}} * 100\% = \left(1 - \frac{PEC_{sw,max,step4}}{PEC_{sw,max,step3}}\right) * 100\% \quad (Gl. II.7-4)$$

Einsetzen von Gl. II.7-2 und Gl. -3 in Gl. -4 ergibt:

$$\Delta PEC_{sw} = \left(1 - \frac{((Ac * ftb + Af)(1 - frf) + Ac * (ft - ftb))M}{(Ac * fb + Af)(1 - frv) + (1 - fb)Ac} \cdot \frac{(Ac * ft + Af)M}{(Ac + Af)V}\right) * 100\%$$

$$\Delta PEC_{sw} = \left(1 - \frac{((Ac * ftb + Af)(1 - frf) + Ac * (ft - ftb))}{(Ac * fb + Af)(1 - frv) + (1 - fb)Ac} \cdot \frac{(Ac * ft + Af)}{(Ac + Af)}\right) * 100\%$$

$$\Delta PEC_{sw} = \left(1 - \frac{((Ac * ftb + Af)(1 - frf) + Ac * (ft - ftb)) * (Ac + Af)}{((Ac * fb + Af)(1 - frv) + (1 - fb)Ac) * (Ac * ft + Af)}\right) * 100\% \quad (Gl. II.7-5)$$

Somit hängt ΔPEC_{sw} von 7 Variablen ab:

- 5 Szenarioparameter: Ac, Af, ft, ftb, fb
- 2 VFSSMOD-Outputvariablen: frf, frv

Im Spezialfall, dass alle behandelten Flächen im Upstream Catchment mit einem VFS ausgestattet sind (ein Teil der SWAN-Szenario-Annahmen), d.h. ftb = ft, vereinfacht sich die Gleichung zu

$$\text{deltaPEC}_{sw} = \left(1 - \frac{((Ac * ft + Af)(1 - frf)) * (Ac + Af)}{((Ac * fb + Af)(1 - frv) + (1 - fb)Ac) * (Ac * ft + Af)}\right) * 100\% \quad (\text{Gl. II.7-6})$$

Kürzen des Terms (Ac * ft + Af) ergibt:

$$\text{deltaPEC}_{sw} = \left(1 - \frac{(1 - frf) * (Ac + Af)}{(Ac * fb + Af)(1 - frv) + (1 - fb)Ac}\right) * 100\% \quad (\text{Gl. II.7-7})$$

Tatsächlich ist der behandelte Anteil des Upstream Catchment aus der Gleichung verschwunden. Da jedoch die Annahme genutzt wurde, dass alle behandelten Flächen mit VFS ausgestattet sind (ft = ftb), und da fb >= ftb sein muss, gilt Gl. II.7-7 nur, wenn fb >= ft.

Delta PEC_{sw} hängt dann nur noch von 5 Variablen ab:

- 3 Szenarioparameter: Ac, Af, fb
- 2 VFSSMOD-Outputvariablen: frf, frv

Im Extremfall, dass das gesamte Upstream Catchment mit VFS ausgestattet ist (fb = 1), vereinfacht sich die Lösung zu:

$$\text{deltaPEC}_{sw} = \left(1 - \frac{(1 - frf)(Ac + Af)}{(Ac * 1 + Af)(1 - frv) + (1 - 1)Ac}\right) * 100\% = (\text{Gl. II.7-8})$$

$$\text{deltaPEC}_{sw} = \left(1 - \frac{(1 - frf)(Ac + Af)}{(Ac + Af)(1 - frv)}\right) * 100\% = \left(1 - \frac{(1 - frf)}{(1 - frv)}\right) * 100\% = \frac{frf - frv}{1 - frv} * 100\%$$

Für die FOCUS-Szenarioeinstellungen (Ac = 100 ha, Af = 1 ha) und mit den SWAN-Szenario-annahmen (ft = ftb = fb = 0.2), d.h. für den von Ter Horst et al. (2009) untersuchten Fall, wird die Lösung zu:

$$\text{deltaPEC}_{sw} = \left(1 - \frac{(1 - frf) * 101}{(100 * 0.2 + 1)(1 - frv) + 0.8 * 100}\right) * 100\% = \left(1 - \frac{(1 - frf) * 101}{21(1 - frv) + 80}\right) * 100\%$$

(Gl. II.7-9)

II.7.3.1.3 Ergebnisse und Diskussion

Die folgenden vier Diagramme (Abb. II.7-3 bis II.7-6) zeigen deltaPEC_{sw} gemäß Gl. II.7-7 als Funktion von deltaR (=frv * 100 %) für verschiedene Verhältnisse von deltaP/deltaR = frf/frv (gleiches Diagramm) und verschiedene Werte von fb (verschiedene Diagramme). Für deltaR < 0 wurde deltaP auf Null gesetzt, da es in der Praxis nicht auftreten sollte, dass der PSM-Austrag aus dem VFS höher ist als der PSM-Eintrag.

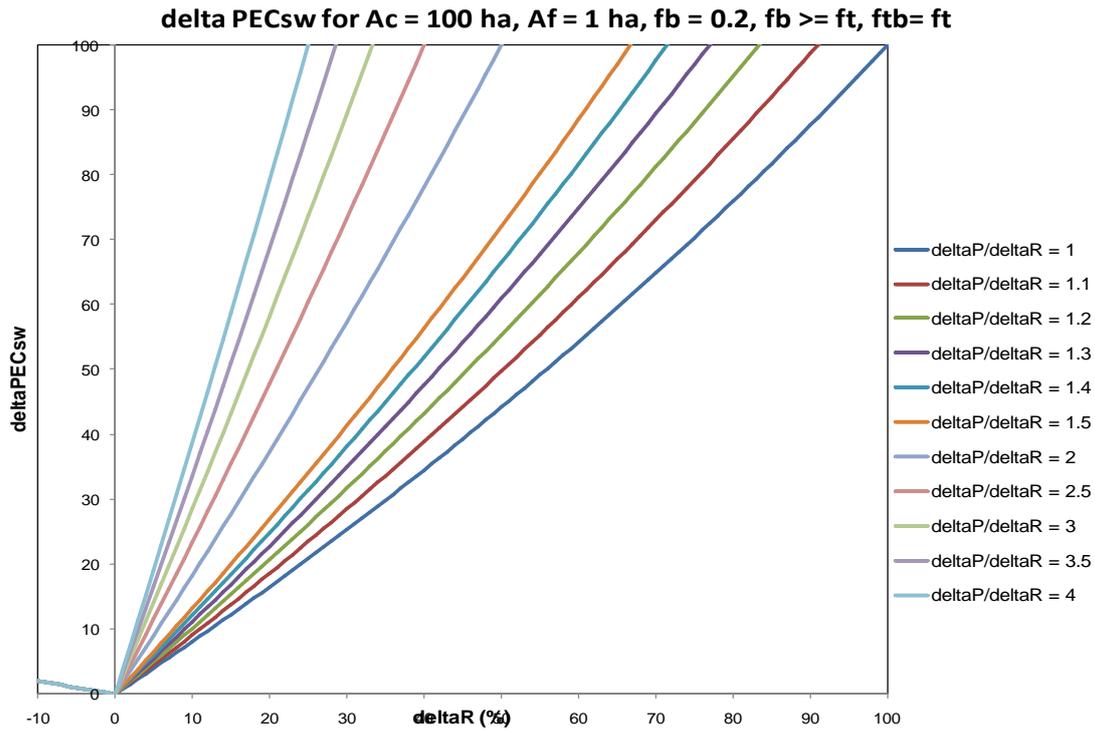


Abb. II.7-3: ΔPEC_{sw} als Funktion von ΔR für $fb = 0.2$ und verschiedenen Verhältnisse von $\Delta P / \Delta R$.

Für negative ΔR wurde ΔP als Null angenommen.

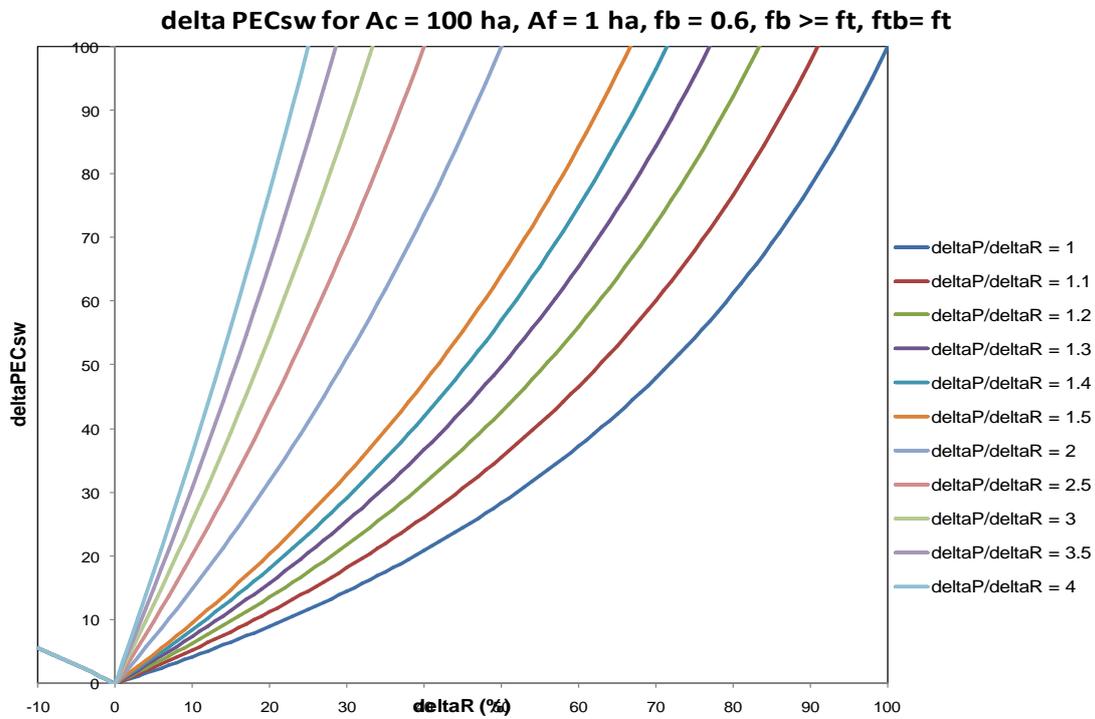


Abb. II.7-4: ΔPEC_{sw} als Funktion von ΔR für $fb = 0.6$ und verschiedenen Verhältnisse von $\Delta P / \Delta R$.

Für negative ΔR wurde ΔP als Null angenommen.

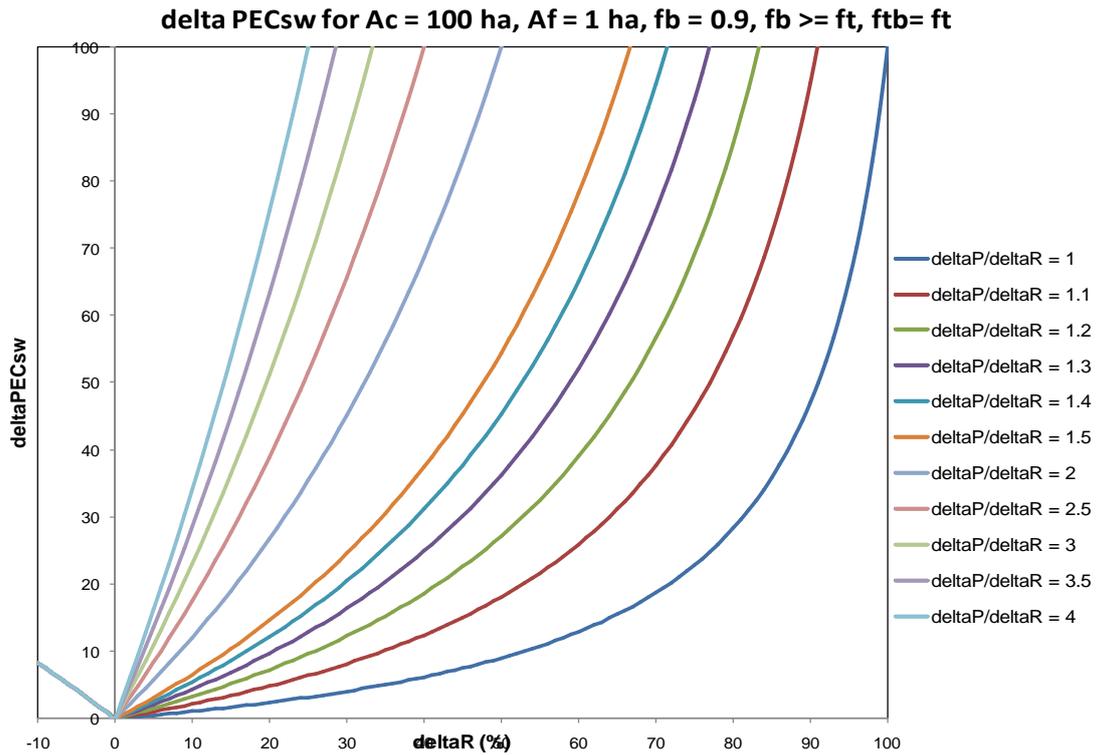


Abb. II.7-5: deltaPECsw als Funktion von deltaR für fb = 0.9 und verschiedenen Verhältnisse von deltaP/deltaR.
 Für negative deltaR wurde deltaP als Null angenommen.

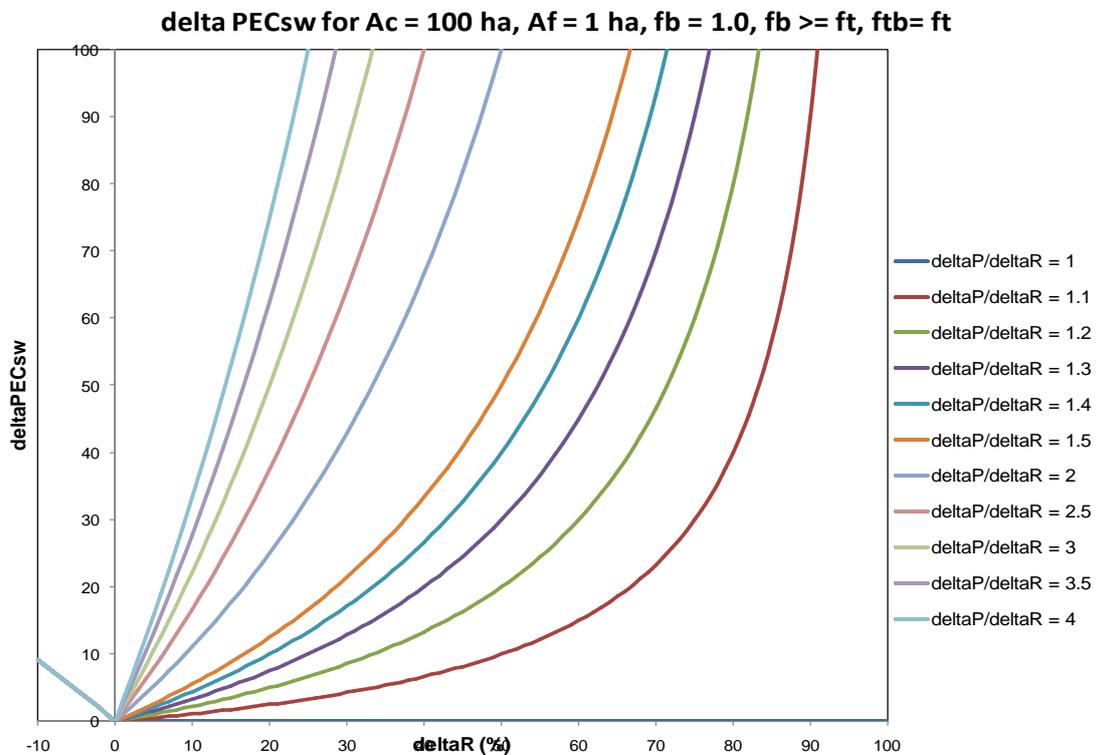


Abb. II.7-6: deltaPECsw als Funktion von deltaR für fb = 1.0 und verschiedenen Verhältnisse von deltaP/deltaR.
 Für negative deltaR wurde deltaP als Null angenommen.

Wenn man die verschiedenen Verhältnisse von $\Delta P/\Delta R$ (welche z.B. mit zunehmendem Koc zunehmen sollten) vergleicht, stellt man fest:

- Je höher $\Delta P/\Delta R$, desto schneller wird ein $\Delta P/EC_{sw}$ von 100 % erreicht.
- Je niedriger $\Delta P/\Delta R$, desto konkaver werden die $\Delta P/EC_{sw}$ -Kurven.
- Im Falle eines negativen ΔR verhalten sich alle Kurven gleich, weil sie alle das gleiche $\Delta P = 0$ haben.

Wenn man die verschiedenen Werte von f_b (verschiedene Diagrammen) vergleicht, wird Folgendes offensichtlich:

- Für das gleiche Verhältnis von $\Delta P/\Delta R$ erreicht $\Delta P/EC_{sw}$ den Wert 100 % für den gleichen Wert von ΔR (d.h. der Schnittpunkt mit dem oberen Rand des Diagramms ist immer der gleiche).
- Mit zunehmendem f_b werden die Kurven immer konkaver. Dieser Effekt nimmt mit abnehmendem $\Delta P/\Delta R$ zu.
- Für den Extremfall $f_b = 1$ und $\Delta P/\Delta R = 1$ wird $\Delta P/EC_{sw}$ Null (dies liegt an der Vernachlässigung des Baseflow, des lateralen Zuflusses und des stehenden Wasservolumens des Stream)

Außerdem gilt für positive ΔR (und damit positive ΔP):

- $\Delta P/EC_{sw}$ nähert sich mit zunehmendem f_b und zunehmendem $\Delta P/\Delta R$ asymptotisch an ΔP an. Wenn $\Delta P/EC_{sw} = \Delta P$, wird die Kurve zur Geraden.
- Mathematisch: Wenn f_b klein ist, ist der Effekt von $f_{rv} = \Delta R/100$ auf den Nenner der $\Delta P/EC_{sw}$ -Gleichung (Gl. II.7-7) ebenfalls klein.

II.7.3.1.4 Schlussfolgerungen

Mit den FOCUS-Szenarioannahmen ($A_c = 100$ ha, $A_f = 1$ ha, $f_t = 0.2$) und den zusätzlichen SWAN-Annahmen ($f_b = f_{tb} = f_t$, d.h. nur der Anteil des Upstream Catchment, der mit dem simulierten Wirkstoff behandelt wird [in FOCUS 20 % der Fläche des Upstream Catchment A_c] ist mit grasbewachsenen Pufferstreifen ausgestattet; der "unbehandelte" Anteil hat keine VFS), ergibt die analytisch hergeleitete Beziehung, dass $\Delta P/EC_{sw}$ annähernd gleich ΔP (relative Reduktion der PSM-Fracht) ist. Grund ist, dass die Reduktion des Oberflächenabflussvolumens durch VFS einen zu kleinen Flächenanteil des Upstream Catchment betrifft, um das vom Upstream Catchment kommende Oberflächenabflussvolumen signifikant zu beeinflussen. Mathematisch ausgedrückt: Wenn f_b klein ist, ist der Effekt von $f_{rv} = \Delta R/100$ auf den Nenner der $\Delta P/EC_{sw}$ -Gleichung ebenfalls klein. Somit kann die Aussage von Ter Horst et al. (2009) bestätigt und präzisiert werden: In SWAN oder SWAN-VFSMOD ist $\Delta P/EC_{sw}$ annähernd gleich ΔP (wenn die Annahmen gelten, dass Basisabfluss, stehendes Volumen und lateraler Zufluss im Vergleich zum Oberflächenabflussvolumen klein sind).

Wenn jedoch ein höherer Wert von f_b benutzt wird (d.h. ein größerer Anteil des Upstream Catchment mit VFS ausgestattet ist), ändert sich das Bild erheblich und $\Delta P/EC_{sw}$ kann wesentlich geringer sein als ΔP (vgl. die konkaven Kurven). Die Frage ist nun, ob die SWAN-Szenarioannahmen (die nichts mit VFSMOD zu tun haben) realistisch sind, insofern der Pseudo-Einzugsgebietsansatz von FOCUS realistisch sein kann, oder ob sie zu günstig (d.h. günstiger als intermediate case) sind. Nach Meinung der Autoren sind für Ackerkulturen die SWAN-Annahmen ($f_b = f_t = f_{tb} = 0,2$), d.h. nur der Anteil des Upstream Catchment, der mit dem

simulierten Wirkstoff behandelt wird (in FOCUS 20 % der Fläche des Upstream Catchment Ac) ist mit grasbewachsenen Pufferstreifen ausgestattet; der "unbehandelte" Anteil hat keine VFS, nicht sinnvoll:

- Erstens sind grasbewachsene Pufferstreifen (VFS) Strukturen mit permanenter Vegetation. Sie werden nicht für eine einzelne Saison speziell für die Applikation eines bestimmten PSM installiert und anschließend wieder entfernt.
- Zweitens verlangen die EU Cross Compliance Richtlinie und die gute fachliche Praxis im Pflanzenschutz, dass auf Ackerflächen Rotation durchgeführt wird. Es können also theoretisch alle Ackerflächen im Upstream Catchment (UC) potenziell mit der zu simulierenden Kultur bepflanzt und mit dem zu simulierenden PSM behandelt werden, wenn auch nicht in der selben Anbauperiode. Folglich sollten alle Ackerflächen im UC mit VFS ausgestattet sein. Es ist jedoch hinlänglich bekannt, dass in der Praxis längst nicht alle Ackerflächen Pufferstreifen besitzen (unabhängig von der Frage, um welchen Typ von VFS es sich dabei handelt, s. Kap. II.7.9).

Angesichts der Tatsache, dass in FOCUSStep3 das hydrologische Signal des Upstream Catchment identisch ist mit dem hydrologischen Signal des 1-ha-Feldes (da das von PRZM berechnete Oberflächenabflussvolumen einfach auf das UC hochskaliert wird), ist es wahrscheinlich, dass das gesamte Upstream Catchment die gleiche Landnutzung hat wie das Feld. Man kann sich verschiedene Lösungen für die Parametrisierung des UC in GERDA überlegen:

- a) Das gesamte UC ist ackerbaulich genutzt und mit VFS ausgestattet ($fb = 1$). Dies ist logisch konsistent (s.o.), führt aber zu einem extrem worst case für die PECsw-Werte.
- b) Nur ein Teil des UC ist ackerbaulich genutzt und nur der ackerbaulich genutzte Anteil ist mit VFS ausgestattet. Allerdings sollte dann der nicht-ackerbauliche genutzte Teil (z.B. Weide, Wiese oder Forst) weniger und seltener Oberflächenabfluss produzieren. Diese würde die Berechnung der Wasserflüsse im modifizierten p2t-File erheblich verkomplizieren.
- c) Als Kompromiss wird von den Autoren vorgeschlagen: Das gesamte UC ist ackerbaulich genutzt, jedoch nicht vollständig mit VFS ausgestattet. Der Wert von $ft = 0.2$ (ft = Anteil des Upstream Catchment, der am gleichen Tag mit dem simulierten Wirkstoff behandelt wird) wird beibehalten. fb wird auf einen realistischen Wert >0.2 und <1 gesetzt; bspw. $fb = 0.6$. Dies würde für den FOCUS stream bedeuten, dass von der nicht mit dem zu simulierenden PSM behandelten Fläche (80 % des UC) die Hälfte mit VFS ausgestattet ist und die andere nicht.

Für Dauerkulturen findet logischerweise keine Rotation statt. Hier ist die Frage, welcher Anteil des UC mit der betreffenden Kultur (z.B. Wein) bedeckt sein sollte. Auch hier gelten die gleichen Erwägungen wie oben für Ackerkulturen:

- Nachdem in FOCUS Step3 das hydrologische Signal des Upstream Catchment identisch ist mit dem hydrologischen Signal des 1-ha-Feldes, ist es wahrscheinlich, dass das gesamte UC die gleiche Landnutzung hat wie das 1-ha-Feld (z.B. Wein).
- Die Erzeugung eines modifizierten p2t-Files für zwei verschiedene Landnutzungen im UC ist mit erheblichen Schwierigkeiten verbunden.

Man sollte deshalb vermutlich auch für Dauerkulturen bei der Annahme bleiben, dass das gesamte UC die gleiche Landnutzung hat wie das 1-ha-Feld (siehe Buchstabe c) für Ackerkulturen.

II.7.3.2 Analytische Herleitung von ΔPEC_{sw} für den FOCUS pond

Auch hier ist die Grundidee, die $PEC_{sw,max,step4}$ (PRZM-VFSMOD-TOXSWA) abzuleiten und sie mit $PEC_{sw,max,step3}$ (PRZM-TOXSWA) in Beziehung zu setzen, um die relative Reduktion von $PEC_{sw,max}$ (ΔPEC_{sw}) auszurechnen.

Im allgemeinen Fall, unter den folgenden Bedingungen

- nicht sehr stark sorbierende Substanzen (bspw. für $K_{oc} \leq 10000$ L/kg),
- Basisabfluss und lateraler Zufluss vom Feld sind klein im Vergleich zum Oberflächenabflussvolumen (was nicht immer der Fall ist),
- keine nennenswerten PSM-Konzentrationen in der gelösten Phase der Wassersäule des Ponds als Rückstände früherer Runoff- oder Drifteintragsereignisse,

kann $PEC_{sw,max,step3}$ angenähert werden als

$$PEC_{sw,max,step3} = \frac{A_f * M}{A_f * V + V_{po}} \quad (\text{Gl. II.7-10})$$

mit

M PSM-Runoffaustrag aus dem Feld (PRZM-Output; $\text{mg m}^{-2} \text{h}^{-1}$)

V Oberflächenabflussvolumen, das das Feld verlässt (PRZM-Output; mm h^{-1})

A_f Fläche des behandelten Feldes (m^2)

V_{po} stehendes Wasservolumen des Ponds (L)

$PEC_{sw,max,step4}$ (nach Reduktion des Oberflächenabflussvolumens und der gelösten PSM-Fracht durch grasbewachsene Pufferstreifen (VFS)) ist dann gegeben als

$$PEC_{sw,max,step4} = \frac{A_f * M (1 - frf)}{A_f * V (1 - frv) + V_{po}} \quad (\text{Gl. II.7-11})$$

mit

frf fraktionale Reduktion der gelösten PSM-Fracht im Oberflächenabfluss ($frf = \Delta P / 100$)

frv fraktionale Reduktion des Oberflächenabflussvolumens ($frv = \Delta R / 100$)

ΔPEC_{sw} wird analog zu ΔP und ΔR wie folgt definiert:

$$\Delta PEC_{sw} = \frac{PEC_{sw,max,step3} - PEC_{sw,max,step4}}{PEC_{sw,max,step3}} * 100\% = \left(1 - \frac{PEC_{sw,max,step4}}{PEC_{sw,max,step3}}\right) * 100\% \quad (\text{Gl. II.7-12})$$

Einsetzen von Gl. II.7-10 und Gl. -11 in Gl. -12 ergibt

$$\Delta PEC_{sw} = \left(1 - \frac{\frac{A_f * M (1 - frf)}{A_f * V (1 - frv) + V_{po}}}{\frac{A_f * M}{A_f * V + V_{po}}}\right) * 100\% = \left(1 - \frac{(1 - frf)}{\frac{A_f * V (1 - frv) + V_{po}}{A_f * V + V_{po}}}\right) * 100\%$$

$$\text{deltaPEC}_{sw} = \left(1 - \frac{(1 - frf)(Af * V + Vpo)}{Af * V(1 - frv) + Vpo}\right) * 100\% \quad (\text{Gl. II.7-13})$$

Im Falle $Vpo \gg Af * V$ kann die Lösung angenähert werden als:

$$\text{deltaPEC}_{sw} = \left(1 - \frac{(1 - frf)Vpo}{Vpo}\right) * 100\% = (1 - (1 - frf)) * 100\% = frf * 100\% = \text{deltaP} \quad (\text{Gl. II.7-14})$$

Für den FOCUS pond beträgt $Vpo = 900000$ L. Für ein Runoffereignis mit 20 mm Oberflächenabflusshöhe beträgt das gesamte Oberflächenabflussvolumen, das das Feld verlässt, $Af * V = 4500 \text{ m}^2 * 20 \text{ mm} = 90000$ L, d.h. nur 1/10 des stehenden Wasservolumens. Damit können wir, mit Ausnahme extremer Runoffereignisse, die Annahme verwenden, dass $Vpo \gg Af * V$ ist und folglich die Näherung, dass deltaPEC_{sw} gleich deltaP ist.

Es ist jedoch zu beachten, dass dies nur gilt, wenn in der Wassersäule des Ponds keine nennenswerten PSM-Rückstandskonzentrationen von früheren Runoff- oder Drifteintragsereignissen vorhanden sind. Tatsächlich wird für den FOCUS Pond in der Simulationsstudie, die in den Kap. II.7.4 und II.7.5 beschrieben wird, für das Runoffereignis am 07.10.1982 beobachtet, dass die Gegenwart von Rückständen vom Drifteintragsereignis 4 Tage vorher (Applikation am 03.10.1982) im Pond zu Verhältnissen $\text{deltaPEC}_{sw}/\text{deltaP}$ von bis zu einem Minimum von 0,29 führte (für die Parameterkombination $Koc = 100 \text{ L/kg}$, $FWIDTH = 0,3 \text{ m}$, $VL = 5 \text{ m}$).

II.7.4 Neue Version von VFSSMOD (mit Option Wasserspiegel)

Einführung

Die Gegenwart eines hochanstehenden Wasserspiegels unter dem VFS kann die Gesamtinfiltration im Vergleich zu einer Situation ohne Wasserspiegel deutlich reduzieren. Beispiele weltweit verbreiteter Flächen, wo diese Bedingungen saisonal oder permanent auftreten, sind feuchte Ebenen, Auenbereiche (floodplains) und Böden mit wenig durchlässigen oder undurchlässigen Horizonten, die in Stauwasserspiegeln (perched water table) resultieren (Muñoz-Carpena et al., in preparation).

Neuere Versionen von VFSSMOD können hochanstehende Wasserspiegel simulieren (Muñoz-Carpena et al., 2011). Dies ist besonders wichtig für VFS, die an Oberflächengewässer grenzen, oder für Böden mit Stauhorizont. Es werden vier unterschiedliche untere Randbedingungen angeboten:

- BC0: kein Wasserspiegel (dies ist die Bedingung, die in SWAN-VFSSMOD implementiert ist)
- BC 1: Wasserspiegel mit Dupuit-Forchheimer-Annahmen (von Rafael Muñoz-Carpena als Standardeinstellung empfohlen (“most relevant in field situations”))
- BC 2: Wasserspiegel mit vertikalem gesättigtem Fluss und Gradient von 1
- BC 3: Wasserspiegel mit vereinfachter Methode.

Hier ist zu beachten, dass BC1, BC2 und BC3 erst dann effektiv werden, wenn die Infiltrationsfront den Wasserspiegel (initialwater table WTD) erreicht hat und damit das gesamte Profil gesättigt ist.

Lower boundary conditions in VFSDMOD mit "shallow water table"

Die verschiedenen unteren Randbedingungen sollen im Folgenden erklärt werden. Man muss hier zwischen zwei Phasen während des Infiltrationsereignisses unterscheiden:

- A) bevor das Profil komplett aufgesättigt ist, und
- B) nach Erreichen der Sättigung.

Die drei Randbedingungen BC1, BC2 and BC3 werden erst dann effektiv, wenn das gesamte Profil gesättigt ist.

A) Vor Sättigung des Profils

Zu Beginn des Ereignisses ist der Boden oberhalb des Wasserspiegels im hydrostatischen Gleichgewicht mit dem Wasserspiegel, d.h. die Gradienten des Matrixpotentials und des Gravitationspotenzials gleichen einander aus.

Die Befeuchtungsfront (wetting front) dringt von der Bodenoberfläche nach unten (mittels des Green-Ampt-Infiltrationsalgorithmus) und sättigt das Profil von oben auf (Abb. II.7-7). Sobald die Befeuchtungsfront den oberen Rand des Kapillarsaums (capillary fringe) erreicht hat ($t = t_w$), ist das Profil komplett gesättigt und die Randbedingung ändert sich.

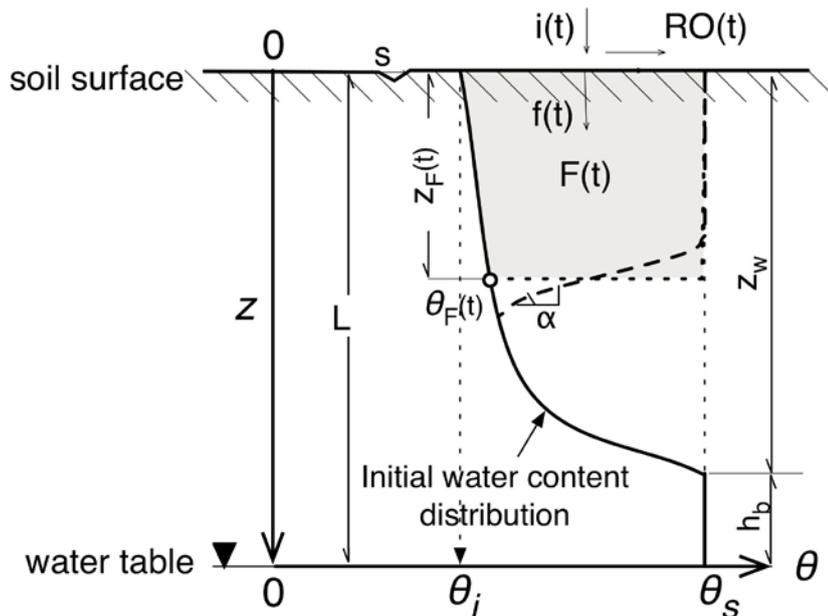


Abb. II.7-7: Infiltrations- und Redistributionshypothese für Böden mit hochanstehendem Wasserspiegel in hydrostatischem Gleichgewicht, vor Erreichen der Sättigung (d.h. bevor die Befeuchtungsfront den Kapillarsaum erreicht (Abbildung aus Munoz-Carpena et al., in preparation). Die Dicke des Kapillarsaums h_b entspricht der Saugspannung am Lufteintrittspunkt h_b des Bodens. z = vertikale Koordinate (positiv nach unten), L = Wasserspiegeltiefe, $z_F(t)$ = Tiefe der Befeuchtungsfront, $F(t)$ = kumulative Infiltration.

B) Nach Erreichen der Sättigung

BC1: Horizontaler Fluss mit Dupuit-Forchheimer-Annahmen

Salvucci und Entekabi (1995) sowie Liu et al. (2011) schlugen vor, dass die Infiltrationsrate gleich der vertikalen gesättigten Leitfähigkeit ist, wenn das Profil gesättigt ist. Dies impliziert, dass der vertikale hydraulische Gradient am initialen Wasserspiegel 1 ist (vgl. Darcy's Law). Jedoch ist in den meisten Situationen im Feld, wenn die Befeuchtungsfront den Wasserspiegel erreicht hat, der hydraulische Gradient im Profil kleiner als 1, so dass die vorgeschlagene Lösung die finale Infiltrationsrate ggf. überschätzt (Munoz-Carpena et al., in preparation).

Stattdessen ist eine andere Lösung in Betracht zu ziehen: Für $t \geq t_w$ stellt der initiale Wasserspiegel eine zero-flux-Randbedingung dar (aufgrund eines hydraulischen Gradienten von 0). Der Infiltrationsfluss an der Oberfläche (Q_f) wird nur durch lateralen Abfluss (Q_L) an der hangabwärts gelegenen Grenze des simulierten Boden-Elementarvolumens gewährleistet (Abb. II.7-8).

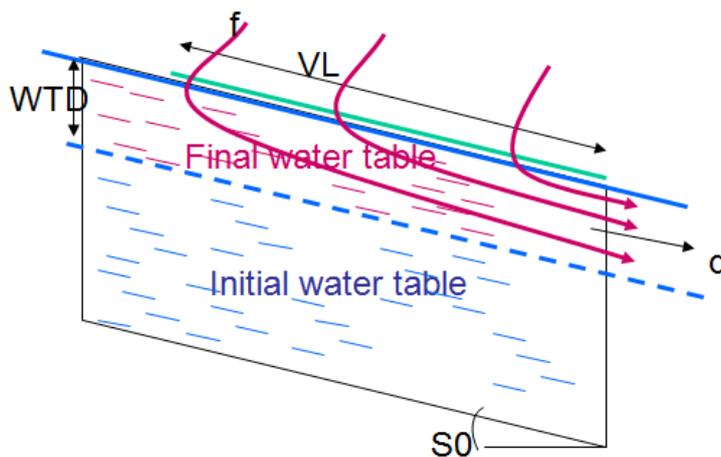


Abb. II.7-8: Konzeptualisierung von BC1. Abbildung von N. Carluer, zur Verfügung gestellt von Rafael Muñoz-Carpena.

Wenn man berücksichtigt, dass für $t \geq t_w$ das gesamte Profil gesättigt ist und den folgenden vier Dupuit-Forchheimer-Annahmen folgt (weiterführende Informationen zur Dupuit-Forchheimer-Theorie s. u.a.: <http://content.alterra.wur.nl/Internet/webdocs/ilri-publicaties/publicaties/Pub162/pub162-h7.2.pdf>):

- 1) der Fluss ist horizontal an jedem beliebigen vertikalen Querschnitt,
- 2) die Fließgeschwindigkeit ist konstant über die Tiefe,
- 3) die Fließgeschwindigkeit wird mit der Neigung der freien Wasseroberfläche als hydraulischer Gradient berechnet,
- 4) die Neigung des Wasserspiegels ist relativ gering,

dann kann der Abfluss folgendermaßen abgeschätzt werden (Munoz-Carpena et al., in preparation; vgl. auch Abb. II.7-9):

$$Q_f = f_w * w * b$$

$$Q_L = K_{sh} * S * L * w$$

mit

Q_f Infiltrationsfluss an der Bodenoberfläche ($V T^{-1}$)

- f_w Infiltrationsrate an der Bodenoberfläche ($L T^{-1}$)
- w Breite der Oberfläche des Elementarvolumens (L); entspricht dem VFSSMOD-Parameter FWIDTH
- b Länge der Oberfläche des Elementarvolumens (L); entspricht VFSSMOD-Parameter VL
- Q_L lateraler Fluss an der hangabwärts gelegenen Grenzfläche ($V T^{-1}$)
- K_{sh} *horizontale* gesättigte Leitfähigkeit ($L T^{-1}$)
- S Neigung des initialen Wasserspiegels ($L L^{-1}$)
- L Tiefe des initialen Wasserspiegels (L)

Wenn S als gleich der Hangneigung der Bodenoberfläche S_0 angenommen wird (wie es oft in der hydrologischen Modellierung von Hängen gemacht wird), ergibt sich

$$f_w = K_{sh} * S_0 * L / b$$

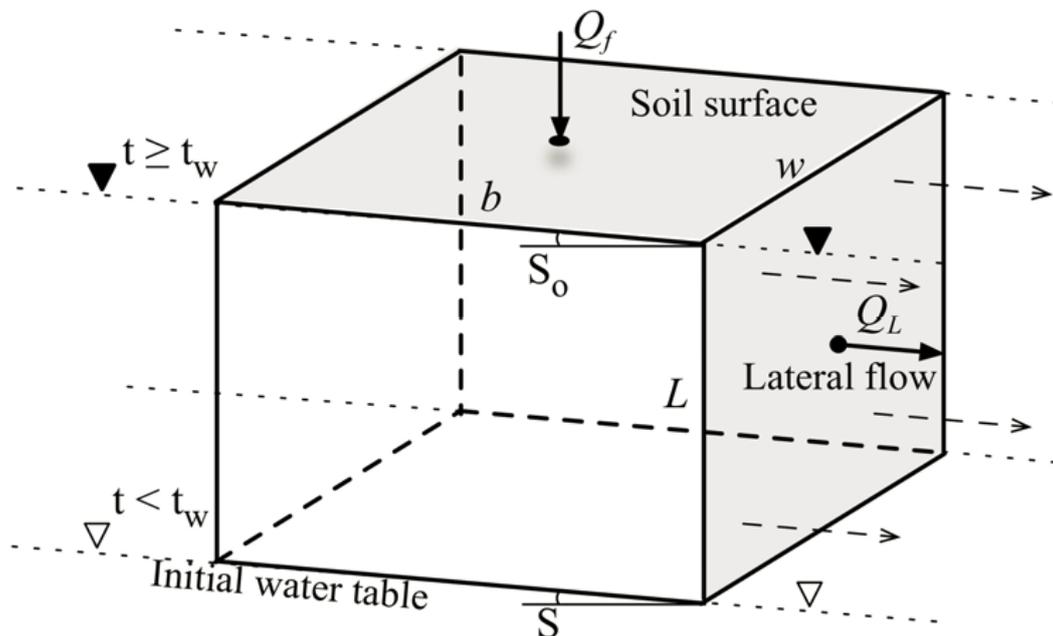


Abb. II.7-9: Infiltrations- und Redistributionshypothese für Böden mit hochanstehendem Wasserspiegel in hydrostatischem Gleichgewicht, nach Erreichen der Sättigung, d.h. nachdem die Befeuchtungsfront den Kapillarsaum erreicht hat (Abbildung aus Munoz-Carpa et al., in preparation).

BC2: Vertikaler gesättigter Fluss

BC2 nimmt vertikalen gesättigten Fluss an (z.B. Salvucci and Entekhabi, 1995), wobei die Infiltrationsrate f_w gleich der vertikalen gesättigten Leitfähigkeit K_s ist. Dies entspricht einem hydraulischen Gradienten von 1 am initialen Wasserspiegel, was in den meisten Situationen im Feld nicht realistisch ist.

BC3: Simplified

BC3 ist eine vereinfachte Bedingung mit $f_w = K_{sh} * S_0$.

Diese Randbedingung wurde für Testzwecke für einen Spezialfall implementiert und sollte nicht für allgemeine Anwendungen benutzt werden (Munoz-Carpena, personal communication, 2014).

II.7.5 Modellierungsstudie

II.7.5.1 Zielsetzung der Modellierungsstudie

1) Ermittlung der Effekte

- der Präsenz eines hochanstehendem Wasserspiegel (untere Randbedingung + initiale-Wasserspiegeltiefe)
- der Länge der Simulationsperiode
- der Abflusskonzentration

auf die Reduktionseffizienzen von VFS für die FOCUSsw-Szenarien:

- Reduktionseffizienzen für die gesamte PRZM (p2t)-Zeitreihe: delta PECsw/PECsed
- eventbasierte Reduktionseffizienzen: deltaR, deltaQ, deltaE, deltaP etc.

2) Ableiten einer Beziehung zwischen der Reduktion von PECsw,max und potenziellen erklärenden Variablen

- erste Menge potenzieller Variablen (PRZM-Output und VFSSMOD-Output): RUNF, PRECIP, ESLS, deltaP, deltaR, deltaQ, deltaE
- zweite Menge potenzieller Variablen (PRZM-Output und Szenarioeinstellungen): PRECIP, RUNF, ESLS, wb_type, scenarionr, appmonth, txwperiod, BC, WTD, FWIDTH, VL, Koc.

II.7.5.2 Simulationsdesign

Es wird hier keine Sensitivitätsanalyse unternommen, sondern verschiedene Optionen sollen direkt verglichen werden. Es wurde deshalb ein komplett faktorielles Design gewählt. Die zu variierenden Inputvariablen werden in den folgenden Abschnitten detailliert aufgeführt.

II.7.5.2.1 Substanzparameter

Nur zwei verschiedene Substanzen (zwei unterschiedliche Koc-Werte: 100 L/kg and 10000 L/kg; alle anderen Eigenschaften fix) wurden simuliert. Die Applikationsrate wurde auf 1000 g/ha festgelegt.

Tab. II.7-1: Fixe Inputparameter.

Name	Beschreibung	Einheit	Wert
degHLsoil	Abbauhalbwertszeit im Boden @20 °C	d	100
nf	Freundlich-Exponent nf	-	0,9
degHLwc	Abbauhalbwertszeit in der Wassersäule	d	30
degHLsed	Abbauhalbwertszeit im Gewässersediment	d	30
foliarWC	foliar washoff coefficient	1/cm	0,5
PUF	plant uptake factor	-	0,5
vp	Dampfdruck bei Referenztemperatur	mPa	1,0e-3
watersolub	Wasserlöslichkeit bei Referenztemperatur	mg/L	100

II.7.5.2.2 Kulturen

Nicht jede FOCUS-Kultur ist für jedes FOCUSsw-Szenario parametrisiert worden. Tatsächlich gibt es keine Kultur, die in allen 4 R&E-Szenarien auftritt. Es wurde nur eine typische Kultur für jedes Szenario simuliert → 4 Kombinationen.

Tab. II.7-2: Kombinationen von FOCUS-Szenario und simulierter Kultur.

FOCUSsw scenario	zu simulierende Winterkultur	zu simulierende Sommerkultur
R1	Wintergetreide	
R2		Mais
R3	Wintergetreide	
R4	Wintergetreide	

II.7.5.2.3 Gewässertypen

Nicht alle möglichen Kombinationen von FOCUSsw R+E-Szenario und Gewässertyp treten in FOCUSsw auf. Tatsächlich gibt es nur 5 Kombinationen statt 12. Dies muss im Simulationsdesign berücksichtigt werden.

Tab. II.7-3: In FOCUS auftretende Kombinationen von FOCUS R+E-Szenarien und Gewässertypen (FOCUS, 2001).

Scenario	Inputs	Slope (%)	Soil type	Water body type(s)
R1	Runoff + Drift	2 – 4	Light silt	Pond, stream
R2	Runoff + Drift	10 – 30	Light loam	Stream
R3	Runoff + Drift	0 – 15.5	Heavy loam	Stream
R4	Runoff + Drift	2 – 10	Medium loam	Stream

II.7.5.2.4 PSM-Applikationsszenarien

- Die Aufwandmenge wurde auf 1000 g/ha fixiert.
- Drei verschiedene Applikationsmonate wurden ausgewählt: März, Juni und Oktober (Zieldatum: immer der 1. des Monats). Auf diese Weise werden alle drei 12-Monats-Evaluierungsperioden von FOCUS R+E abgedeckt.

II.7.5.3.5 VFSSMOD-Einstellungen

Untere Randbedingung und Wasserspiegeltiefe

Vier verschiedene untere Randbedingungen sind zu untersuchen:

- kein Wasserspiegel (BC0)
- Wasserspiegel mit Dupuit-Forchheimer-Annahmen (BC1)
- Wasserspiegel mit vertikalem gesättigtem Fluss (BC2)
- Wasserspiegel mit vereinfachter Methode (BC3)

Abgesehen davon sind unterschiedliche Wasserspiegeltiefen (WTD) zu testen: 1 m, 2 m, 3 m. Dies ist nur für $BC > 0$ von Bedeutung, so dass die Anzahl der resultierenden Kombinationen von BC und WTD 10 beträgt.

Effektive Fließbreite des Filterstreifens (FWIDTH)

Die effektive Fließbreite des VFS (FWIDTH) ist unter uniformen, flächenhaften Abflussbedingungen identisch zur tatsächlichen Breite des VFS senkrecht zur Hauptfließrichtung. FWIDTH wird aber kleiner, wenn der Oberflächenabfluss sich konzentriert (Fox et al., 2010).

Um die Lagebeziehung zwischen der source area (Feld) und dem VFS für die FOCUS-Szenarien korrekt abzubilden, wurde in dieser Studie die Größe „field_outlet_width“ (Feldauslassbreite) als die Länge der Feldrandstrecke definiert, durch welche der Oberflächenabfluss und erodiertes Bodenmaterial das Feld verlassen. Dies ist trivial für das quadratische 1-ha-Feld, das für den FOCUS stream benutzt wird. Es ist jedoch nicht trivial für das 0.45-ha-Feld, das den FOCUS pond umgibt.

FWIDTH kann also als Fraktion von field_outlet_width ausgedrückt werden. 5 verschiedene Stufen von FWIDTH werden simuliert:

- identisch mit field_outlet_width (keine Abflusskonzentration)
- $0,5 * \text{field_outlet_width}$
- $0,1 * \text{field_outlet_width}$
- $0,05 * \text{field_outlet_width}$
- $0,01 * \text{field_outlet_width}$ (Konzentrierung des Oberflächenabflusses um Faktor 100)

Länge des Filterstreifens in Fließrichtung (VL)

VL bezeichnet die Länge des VFS in Fließrichtung (üblicherweise in Richtung des Gefälles). Hinweis: Dies ist die Größe, die gemeinhin als Pufferstreifen*breite* bezeichnet wird.

Vier verschiedene Stufen von VL werden simuliert:

- 5 m
- 10 m
- 20 m
- 30 m

II.7.5.3.6 Länge der Simulationsperiode

Zwei verschiedene Längen der Simulationsperiode sind für die PRZM-VFSMOD-TOXSWA Kopplung zu testen:

- 12 Monate (nur die in FOCUSsw ausgewählte Periode, in Abhängigkeit von der Applikationssaison)
- 240 Monate (gesamte PRZM-Output-Zeitreihe).

II.7.5.3.7 Übersicht zu den durchgeführten Simulationsläufen

Da nicht alle Kombinationen von Szenario und Wasserkörper auftreten, wurden die Analysen getrennt für die beiden Gewässertypen Stream und Pond durchgeführt.

- R+E / stream
 - 2 (substances) *
 - 4 (scenario / crop) *
 - 3 (application month) *
 - 10 (lower boundary condition of VFSSMOD / water table depth) *
 - 5 (effective flow width FWIDTH) *
 - 4 (filter strip length in flow direction VL) *
 - 2 (length of simulation period)
 - = 9600 simulation runs

- R + E / pond
 - 2 (substances) *
 - 1 (scenario / crop) *
 - 3 (application month) *
 - 10 (lower boundary condition of VFSSMOD / water table depth) *
 - 5 (effective flow width FWIDTH) *
 - 4 (filter strip length in flow direction VL) *
 - 2 (length of simulation period)
 - = 2400 simulation runs

Außerdem, um Reduktionseffizienzen für PEC_{sw}/PEC_{sed} berechnen zu können, wurden PRZM/TOXSWA-Kontrollsimulationen (also ohne VFSSMOD) durchgeführt.

- R+E / stream control
 - 2 (substances) *
 - 4 (scenario / crop) *
 - 3 (application month) *
 - 2 (length of simulation period)
 - = 48 simulation runs

- R + E / pond control
 - 2 (substances) *
 - 1 (scenario / crop) *
 - 3 (application month) *
 - 2 (length of simulation period)
 - = 12 simulation runs

Tab. II.7-4: Anzahl der Simulationsläufe für die vorliegende Modellierungsstudie.

Eintragspfad / Szenariotyp	Gewässertyp	Anzahl der PRZM/VFSSMOD/TOXSWA Simulationen	Anzahl der PRZM/TOXSWA-Kontrollsimulationen
R+E	Stream	9600	48
R+E	Pond	2400	12

II.7.5.3.8 Übersicht zu den variierten Faktoren und deren Werten

Koc:

- 100 L/kg
- 10000 L/kg

Untere Randbedingung (BC):

- 0 (no water table)
- 1 (Dupuit-Forchheimer)
- 2 (vertical saturated flow)
- 3 (simplified)

Initiale Wasserspiegeltiefe (WTD):

- 1 m
- 2 m
- 3 m

Effektive Fließbreite des VFS (FWIDTH):

- equal to field width
- 0,5 * field width
- 0,1 * field width
- 0,05 * field width
- 0,01 * field width

Länge des VFS in Fließrichtung (VL):

- 5 m
- 10 m
- 20 m
- 30 m

Länge der Simulationsperiode von VFSSMOD/TOXSWA (PRZM läuft hier immer über 20 Jahre):

- 12 Monate
- 240 Monate

PSM-Applikationsmonat

- März (3)
- Juni (6)
- Oktober (10)

II.7.5.3 Unterschiede der entwickelten PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Kopplung zu SWAN-VFSMOD

Tab. II.7-5: Unterschiede der entwickelten PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Kopplung zu SWAN-VFSMOD.

Gegenstand	SWAN-VFSMOD	PRZM-VFSMOD-TOXSWA UBA	Anmerkungen
Länge der Simulationsperiode	fix (12 Monate)	flexibel (12 oder 240 Monate)	---
Konz. des erodierten Sediments im einströmenden Oberflächenabfluss (CI)	Bug: Unterschätzung um Faktor 2.2 (Einheitenfehler)	korrekte Berechnung	Der Bug geht auf eine Fehlinterpretation der Einheit der Spalte "erosion mass" im p2t file zurück: Die Einheit ist kg/h und nicht kg/(ha*h)
Felddimensionen für den Teich (pond)	SWIDTH = 100 m, SLENGTH = 100 m (d.h. gleiche Werte wie für den Stream)	SWIDTH = 60 m, SLENGTH = 75 m	Die source area wird von VFSMOD intern als SWIDTH * SLENGTH berechnet. Folglich muss SWIDTH * SLENGTH 0.45 ha ergeben, um zur Szenariodefinition des FOCUSsw pond zu passen. Die Geometrie des Feldes (welches die source area darstellt) ist für den FOCUS pond kompliziert, da das Feld nicht quadratisch ist und um den Pond herum liegt. Um die richtige source area von 0.45 ha zu erreichen, wurden SWIDTH = 60 m and SLENGTH = 75 m angenommen.
FWIDTH für den Pond	100 m (i.e. same value as for stream)	30 m (Basiswert in Abwesenheit von Abflusskonzentration)	Die Länge des Feldstreifens, der Erosionseinträge beisteuert, ist in FOCUSsw für den Pond auf 30 m gesetzt. Daher wird die Größe field_outlet_width (kein VFSMOD-Parameter; definiert als die Länge der Feldrandstrecke, durch welche Oberflächenabfluss und erodiertes Bodenmaterial das Feld verlassen) ebenfalls auf 30 m gesetzt. Folglich beträgt der Basiswert von FWIDTH (ohne Abflusskonzentration) ebenfalls 30 m.
Möglichkeit, Abflusskonzentration zu simulieren	Nein	ja	FWIDTH kann in SWAN-VFSMOD vom Nutzer nicht verändert werden (default-Wert: 100 m).
Runoff-Hydrograph	rechteckig	dreieckig (triangulär)	Rafael Muñoz-Carpena empfiehlt einen dreieckigen Hydrographen, um numerische Probleme (kinematischer Schock) zu vermeiden; vgl. technische Notiz Tech_Note_Field_Hydrograph_VFSMOD.pdf
hochanstehender Wasserspiegel	Nein	abwesend oder vorhanden (wenn vorhanden, drei verschiedene untere Randbedingungen für den Wasserspiegel)	Wenn ein hochanstehender Wasserspiegel simuliert werden soll, benötigt VFSMOD zusätzliche Inputparameter (Van Genuchten alpha, N, m). Diese sind mit den HYPRES-Pedotransferfunktionen nach Woesten et al. (1998) aus den VFS-Bodeneigenschaften in Brown et al. (2012)

Achtung: In der von Footways für diese Modellierungsstudie entwickelten PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Kopplung sind die Werte von source area und field_outlet_width zwischen Stream und Pond unterschiedlich (1 ha vs. 0.45 ha bzw. 100 m vs. 30 m). Somit ist das Verhältnis source area/field_outlet_width für den Pond um den Faktor 1,5 höher als für den Stream. Für das gleiche Oberflächenabflussereignis und das gleiche Verhältnis FWIDTH/field_outlet_width erhält der Pond-VFS somit eine um 50 % höhere runoff depth (Runoffvolumen in L/m² VFS) higher als der Stream-VFS.

Die Simulationsstudie wurde mit der ausführbaren Datei vfm.exe v. 4.2.3 vom August 2013 durchgeführt.

II.7.5.4 Modifikation des p2t files mittels der VFSMOD-Ergebnisse

In der PRZM-VFSMOD-TOXSWA Simulationskette (ebenso wie in SWAN-VFSMOD oder in GERDA) wird das ursprüngliche p2t-File mittels der VFSMOD-Ergebnisse modifiziert. Das modifizierte p2t-File wird als Input für TOXSWA verwendet. Die folgenden Gleichungen werden für die Modifikation des p2t verwendet (identisch zu SWAN-VFSMOD und GERDA):

II.7.5.4.1 Modifikation des p2t für den Stream

1) Oberflächenabflussvolumen (Spalte 2 im p2t):

$$RV_{step4} = RV_{step3} * [A_f * (1 - frv) + A_c * (1 - F * frv)] / [A_f + A_c]$$

mit

RV_{step4} Oberflächenabflussvolumen (surface runoff volume) im neuen p2t file

RV_{step3} Oberflächenabflussvolumen im ursprünglichen p2t file

A_f Fläche des behandelten Feldes (ha) = 1 ha

A_c Fläche desUpstream Catchment (ha) = area_up = 100 ha

F behandelte Fraktion desUpstream Catchment = Ftreated_up = 0.2

frv fraktionale Reduktion des Oberflächenabflussvolumens durch den Pufferstreifen= deltaR/100 (berechnet von VFSMOD; hier muss deltaR und nicht deltaQ benutzt werden, wie Nachschlagen der Definitionen von deltaR and deltaQ im VFSMOD code bestätigt hat)

2) PSM-Fracht im Oberflächenabfluss (Spalte 3 im p2t):

$$RF_{step4} = RF_{step3} * (1 - frf)$$

mit

RF_{step4} PSM-Fracht im Oberflächenabfluss (pesticide runoff flux) im neuen p2t file

RF_{step3} PSM-Fracht im Oberflächenabfluss (pesticide runoff flux) im ursprünglichen p2t file

frf fraktionale Reduktion der PSM-Fracht im Oberflächenabfluss durch den Pufferstreifen= $\Delta P/100$ (berechnet von VFSSMOD; Achtung: ΔP unterscheidet nicht zwischen gelösten und partikelgebundenen Molekülen)

3) Fracht erodierten Sediments (Spalte 4 im p2t):

$$EMstep4 = EMstep3 * (1-fem)$$

mit

EMstep4 Fracht erodierten Sediments (eroded sediment load) im neuen p2t file

EMstep3 Fracht erodierten Sediments (eroded sediment load) im ursprünglichen p2t file

fem fraktionale Reduktion der Fracht erodierten Sediments durch den Pufferstreifen= $\Delta E/100$ (berechnet von VFSSMOD)

4) PSM-Fracht in erodiertem Sediment (Spalte 5 im p2t):

$$EFstep4 = EFstep3 * (1-fef)$$

mit

EFstep4 PSM-Fracht in erodiertem Sediment (pesticide erosion flux) im neuen p2t file

EFstep3 PSM-Fracht in erodiertem Sediment (pesticide erosion flux) im ursprünglichen p2t file

fef fraktionale Reduktion der PSM-Fracht in erodiertem Sediment durch den Pufferstreifen = $\Delta P/100$ (berechnet von VFSSMOD; Achtung: ΔP unterscheidet nicht zwischen gelösten und partikelgebundenen Molekülen)

II.7.5.4.2 Modifikation des p2t für den Pond

Gleiche Modifikationen wie für den Stream, mit einer Ausnahme:

1) Oberflächenabflussvolumen (Spalte 2 in p2t):

$$RVstep4 = RVstep3 * (1-frv)$$

mit

RVstep4 Oberflächenabflussvolumen im neuen p2t file

RVstep3 Oberflächenabflussvolumen im ursprünglichen p2t file

frv fraktionale Reduktion des Oberflächenabflussvolumens durch den Pufferstreifen = $\Delta R/100$ (berechnet von VFSSMOD; hier muss ΔR und nicht ΔQ benutzt werden, wie Nachschlagen der Definitionen von ΔR and ΔQ im VFSSMOD code bestätigt hat)

II.7.6 Auswertung der PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Simulationen

II.7.6.1 Erste Ergebnisse

Nach erster Auswertung der Simulationen sind folgende Ergebnisse festzuhalten.

- TOXSWA stürzt für die Szenarien R2, R3 und R4 ab, wenn die Simulationsperiode 240 Monate beträgt (numerische Probleme)
 - Ergebnisse für 240 Monate sind nur für R1 stream und R1 pond vorhanden
 - Dies bestätigt die Entscheidung, für das Tool GERDA statt TOXSWA das Modell STEPS-3 zu benutzen
- Verfügbare Ergebnisse:
 - 12000 Läufe mit VFSMOD-Ergebnissen für jedes Event:
 - deltaQ
 - deltaR
 - deltaE
 - deltaP
 - 8400 PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Läufe mit TOXSWA-Ergebnissen:
 - PECsw,max
 - PEDsed,max
 - TWACsw (1, 2, 4, 7, 14, 21, 28, 42, 50, 100 d)
 - TWACsed
 - 42 PRZM-TOXSWA-Kontrollläufe mit TOXSWA-Ergebnissen
 - PECsw,max
 - PEDsed,max
 - TWACsw (1, 2, 4, 7, 14, 21, 28, 42, 50, 100 d)
 - TWACsed
- 9 unabhängige Variablen → komplexes Design mit vielen Interaktionen
- Aufgrund der FOCUSsw-Szenariodefinition und der TOXSWA-Abstürzeweisen die verfügbaren Ergebnissen Asymmetrien auf im Hinblick auf die Besetzung der Faktorstufen-Kombinationen.
- Der große Umfang der Simulationen und der Ergebnisdateien erfordert eine systematische Auswertung, die allerdings im Rahmen des hier vorliegenden Projekts nicht zu leisten war.
- In den folgenden drei Abbildungen II.7-10 bis II.7-12 werden nur einige Beispiele gezeigt:
 - Effekt der unteren Randbedingung (BC) und der initialen Wasserspiegeltiefe (WTD)
 - Effekt von VFS-Fließlänge (VL) und effektiver Fließbreite (FWIDTH).

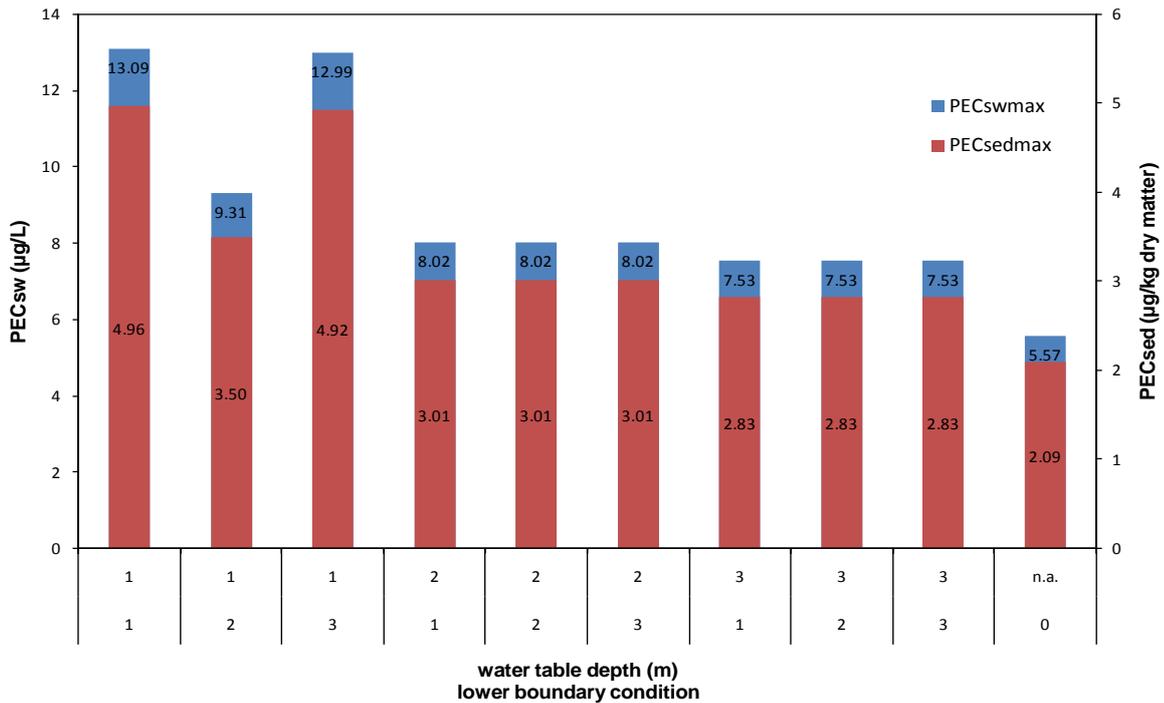


Abb. II.7-10: Effekt der unteren Randbedingung (BC) und der initialen Wasserspiegeltiefe WTD für ansonsten konstante Einstellungen: Szenario = R1 stream, Koc = 100 L/kg, Simulationsperiode = 240 Monate, Applikationsmonat = 10, VL = 20 m, FWIDTH = 100 m.

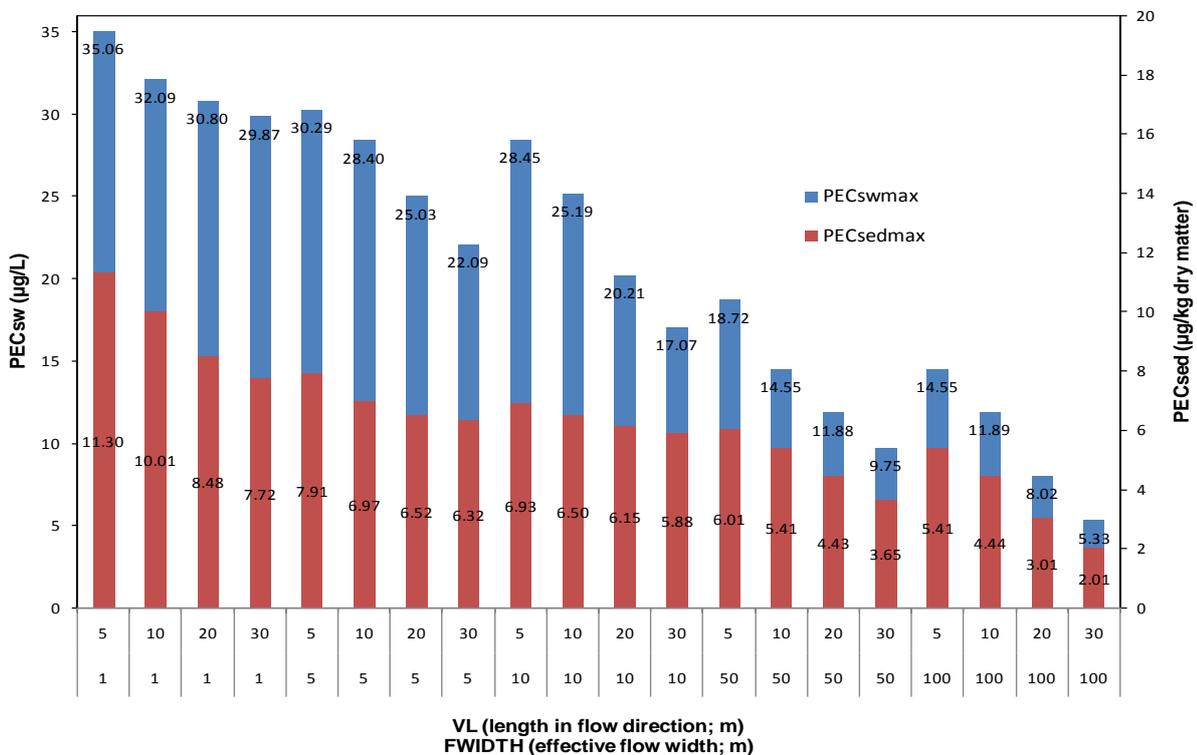


Abb. II.7-11: Effekt der VFS-Länge in Fließrichtung (VL) und der effektiven Fließbreite (FWIDTH) für ansonsten konstante Einstellungen: Szenario = R1 stream, Koc = 100 L/kg, Simulationsperiode = 240 Monate, Applikationsmonat = 10, lowerBC = 1, WTD = 2 m. Kontrollsimulation (ohne VFS): PEC_{sw,max} = 71.2 µg/L, PEC_{sed,max} = 13.1 µg/kg.

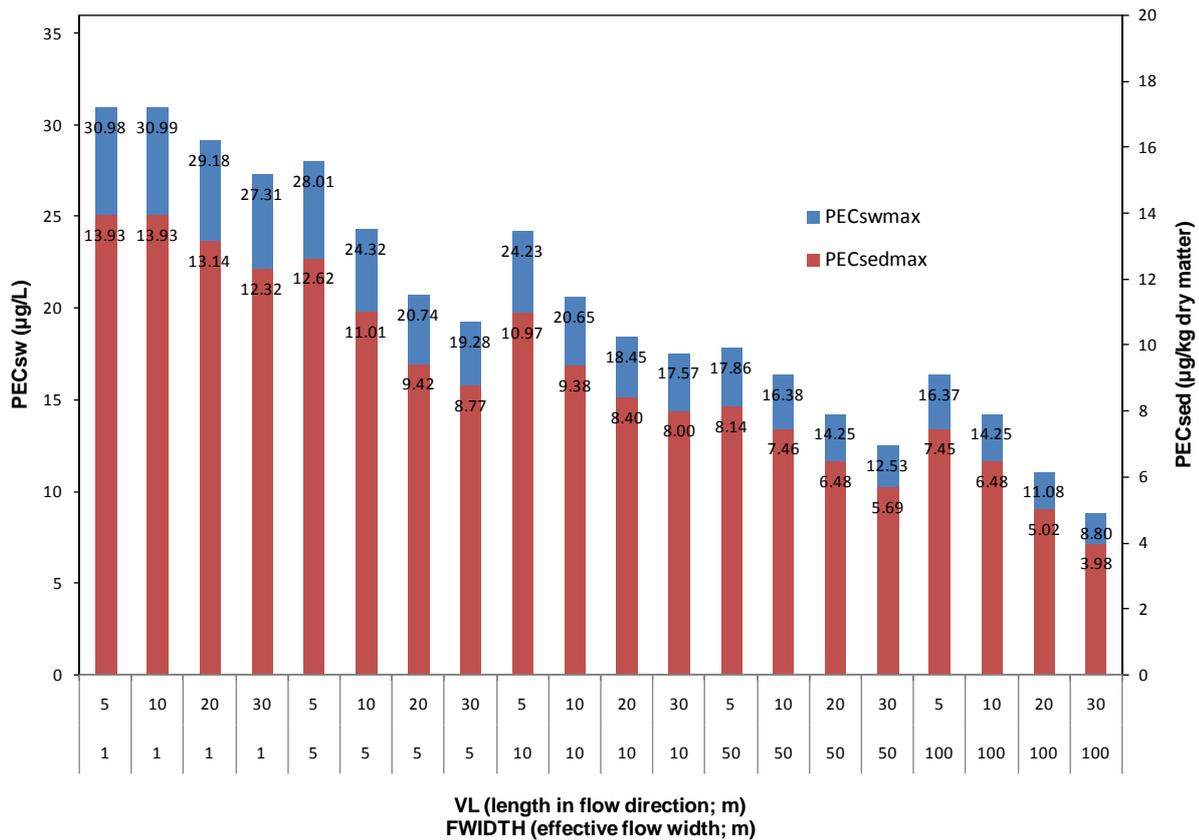


Abb. II.7-12: Effekt der VFS-Länge in Fließrichtung (VL) und der effektiven Fließbreite (FWIDTH) für ansonsten konstante Einstellungen: Szenario = R4 stream, Koc = 100 L/kg, Simulationsperiode = 12 Monate, Applikationsmonat = 10, lowerBC = 1, WTD = 2 m. Kontrollsimulation (kein VFS): PECsw,max = 30.97 µg/L, PECsed,max = 13.92 µg/kg.

Diese Beispiele können wie folgt interpretiert werden:

- Der Effekt von BC und WTD auf die PECsw,max und PECsed,max zeigt sich vor allem bei geringer hydraulischer Last (vgl. Lauvernet et al., 2011)
- VL und FWIDTH sind wesentlich wichtiger als die untere Randbedingung (BC) und die Wasserspiegeltiefe (WTD)
- Die PECsw,max ist für unterschiedliche Kombinationen von VL und FWIDTH schwierig zu vergleichen, da oft nicht das gleiche Event für PECsw,max verantwortlich ist.
- Worst case-Kombinationen von VL und FWIDTH
 - führen manchmal immer noch zu erheblicher PECsw,max-Reduktion
 - manchmal aber auch kein Effekt auf PECsw,max.

Ein Beispiel soll exemplarisch genauer betrachtet werden:

- Beispiel: VL = 5 m, FWIDTH = 1 m, R1 stream, Koc = 100 L/kg, 240 months, appmonth = 10, lowerBC = 1 (...), WTD = 2 m (...)
- Für PECsw,max verantwortliches Runoffereignis:
 - deltaQ = 8,8 % (relative Reduktion des gesamten Wasserzuflusses (einströmender Oberflächenabfluss + Regen auf den VFS))

- $\Delta R = 5,1 \%$ (relative Reduktion des einströmenden Oberflächenabflusses)
- $\Delta E = 9,8 \%$ (relative Reduktion der Sedimentfracht)
- $\Delta P = 50,0 \%$ (relative Reduktion der PSM-Fracht)

- ➔ Das bedeutet in diesem Beispiel, dass nur 5 % Reduktion des Runoffvolumens auftreten, aber 50 % Reduktion der PSM-Fracht (für eine relativ schwach sorbierende Substanz, die sich fast vollständig in der gelösten Phase befindet).
- ➔ Diese offensichtliche Diskrepanz wirft die grundsätzliche Frage auf, wie zuverlässig bzw. wie plausibel die multiple Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) ist, die in VFSSMOD zur Bewertung für ΔP benutzt wird?

Die Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) wird in Kap. II.7.8 eingehender diskutiert.

II.7.6.2 ΔP (relative Reduktion der PSM-Fracht) vs. ΔQ (relative Reduktion des gesamten Wasserzuflusses und ΔE (relative Reduktion der Sedimentfracht)

Das Verbinden („join“ in der Datenbank) der Ergebnisse der 8400 erfolgreichen PRZM-VFSSMOD-TOXSWA-Simulationen mit denen der 42 PRZM-TOXSWA-Kontrollsimulationen (FOCUS_{sw} Step 3) ergab 4995 Simulationen, wo die $PEC_{sw,max}$ sowohl für die PRZM-VFSSMOD-TOXSWA-Simulation als auch für die Kontrollsimulation durch das gleiche Runoffereignis verursacht wurde (vgl. Tab. II.7-6). Die Tabelle II.7-6 zeigt, dass in Bezug auf die Differenzterme (ΔP minus ΔQ), (ΔP minus ΔE) und (ΔP minus ΔR) erhebliche Unterschiede zwischen hohen und niedrigen Koc-Werten auftreten. Allerdings bedeuten die abweichenden Mittelwerte von Runf (Oberflächenabflussvolumen), Esls (Masse des erodierten Bodenmaterials), ΔQ und ΔE , dass die Runoff- und Erosionsereignisse zwischen den zwei Koc-Gruppen weitgehend unterschiedlich waren. Eine echte Vergleichbarkeit der drei Differenzterme zwischen den beiden Koc-Gruppen ist daher nicht gegeben.

Tab. II.7-6: Mittelwerte und mittlere Differenzen der Deltas für verschiedene Koc-Werte; Menge der 4995 $PEC_{sw,max}$ -Ereignisse aus 4995 PRZM-VFSSMOD-TOXSWA-Simulationen, in denen die $PEC_{sw,max}$ durch das gleiche Ereignis verursacht wurde wie in der Kontrollsimulation.

Koc	Runf	Esls	ΔQ	ΔE	ΔR	ΔP	mittlere abs. Differenz			Count
							$\Delta P - \Delta Q$	$\Delta P - \Delta E$	$\Delta P - \Delta R$	
L/kg	mm	kg	%	%	%	%	%	%	%	
100	5,19	48,40	28,01	96,41	19,04	56,59	28,58	-39,81	37,55	3389
10000	24,56	308,65	10,37	82,83	3,94	54,46	44,09	-28,37	50,52	1606

Tabelle II.7-7 enthält alle 8400 $PEC_{sw,max}$ -Ereignisse der 8400 erfolgreichen PRZM-VFSSMOD-TOXSWA-Simulationsläufe. Die Teilmengen der Simulationsläufe für die zwei Koc-Gruppen sind symmetrisch; das heißt, die 4200 PRZM-VFSSMOD-TOXSWA-Läufe für Koc = 100 L/kg unterscheiden sich von denen für Koc = 10000 L/kg nur hinsichtlich des Koc. Jedoch zeigen die abweichenden Mittelwerte von Runf, Esls, ΔQ und ΔE , dass die Runoff- und Erosionsereignisse, die die $PEC_{sw,max}$ verursacht haben, zwischen den beiden Koc-Gruppen nicht die gleichen waren.

Tab. II.7-7: Mittelwerte und mittlere Differenzen der Deltas für verschiedene Koc-Werte; Menge der 8400 PEC_{sw,max}-Ereignisse aus 8400 erfolgreichen PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Simulationen.

Koc	Runf	Esls	deltaQ	deltaE	deltaR	deltaP	mittlere abs. Differenz			Count
							deltaP - deltaQ	deltaP - deltaE	deltaP - deltaR	
L/kg	mm	kg	%	%	%	%	%	%	%	
100	5,73	52,92	34,48	97,05	24,56	60,86	26,37	-36,20	36,30	4200
10000	21,52	336,99	14,74	80,82	6,93	54,71	39,97	-26,11	47,78	4200

Tabelle II.7-8 enthält schließlich nicht nur die Oberflächenabflussereignisse, die für PEC_{sw,max} verantwortlich waren, sondern alle von VFSMOD simulierten Ereignisse. Die Sätze der Runoffereignisse sind identisch zwischen den beiden Koc-Gruppen. Die Ergebnisse werden getrennt dargestellt für verschiedene Kombinationen von Koc (100 oder 10000 L/kg), Wasserkörpertyp (Pond oder Stream) und untere Randbedingung (0 = kein Wasserspiegel, >0 = hochanstehender Wasserspiegel vorhanden).

Auf Basis von Tabelle II.7-8 können die folgenden Beobachtungen festgehalten werden:

- Vorhandensein oder Abwesenheit eines hochanstehenden Wasserspiegels
 - deltaQ ist im Mittel 5 - 6 % niedriger in Gegenwart eines hochanstehenden Wasserspiegels als in seiner Abwesenheit. Für deltaR beträgt die Differenz 7 - 8 %.
 - deltaE wird von der Gegenwart oder Abwesenheit eines hochanstehenden Wasserspiegels nicht beeinflusst.
 - deltaP ist im Mittel 2 - 3 % niedriger in Gegenwart eines hochanstehenden Wasserspiegels als in seiner Abwesenheit.
- Hoher oder niedriger Koc
 - deltaP ist im Mittel 6 % höher für Koc = 10000 L/kg als für Koc = 100 L/kg
 - Da deltaQ, deltaR und deltaE vom Koc unabhängig sind, bedeutet dies auch, dass für Koc = 10000 L/kg deltaP im Mittel 6 % näher an deltaE und 6 % weiter entfernt von deltaQ and deltaR liegt als für Koc = 100 L/kg
 - Für Koc = 100 L/kg war deltaP im Durchschnitt 14 - 20 % höher als deltaQ and 17 - 26 % höher als deltaR

(Prozentangaben bedeuten hier immer absolute Differenzen, da dies die Einheit von deltaQ etc. ist.)

Wenn man statt des Mittelwerts das Maximum berechnet, beträgt die größte Differenz zwischen deltaP und deltaQ 50,5 % für Koc = 100 L/kg und 60,9 % für Koc = 10000 L/kg.

Tab. II.7-8: Mittelwerte und mittlere Differenzen der Deltas für verschiedene Koc-Werte, getrennt für Wasserkörpertyp und Vorhandensein/Abwesenheit eines hochanstehenden Wasserspiegels; alle VFSSMOD-Ereignisse.

Koc	wb_ty pe	B C	Runf	Esls	del- taQ	del- taE	del- taR	del- taP	— mittlere abs. Differenz —			Count
									deltaP - deltaQ	deltaP - deltaE	deltaP - deltaR	
L/kg			mm	kg	%	%	%	%	%	%	%	
100	p	0	1,96	15,9 4	61,09	98,33	56,94	78,54	17,45	-19,79	21,59	26760
		>0	1,96	15,9 4	56,40	98,32	50,05	75,95	19,56	-22,37	25,91	240840
	s	0	4,61	58,8 2	62,61	96,54	60,04	76,61	14,00	-19,93	16,57	147468
		>0	4,61	58,8 4	56,89	96,53	52,21	73,08	16,18	-23,46	20,86	132726 6
1000 0	p	0	1,96	15,9 4	61,09	98,33	56,94	84,74	23,66	-13,58	27,80	26760
		>0	1,96	15,9 4	56,40	98,32	50,05	82,84	26,44	-15,49	32,79	240840
	s	0	4,61	58,8 2	62,61	96,54	60,04	82,35	19,74	-14,19	22,31	147468
		>0	4,61	58,8 4	56,89	96,53	52,21	79,63	22,73	-16,91	27,41	132726 6

II.7.6.3 Multiple Regressionsanalyse (MLR)

II.7.6.3.1 Einführung

Ausgangspunkt ist die Überlegung, für verschiedene abhängige Variablen und unterschiedliche Mengen von erklärenden unabhängigen Variablen multiple Regressionsgleichungen abzuleiten.

In Kap. II.7.3 wird gezeigt, dass für den FOCUS stream (mit den SWAN-Szenarioannahmen) und auch für den FOCUS pond $\text{deltaPEC}_{\text{sw}}$ näherungsweise gleich deltaP ist. Anstelle einer Regression für $\text{deltaPEC}_{\text{sw}}$ (berechnet aus dem TOXSWA-Output für Simulationen mit und ohne VFS) ist es daher ausreichend, eine Regression für den VFSSMOD-Output deltaP durchzuführen. Dies wiederum macht es unnötig, sich nur auf die Runoffereignisse zu beschränken, die für die globale $\text{PEC}_{\text{sw,max}}$ in TOXSWA verantwortlich sind. Stattdessen kann man alle mit VFSSMOD simulierten Oberflächenabflussereignisse analysieren.

deltaP ist eine bekannte Funktion von deltaQ and deltaE (die multiple Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009), die in VFSSMOD implementiert ist), so dass man vielleicht eher nach deltaQ und deltaE suchen sollte. Nichtsdestoweniger wurde der Vollständigkeit halber die Regressionsanalyse für die folgenden abhängigen Variablen durchgeführt:

- deltaP
- deltaQ
- deltaE
- deltaR

Die Analyse wurde für vier Teilmengen der VFSSMOD-Simulationsläufe durchgeführt:

- 1) wb_type = stream; kein hochanstehender Wasserspiegel simuliert:
- 2) wb_type = stream; hochanstehender Wasserspiegel simuliert
- 3) wb_type = pond; kein hochanstehender Wasserspiegel simuliert
- 4) wb_type = pond; hochanstehender Wasserspiegel simuliert

II.7.6.3.2 Material und Methoden

Aus den PRZM-VFSSMOD-TOXSWA-Simulationen waren folgende Outputdateien verfügbar:

- 12000 .zts files (PRZM output)
- 12000 .p2t output files (zts files disaggregiert zu stündlichen Werten)
- 12000 .vfsout files (eines für jeden PRZM-Lauf); jedes .vfsout enthält die VFSSMOD-Outputs für alle Runoffereignisse während der 20-jährigen Simulationsperiode

Für jede Kombination von runID und Datum wurde der Inhalt der vfsout files mit dem Inhalt der zts files verbunden und in MS Access importiert. Dies ergab je eine große Tabelle für Stream und Pond:

- pond: 566000 Zeilen (Ereignisse)
- stream: 3116400 Zeilen (Ereignisse)

Die Variable txwperiod bestimmt nur die Länge der Simulationsperiode, die für die VFSSMOD- und TOXSWA-Simulationen benutzt wurde:

- 240: die gesamte PRZM-Simulationsperiode von 20 Jahren
- 12: nur die "repräsentative" 12-Monats-Periode, die in FOCUS ausgewählt ist

Da die Bodenfeuchtegehalte der VFS zu Beginn der Runoffereignisse im Voraus mit ThetaFAO berechnet wurden, sind die VFSSMOD-Simulationen für die gleiche Kombination von Szenario und Datum, die für sowohl txwperiod = 12 als auch txwperiod = 240 existieren, identisch. Die Records mit txwperiod = 12 (30800 für den Pond und 166800 für den Stream) wurden daher von der weiteren Analyse ausgeschlossen.

Ferner wurden die Tabellen aufgeteilt zwischen VFSSMOD-Simulationen ohne hochanstehenden Wasserspiegel und Simulationen mit hochanstehendem Wasserspiegel. Die resultierenden 4 Tabellen hatten die folgende Anzahl von Records:

- pond / kein hochanstehender Wasserspiegel: 53520 records
- pond / hochanstehender Wasserspiegel: 481680 records
- stream / kein hochanstehender Wasserspiegel: 294960 records
- stream / hochanstehender Wasserspiegel: 2654640 records

Die Mengen der potenziellen erklärenden Variablen werden in den folgenden Tabellen (Tab. II.7-9 bis -12) aufgelistet. Die Variablen scenarionr und appmonth wurden bewusst ausgelassen. Die kleinere Anzahl an Variablen für den Pond als für den Stream ist durch die Tatsache bedingt, dass der Pond nur ein Szenario hat → OCP, CCP and VKS_cm_h sind konstant.

Dies ergibt folgende Anzahlen an potenziellen erklärenden Variablen:

- | | |
|---|--------------|
| 1) pond / kein hochanstehender Wasserspiegel: | 6 Variablen |
| 2) pond /hochanstehender Wasserspiegel: | 8 Variablen |
| 3) stream / kein hochanstehender Wasserspiegel: | 9 Variablen |
| 4) stream / hochanstehender Wasserspiegel: | 11 Variablen |

Tab. II.7-9: Liste der potenziellen erklärenden Variablen für die multiple Regressionsanalyse, Teilmenge pond / kein hochanstehender Wasserspiegel.

Variable	Beschreibung	Einheit	Verwendung in	Anmerkung
PRECIP	precipitation (without snowfall)	mm d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
RUNF	surface runoff leaving the field	mm d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
ESLS	eroded sediment loss from the field	kg d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
ratio_FWIDTH_fow	ratio of VFS effective flow width to "field outlet width"	m	VFSMOD	this is the inverse of the flow concentration factor; values 0,01, 0,05, 0,1, 0,5, 1
VL	VFS flow length	m	VFSMOD	5, 10, 20, 30
Koc	normalized Freundlich adsorption coefficient		PRZM, VFSMOD	10, 10000; only relevant for deltaP

Tab. II.7-10: Liste der potenziellen erklärenden Variablen für die multiple Regressionsanalyse, Teilmenge pond / hochanstehender Wasserspiegel.

Variable	Beschreibung	Einheit	Verwendung in	Anmerkung
Precip	precipitation (without snowfall)	mm d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
Runf	surface runoff leaving the field	mm d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
Esls	eroded sediment loss from the field	kg d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
lowerBC	lower boundary condition for shallow water table simulations		VFSMOD	1, 2 or 3
WTD	seasonal water table depth	m	VFSMOD	1, 2 or 3
ratio_FWIDTH_fow	ratio of VFS effective flow width to "field outlet width"	m	VFSMOD	this is the inverse of the flow concentration factor; values 0,01
VL	VFS flow length	m	VFSMOD	this is the inverse of the flow concentration factor; values 0,01
Koc	normalized Freundlich adsorption coefficient		PRZM, VFSMOD	10, 10000; only relevant for deltaP

Tab. II.7-11: Liste der potenziellen erklärenden Variablen für die multiple Regressionsanalyse, Teilmenge stream / kein hochanstehender Wasserspiegel.

Variable	Beschreibung	Einheit	Verwendung in	Anmerkung
PRECIP	precipitation (without snowfall)	mm d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
RUNF	surface runoff leaving the field	mm d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
ESLS	eroded sediment loss from the	kg d ⁻¹	VFSMOD	PRZM output

	field		(indirectly)	
ratio_FWIDTH_fow	ratio of VFS effective flow width to "field outlet width"	m	VFSMOD	this is the inverse of the flow concentration factor; values 0,01, 0,05, 0,1, 0,5, 1
VL	VFS flow length	m	VFSMOD	5, 10, 20, 30
Koc	normalized Freundlich adsorption coefficient		PRZM, VFSMOD	10, 10000; only relevant for deltaP
VKS_cm_h	vertical saturated hydraulic conductivity of the VFS	cm h ⁻¹	VFSMOD	scenario-specific
OCP	organic carbon content of eroded sediment	%	VFSMOD	scenario-specific; only relevant for deltaP
CCP	clay content of eroded sediment	%	VFSMOD	scenario-specific

Tab. II.7-12: Liste der potenziellen erklärenden Variablen für die multiple Regressionsanalyse, Teilmenge stream / hochanstehender Wasserspiegel.

Variable	Beschreibung	Einheit	Verwendung in	Anmerkung
PRECIP	precipitation (without snowfall)	mm d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
RUNF	surface runoff leaving the field	mm d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
ESLS	eroded sediment loss from the field	kg d ⁻¹	VFSMOD (indirectly)	PRZM output
lowerBC	lower boundary condition for shallow water table simulations		VFSMOD	1, 2 or 3
WTD	seasonal water table depth	m	VFSMOD	1, 2 or 3
ratio_FWIDTH_fow	ratio of VFS effective flow width to "field outlet width"	m	VFSMOD	this is the inverse of the flow concentration factor; values 0,01, 0,05, 0,1, 0,5, 1
VL	VFS flow length	m	VFSMOD	5, 10, 20, 30
Koc	normalized Freundlich adsorption coefficient		PRZM, VFSMOD	10, 10000; only relevant for deltaP
VKS_cm_h	vertical saturated hydraulic conductivity of the VFS	cm h ⁻¹	VFSMOD	scenario-specific
OCP	organic carbon content of eroded sediment	%	VFSMOD	scenario-specific; only relevant for deltaP
CCP	clay content of eroded sediment	%	VFSMOD	scenario-specific

Eine kleine Zahl von VFSMOD-Simulationen (132) lieferte NaN (not a number) als Output für deltaQ, deltaP und deltaR (nicht für deltaE), s. Tab. II.7-13:

- Scenario R1 stream, 23.05.1978
- Scenario R4 stream, 26.01.1987

Diese Abstürze wurden mit der vfm.exe v.4.2.3 vom August 2013 beobachtet. Die aktuelle Version ist v. 4.2.4 vom 11.04.2014. Rafael Muñoz-Carpena arbeitet allerdings noch an der Eliminierung der beobachteten numerischen Probleme.

Tab. II.7-13: Anzahl der VFSSMOD-Simulationen mit "NaN (not a number)" als Output.

event	precipitation	surface runoff volume leaving the field (PRZM)	stream, no shallow water table		stream, shallow water table	
			nb failed runs	total nb of runs	nb failed runs	total nb of runs
	mm	mm				
R1, 23.05.1978	83,8	46.2	12	120	-	1080
R4, 26.01.1987	0,1	0,17	12	120	108	1080

Das Ereignis am 23.05.1978 war ein Extremereignis mit 83,8 mm Niederschlag. Die abgestürzten Läufe entsprechen den folgenden Parameterkombinationen:

- FWIDTH = 10 m, VL = 20 m
- FWIDTH = 50 m, VL = 30 m.

Dies ist insofern unerklärlich, als extreme Kombinationen (niedrigere und FWIDTH für den gleichen Wert von VL) kein NaN lieferten.

Das zweite Ereignis am 26.01.1987 ist ein Ereignis, bei dem Schneeschmelze in PRZM beteiligt war (Oberflächenabfluss > Niederschlag). Sowohl für die Simulationen ohne als auch für die Simulationen mit hochanstehendem Wasserspiegel entsprachen die abgestürzten Läufe den folgenden Parameterkombinationen:

- FWIDTH = 50 m, VL = 10 m
- FWIDTH = 50 m, VL = 30 m.

Dies ist ebenfalls unerklärlich, da extremere Kombinationen nicht abstürzten.

Es wurde entschieden, die 132 abgestürzten Läufe von der Regressionsanalyse auszuschließen (statt z.B. die verschiedenen Deltas auf 100 zu setzen). Die resultierenden Anzahlen der zu analysierenden Records waren also:

- pond / no shallow water table: 53520 records
- pond / shallow water table: 481680 records
- stream / no shallow water table: 294936 records
- stream / shallow water table: 2654532 records

Sowohl die lineare als auch die log-lineare Regression ergaben schlechte Ergebnisse für die Ereignisse, wo deltaP, deltaQ, deltaR bzw. deltaE 100 % betrogen (d.h. wo kein PSM, Oberflächenabfluss bzw. erodiertes Sediment das Feld verließen). Es wurde daher entschieden, die Daten zu zensieren: Alle Ereignisse mit deltaQ = 100 %, d.h. vollständiger Infiltration des einströmenden Oberflächenabflusses und des auf den VFS fallenden Niederschlags, wurden von der Regression ausgeschlossen.

Die resultierenden 4 Tabellen hatten die folgenden Anzahlen von Records:

- pond / no shallow water table: 33366 records
- pond / shallow water table: 330569 records

- stream / no shallow water table: 178212 records
- stream / shallow water table: 1810010 records

Schließlich wurden Regressionsanalysen für die folgenden 80 Kombinationen durchgeführt:

- 2 Arten von Regression
 - linear (Annahme einer additiven Beziehung zwischen den unabhängigen Variablen und der abhängigen Variable)
 - log-linear (unabhängige und abhängige Variablen logarithmiert; Annahme einer multiplikativen Beziehung zwischen den unabhängigen Variablen und der abhängigen Variable).
- 4 verschiedene abhängige Variablen
 - deltaQ
 - deltaR
 - deltaE
 - deltaP
- 10 verschiedene Teildatensätze
 - pond / kein hochanstehender Wasserspiegel
 - pond / hochanstehender Wasserspiegel (BC > 0)
 - pond / hochanstehender Wasserspiegel (BC = 1)
 - pond / hochanstehender Wasserspiegel (BC = 2)
 - pond / hochanstehender Wasserspiegel (BC = 3)
 - stream / kein hochanstehender Wasserspiegel
 - stream / hochanstehender Wasserspiegel (BC > 0)
 - stream / hochanstehender Wasserspiegel (BC = 1)
 - stream / hochanstehender Wasserspiegel (BC = 2)
 - stream / hochanstehender Wasserspiegel (BC = 3)

Die loglineare Regression schloss alle Records aus, wo die betreffende abhängige Variable Werte ≤ 0 hatte (vgl. Tab. II.7-14).

Tab. II.7-14: Gesamtanzahl von Records für die Regressionsanalyse und ausgeschlossene Records.

water body	BC	linear regression	— values excluded from loglinear regression —			
		total number of records	deltaQ ≤ 0	deltaE ≤ 0	deltaR ≤ 0	deltaP ≤ 0 ¹⁾
pond	0	33366	-	-	96	-
pond	>0	330569	-	-	7770	-
pond	1	110231	-	-	3678	-
pond	2	110103	-	-	540	-
pond	3	110235	-	-	3552	-
stream	0	178212	12	-	144	-
stream	>0	1810010	-	-	26298	6411
stream	1	610313	-	-	14022	2139
stream	2	589548	-	-	1284	2133

stream	3	610149	-	-	10992	2139
--------	---	--------	---	---	-------	------

¹⁾ Negative Werte von deltaP traten nicht auf.

II.7.6.3.3 Ergebnisse der multiplen Regressions Analyse

Für jede der 19 erfolgreichen Kombinationen von Teildatensätzen und Regressionstyp wurden drei Outputdateien erzeugt:

- Eine Datei .pdf mit 4 Scatterplots von gefitteten Werten gegen “gemessene” Werte (d.h. von VFSSMOD berechnete Werte)
- Eine Datei .txt mit einer Zusammenfassung der 4 Regressionen (benutzte Variablen und Output der Regression)
- Eine Datei .Rout mit einem Echo der von R ausgeführten Befehle.

Die 20. Kombination (stream, BC > 0, loglinearer Fit) scheiterte, weil die maximale Speicherzuweisung von R erreicht war.

Die Outputdateien sind im Archiv results_MLR_VFSSMOD.rar enthalten.

Die Werte des korrigierten r^2 (adjusted r^2) für die 80 Regressionen sind in Tabelle II.7-15 angegeben. Aufgrund des großen Stichprobenumfangs sind die Werte von adjusted r^2 und Standard- r^2 praktisch identisch.

Tab. II.7-15: Korrigiertes r^2 (adjusted r^2) für die 80 durchgeführten Regressionen.

water body	BC	regression type	deltaQ	deltaE	deltaR	deltaP
pond	0	linear	0,4934	0,3569	0,4569	0,5926
	>0		0,4887	0,3492	0,419	0,5950
	1		0,4863	0,3491	0,4131	0,5934
	2		0,4937	0,3493	0,4328	0,5986
	3		0,4866	0,3491	0,4139	0,5937
stream	0	linear	0,4935	0,3631	0,4704	0,6576
	>0		0,4898	0,3479	0,3994	0,6591
	1		0,4846	0,3465	0,3705	0,6650
	2		0,5070	0,3513	0,4693	0,6727
	3		0,4910	0,3466	0,3955	0,6687
pond	0	loglinear	0,9805	0,2547	0,9879	0,8647
	>0		0,9791	0,2373	0,9616	0,8652
	1		0,9785	0,2372	0,9522	0,8646
	2		0,9823	0,2374	0,9841	0,8668
	3		0,9788	0,2372	0,9552	0,8647
stream	0	loglinear	0,9801	0,3926	0,9805	0,7973
	>0		failed	failed	failed	failed
	1		0,9500	0,3516	0,9058	0,7923
	2		0,9807	0,3624	0,9727	0,8077
	3		0,9537	0,3518	0,9143	0,7948

Es ist zu beachten, dass sich die Werte des adjusted r^2 für den loglinearen Fit auf die logarithmierten Variablen beziehen. Wenn man die de-logarithmierten gefitteten gegen die originalen "gemessenen" Datenpunkte plottet, erhält man andere Werte von r^2 (Tab. II.7-16). Wenn man also die Güte der Anpassung (goodness-of-fit) zwischen linearem und loglinearem Fit vergleichen will, muss man die r^2 -Werte für die nicht-logarithmischen Variablen vergleichen, d.h. die Werte aus Table 24 für den linearen und die aus Tabelle 25 für den loglinearen Fit.

Tab. II.7-16: r^2 -Werte der de-logarithmierten Scatterplots des loglinear fit.

water body	BC	regression type	deltaQ	deltaE	deltaR	deltaP
pond	0	loglinear	0,8287	0,3491	0,7557	0,9181
	>0		0,8232	0,3255	0,7167	0,9126
	1		0,8201	0,3254	0,7141	0,9110
	2		0,8298	0,3258	0,7219	0,9163
	3		0,8205	0,3254	0,7145	0,9112
stream	0	loglinear	0,8296	0,4969	0,7801	0,9342
	>0		failed	failed	failed	failed
	1		0,7963	0,4477	0,6973	0,9123

2	0,8263	0,4605	0,7499	0,9279
3	0,8031	0,4479	0,7011	0,9160

Für jede Regression wurden die drei unabhängigen Variablen mit dem höchsten Betrag des Regressionskoeffizienten notiert und in Tabelle II.7-17 eingetragen. Die Regressionskoeffizienten müssen jedoch mit Vorsicht interpretiert werden:

- Die Regressionskoeffizienten sind nicht standardisiert worden (Standardisierung ist nur sinnvoll, wenn die jeweiligen unabhängigen Variablen Normal-verteilt sind, was in der hier durchgeführten Simulationsstudie nicht der Fall ist). Dies bedeutet, dass der Wert des Regressionskoeffizienten einer unabhängigen Variablen stark von den numerischen Werten und damit von der Einheit dieser Variable abhängt.
- Die Regressionskoeffizienten für die loglineare Regression beziehen sich auf logarithmierte unabhängige Variablen und können nicht mit denen für eine lineare Regression verglichen werden.

Tab. II.7-17: Die wichtigsten unabhängigen Variablen in der multiplen Regression.

water body	BC	reg. type	deltaQ	deltaE	deltaR	deltaP
			three variables with highest abs(regression coefficient)			
pond	0	linear	ratio_FWIDTH_fow , Runf, Precip	ratio_FWIDTH_fow , Runf, VL	ratio_FWIDTH_fow , Runf, Precip	ratio_FWIDTH_fow, Runf, Precip
	>0		ratio_FWIDTH_fow, WTD, Runf	ratio_FWIDTH_fow , Runf, VL	ratio_FWIDTH_fow, WTD, Precip	ratio_FWIDTH_fow, Runf, WTD
	1		ratio_FWIDTH_fow, WTD, Runf	ratio_FWIDTH_fow , Runf, VL	ratio_FWIDTH_fow, WTD, Precip	ratio_FWIDTH_fow, WTD, Runf
	2		ratio_FWIDTH_fow , Runf, Precip	ratio_FWIDTH_fow , Runf, VL	ratio_FWIDTH_fow, WTD, Precip	ratio_FWIDTH_fow, Runf, WTD
	3		ratio_FWIDTH_fow, WTD, Runf	ratio_FWIDTH_fow , Runf, VL	ratio_FWIDTH_fow, WTD, Precip	ratio_FWIDTH_fow, WTD, Runf
stream	0	linear	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, VL	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, VL	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, VL	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, OCP
	>0		ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, WTD	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, VL	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, WTD	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, OCP
	1		ratio_FWIDTH_fow, WTD, Precip	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, VL	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, WTD	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, OCP
	2		ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, Precip	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, VL	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, Precip	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, OCP
	3		ratio_FWIDTH_fow, WTD, VKS_cm_h	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, VL	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, WTD	ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h, OCP
pond	0	log-linear	Runf, VL, ratio_FWIDTH_fow	VL, ratio_FWIDTH_fow, Precip	Runf, VL, ratio_FWIDTH_fow	Runf, ratio_FWIDTH_fow, VL
	>0		VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Precip, VL, ratio_FWIDTH_fow	VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Runf, VL, ratio_FWIDTH_fow
	1		VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Precip, VL, ratio_FWIDTH_fow	VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Runf, VL, ratio_FWIDTH_fow

GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

	2		VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	VL, Precip, ratio_FWIDTH_fow	VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Runf, VL, ratio_FWIDTH_fow
	3		VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Precip, VL, ratio_FWIDTH_fow	VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Runf, VL, ratio_FWIDTH_fow
	0		VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Precip, VL, ratio_FWIDTH_fow	VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	CCP, ratio_FWIDTH_fow, VL
	>0		-	-	-	-
stream	1	log-linear	VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Precip, Runf, VL	VL, VKS_cm_h, ratio_FWIDTH_fow	CCP, ratio_FWIDTH_fow, VL
	2		VL, ratio_FWIDTH_fow, VKS_cm_h	Precip, VL, Runf	VKS_cm_h, VL, ratio_FWIDTH_fow	CCP, ratio_FWIDTH_fow, VL
	3		VL, ratio_FWIDTH_fow, Runf	Precip, Runf, VL	VKS_cm_h, VL, ratio_FWIDTH_fow	CCP, ratio_FWIDTH_fow, VL

II.7.6.3.4 Diskussion

a) Goodness of fit

Die Diskussion basiert auf Tabellen II.7-15 und -16 und den pdf-Scatterplots.

DeltaQ

Für deltaQ ergibt der loglineare Fit eine wesentlich bessere Korrelation als der lineare.

Loglinearer Fit:

- Liefert eine relative gute Übereinstimmung für den Bereich der mit VFSSMOD berechneten deltaQ-Werte zwischen 0 % und nahe 80 %. Jenseits davon zunehmende Überschätzung.
- Abrupte Zunahme der Überschätzung, wenn das mit VFSSMOD berechnete deltaQ sich 100 % annähert.
- Für die Kombination stream/shallow water table treten extreme Ausreißer (Überschätzungen) oberhalb von mit VFSSMOD berechneten deltaQ-Werten von 20 % auf.

DeltaE

deltaE wird sowohl von dem linearen als auch dem loglinearen Fit schlecht vorhergesagt. Anscheinend gibt es weder eine additive noch eine multiplikative Beziehung zwischen den unabhängigen Variablen und deltaE.

DeltaR

Für deltaR liefert der loglineare Fit eine wesentlich bessere Korrelation als der lineare.

Loglinear Fit:

- etwas schlechter für deltaR als für deltaQ (mehr Streuung)
- Streuung und Überschätzung nehmen mit zunehmendem von VFSSMOD berechnetem deltaR zu.
- Streuung und Überschätzung sind schlechter für Randbedingungen mit hochanstehendem Wasserspiegel, besonders BC 1 and 3.

DeltaP

Für deltaP ergibt der loglineare Fit eine deutlich bessere Korrelation als der lineare.

Linearer Fit:

- liefert allgemein große Streuung (wenn auch ohne systematische Abweichung),

Loglinearer Fit:

- Liefert relative gute Übereinstimmung für den Bereich der mit VFSSMOD berechneten deltaP-Werte zwischen 40 % und nahe 100 %.
- Jenseits dieser Grenzen überschätzt der Fit deltaP.
- Seltsamerweise ist r^2 für deltaP besser als für deltaQ und deltaE, obwohl VFSSMOD deltaP als Funktion von deltaQ und deltaE berechnet.
- Streuung und Ausreißer sind schlechter für Randbedingungen mit hochanstehendem Wasserspiegel, besonders BC 1 and 3.

b) Vergleich Stream - Pond

Der Hauptunterschied zwischen Stream und Pond hinsichtlich der Regression ist, dass es vier Szenarien für den Stream und nur eines für den Pond gibt. Dies bedeutet, dass für den Pond die Variablen CCP, OCP und VKS_cm_h keinen Einfluss auf die Regression haben, weil ihre Werte konstant sind. Außerdem ist für das gleiche Regen-/Runoffereignis die in den VFS einströmende Oberflächenabflusshöhe (runoff depth) für den Pond 50 % höher als für den Stream (aufgrund der Szenariogeometrie).

Die Fits sind für den Stream objektiv nicht schlechter als für den Pond. Der loglineare Fit für ΔE ist sogar besser für den Stream als für den Pond. Vermutlich kompensiert die größere Anzahl verfügbarer erklärender unabhängiger Variablen (die drei szenariospezifischen Variablen CCP, OCP und VKS_cm_h) die zusätzliche Varianz, die von den unterschiedlichen Szenarien verursacht wird.

Ein visueller Vergleich ergibt allgemein mehr Streuung und mehr Ausreißer für den Stream als für den Pond. Die Muster sind allerdings zwischen Stream und Pond nicht grundlegend unterschiedlich.

c) Vergleich der unteren Randbedingungen

Im Allgemeinen sind mehr Streuung und mehr Ausreißer für die unteren Randbedingungen mit hochanstehendem Wasserspiegel als für die Randbedingung ohne Wasserspiegel zu verzeichnen. Dies kann wahrscheinlich dadurch erklärt werden, dass in den VFSSMOD-Simulationen mit hochanstehendem Wasserspiegel ein Umschalten der Randbedingung erfolgt, wenn die Befeuchtungsfront den Kapillarsaum erreicht. Der Zeitpunkt des Umschaltens hängt von der Wasserspiegeltiefe ab. Wenn das Oberflächenabflussereignis klein und/oder der Wasserspiegel tief ist, erreicht die Befeuchtungsfront ggf. den Kapillarsaum gar nicht, und es findet kein Umschalten statt.

Dieses Umschaltverhalten während der Simulation mit variablem Umschaltzeitpunkt ist wahrscheinlich zu komplex, um es mit einer einfachen Regression darstellen zu können. Diese Hypothese wird durch die Tatsache gestützt, dass Streuung und Ausreißer für BC 2 (wo die untere Randbedingung weniger drastisch wechselt, nämlich zu gesättigtem vertikalem Fluss) weniger ausgeprägt sind als für BC 1 und 3 (wo die untere Randbedingung zu zero flux umschaltet und das Wasser vom Umschaltzeitpunkt an lateral abfließen muss).

Was die statistische und visuelle Güte der Anpassung (goodness-of-fit) angeht, ist ein leichtes Abnehmen in der Reihenfolge BC 0 > BC 2 > BC 3 > BC 1 festzustellen, d.h. in der Reihenfolge zunehmender hydrologischer Komplexität und zunehmender Änderung der Infiltrationsrate am Umschaltzeitpunkt.

d) Wichtigste erklärende Variablen

Die folgenden allgemeinen Beobachtungen können auf Basis von Tabelle II.7-17 festgehalten werden:

Linearer Fit:

- ratio_FWIDTH_fow (Verhältnis zwischen effektiver Fließbreite des VFS und der Feldauslassbreite; inverser Abflusskonzentrationsfaktor) ist immer die wichtigste Variable.

- Pond
 - Wenn ein hochanstehender Wasserspiegel simuliert wird, kommt für deltaP, deltaR und deltaQ die initiale Wasserspiegeltiefe WTD an zweiter oder dritter Stelle (außer für deltaQ für BC 2).
 - Weitere wichtige Variablen: Oberflächenabflussvolumen Runf und Niederschlag Precip.
- Stream
 - Die szenariospezifischen Variablen VKS_cm_h (gesättigte Leitfähigkeit) und OCP (Gehalt an organischem Kohlenstoff; relevant nur für deltaP) werden wichtig
 - WTD unter den drei wichtigsten Variablen für BC > 0, BC = 1 und BC = 3
- BC > 0: In diesem Teildatensatz, dem einzigen mit verschiedenen Werten von BC (1, 2 oder 3), taucht BC nie in der Liste der drei wichtigsten Variablen auf. Es scheint, dass die Tiefe des initialen Wasserspiegels wichtiger ist als die Beschaffenheit der unteren Randbedingung.

Loglinearer Fit:

- Die effektive Länge des VFS in Fließrichtung flow length VL ist immer unter den drei wichtigsten Variablen
- ratio_FWIDTH_fow ist ebenfalls immer unter den drei wichtigsten Variablen, außer für deltaE für den Stream im Fall eines hochanstehenden Wasserspiegels
- WTD taucht nie unter den wichtigsten Variablen auf.
- Pond:
 - für deltaQ, deltaR und deltaP immer die gleichen drei wichtigsten Variablen: Runf, ratio_FWIDTH_fow und VL.
 - für deltaE, sind es immer Precip, ratio_FWIDTH_fow und VL
 - die untere Randbedingung ändert nur die Reihenfolge der drei Variablen, aber nicht ihr Auftreten.
- Stream:
 - für deltaP immer die gleichen drei wichtigsten Variablen, in der gleichen Reihenfolge: die szenariospezifische Variable CCP ist die wichtigste, gefolgt von ratio_FWIDTH_fow und VL.
 - für deltaQ und deltaR sind VL und ratio_FWIDTH_fow immer unter den drei wichtigsten Variablen
 - weitere wichtige Variablen: Runf für deltaQ, und die szenariospezifische Variable VKS_cm_h für deltaR und in geringerem Maße für deltaQ (in 3. Position für BC 2, sonst in 4. Position)
 - für deltaE sind Precip und VL immer unter den drei wichtigsten Variablen
- BC > 0: In diesem Teildatensatz (hier nur Ergebnisse für den Pond) taucht BC nie in der Liste der drei wichtigsten Variablen auf. Es scheint, dass die Tiefe des initialen Wasserspiegels wichtiger ist als die Beschaffenheit der unteren Randbedingung.

II.7.6.4 Schlussfolgerungen aus der Simulationsstudie

Die Ziele der Simulationsstudie (vgl. Kap. II.7.5.1) waren

1) Ermittlung der Effekte

- der Präsenz eines hochanstehenden Wasserspiegels (untere Randbedingung + initiale Wasserspiegeltiefe)
- der Länge der Simulationsperiode
- der Abflusskonzentration

auf die Reduktionseffizienzen von VFS für die FOCUSsw-Szenarien:

- Reduktionseffizienzen für die gesamte p2t-Zeitreihe: delta PECsw und delta PECsed
- eventbasierte Reduktionseffizienzen: deltaR, deltaQ, deltaE, deltaP etc.

2) Ableiten einer Beziehung zwischen der Reduktion von PECsw,max und potenziellen erklärenden Variablen

- erste Menge potenzieller Variablen (PRZM-Output und VFSSMOD-Output): RUNF, PRECIP, ESLS, deltaP, deltaR, deltaQ, deltaE
- zweite Menge potenzieller Variablen (PRZM-Output und Szenarioeinstellungen): PRECIP, RUNF, ESLS, wb_type, scenarionr, appmonth, txwperiod, BC, WTD, FWIDTH, VL, Koc.

Hinsichtlich des ersten Ziels können aus den Ergebnissen von II.7.6.1 and II.7.6.2 die folgenden Schlüsse gezogen werden:

- Die Oberflächenabflusskonzentration in Form der VFSSMOD-Inputparameter FWIDTH (effektive Fließbreite des VFS) oder der abgeleiteten Größe ratio_FWIDTH_fow (Verhältnis der effektiven Fließbreite zur Feldauslassbreite, inverser Abflusskonzentrationsfaktor) ist ein entscheidender Faktor für die Effizienz von Pufferstreifen (deltaQ, deltaR, deltaE, deltaP). Sie ist von ähnlicher Wichtigkeit wie die Länge in Fließrichtung VL. Folglich müssen FWIDTH und ratio_FWIDTH_fow beim Erstellen von VFSSMOD-Szenarien sehr sorgfältig ausgewählt werden.
- Die Gegenwart eines hochanstehenden Wasserspiegels beeinflusst die von VFSSMOD berechneten Pufferstreifeneffizienzen weniger als die Abflusskonzentration, ist aber nicht vernachlässigbar. Wenn ein Wasserspiegel vorhanden ist, ist die initiale Wasserspiegeltiefe wichtiger als die untere Randbedingung (BC 1, 2 or 3) selbst. BC = 1 liefert die stärksten Abweichungen vom Infiltrationsverhalten ohne hochanstehenden Wasserspiegel.
- Die Länge der TOXSWA-Simulationsperiode spielt nur eine Rolle für TOXSWA, nicht für VFSSMOD. Da sich deltaPECsw für FOCUS stream (mit den Szenarioannahmen von SWAN) und FOCUS pond als näherungsweise gleich deltaP herausgestellt hatte, wurde der Effekt der Länge der Simulationsperiode auf deltaPECsw nicht weiter untersucht. Es kann jedoch festgehalten werden, dass TOXSWA (Version toxswa_focus.exe von 2009) nicht in der Lage ist, für die Stream-Szenarien R2, R3 und R4 die vollen 20 Jahre durchzurechnen.

In Bezug auf das zweite Ziel:

- Eine multiple Regression für die abhängige Variable deltaPECsw mit der ersten Menge von Variablen (PRZM-Output + VFSSMOD-Output) wurde nicht durchgeführt, weil gezeigt werden konnte, dass deltaPECsw sowohl für den Stream als auch für den Pond annähernd gleich deltaP ist (mit den FOCUS-Szenarioeinstellungen und den SWAN-Szenarioannahmen).
- Eine multiple Regression für die VFSSMOD-Outputvariablen (deltaQ, deltaR, deltaE, deltaP) als Abhängig mit der zweiten Menge von unabhängigen Variablen (PRZM-Output und VFSSMOD-Szenarioeinstellungen) ergab zwar keine Beziehungen von hinreichender Qualität, erlaubte es aber, die wichtigsten Variablen zu identifizieren.

II.7.7 Untersuchung der Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009)

Die Verlässlichkeit der multiplen Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) zur Abschätzung von deltaP ist noch nicht hinreichend geklärt worden. Die Gleichung wird im Folgenden untersucht.

II.7.7.1 Die Regressionsgleichung für deltaP

Die multiple Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) schätzt deltaP (Reduktion der PSM-Fracht im Oberflächenabfluss) als

$$\text{deltaP} = 24,79 + 0,54 \cdot \text{deltaQ} + 0,52 \cdot \text{deltaE} - 2,42 \cdot \ln(\text{Fph} + 1) - 0,89 \cdot (\%C) \quad (\text{Gl. II.7-15})$$

mit

deltaP	relative Reduktion der in den Pufferstreifen eingetragenen PSM-Fracht (%)
deltaQ	relative Reduktion des gesamten Wasserzuflusses (einströmender Oberflächenabfluss + Regen auf den VFS) (%)
deltaE	relative Reduktion der eingetragenen Sedimentfracht (%)
Fph	Phasenverteilungskoeffizient, gegeben als $F_{ph} = Q_i / (K_d \cdot E_i)$
Q _i	zufließendes Wasservolumen (L)
E _i	eingetragene Fracht an erodiertem Sediment (kg)
K _d	linearer Adsorptionskoeffizient (L/kg)
%C	Tongehalt des eingetragenen erodierten Sediments (%)

II.7.7.2 Herleitung

Sabbagh et al. (2009) erstellten obige Regressionsgleichung auf der Basis experimenteller Daten aus fünf Studien: Arora et al. (2003), Krutz et al. (2003), Hall et al. (1983), Barfield et al. (1998) und Schmitt et al. (1999). Die Wertebereiche der schließlich ausgewählten unabhängigen Variablen in den fünf Kalibrierungsstudien waren (Sabbagh et al., 2009; Tab. 2):

- deltaQ: 22 - 100 %
- deltaE: 0 - 100 %; allerdings bezieht sich die 0 auf ein Ereignis ohne Sedimentfracht und sollte besser „n/a“ lauten (und von der Regression ausgeschlossen werden); ohne diese falsche Null ist der Wertebereich 54 - 100 %
- deltaP: 22 - 100 %

- Fph: 0 - 636; jedoch bezieht sich die 0 wieder auf das Ereignis ohne Sedimentfracht und sollte daher "unendlich" lauten (und von der Regression ausgeschlossen werden); ohne diese falsche Null ist der Wertebereich 1 - 636. Es ist zu beachten, dass Fph-Werte von Null in der Praxis eigentlich nicht auftreten können. Fph kann manchmal gegen Unendlich gehen, aber kaum gegen Null, da es unwahrscheinlich ist, dass $K_d * E_i$ wesentlich größer wird als Q_i (nicht einmal für sehr stark sorbierende Substanzen).
- %C: 21 - 48 %

Fehler in der Datenbehandlung werden natürlich die geschätzten Regressionskoeffizienten und ggf. auch die Menge der in die Regressionsgleichung einbezogenen Variablen beeinflussen. Die multiple Regression ergab Gl. II.7-15, mit einem r^2 von 0,86 und einem korrigierten r^2 von 0,84.

II.7.7.3 Validierungsstudien

Die Regressionsgleichung, die mit den Datenpunkten der 5 obigen Studien erhalten wurde, wurde von Sabbagh et al. (2009) unabhängig gegen 5 andere Studien getestet: Tingle et al. (1998), Arora et al. (1996), Popov (2005), Patty et al. (1997) und Pätzold et al. (2007). Die Wertebereiche der unabhängigen Variablen in den 5 Validierungsstudien waren (Sabbagh et al., 2009; Tabelle 4):

- deltaQ: 4 - 100 %
- deltaE: 41 - 100 %; jedoch beziehen sich einige der Werte von 100 auf ein Ereignis ohne Sedimentfracht und sollten daher n.a. lauten.
- deltaP: 8 - 100 %
- Fph: 0 - $3.9E+06$; allerdings bezieht sich die Null wieder auf Ereignisse ohne Sedimentfracht und sollte daher "unendlich" lauten; ohne diese falsche Null beträgt der Wertebereich 1 - $3.9E+06$ %
- %C: 12 - 45 %

Die Regressionsgleichung wurde angewandt, um deltaP aus gemessenen Werten von deltaQ, deltaE, FpH und %C vorherzusagen. Auftragen der vorhergesagten gegen die gemessenen deltaP-Werte ergab ein r^2 von 0.82.

Die Anwendung der Regressionsgleichung unter Benutzung von mit VFSSMOD berechneten Werten von deltaQ und deltaE als Input lieferte beim Auftragen der vorhergesagten gegen die gemessenen deltaP-Werte immer noch ein r^2 von 0.74.

Die Validierungsstudie von Poletika et al. (2009) verglich mit VFSSMOD berechnete Werte von deltaQ, deltaE und deltaP (wobei deltaP von VFSSMOD gemäß Gl. II.7-15 aus den simulierten deltaQ und deltaE berechnet wird) mit Messdaten. Die Messdaten kamen aus vier experimentellen Versuchseinstellungen, die vier verschiedenen Ausprägungen der Abflusskonzentration entsprachen. Die für deltaQ ($r^2 = 0.79$), deltaE ($r^2 = 0.85$) und deltaP ($r^2 = 0.84$) erhaltenen Korrelationen waren relativ gut. Diese gute Korrelation könnte jedoch teilweise durch die Tatsache verursacht sein, dass es zwei getrennte Datenpunktwolken gab: die mit hoher Abflusskonzentration und niedriger Reduktionseffizienz, und die mit niedriger Abflusskonzentration und hoher Reduktionseffizienz. Ein Auftragen der vorhergesagten Deltas gegen die gemessenen Deltas getrennt für beide Punktwolken würde möglicherweise eine deutlich schlechtere Korrelation ergeben.

II.7.7.4 Diskussion

Eine erste Untersuchung der Ergebnisse der PRZM-VFSMOD-TOXSWA-Kette (Kap. II.7.6.1) ergab, dass in einigen Fällen ΔP wesentlich höher war als ΔQ , obwohl die Substanz nur einen K_{oc} von 100 L/kg hatte und fast die gesamte Masse des PSM in der gelösten Phase des Oberflächenabflusses vorlag. Wenn hohe Werte von ΔE und sehr niedrige Werte von ΔQ zusammenfielen, betrug ΔP bis zu 50 % ($K_{oc} = 100$ L/kg) or 61 % ($K_{oc} = 10000$ L/kg; s. Kap. II.7.6.2). Natürlich bedeutet ein "kontra-intuitives" Ergebnis keineswegs, dass ein Modell falsch ist. Die folgenden Punkte sollten jedoch genauer untersucht werden:

- 1) Korrektheit der Regressionsanalyse und damit der Werte der Regressionskoeffizienten
- 2) Eignung der mathematischen Struktur der Regressionsgleichung
- 3) Gültigkeitsbereich der Regressionsgleichung.

Zu 1) Eine Reihe von Fehlern in der Behandlung von Datenpunkten mit in Wirklichkeit "n.a." oder unendlichen Werten während Kalibrierung und Validierung wurden beobachtet (vgl. Kap. II.7.7.2). Diese Datenpunkte hätten von der Regression bzw. der Validierung ausgeschlossen werden müssen, wurden aber stattdessen mit falschen Werten von 0 oder 100 % einbezogen. Es ist jedoch nicht garantiert, dass diese Fehler die geschätzten Regressionskoeffizienten oder den Fit in den Validierungsstudien wesentlich beeinflusst haben. In jedem Fall sollten sowohl die Regressionsanalyse von Sabbagh et al. (2009) als auch die Validierungsstudien mit korrekt behandelten Datenpunkten wiederholt werden.

Zu 2) Intuitiv sollte für Substanzen, die größtenteils in der gelösten Phase des Oberflächenabflusses vorliegen, die Reduktion der Fracht des erodierten Sediments nicht von Bedeutung sein. Ebenso sollte für Substanzen, die größtenteils adsorbiert an Partikel vorliegen, nur ΔE von Bedeutung sein. S. Reichenberger wies in seiner E-Mail-Korrespondenz mit Rafael Muñoz-Carpena (cf. Anhang A11) darauf hin, dass "the mathematical structure of the regression equation seems unfortunate because the phase distribution factor is decoupled from ΔQ and ΔE . Possibly one wouldn't even have needed a multiple linear regression, and a simple relationship like $\Delta P = \frac{\text{frac_dissolved}}{\text{infiltration/Runoff_inflow} * 100} + \text{frac_adsorbed} * \Delta E$ would have done?" Auf Nachfrage von Rafael Muñoz-Carpena antworteten Sabbagh et al. jedoch, dass der experimentell gefundene Wertebereich von ΔP tatsächlich kleiner ist als der von ΔE und dass ΔP üblicherweise niedriger ist als ΔE . Daher erscheint es ratsam, die Regressionsanalyse mit einem erweiterten Kalibrierungsdatensatz und verschiedenen Strukturen der Gleichung noch einmal durchzuführen.

Zu 3) Mit Hilfe eines Excel-Spreadsheet wurde das Verhalten der Regressionsgleichung in Extremfällen überprüft:

- Wenn der K_{oc} gegen Null geht, geht ΔP gegen minus unendlich (wegen des \ln in der Formel). → Die Gleichung sollte nicht auf sehr schwach sorbierende Substanzen wie Chlorid oder Bromid angewandt werden.
- Wenn der K_{oc} gegen unendlich geht, nähert sich ΔP asymptotisch an den Wert $\Delta P = 24,79 + 0,54 * \Delta Q + 0,52 * \Delta E - 0,89(\%C)$ an → ΔP ist üblicherweise kleiner als ΔE . Es kann jedoch auch größer werden als 100 % (es ist aber zu vermuten, dass ΔP im VFSMOD-Code auf ≤ 100 % begrenzt ist).

- Wenn ΔQ nahe bei Null liegt und ΔE nahe bei 100 %, ist ΔP selbst für Substanzen mit niedrigem K_d (um einen Wert zu nennen: $K_d \geq 0,1$) erheblich höher als ΔQ .

Der Kalibrierungsdatensatz beinhaltet keine sehr niedrigen Werte von ΔQ , und die Validierungsdatensätze nur einige wenige Datenpunkte mit $\Delta Q = 4$ %. Diese Datenpunkte waren jedoch nicht mit hohen ΔE -Werten verbunden. Tatsächlich scheinen Kombinationen von niedrigem ΔQ und hohem ΔE in der Praxis nicht oft aufzutreten. Sie treten allerdings im VFSMOD-Output auf. Die Autoren vermuten, dass solche Kombinationen jenseits des Anwendungsbereichs der Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) liegen.

Letztendlich scheint die Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) nicht fundamental fehlerhaft zu sein. Sie scheint nutzbar für den Zweck der regulatorischen Risikoabschätzung im Tool GERDA, insbesondere im Hinblick auf die Tatsache, dass im Moment keine alternative Berechnungsmethode für ΔP verfügbar ist.

Vor einer gegebenenfalls zukünftigen Nutzung im Zulassungsverfahren halten die Autoren allerdings weitere, klärende Forschungsarbeiten für unabdingbar:

- Untersuchung des Bereichs der Anwendbarkeit der Gleichung von Sabbagh et al., unter Benutzung von sowohl zusätzlichen experimentellen Validierungsdaten als auch VFSMOD-Outputs (ΔQ und ΔE)
- Überprüfung und ggf. Neuberechnung der Regressionsanalyse
 - mit den ursprünglichen Kalibrierungsdatensätzen mit korrekt behandelten Datenpunkten,
 - mit zusätzlichen experimentellen Datenpunkten für Kalibrierung und Validierung,
 - mit Ausprobieren alternativer Strukturen der Gleichung.

II.7.8 Weitere Diskussionspunkte

II.7.8.1 Diskussionspunkte mit dem VFSMOD-Entwickler (E-Mail)

Mehrere E-Mail-Diskussionen (vgl. Anhang A11) wurden mit dem VFSMOD-Entwickler Rafael Muñoz-Carpena über folgende Themen geführt:

- untere Randbedingungen mit hochanstehendem Wasserspiegel und die Wasserspiegeltiefe
- untere Randbedingungen in VFSMOD für Böden mit undurchlässigem anstehendem Gestein
- lateraler unterirdischer Abfluss (lateral subsurface flow) vom VFS zum Oberflächengewässer.

Die Schlussfolgerungen aus diesen Diskussionen waren:

- Die initiale Wasserspiegeltiefe WTD sollte als saisonaler Wasserspiegel parametrisiert werden. Das heißt, die Werte von WTD sollten entweder pro Kalendermonat oder pro Saison (z.B. Periode mit Bodenfeuchtedefizit/Periode mit feldgesättigtem Boden) angegeben werden.
- Im Moment gibt es keine untere Randbedingung in VFSMOD für undurchlässiges anstehendes Gestein (ungeklüfteter Granit, massiver Ton, unverwitterter Schiefer etc.). Sie könnte

jedoch einfach implementiert werden, wenn echter Bedarf besteht. In der Zwischenzeit könnte die undurchlässige Gesteinsschicht mit einem hochanstehenden Wasserspiegel und BC1 angenähert werden, wenn WTD so gewählt wird, dass die Obergrenze der Gesteinsschicht gleich der Obergrenze des Kapillarsaums des BC1-Wasserspiegels ist, das heißt: $WTD = (\text{Obergrenze der undurchlässigen Gesteinsschicht} + \text{Dicke des Kapillarsaums})$. Letztlich erlaubten es Wasserbilanzrechnungen mit MACRO, WTD für diese Böden ohne Korrekturbedarf direkt auszurechnen.

- Lateraler unterirdischer Abfluss (und die damit verbundene PSM-Fracht), die das untere Ende des Pufferstreifens (VFS) verlassen, werden von TOXSWA im Moment nicht berücksichtigt, selbst wenn der VFS direkt an das Oberflächengewässer angrenzt. Es gibt den gegenläufigen Effekt, dass, wenn das untere Ende des VFS nahe an einem entwässernden Bach liegt (gilt also nicht für den Pond), die Infiltration in das untere Ende des VFS und der laterale Abfluss zum Bach ggf. von VFSSMOD unterschätzt werden. Es wurde gefolgert, dass PSM-Einträge über lateralen unterirdischen Abfluss vom VFS in das Oberflächengewässer vorerst nicht berücksichtigt werden müssen:
 - (i) PSM-Einträge über lateralen unterirdischen Abfluss vom Pufferstreifen sind wahrscheinlich unbedeutend gegenüber PSM-Einträgen mit dem Oberflächenabfluss.
 - (ii) Die mögliche Unterschätzung der Infiltration und damit der Reduktion der PSM-Fracht im Oberflächenabfluss am unteren Ende des VFS (d.h. leichte Überschätzung des Oberflächenabflussvolumens und der darin transportierten PSM-Fracht, die in den Bach eintreten) hebt sich zu einem gewissen Grad mit der Nichtberücksichtigung des lateralen unterirdischen Abflusses und der damit verbundenen PSM-Einträge in den Bach auf.

II.7.8.2 SWAN-Szenarioannahmen

Die in SWAN getätigte Annahme (keine FOCUS_{sw}-Annahme) "Die unbehandelte Fläche des Upstream Catchment des FOCUS Stream (80 % von 100 ha) hat keine VFS" ist nicht gerechtfertigt:

- Erstens, da das hydrologische Signal von den unbehandelten 80 % das gleiche ist wie das von den behandelten Feldern, kann angenommen werden, dass die Landnutzung der unbehandelten 80 % ebenfalls landwirtschaftlich ist (kein Wald oder Weide).
- Zweitens bedeutet "unbehandelt" nur, dass der simulierte Wirkstoff nicht appliziert wird. "Unbehandelt" impliziert keine nicht-landwirtschaftliche Nutzung.
- Drittens installieren Landwirte Pufferstreifen nicht nur wegen eines einzigen PSM, das in einer einzigen Anbausaison appliziert wird. Folglich, wenn die behandelten 20 % des Upstream Catchments Pufferstreifen aufweisen, ist es wahrscheinlich, dass auch ein Teil der "unbehandelten" 80 % mit Pufferstreifen ausgestattet ist.

Die Autoren schlagen daher vor, die Annahme "nur Flächen, die mit dem simulierten Wirkstoff behandelt werden, haben Pufferstreifen" fallenzulassen, weil sie nicht logisch und außerdem nicht ausreichend konservativ ist (zu günstig, da hohe Verdünnung).

Es ist zu beachten, dass Situationen auftreten können, wo ΔR negativ ist, d.h. mehr Oberflächenabfluss das Feld verlässt als eingeströmt ist. Hierzu kommt es, wenn die Infiltration in den VFS geringer ist als der Niederschlag auf den Pufferstreifen. In diesem Fall liefern die Felder mit VFS mehr Oberflächenabfluss als die Felder ohne, und die Annahme „nur Flächen, die mit dem simulierten Wirkstoff behandelt werden, haben Pufferstreifen“ bringt somit keine

Vorteile mehr. Allerdings sind Ereignisse mit negativem ΔR unter denen, die die $PEC_{sw,max}$ verursachen, eher selten (vgl. Kap. II.7.6.2).

II.7.9 Empfohlene Einstellungen für VFS-Szenarien

II.7.9.1 Bedeutung und verschiedene Typen von simulierten VFS

Zuerst muss die Frage geklärt werden, was die in GERDA simulierten Pufferstreifen eigentlich widerspiegeln sollen. Die Antwort bestimmt die Parametrisierung von VFSSMOD und die Interpretation der VFSSMOD-Ergebnisse. In jedem Fall ist es von entscheidender Bedeutung, dass sowohl Standorthydrologie als auch Abflusskonzentration korrekt abgebildet werden.

Für Szenarien für grasbewachsene Pufferstreifen(VFS) in einem regulatorischen Kontext gibt es mindestens drei Optionen:

- Typ A: grasbewachsene Pufferstreifen in Hanglage oder in ebener Position, unmittelbar unterhalb des behandelten Feldes, mit oder ohne hochanstehenden Wasserspiegel, nicht direkt angrenzend an ein Oberflächengewässer → weniger strikte Parametrisierung, aber strengere Risikomanagement-Auflagen bei Einhaltung des Akzeptabilitätskriteriums.
- Typ B: grasbewachsene Pufferstreifen direkt angrenzend an ein Oberflächengewässer, mit hochanstehendem Wasserspiegel, nicht notwendigerweise angrenzend an ein behandeltes Feld, konzentrierten Oberflächenabfluss von mehreren Feldern erhaltend → strengere (weniger günstige) Parametrisierung, aber weniger strenge Risikomanagement-Auflagen bei Einhaltung des Akzeptabilitätskriteriums.
- Typ C: das regulatorische Standard-“edge-of-field“-Oberflächenwasserkörper-Szenario: grasbewachsene Pufferstreifen unmittelbar unterhalb des behandelten Feldes UND direkt angrenzend an ein Oberflächengewässer, nur von einem Feld Oberflächenabfluss erhaltend (hydrologisch unrealistisch) → die inhärenten Widersprüche dieses Szenarios müssten zuerst aufgelöst werden.

Typ A: Grasbewachsene Pufferstreifen, nicht direkt angrenzend an einen Oberflächenwasserkörper

Diese grasbewachsenen Pufferstreifen befinden sich in Hanglage oder in ebener Position unmittelbar unterhalb des behandelten Feldes. Sie können einen hochanstehenden Wasserspiegel aufweisen oder nicht, und sie grenzen nicht direkt an ein Oberflächengewässer an.

Im Falle eines edge-of-field-Puffers (nicht angrenzend an ein Oberflächengewässer) sollte die Standorthydrologie des VFS mit der des Feldes konsistent sein. Tatsächlich sollte der Bodentyp des VFS mit dem Bodentyp des mit PRZM modellierten Feldes identisch sein. Folglich müssten für das Projekt GERDA 102 verschiedene VFS parametrisiert werden, einer für jeden modellierten FST. Einige FOOTPRINT Hydrologic Groups FHG (R, S, T, U, V) haben undurchlässiges anstehendes Gestein. Wenn für einen dieser Böden ein VFS modelliert werden soll, muss der VFS auch diese undurchlässige untere Randbedingung aufweisen (entweder simuliert mit einer neuen Randbedingung oder angenähert mit $BC = 1$ und angepasster Tiefe des “Wasserspiegels” (vgl. Kap. II.7.8.1).

Wenn im Feld selbst keine Abflusskonzentration stattfindet, der VFS entlang des gesamten unteren (d.h. hangabwärts gelegenen) Randes des Felds vorhanden ist und der VFS in gutem Zustand ist, kann FWIDTH gleich der Länge des unteren Feldrands gesetzt werden.

Die initiale Wasserspiegeltiefe (WTD) kann auf saisonaler oder Monatsbasis mittels Wasserbilanzsimulationen (z.B. mit MACRO) für jeden FST bestimmt werden.

Typ B: Grasbewachsene Pufferstreifen direkt angrenzend an ein Oberflächengewässer (aber nicht notwendigerweise an ein Feld), konzentrierten Oberflächenabfluss erhaltend

Diese VFS befinden sich in unmittelbarer Nachbarschaft eines Oberflächengewässers und weisen einen hochanstehenden Wasserspiegel auf. Sie grenzen nicht notwendigerweise an ein behandeltes Feld an, und sie erhalten konzentrierten Oberflächenabfluss von mehreren Feldern (was einen niedrigen Wert von FWIDTH und hohe Oberflächenabflusshöhen implizieren würde).

Im Falle von VFS, die direkt an einen Bach angrenzen, sind einige FOOTPRINT Hydrologic Groups (z.B. diejenigen mit undurchlässigem anstehendem Gestein oder diejenigen, die nie einen hochanstehenden Wasserspiegel aufweisen), nicht realistisch. Tatsächlich tritt die Mehrheit der 102 in GERDA mit PRZM modellierten FSTs nicht in der unmittelbaren Nachbarschaft von Bächen (streams) auf. Die Situation ist anders für Teiche (ponds) und Gräben (ditches), die anthropogene Strukturen und damit im Prinzip mit allen FOOTPRINT Hydrologic Groups kombinierbar sind.

Wenn die Entscheidung getroffen werden sollte, auch diese Art von Puffern, die direkt an einen Bach angrenzen, zu parametrisieren, sollten die VFS als Auenboden parametrisiert werden, d.h. FOOTPRINT Hydrologic Group O, P, oder Q. Der Bodentyp des VFS wird also nicht notwendigerweise mit dem Bodentyp des Feldes übereinstimmen.

Wie soll man jedoch den FST des VFS kennen, wenn er nicht identisch zum FST des modellierten Feldes ist? Der einfachste und direkteste Ansatz wäre vermutlich, die Texturklassen von Ober- und Unterboden zu behalten, aber die Standorthydrologie und das Tiefenprofil der organischen Bodensubstanz zu ändern. Zum Beispiel:

FST Feld: N33n → FST des VFS am Rand des Baches: Q33a oder P33a

FST Feld: N22n → FST des VFS am Rand des Baches: Q22a oder P22a

FST Feld: R11n → FST des VFS am Rand des Baches: Q11a oder O11a.

Für diese Art Puffer wäre die initiale Wasserspiegeltiefe (WTD) vom aktuellen Wasserspiegel des angrenzenden Oberflächenwasserkörpers beeinflusst.

Typ C: Regulatorisches Standard-edge-of-field-Szenario: Grasbewachsener Pufferstreifen direkt unterhalb des behandelten Feldes UND angrenzend an ein Oberflächengewässer

Diese Pufferstreifen entsprechen dem regulatorischen Standardszenario eines "edge-of-field water body": Der VFS liegt direkt unterhalb des behandelten Feldes UND grenzt direkt an ein Oberflächengewässer an, und er erhält Oberflächenabfluss nur von einem Feld. Dies ist hydrologisch unrealistisch, weil Oberflächenabfluss sich in der Landschaft akkumuliert und konzentriert und das Feld nahe an einem Talweg liegt. Obwohl man sich eine Situation vorstellen könnte, wo kein weiterer Acker oberhalb des modellierten Feldes liegt und hangauf-

wärts kein Oberflächenabfluss generiert wird, ist diese Vorstellung schwierig auf das Upstream Catchment des FOCUS stream zu extrapolieren.

Es besteht bereits die Schwierigkeit, dass die meisten der 102 in GERDA mit PRZM modellierten FSTs nicht in direkter Nachbarschaft zu Bächen auftreten, weil die Standorthydrologie nicht passt. Man könnte sich folgende Lösung vorstellen:

- Wenn ein Stream-Szenario simuliert werden soll, werden die VFS als zu FOOTPRINT Hydrologic Group O, P oder Q gehörend modelliert.
- Wenn ein Ditch- oder Pond-Szenario simuliert werden soll, werden die VFS mit dem gleichen FST modelliert wie das behandelte Feld.
- Hinsichtlich der Abflusskonzentration (Parameter FWIDTH = effektive Fließbreite):
 - Wenn man von den Annahmen ausgeht, dass (i) nur auf dem unmittelbar Gewässerangrenzenden Feld Oberflächenabfluss entsteht und in den VFS eintritt, (ii) auf dem Feld selbst keine Abflusskonzentration stattfindet, und (iii) der Übertritt des Oberflächenabflusses vom Feld in den VFS entlang des gesamten Feldrands VFS flächig erfolgen kann, dann wäre $FWIDTH = \text{Feldbreite} = 100 \text{ m}$ zu setzen. Aus Sicht der Autoren erscheint es jedoch nicht gerechtfertigt, das Zusammentreten dieser drei Bedingungen im Zulassungsverfahren als Annahmen für die Festlegung eines default-Wertes für FWIDTH zugrunde zu legen.
 - Die Annahme ist wenig realistisch, dass in dem 100 ha großen Upstream Catchment des Gewässerszenarios Stream *keine* Konzentration des Oberflächenabflusses stattfindet, zumindest in Landschaften mit einer Neigung der Landoberfläche ab etwa 1 – 2 %. Man sollte daher eher einen "effektiven" Wert von FWIDTH für das Stream-Szenario auswählen. In welcher Größenordnung dieser Wert anzusetzen ist, hängt von den Annahmen zur Relief-Ausformung im Einzugsgebiet ab (Hangneigung, Konvergenz des Abflusses auf der Landoberfläche). Für die Ermittlung von empirisch basierten, landschaftstypischen Werten für FWIDTH sind dazu GIS-Analysen in realen Einzugsgebieten erforderlich.

II.7.9.2 Kompromisslösung für GERDA

Für das Tool GERDA wurde folgende Kompromisslösung gefunden (Projekttreffen mit dem UBA, März 2014 in Gießen):

- GERDA simuliert die Wasserkörper Stream und Ditch. Der Pond wird vorerst nicht simuliert (siehe Kapitel I.3.6, Spiegelstrich „Gewässerszenarien“).
- Die Pufferstreifen liegen direkt unterhalb des behandelten Feldes und haben den gleichen FST wie das behandelte Feld → 102 verschiedene VFS sind für VFSSMOD parametrisiert worden (Anmerkung: die für GERDA gewählte Parametrisierung stimmt nicht überein mit der Parametrisierung von SWAN-VFSSMOD nach Brown et al. 2012).
- Über die direkte Nachbarschaft zu einem Oberflächengewässer wird keine Aussage getroffen, aber der VFS fungiert in der regulatorischen Entscheidung als Randstreifen am Gewässer.
- Untere Randbedingung der VFS:
 - VFS, die zu FOOTPRINT Hydrologic Groups L, M oder N gehören, werden mit der Lower Boundary Condition $BC = 0$ simuliert (kein Wasserspiegel vorhanden),

- VFS, die zu einer der anderen FHGs gehören, werden mit $BC = 1$ simuliert (hochstehender Wasserspiegel, d.h. Grund- oder Stauwasser, mit Dupuit-Forchheimer-Annahmen).
- Initiale Wasserspiegeltiefen (WTD) werden mittels 30-jähriger Wasserbilanzsimulationen mit MACRO geschätzt. WTD wird auf Kalendermonatsbasis berechnet als Median der täglichen Wasserspiegeltiefen. Diese werden von MACRO als Tiefe des höchsten gesättigten Layers (Variable PWT) berechnet und beinhalten damit den Kapillarsaum.
- Die Fraktion des Upstream Catchment, die mit VFS ausgestattet ist (fb), wird vorerst für den Stream auf 0,6 und für den Ditch auf 0,5 gesetzt. Dies bedeutet für beide Wasserkörper, dass von der nicht mit dem zu simulierenden PSM behandelten Fläche des Upstream Catchments *die Hälfte* mit VFS ausgestattet ist und die andere nicht.
- Die effektive Fließbreite FWIDTH, die den Grad der Abflusskonzentration widerspiegelt, kann in der Oberfläche der aktuellen GERDA-Version frei ausgewählt werden, sollte aber später abhängig von der regulatorischen Definition des Randstreifens fixiert werden (zur Problematik der Festlegung eines fixen Wertes für FWIDTH s. Kap. II.7.9.1, Absatz „Typ C“).
- Die Länge des VFS in Fließrichtung (VL) kann vom GERDA-Nutzer frei gewählt werden. Dies ist der Parameter, der die Risikomanagement-Auflage, d.h. die einzuhaltende Mindestlänge des bewachsenen Randstreifens in Fließrichtung, bestimmt. Unbeschadet von der Mindestlänge für VL, die sich nach einer VFSSMOD-Simulation ergibt, erscheint es im Hinblick auf Praktikabilität und Kontrollierbarkeit von Auflagen naheliegend, in der regulatorischen Praxis feste Werte für VL zu wählen (beispielsweise 5, 10 oder 20 Meter).

II.8 Verwendung des TK-TD-Modells GUTS zur Bestimmung von Worst Case-Expositionsszenarien

II.8.1 Einleitung

Bei der Bewertung der Umweltrisiken von Pflanzenschutzmitteln (PSM) im Rahmen des Zulassungsverfahrens müssen die möglichen Expositionsszenarien, durch die die betrachteten Substanzen in die aquatische Umwelt gelangen können, ermittelt und im Zuge der Expositionsbeurteilung berücksichtigt werden. Für die Entscheidungsfindung, ob das betrachtete PSM eine nicht vertretbare Wirkung auf aquatische Populationen haben kann, ist es also notwendig, die identifizierten Expositionsszenarien hinsichtlich ihrer ökotoxikologischen Relevanz zu überprüfen und festzustellen, welche der berechneten Szenarien die größten Wirkungen hervorrufen (worst case-Szenarien). Diese Wirkungen auf aquatische Organismen können dabei, abhängig von den jeweiligen Substanzeigenschaften und des Expositionsmusters, durch verschiedene toxikologische Prozesse mit unterschiedlichen Konsequenzen für die Lebensgemeinschaften ausgelöst werden (Reinert et al. 2002). Neben akuten letalen Effekten haben somit auch subletale oder chronische Wirkungen auf Individuen einen Einfluss auf die Abundanzen von Populationen und die Zusammensetzung von Lebensgemeinschaften. Zudem kann es zu verzögerten Effekten bei Individuen (Beketov and Liess 2009) oder auch zu einer sogenannten *Carry Over Toxicity* (Ashauer et al. 2010) kommen, bei der höhere Effektraten durch aufeinanderfolgende Expositionen beobachtet werden. Diese verschiedenen Auswirkungen auf Populationen sollten nach Möglichkeit im Zuge der Risikobeurteilung und für die Wahl der worst case-Szenarien berücksichtigt werden (s. dazu auch Kap. II.9.2)

Bei Labortests mit einer definierten möglichst konstanten Konzentration entspricht dem relevantesten Expositionsprofil folglich immer die Testreihe mit der höchsten eingesetzten Konzentration. Daraus lässt sich jedoch nicht zwangsläufig ableiten, dass bei dynamischen Expositionsprofilen auch das Szenario mit dem höchsten Expositionsspeak (PEC_{max}) die größte ökotoxikologische Relevanz hat, da diese höchste Konzentration im Verlauf des PSM-Eintrags in das betrachtete Gewässer zum Beispiel in einem nur sehr kurzem Zeitintervall auftreten kann. An dieser Annahme ist die Wahl des realistischen worst case-Szenarios in der derzeitigen Risikobewertung auf EU-Ebene für die Genehmigung eines Wirkstoffes gemäß Verordnung (EU) Nr. 1107/2009 jedoch angelehnt, da in der Regel der PEC_{max} mit der NOEC oder EC_x eines ökotoxikologischen Tests verglichen wird.

Neben der Höhe des größten Peaks können Expositionsprofile im Zeitverlauf jedoch unter anderem auch durch die Anzahl und Breite der Expositionsspeaks charakterisiert werden (Brock et al., 2009). Mit Hilfe von TWA (Time Weighted Averages) über bestimmte Zeitfenster kann dies berücksichtigt werden, wenn bestimmte Voraussetzungen erfüllt sind (s. dazu EFSA 2013). Weiterhin können auch die Intervalle zwischen den Peaks und die allgemeine Grundbelastung unterschiedliche Rollen für das Ausmaß der Effekte einer Substanz spielen (Abb. II.8-1). Diese unterschiedlichen Merkmale von Expositionsszenarien, im Weiteren auch Deskriptoren genannt, determinieren also die ökotoxikologische Wirkung eines Szenarios und können dabei, je nach betrachteten Organismen und Chemikalien, in ganz unterschiedlichen Ausprägungen wirken. In dieser Studie sollte die Bedeutung verschiedener Deskriptoren auf die Effekte ermittelt werden. Dazu wurden Expositionsprofile und die zu erwartenden ökotoxikologischen Effekte mit Hilfe von TK-TD-Modellen (Toxikokinetik-Toxikodynamik) gekoppelt.

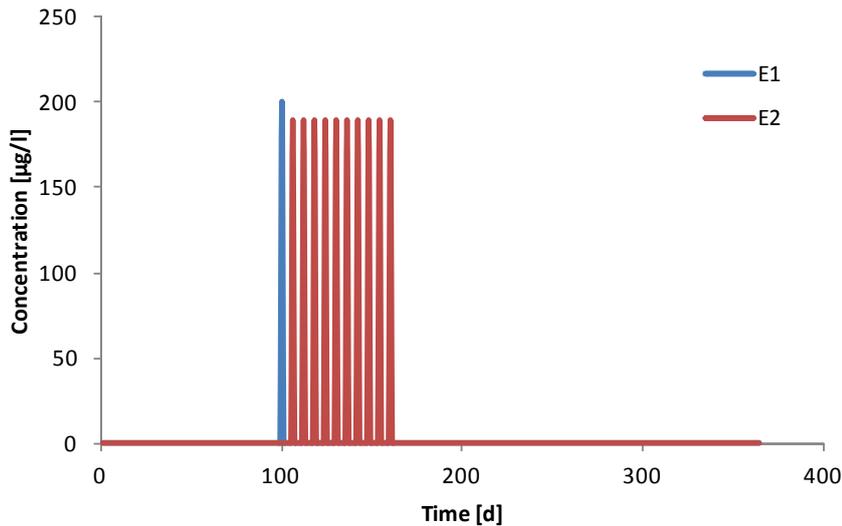


Abb. II.8-1: Vereinfachtes Beispiel für zwei Expositionsprofile (E1= blau, E2= rot). Aus ökotoxikologischer Sicht hätte E2 im zeitlichen Verlauf einen größeren Einfluss auf Populationen, deren Organismen in dieser Konzentration sensitiv auf die Expositionskonzentration reagieren können. Würde nur die PECmax zur Bewertung herangezogen, würde das Szenario E1 aufgrund des als worst case-Szenario bestimmt werden. Je nach Dauer des Zeitfensters würde einTWA-Ansatz E2 als worst case identifizieren.

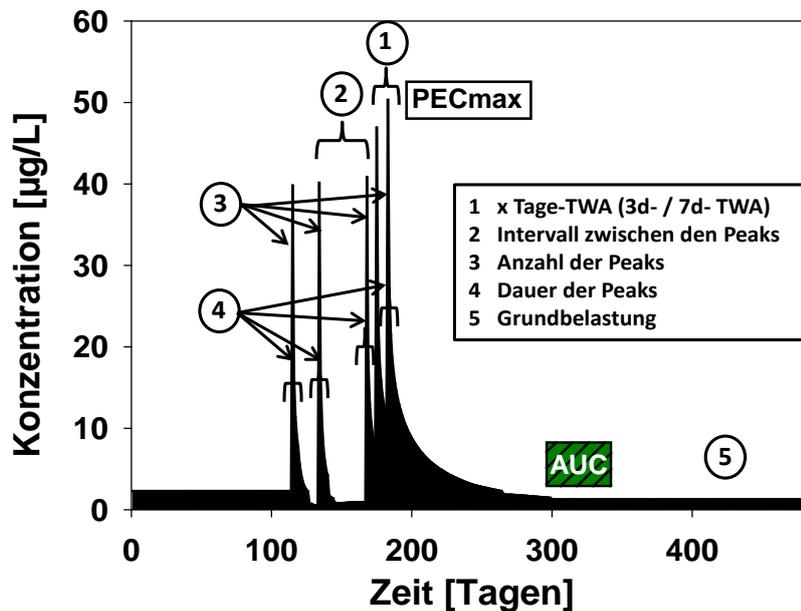


Abb. II.8-2: Darstellung der Deskriptoren eines Expositionsprofils, die mutmaßlich einen Einfluss auf die ökotoxikologische Relevanz eines Szenarios haben (AUC = Area Under the Curve).

TK-TD-Modelle sind aktuell die einzigen wissenschaftlichen Ansätze, um die Effekte dynamischer Expositionsprofile vorherzusagen. Es kann dabei angenommen werden, dass sich die mittels TK-TD-Modellen ermittelten Effekte und Unterschiede zwischen Szenarien auf Individuenebene in ähnlicher Form auch für die Populationsebene gelten. Ziel der hier vorgestellten Untersuchung ist es, die Relevanz verschiedener Merkmale von Expositionsprofil (s. Abb. II.8-2) für die ökotoxikologischen Auswirkungen eines Szenarios zu analysieren. Darauf basierend

sollte ein Deskriptor der Expositionsprofile ermittelt werden, mit dem die ökotoxikologische Relevanz eines Szenarios möglichst genau und protektiv vorhergesagt werden kann.

II.8.2 Methoden

Zur Ermittlung von Deskriptoren zur Identifizierung von realistic worst case-Expositionsszenarien wurde im ersten Schritt das toxikokinetische/toxikodynamische (TK-TD)-Modell GUTS (General Unified Threshold model of Survival, Jager et al. 2011) verwendet.

GUTS erlaubt eine Quantifizierung der Mortalität von Organismen bei einer dynamischen Expositionskonzentration der betrachteten Chemikalie über die Zeit (Ashauer et al. 2006, 2010; Jager et al. 2005, 2009; Lee et al. 2002, Schuler et al. 2006; Kulkarni et al. 2013). GUTS ist ein generelles Modell, welches das Überleben in Abhängigkeit von einer zeitlich dynamischen Exposition beschreibt, in dem es die Kinetiken der Aufnahme und Ausscheidung des Schadstoffs und damit den Verlauf der internen Konzentration simuliert und aus dieser dann die letalen Effekte ableitet, wobei auch hierbei der zeitliche Verlauf von Aufbau und Reparatur eines Schadens erfasst werden. Für einen Einsatz in der Risikoanalyse wird ein solches Modell an den Daten eines oder mehrerer ökotoxikologischer Tests kalibriert, möglichst an einem anderen Datensatz überprüft und dann zur Vorhersage der Überlebensrate bei anderen Expositionsmustern (z.B. längere Exposition) verwendet (s. z.B. Ashauer et al. 2013).

Hier wurde dieses Modellkonzept jedoch nicht verwendet, um Überlebensraten möglichst genau vorherzusagen, sondern nur um verschiedene Expositionsprofile nach ihrem ökotoxikologischen Potential zu sortieren. Dafür ist entscheidend, dass unterschiedliche Kombinationen der Toxikokinetik (Verlauf der internen Konzentration) und der Toxikodynamik (Aufbau eines Schadens, der bei Überschreiten einer Schwelle einen Effekt auslöst, sowie Reparatur und Wiedererholung) durchgespielt werden können. Die Autoren vermuten, dass die Art des Effektes (oder des Stressors) für die Reihung der Expositionsprofile eine deutlich geringere Rolle spielt. Ein Nachweis ist jedoch erst möglich, wenn geeignete Modelle zu subletalen Effekten (z.B. Reproduktion, Entwicklung) verfügbar sind.

Die Quantifizierung der toxikokinetischen Prozesse erfolgte dabei über eine integrierte Scaled Internal Concentration. Auf Basis dieser abgeschätzten internen Konzentration kann das Überleben des betrachteten Organismus ermittelt werden. Dies wird durch die Annahme eines Stochastic Death-Mechanismus im Modell berechnet. Dabei wird die Mortalität innerhalb der betrachteten Population als stochastischer Prozess beschrieben, abhängig von einem Schwellenwert (z) und einer killing rate (kk) für Expositionskonzentrationen oberhalb dieses Schwellenwerts. Zusammen mit der dominant rate constant (ke), mit der die interne Konzentration beschrieben wird, basiert das hier verwendete TK-TD-Modell auf drei Parameter, die über den zeitlichen Verlauf der Mortalität in einem Standard-Akut-Toxizitätstest (toxikodynamische Daten) kalibriert wurden; Details des Modells in Jager et al. (2001).

Um stringente, ganzheitlich geltende Erkenntnisse gewinnen zu können, wurden sowohl die Expositionsprofile der Szenarien, als auch die TK-TD-Parameter und damit die Organismen/Chemikalien-Kombinationen mit einer möglichst hohen Variabilität gewählt, um alle real vorkommenden Möglichkeiten abzudecken. Für die Szenarien und für die GUTS-Parameter wurden dabei zum einen auf theoretisch mögliche Werte aus allen realistischen Größenordnungen zurückgegriffen, zum anderen aber auch reale Organismus/Chemikalie-TK-TD-Parameter (13 Kombinationen) und Szenarien (8 FOCUS-Szenarien) gewählt. Zusätzlich wurden

weitere 400 Expositionsprofile und 400 Parameterkombinationen für GUTS zufällig generiert und die jeweiligen Überlebenswahrscheinlichkeiten simuliert. Eine Übersicht über die unterschiedlichen durchgeführten Untersuchungen ist in Tab. 8:II-1 festgehalten. Die Eigenschaften der eingesetzten Szenarien und verwendeten TK-TD-Parameter sind in den Kap. II.8.2.2 und II.8.2.3 dargestellt.

Tab. II.8-1: Übersicht über die untersuchten Szenarien und TK-TD-Parameterkombinationen in der Studie.

Untersuchung	TK-TD-Parameter	Szenario
1.1	realistisch (n=13) (Spezies-Chemikalien-Kombination)	realistisch (m=8) (FOCUS)
1.2	theoretisch	
1.3	zufällig (n= 200)	
2.1	realistisch (n=13) (Spezies-Chemikalien-Kombination)	theoretisch (m=15)
2.2	theoretisch	
3.1	realistisch (n=13) (Spezies-Chemikalien-Kombination)	zufällig (m=400)
3.2	theoretisch	
3.3	zufällig (n= 200)	
4	ausgewählt	GERDA (m=11*30)

Zusätzlich zu den GUTS-Simulationen wurden auch die Bedeutung verschiedener Expositionsmuster für subletale Effekte und Effekte auf Populationsebene untersucht. Dazu wurden Simulationen mit einem Individuen-basierten Populationsmodell von *Daphnia magna* (IDaMP, Preuss et al. 2009) und einem einfachen logistischem Populationsmodell¹ (Barnthouse 2004) verwendet.

Im Daphnienmodell wurde eine Dosis-Wirkungs-Funktion für die Abhängigkeit der Reproduktionsrate (Anzahl der Nachkommen je Brut) von der aktuellen Konzentration im Medium angenommen und die minimale Populationsdichte (nach Beginn der Exposition) als ökotoxikologischer Endpunkt verwendet.

Im logistischen Populationsmodell wurde die Populationswachstumsrate oder die Mortalitätsrate (ohne TK-TD) von der Konzentration im Wasser abhängig modelliert. Die minimale Populationsdichte nach Beginn der Exposition diente wiederum als ökotoxikologischer Endpunkt.

II.8.2.2 Verwendete Expositionsprofile

Die in dieser Studie verwendeten Expositionsprofile wurden in einer Auflösung von einem Konzentrationswert (µg/L) pro Tag simuliert. In den durchgeführten Untersuchungen zeigte sich, dass die Verwendung einer mittleren Tageskonzentration bei vielen Expositionsprofilen, vor allem in fließenden Gewässern, aufgrund der Nichtberücksichtigung von Expositionsspitzen zu

¹) $dN/dt = N r (K - N) / K - N m$

Mit N= Populationsdichte, r = Populationswachstumsrate, K = Kapazität und m = Mortalität durch Schadstoff

einer Unterschätzung der toxischen Effekte führen kann. Aus diesem Grund wurden für die berechneten FOCUS-Szenarien, die mit Konzentrationswerten pro Stunde vorliegen, die maximalen Konzentrationen für jeden Tag als Konzentrationswert eingesetzt.

Für den Vergleich der ökotoxikologischen Relevanz verschiedener Expositionsprofile ist es notwendig, dass die Szenarien für die unterschiedlichen Spezies-Chemikalie-Kombinationen in einem Bereich liegen, in dem die jeweilige Population eine Sensitivität gegenüber der Versuchssubstanz zeigt. Gleichzeitig sollte jedoch nicht bei mehreren betrachteten Szenarien die gesamte simulierte Population sterben (also eine Überlebensrate von 0 % simuliert werden), da in dem Fall die Expositionsprofile bezüglich ihrer ökotoxikologischen Relevanz nicht mehr unterscheidbar sein würden. Sobald ein Großteil der Szenarien bei Spezies-Chemikalien-Kombinationen also keine Effekte oder eine zu große Wirkung (= 100 % Mortalitätsrate) auf die Population hatte, wurde mittels eines ‚Scalingfaktors‘ (SF) für diese Parameterkombination die gesamte Konzentrationsreihe so angepasst, dass die Szenarien hinsichtlich ihrer Auswirkungen unterscheidbar wurden. Dieses Verfahren ist für die hier durchgeführte Untersuchung möglich, da nicht die absolute Mortalität der Organismen direkt verglichen wird, sondern lediglich die Rangfolge der Szenarien, aufsteigend sortiert und basierend auf der Überlebensrate (vgl. Kap. II.8.2.4). Voraussetzung für diese Vorgehensweise ist jedoch, dass alle Expositionsprofile bei derselben Spezies-Chemikalie-Kombination auch mit demselben Scalingfaktor verrechnet werden. Nur so werden die Überlebensraten der Szenarien pro Spezies-Chemikalie-Kombination miteinander vergleichbar. Bei dem Datenpaket 4 der Untersuchung 3 mit zufällig generierten Expositionsprofilen (s. Tab. II.8-1) wurden alle Spezies-Chemikalie-Kombinationen mittels des Scalingfaktors bis maximal zu einer Peak-Konzentration der spezifischen LC50 normiert. Auch dadurch wurde sichergestellt, dass die Konzentrationsprofile für jede untersuchte Spezies in einem relevanten Bereich lagen und die Reaktionen der Populationen unterscheidbar wurden.

Reale FOCUS-Szenarien

Bei den zunächst verwendeten Expositionsprofilen handelt es sich um Szenarien für verschiedene Gewässertypen (Pond, Ditch und Stream), die aus einer FOCUS-Simulation mit der hypothetischen Testsubstanz Modelmethrin generiert wurden. Diese Verbindung wurde in einem SETAC-Workshop (Modellink, 2013) als realistische Beispielsubstanz definiert und basiert auf der ELink-Substanz ELinkMethrin (Brock et al. 2009). Bei den Expositionsprofilen handelt es sich also um realistische Szenarienmuster für Pyrethroide. Die einzelnen Expositionsprofile sind in Abbildung II.8-3 dargestellt. Die Szenarien 1, 5, 7 und 8 beschreiben jeweils Konzentrationsverläufe in einem Stream, Szenario 2 und 3 sind Darstellungen eines Ditch und Szenario 4 und 6 von einem Pond.

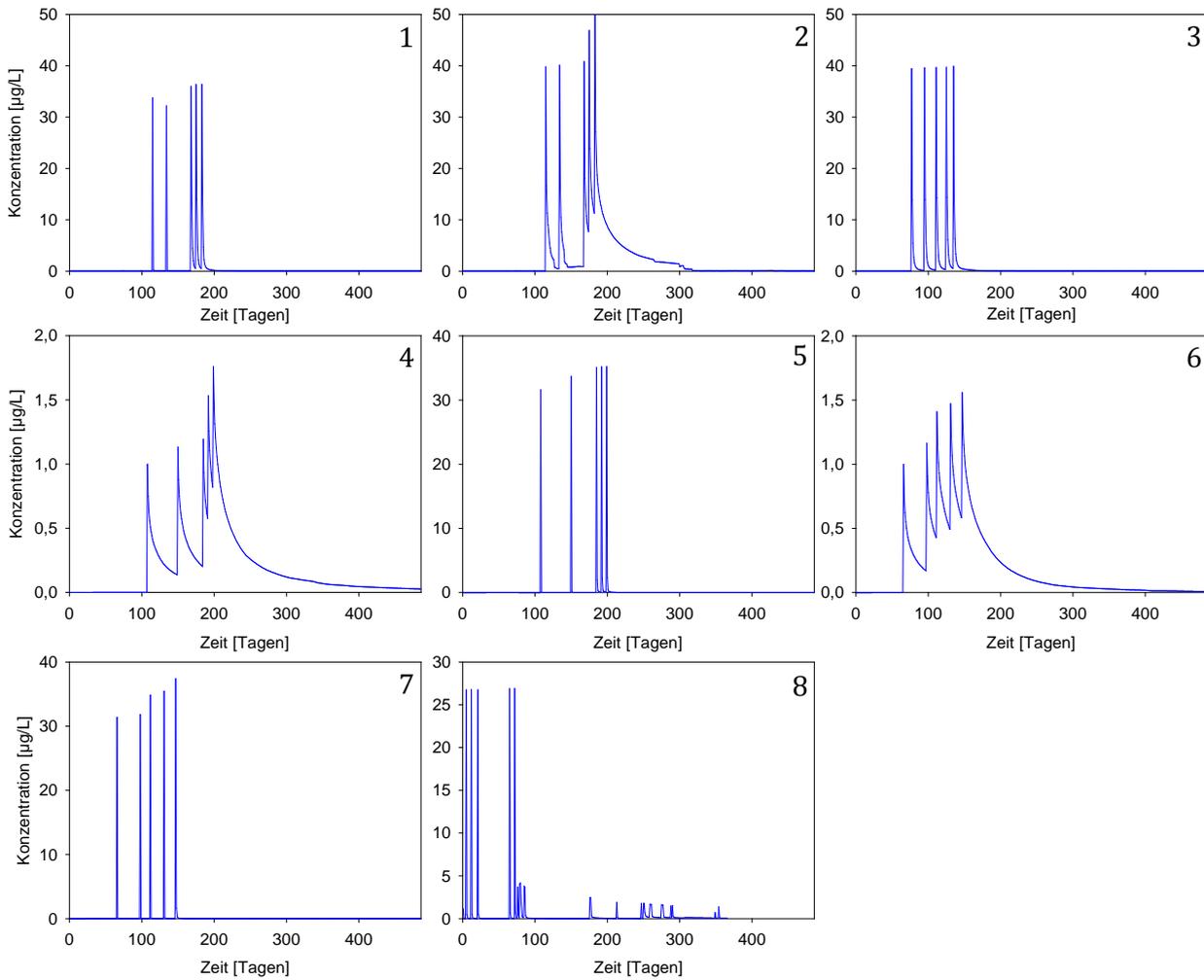


Abb. II.8-3: Expositionsprofile der untersuchten FOCUS-Szenarien über 485 Tage mit der Versuchssubstanz Modelmethrin.

Die beschreibenden Merkmale PECmax (µg/L) und TWA (µg/L) der dargestellten FOCUS-Szenarien sind in Tab. II.8-2 aufgelistet. PECmax ist dabei die höchste ermittelte Konzentration im Verlauf des Szenarios (Konzentrationen in Tageswerte), TWA ist die mittlere Konzentration über den zeitlichen Verlauf der Exposition.

Tab. II.8-2: Deskriptoren (PECmax und TWA) der untersuchten FOCUS-Expositionsprofile.

Szenario	S1 Stream	S2 Ditch	S3 Ditch	S4 Pond	S5 Stream	S6 Pond	S7 Stream	S8 Stream
PECmax (µg/L)	36,35	50,26	39,89	1,76	35,18	1,56	37,38	26,89
AUC (µg/L)	0,52	2,32	0,74	0,18	0,37	0,19	0,36	0,56
3d-TWA (µg/L)	18,32	32,91	20,25	1,52	12,64	1,33	13,10	9,23
7d-TWA (µg/L)	8,58	23,48	9,82	1,28	5,48	1,13	5,66	4,57

Theoretische Expositionsszenarien

Bei den theoretischen Expositionsprofilen handelt es sich um 18 verschiedene Szenarien mit demselben Zeitintervall (40 Tage), jedoch mit Unterschieden im Konzentrationsverlauf und somit bei den Deskriptoren der Szenarien. Die Szenarien wurden so gewählt, dass zum einen durch eine möglichst hohe Variabilität in den Konzentrationsverläufen die verschiedensten Expositionsmuster abgedeckt sind. Zum anderen sollte durch die Wahl mehrerer Szenarien mit jeweils einem konstanten Deskriptor der Einfluss der Unterschiede des anderen betrachteten Deskriptors auf die Mortalitätsraten analysiert werden. Aus diesem Grund wurden die Szenarien 1 bis 9 mit jeweils gleichem AUC und Unterschieden in PECmax generiert. Die Szenarien 10 bis 13 besitzen denselben PECmax, jedoch verschiedene AUC-Werte. Bei den Szenarien 14 bis 18 werden beide Deskriptoren variiert. Die Werte der einzelnen Szenario-merkmale sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst:

Tab. II.8-3: Deskriptoren PECmax und AUC der untersuchten theoretischen Szenarien.

Szenario Nr.	1	2	3	4	5	6	7	8	9
PECmax($\mu\text{g/L}$)	100	36	500	250	100	50	200	200	250
AUC($\mu\text{g/L}$)	34,14	34,19	34,17	34,19	34,16	34,17	34,16	34,16	34,19
Szenario Nr.	10	11	12	13	14	15	16	17	18
PECmax($\mu\text{g/L}$)	250	250	250	250	100	50	500	250	250
AUC($\mu\text{g/L}$)	85,40	170,84	52,01	42,71	96,25	48,13	15,24	34,19	42,71

Die dazugehörigen Expositionsprofile im zeitlichen Verlauf sind in Abb. II.8-4 dargestellt.

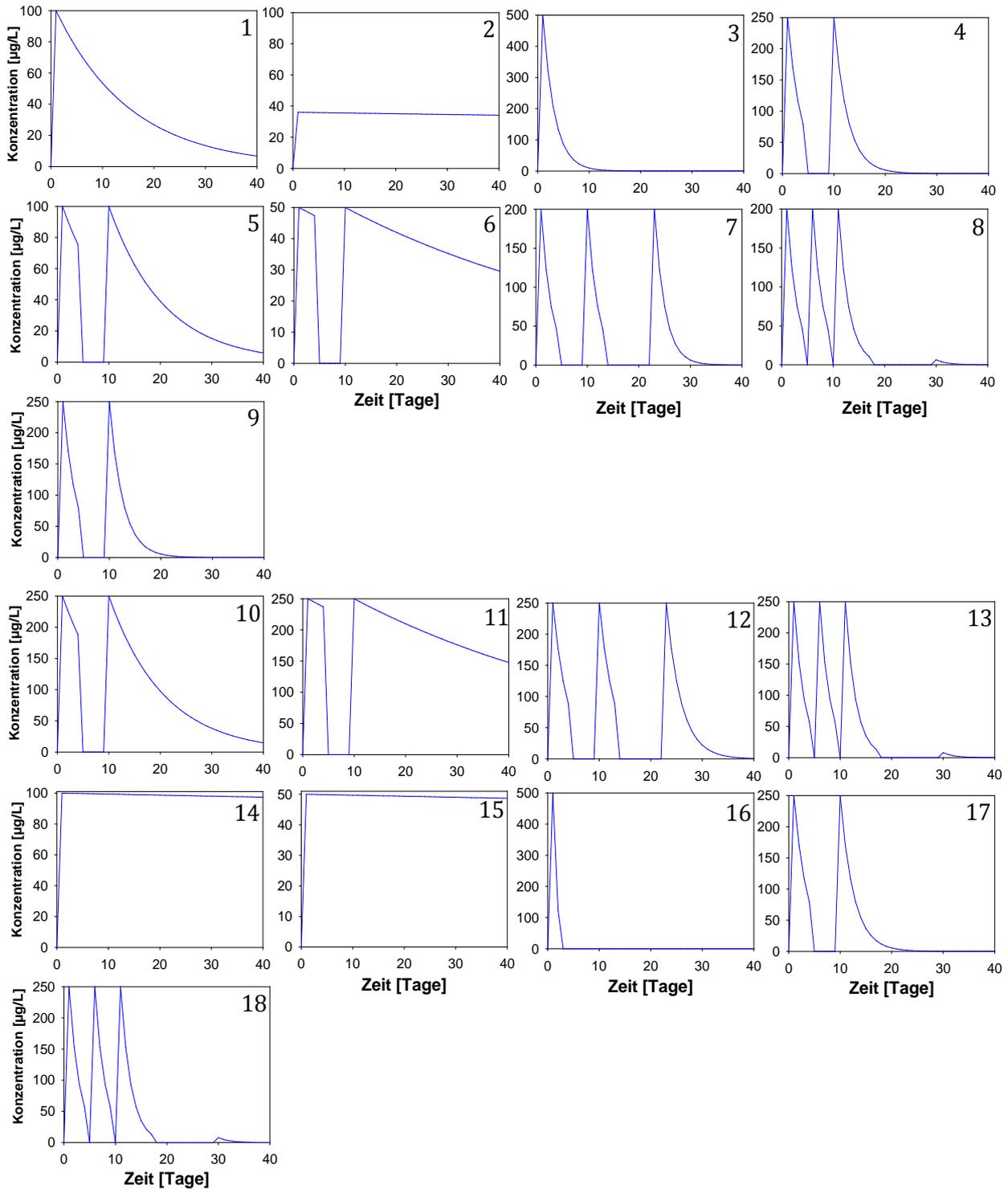


Abb. II.8-4: Expositionsprofile der untersuchten, theoretischen Szenarien.

Zufällige Expositionsszenarien

Um die Erkenntnisse dieser Untersuchung auf andere Szenarien abbilden und generische Schlussfolgerungen ableiten zu können, wurde in einer weiteren Simulationsreihe zufällige Expositionsprofile generiert und das Überleben bei den verschiedenen Spezies-Chemikalien-Kombinationen berechnet. Es wurden dabei insgesamt vier Szenario-Pakete mit jeweils 100

Szenarien getestet und die 100 Szenarien von jedem Paket untereinander im Hinblick auf die zu erwartende Toxizität verglichen. Die einzelnen Szenarien beruhen auf Tageskonzentrationen und besitzen jeweils eine Dauer von 485 Tagen, vergleichbar mit den FOCUS-Szenarien. Der Konzentrationsbereich der täglichen Exposition wurde zunächst zwischen 0 und 100 µg/L festgelegt.

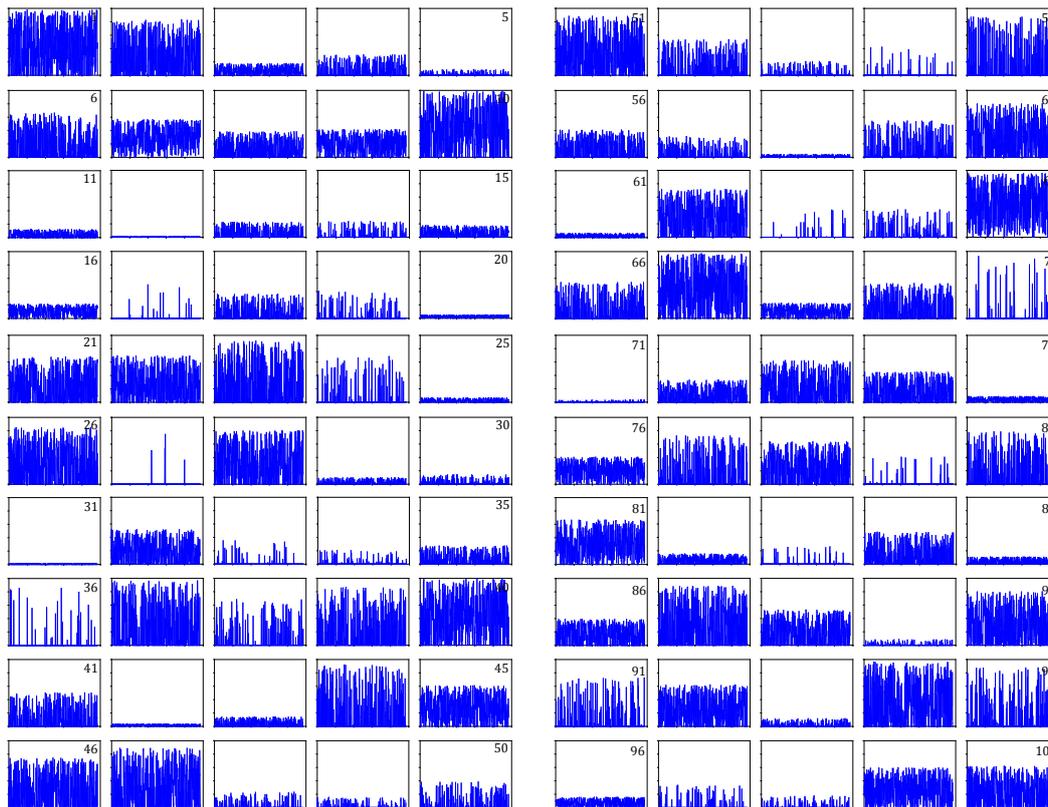
Die Anzahl der Expositionstage pro Szenario wurde im Datenpaket 1 zufällig zwischen 0 und 485 Tage festgelegt. Um in weiteren Simulationsreihen etwas realitätsnähere Konzentrationsmuster zu generieren, wurde die Anzahl der Expositionstage im Datenpaket 2 auf bis zu 50 Tage und im Datenpaket 3 und 4 auf bis zu 25 Tage beschränkt. Die Merkmale der verwendeten Szenario-Pakete gibt Tabelle II.8-4 wider.

Tab. II.8-4: Eigenschaften der betrachteten, zufällig generierten Expositionsszenarien.

Anzahl der Szenario-Pakete	4
Anzahl der Expositionsprofile pro Paket	100
Simulationstage pro Expositionsprofil	485
Konzentrationsbereich für jede Exposition (µg/L)	0 – 100
Anzahl der Expositionstage pro Profil	
Szenario-Paket 1	0 – 485
Szenario-Paket 2	0 – 50
Szenario-Paket 3	0 – 25
Szenario-Paket 4	0 – 25

Die einzelnen Expositionsprofile aller zufällig generierten Datenpakete sind in der folgenden Abbildung II.8-5 aufgeführt.

Datenpaket 1 (bis zu 485 Expositionstage pro Szenario):



Datenpaket 2 (bis zu 50 Expositionstage pro Szenario):

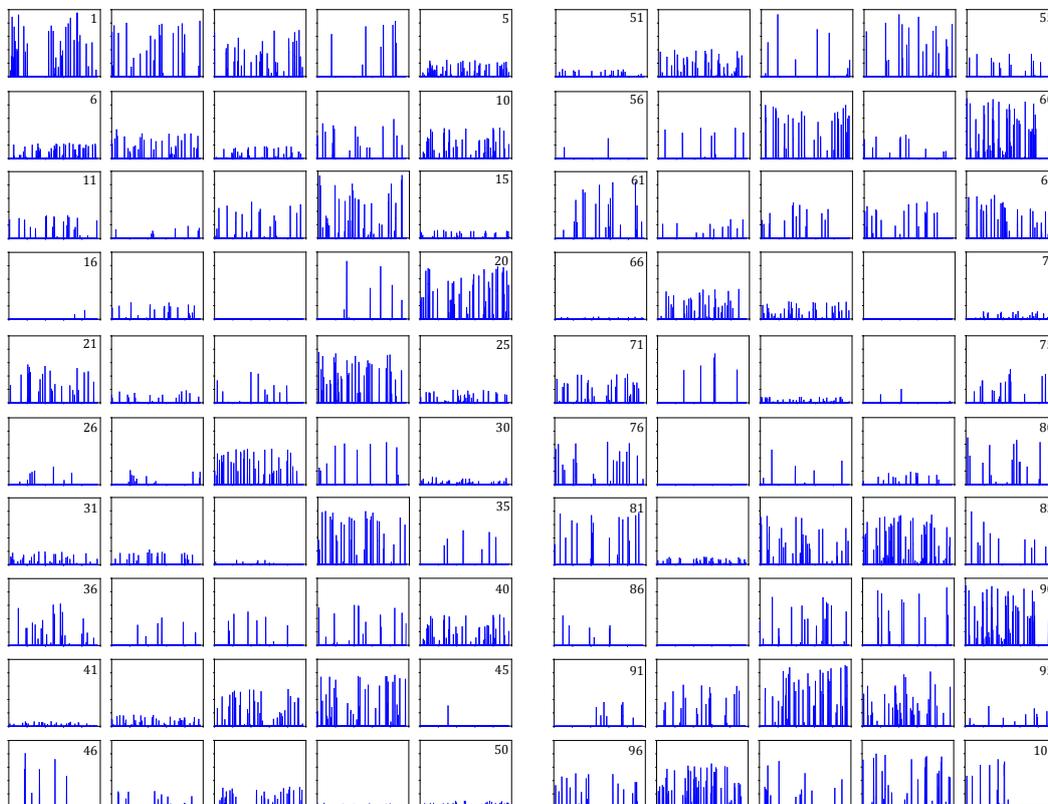
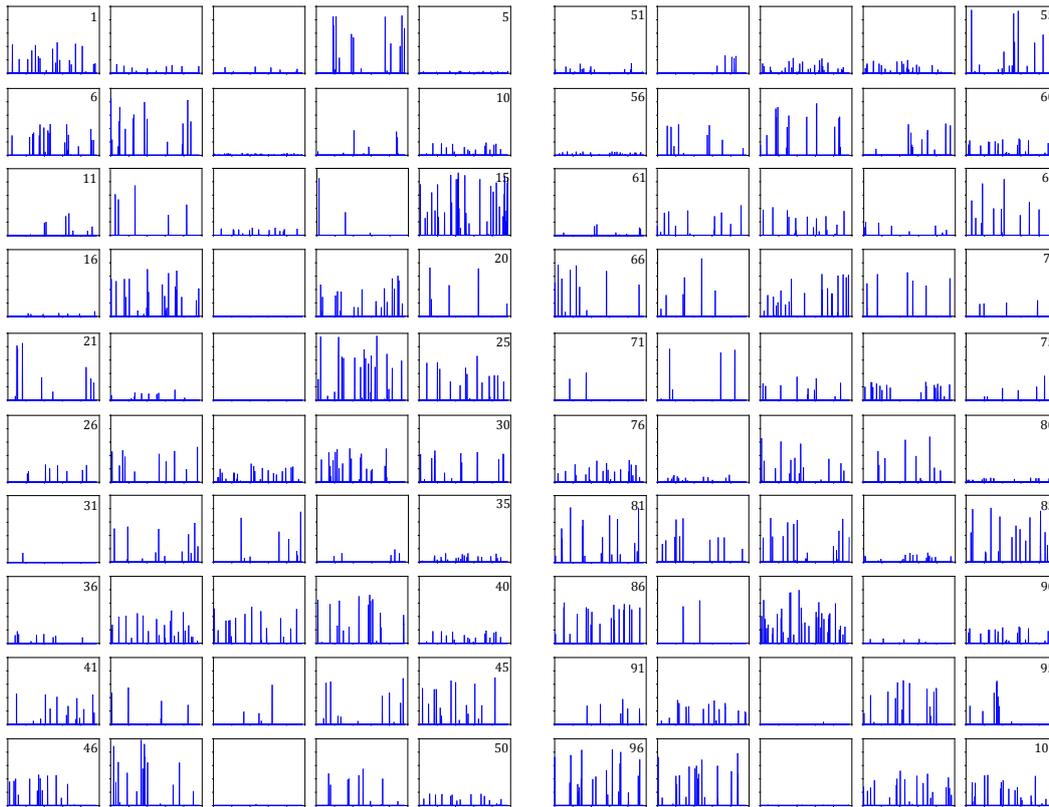


Abb. II.8-5: Expositionprofile der zufällig generierte Szenarien.

Datenpaket 3 (bis zu 25 Expositionstage pro Szenario):



Datenpaket 4 (bis zu 25 Expositionstage pro Szenario):

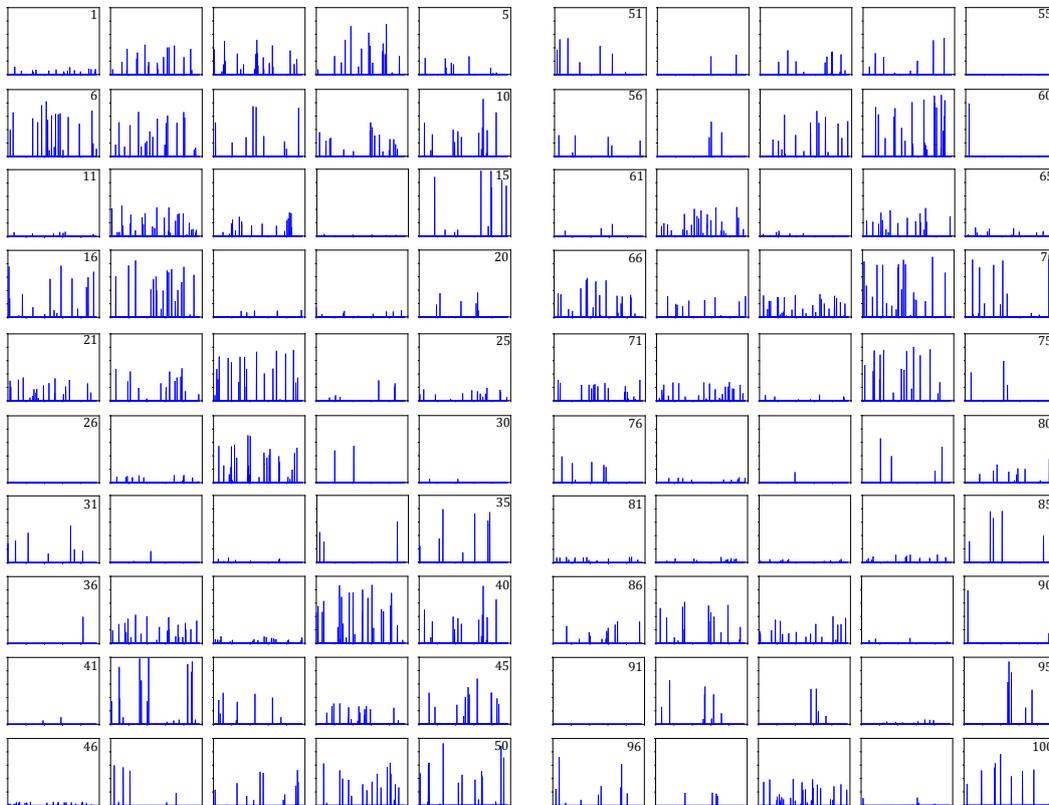


Abb. II.8-5: Expositionprofile der zufällig generierten Szenarien (Fortsetzung).

GERDA Szenarien

Die Ergebnisse aus den vorherigen Simulationen wurden in einer abschließenden Untersuchung (II.8.2) mit den ersten verfügbaren Expositionsprofilen aus dem GERDA-Projekt überprüft. Es handelte sich dabei um insgesamt 11 Szenarien mit einer Länge von jeweils 30 Jahren. Die Expositionsprofile sind Abb. II.8-6 dargestellt.

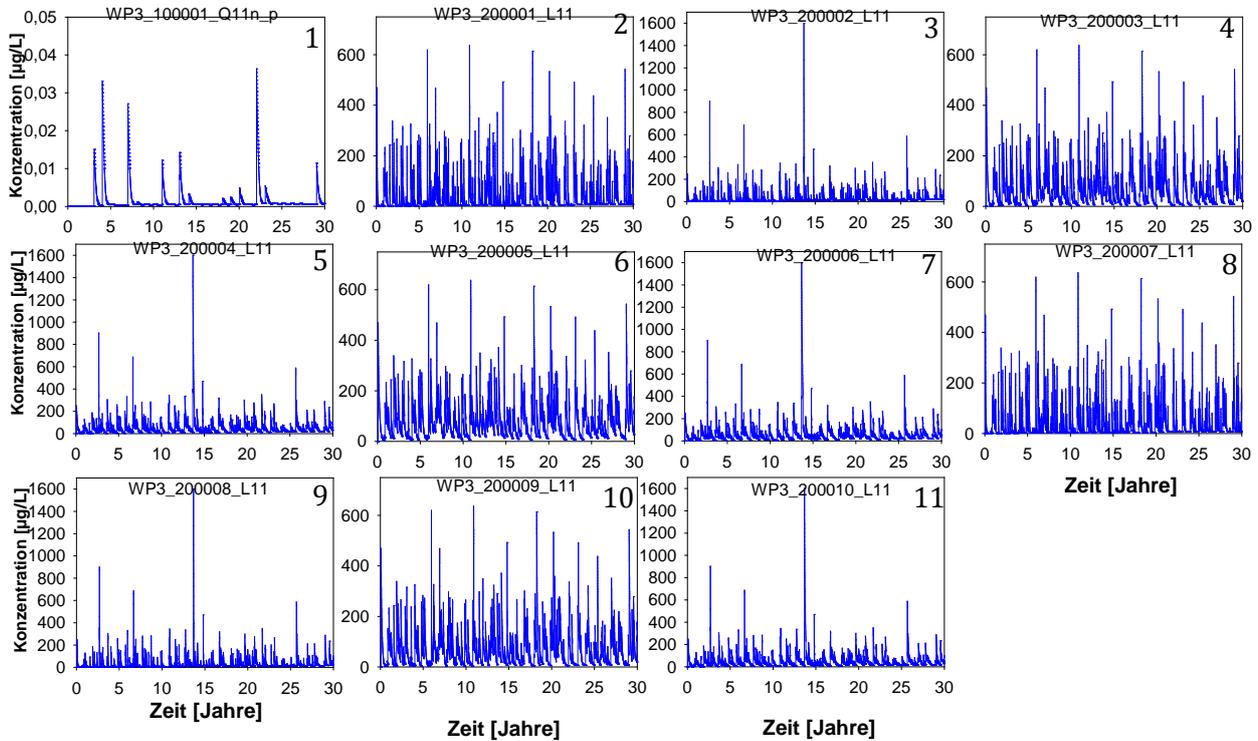


Abb. II.8-6: Expositionsprofile der GERDA-Szenarien über einen Simulationszeitraum von 30 Jahren.

In dieser Untersuchung wurden nicht nur die 11 Szenarien auf ihre ökotoxikologische Relevanz untersucht und mit den jeweiligen Expositionsdeskriptoren verglichen, sondern es wurden zudem die Deskriptoren der einzelnen Expositionsjahre aller Profile berechnet, geordnet und im Hinblick auf die separaten Ergebnisse der TK-TD-Simulationen analysiert. Ein Beispiel für die 30 betrachteten einzelnen Simulationsjahre eines GERDA-Expositionsprofils ist in Abb. II.8-7 dargestellt.

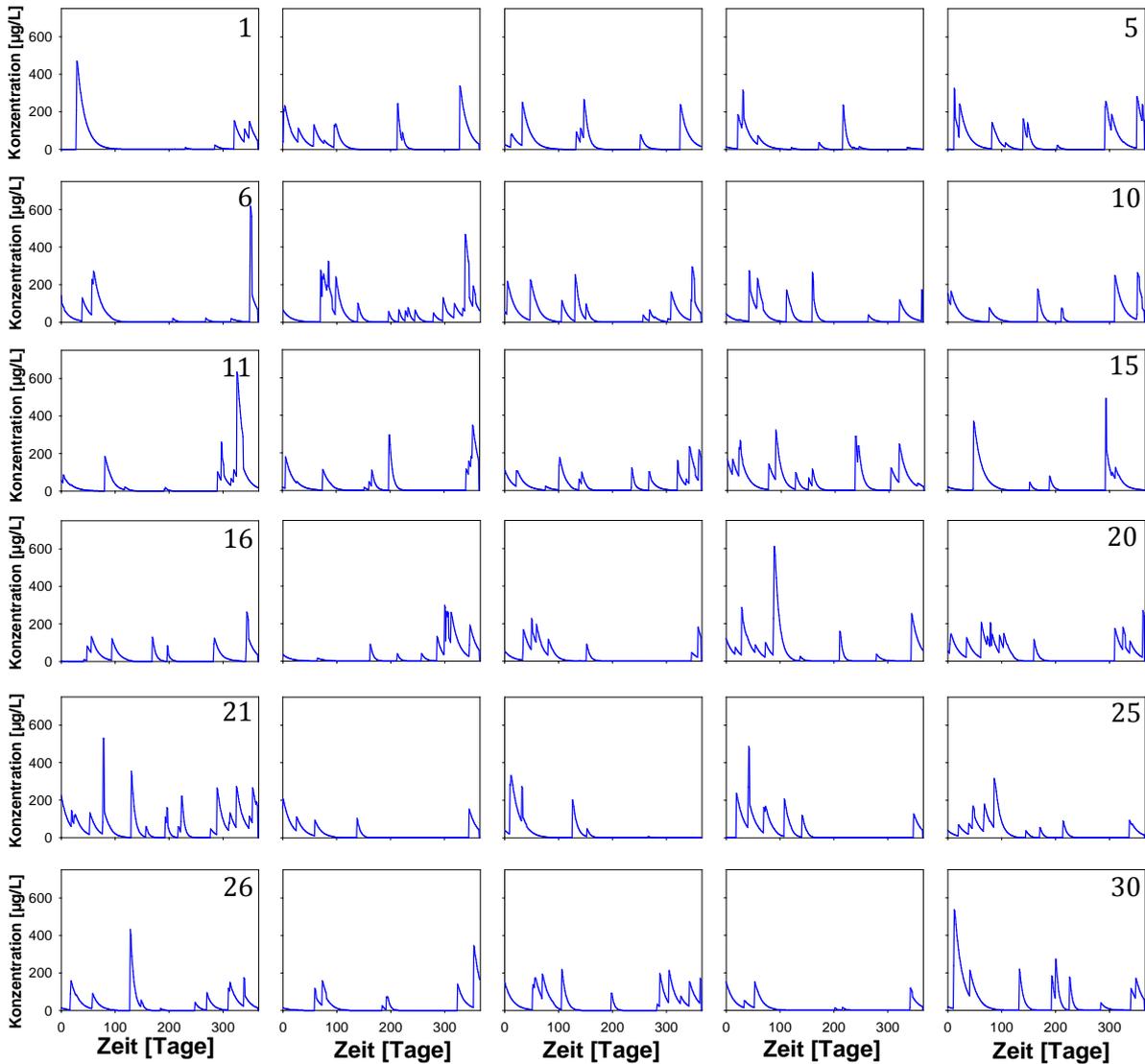


Abb. II.8-7: Darstellung aller 30 separater Simulationsjahre des GERDA-Szenarios WP3_200001_L11

II.8.2.3 Berechnung der Expositionsdeskriptoren

Für alle untersuchten Szenarien wurden zunächst die beschreibenden Profilm Merkmale (Deskriptoren), basierend auf den Empfehlungen des eLink-Reports (Brock et al., 2009) berechnet.

Als PECmax wurde dabei die höchste berechnete Konzentration des Expositionsszenarios gewählt. Der AUC entspricht die Summe der Konzentrationswerte über den zeitlichen Verlauf des gesamten Profils. Zur Identifizierung weiterer mutmaßlich verwendbaren Deskriptoren, die das Szenario charakterisieren und dabei stark mit der ökotoxikologischen Relevanz des Expositionsprofil korrelieren, wurden zusätzliche Merkmale wie die Anzahl der Expositionstage oder die Anzahl der Expositionstage mit einer Konzentration größer als 0,75 des PECmax berechnet und in der Untersuchung berücksichtigt. Andere Deskriptoren wie z.B. das Intervall zwischen den Peaks wurden nicht berücksichtigt, da sie von Vorneherein keine Korrelation mit dem Effekt erwarten lassen.

Zur Harmonisierung des hier dargestellten Verfahrens mit der aktuellen europäischen Vorgehensweise der Pflanzenschutzmittelbewertung (siehe auch EFSA Guidance Document, 2013) wurden als weitere Szenario-Deskriptoren die höchsten mittleren Konzentrationswerte der Expositionsprofile innerhalb eines Zeitraums von drei und sieben Tagen (Time Weighted Average, 3d-TWA bzw. 7d-TWA) ermittelt.

II.8.2.4 TK-TD-Parameter

Reale Parametersätze

Die drei benötigten TK-TD-Parameter für die GUTS-Simulationen (threshold z , killing rate k_k und dominant rate constant k_e) für jede Spezies-Chemikalien-Exposition stammen aus Kalibrierungen des Modells an Datensätze aus diversen (Akut-)Toxizitätstests. Die verwendeten Organismen, die getesteten Versuchssubstanzen und die Quellen der Datensätze sind in Tabelle II.8-5 dargestellt.

Tab. II.8-5: Verwendete Spezies-Chemikalie- Zusammensetzungen, durch unterschiedliche Parameter-Kombinationen in das TK-TD-Modell eingesetzt.

	Organismus	Chemikalie	Quelle
Crustacea	<i>M. leuckarti</i> Male	Triphenylzinn (TPT)	Kulkarni et al, 2013
Crustacea	<i>M. leuckarti</i> Nauplii	Triphenylzinn (TPT)	Kulkarni et al, 2013
Crustacea	<i>D. magna</i> Adulte	Triphenylzinn (TPT)	Preuss et al, unveröffentlicht
Crustacea	<i>D. magna</i> Neonate	Triphenylzinn (TPT)	Preuss et al, unveröffentlicht
Insecta	<i>Chaoborus</i>	Triphenylzinn (TPT)	Preuss et al., unveröffentlicht
Insecta	<i>Baetis rhodani</i> klein	Imidacloprid (IMI)	Becker, 2011
Insecta	<i>Baetis rhodani</i> groß	Imidacloprid (IMI)	Becker, 2011
Insecta	<i>Epeorus</i> klein	Imidacloprid (IMI)	Becker, 2011
Insecta	<i>Epeorus</i> groß	Imidacloprid (IMI)	Becker, 2011
Crustacea	<i>Gammarus</i>	Modelmethrin	Modellink, 2013
Insecta	<i>Chaoborus</i>	Modelmethrin	Modellink, 2013
Crustacea	<i>Daphnia magna</i>	Modelmethrin	Modellink, 2013
Crustacea	<i>Gammarus</i>	Diazinon	Jager et al, 2011

Theoretische Parametersätze

Bei den Untersuchungen mit theoretischen TK-TD-Parameterkombinationen wurden die Parameterwerte für den Schwellenwert (z), für die killing rate (k_k) sowie für die dominant rate constant (k_e) aus einem Wertebereich gezogen. Somit kann aufgrund der gewählten Variation der Parameterwerte innerhalb dieses Raumes angenommen werden, dass alle möglichen Parameterkombinationen (Substanz/Spezies-Kombination die real auftreten können) in der Untersuchung berücksichtigt wurden.

Der Schwellenwert z wurde dabei zwischen 0 und 200 $\mu\text{g/L}$ gewählt, k_k lag zwischen 0,00003 und 0,003 $\mu\text{g}^{-1} \text{h}^{-1}$ und k_e zwischen 0,00001 und 1 h^{-1} . In unterschiedlichen Simulationen wurden die Parameter aus diesem Bereich gewählt und miteinander kombiniert, wobei in ver-

schiedenen Durchläufen jeweils zwei der drei Parameter konstant gehalten wurden, um den Einfluss der Änderung dieser Prozesse auf die Mortalitätsraten untersuchen zu können.

Zufällige Parametersätze

Um systematische Fehler durch eine unzureichende Parameterwahl zu vermeiden und allgemeingültige Schlussfolgerungen aus den Untersuchungen ziehen zu können, wurden zusätzlich 400 zufällige Parameterkombinationen aus dem realistisch möglichen Parameterraum generiert. Auf Basis der Kalibration des Modells an die Ergebnisse der Akuttoxizitätstests wurde der Wertebereich dabei zwischen 0 und 100 $\mu\text{g/l}$ für z , 0 - 0,01 $\mu\text{g}^{-1} \text{h}^{-1}$ für k_k sowie 0 - 1 h^{-1} für k_e eingegrenzt.

II.8.2.5 Vorgehensweise Rangzuordnungen

Zur Identifizierung des worst case-Szenarios (nach GUTS) wurden bei jedem Datensatz die Szenarien für jede Parameterkombination sortiert, d. h. in eine Reihenfolge gesetzt beginnend mit dem Szenario mit der geringsten simulierten Überlebenswahrscheinlichkeit (worst case), bis zum Szenario mit der größten Überlebenswahrscheinlichkeit. Das worst case-Szenario für jede untersuchte Parameterkombination (bzw. Spezies-Chemikalie-Kombination) wurde demnach der Rang 1 zugeteilt.

Aus diesen GUTS-Simulationen für unterschiedliche Organismen wurde anschließend für jedes Expositionsprofil der tiefste beobachtete Rang ermittelt (=minGUTS) und mit dem Rang des Szenarios auf Basis unterschiedlicher Szenario-Deskriptoren (PECmax, AUC, absteigende Sortierung) verglichen. Ziel dieser Korrelationsuntersuchung der Rangreihenfolge war die Identifizierung eines Szenario-Deskriptors, der die ökotoxikologische Relevanz eines Expositionsszenarios im Vergleich zu anderen Szenarien am besten vorhersagen kann. Dies ist der Fall, wenn die ermittelten Ränge des betrachteten Deskriptors mit der Rangfolge nach GUTS (minGUTS) für alle Szenarien möglichst gut übereinstimmen. Neben der Betrachtung der einzelnen Expositionsdeskriptoren wurden diese auch in Kombination geprüft (min(PECmax, AUC)). Dabei wurde, ähnlich wie bei der Rangvergabe für minGUTS, der kleinste Rang der jeweils überprüften Expositionsmerkmale als Vergleichswert gewählt. Die Vorgehensweise dieser Untersuchung ist auch in Abb. II.8-8 veranschaulicht.

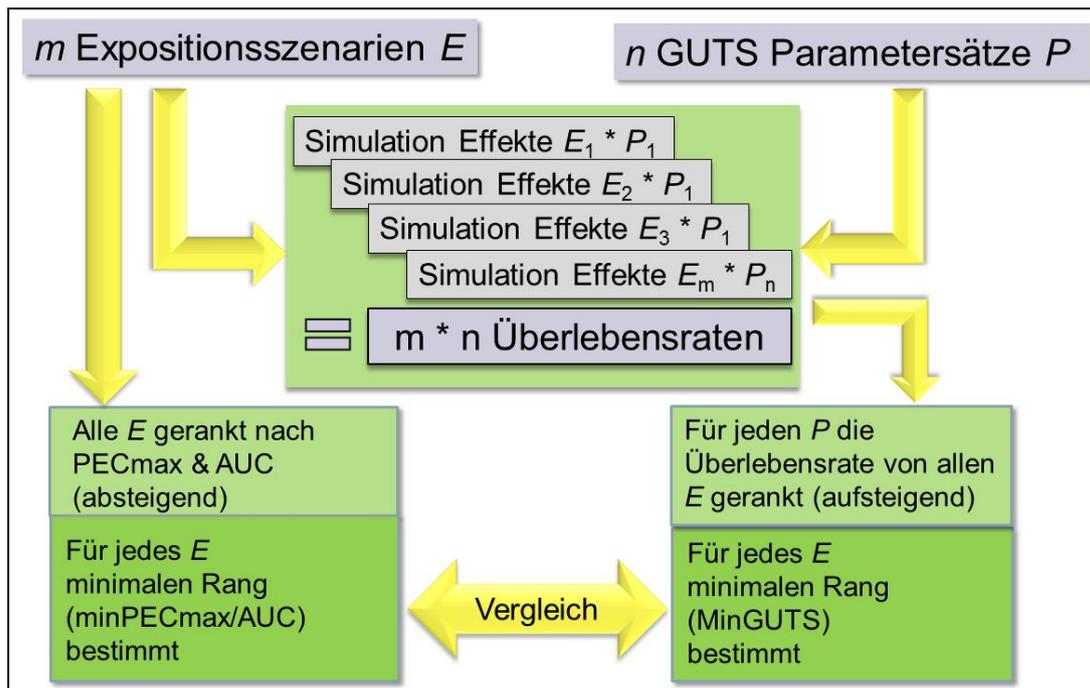


Abb. II.8-8: Schema der Vorgehensweise zum Vergleich der Szenario-Rankings nach den Szenario-Deskriptoren (PECmax, AUC, minPECmax/AUC) mit den Rankings nach dem TK-TD Modell GUTS.

Zusätzlich wurden für die weiteren berechneten Deskriptoren (3d-TWA, 7d-TWA, Anzahl der Expositionstage, Anzahl der Expositionstage $> 0.75 * \text{PECmax}$) die Expositionsprofile absteigend geordnet. Auch diese Rangzuordnungen wurden mit den Ergebnissen aus GUTS und mit den Rängen der anderen Deskriptoren verglichen. Ähnlich wie der $\text{min}(\text{PECmax}, \text{AUC})$ wurde als weiterer Deskriptor ein minimaler Rang $\text{min}(\text{all})$ für die Szenarien gebildet und mit minGUTS verglichen. Dieser Deskriptor setzt sich aus dem minimalen berechneten Rang aller betrachteter Einzelmerkmale zusammen (PECmax, AUC, Anzahl der Expositionstage, Anzahl der Expositionstage $> 0.75 * \text{PECmax}$, 3Tage-TWA, 7Tage-TWA).

II.8.2.6 Statistik

Neben der graphischen Visualisierung der Korrelation wurde für die ordinalskalierten Einteilungen der Expositionsprofile zusätzlich eine Rangkorrelationsberechnung nach Spearman durchgeführt. Die erhaltenen Rangkoeffizienten r_s sind in den jeweiligen Abbildungen und Tabellen dargestellt. Die r_s -Werte können in einem Wertebereich zwischen -1 und 1 liegen, wobei das Vorzeichen die Richtung der Korrelation und der Betrag die Stärke der Korrelation anzeigt.

II.8.3 Ergebnisse

Die Ergebnisse der TK-TD-Simulationen und die Vergleiche zu den Berechnungen der Szenario-Deskriptoren für reale Szenarien (Untersuchung 1), Zufallsgenerierte Szenarien (Untersuchung 2), theoretische Szenarien (Untersuchung 3) und den GERDA-Szenarien (Untersuchung 4) sind in den folgenden Kapiteln dargestellt.

II.8.3.1 FOCUS-Modellink-Szenarien (Untersuchung 1)

Realistische Parameterwerte (Untersuchung 1.1)

Die Ergebnisse der Rangzuordnungen der acht FOCUS-Szenarien nach den Deskriptoren PECmax, AUC, Min(PECmax, AUC) sind in Tab. II.8-6 dargestellt. Die Ränge basieren auf der höchsten Konzentration im Szenario (PECmax) beziehungsweise auf der mittleren Konzentration im Expositionszeitraum (AUC). Die absoluten Werte dieser Deskriptoren sind in Tab. II.8-2 festgehalten.

Tab. II.8-6: Rangzuordnungen der FOCUS-Szenarien auf Basis der der Szenario-Deskriptoren PECmax, AUC und Min(PECmax, AUC).

Szenario	Ränge nach		
	PECmax	AUC	MIN[PECmax, AUC]
S1	4	3	3
S2	1	1	1
S3	2	2	2
S4	7	8	7
S5	5	5	5
S6	8	7	7
S7	3	6	3
S8	6	4	4

Bei der Rangvergabe nach PECmax und AUC zeigt sich, dass bei beiden Deskriptoren das Szenario 2 den Rang 1 erhält, also die höchsten Konzentrationen aufweist. Das Szenario 6 besitzt hingegen den geringsten PECmax und nach diesem Deskriptor folglich den Rang 8, während das Szenario 4 in der Rangvergabe nach dem AUC den höchsten Rang erhält.

In Abb. II.8-9 ist die zeitliche Entwicklung der simulierten Überlebensrate für *Chaoborus*, *Gammarus* und *Daphnia magna* bei den berechneten Expositionsprofilen und Umweltkonzentrationen (jeweils Scalingfaktor = 1) der Testsubstanz Modelmethrin dargestellt. Die verwendeten TK-TD-Parameter dieser Simulationen stammen aus Kalibrationen des Modells an Testdatensätze mit dieser Substanz.

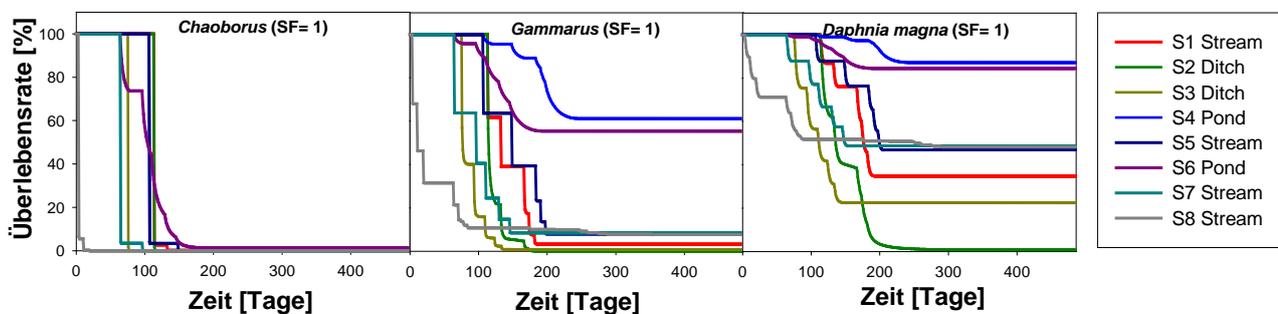


Abb. II.8-9: Simulierte Überlebensrate für Chaoborus, Gammarus und Daphnia magna für die untersuchten FOCUS-Expositionsprofile der Substanz Modelmethrin.

Es konnten dabei sehr große Unterschiede in der Sensitivität der untersuchten Organismen gegenüber der betrachteten Chemikalie Modelmethrin identifiziert werden. Bei *Daphnia magna* ist die ökotoxikologische Relevanz der einzelnen Szenarien durchaus zu unterscheiden, es werden bei den Szenarien Überlebensraten zwischen 1 % (Szenario 2, Ditch) und 87 % (Szenario 4, Pond) berechnet. Bei *Chaoborus* ist dies für die hier betrachteten Expositionsprofile nicht der Fall, die Population würde demnach bei den simulierten Bedingungen nicht fortbestehen können. Um die Szenarien hinsichtlich ihrer ökotoxikologischen Bedeutung jedoch ordnen zu können, wurden die Expositionsprofile in einer weiteren Simulation für jede Spezies-Chemikalien-Kombination mittels eines Scalingfaktors SF (hier SF=1) entsprechend angepasst, um für jede Spezies-Chemikalien-Kombination in einem Konzentrationsbereich zu liegen, in dem die Szenarien hinsichtlich der zu erwartenden Überlebensraten unterscheidbar wurden. Der zeitliche Verlauf dieser Überlebensraten für jede Spezies-Chemikalie-Konzentration und für alle FOCUS-Szenarien ist mit jeweiligem Scalingfaktor in Abb. II.8-10 festgehalten.

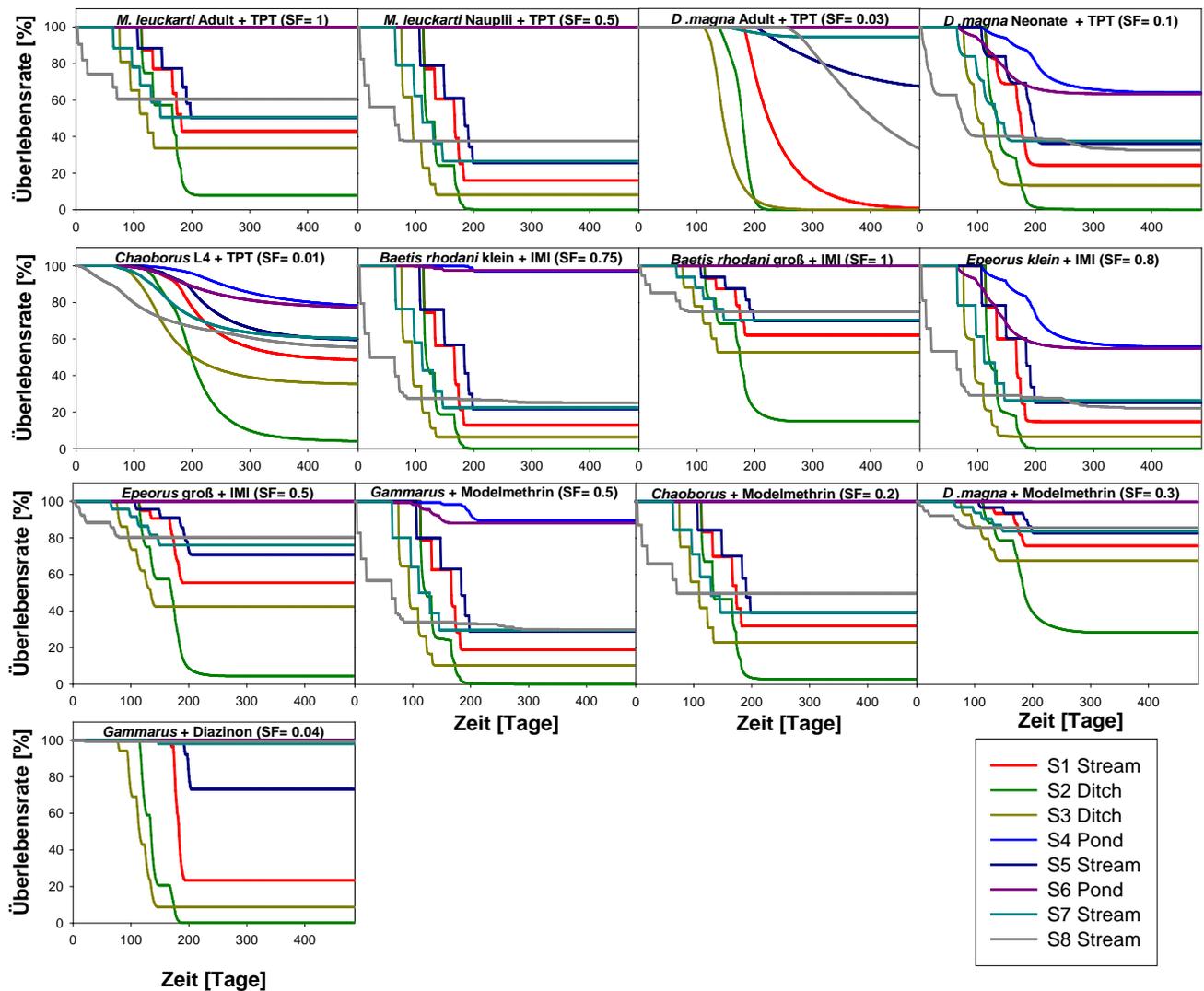


Abb. II.8-10: Überlebensrate aller Spezies-Chemikalien-Kombinationen der untersuchten FOCUS-Szenarien S1- S8. Neben den betrachteten Organismen und Chemikalien ist in jedem Diagramm auch der verwendete Scalingfaktor (SF) angegeben.

Die mit den Scalingfaktoren generierten Überlebensraten erlauben eine Rangzuordnung der acht Szenarien für jede Spezies-Chemikalien-Kombination auf Basis des jeweiligen toxischen Potentials. Für jedes Szenario wird der kleinste zugewiesene Rang aus den unterschiedlichen Spezies-Chemikalien-Kombinationen als Rangwert minGUTS gewählt. MinGUTS entspricht also der relevantesten Einstufung eines Szenarios von allen betrachteten Organismen bzw. Chemikalien. Die minGUTS-Ränge für alle Szenarien sind in Tab. II.8-7 dargestellt. Zusätzlich sind hier die Rangdifferenzen zwischen den Szenario-Rängen aus GUTS und den untersuchten Deskriptoren (siehe Tab. II.8-7) festgehalten.

Tab. II.8-7: Ränge der FOCUS-Szenarien, geordnet aufsteigend nach der berechneten Überlebensrate aus den TK-TD-Simulationen (minGUTS). Weiterhin sind die Rangdifferenzen zwischen minGUTS und den betrachteten Deskriptoren aus Tab. II.8--6 dargestellt.

Szenario	Ränge nach minGUTS	Rangdifferenz* minGUTS -		
		PECmax	AUC	MIN[PECmax, AUC]
S1	3	-1	0	0
S2	1	0	0	0
S3	2	0	0	0
S4	7	0	-1	0
S5	4	-1	-1	-1
S6	7	-1	0	0
S7	4	1	-2	1
S8	4	-2	0	0

*) Erklärung Rangdifferenzen: 0 = Relevanz des Szenarios durch Deskriptor vorhergesagt;
 positiver Wert = Protektive Vorhersage;
 negativer Wert = Unprotektive Vorhersage

Ein negativer Wert der Rangdifferenz bedeutet, dass der betrachtete Deskriptor ein unprotektiver Vorhersagewert für die ökotoxikologische Relevanz der Szenarios ist, da die Szenarien in diesen Fällen nach dem TK-TD-Modell einen relevanteren Rang einnehmen als nach dem Szenariomerkmals (PECmax, AUC, min(PECmax,AUC)). Es zeigt sich, dass bei diesen Simulationen besonders die einzelnen Deskriptoren PECmax und AUC relativ unprotektiv sind. Der AUC-Wert generiert für drei der acht Szenarien unprotektive Ränge, bei PECmax sind es sogar vier von acht Szenarien. Wenn man den Deskriptor min(PECmax,AUC) verwendet, so wird nur noch einem Szenario (S5) eine zu geringe Relevanz zugeordnet. Dieses Szenario ist jedoch sowohl im Hinblick auf das Profil der Exposition (Abb. II.8-11), als auch im Vergleich des PECmax (35,18 µg/L) und des AUC (0,37 µg/L) dem Szenario S7 (PECmax: 37,38 µg/L, AUC: 0,36 µg/L) sehr ähnlich. Demzufolge sind die simulierten Überlebensraten vieler untersuchter Organismen und Chemikalien (z.B. *M. leuckarti* + TPT, *D. magna* + TPT, *Chaoborus* + Modelmethrin, *Gammarus* + Modelmethrin, *B. rhodani* + IMI) in diesen Fällen kaum zu differenzieren (Unterschiede in der Überlebensrate < 1 %).

Die Korrelation zwischen den Rängen der betrachteten Deskriptoren und nach minGUTS ist in Abbildung II.8-11 dargestellt.

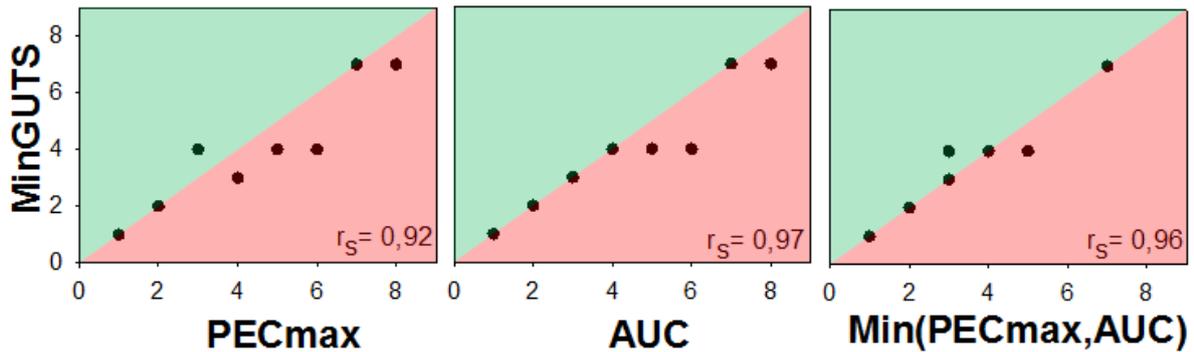


Abb. II.8-11: Auftragung der Ränge aller FOCUS-Szenarien, geordnet nach der Überlebenswahrscheinlichkeit der Organismen in diesen Szenarien (minGUTS), gegen den jeweiligen Rang des Szenarios nach den Expositionsprofil-Deskriptoren PECmax, AUC und min(PECmax, AUC). Im grünen Bereich der Diagramme liegt der Szenario-Rang nach Mortalität (minGUTS) über den jeweiligen Szenario-Rang nach den Expositionsprofil-Merkmalen. In diesen Fällen ist das Expositionsprofil-Merkmal ein protektiver Vorhersagewert für die Einordnung des Szenarios nach ökotoxikologischer Relevanz. Der Spearman-Korrelationskoeffizient r_s beschreibt die Korrelation zwischen den betrachteten Faktoren.

Auch diese Darstellung zeigt, dass man vor allem mit dem PECmax-Wert, der aktuell in der Pflanzenschutzmittel-Regulatorik als Bewertungsmaß verwendet wird, bei einigen Szenarien die ökotoxikologische Relevanz unterschätzen würde (roter Bereich der Abbildung). Auch wenn die Korrelation nach dem Spearman-Korrelationskoeffizienten für alle Deskriptoren relativ hoch ist, so ist besonders für PECmax und AUC eine Unsicherheit der falschen Wahl des worst case-Szenarios gegeben. MinPECmax/AUC erscheint in dieser Untersuchung als der grundsätzlich genauere Vorhersagewert. Diese Erkenntnisse wurden in der folgenden Untersuchung 2 (Kapitel II.8.2) mit weitaus mehr Szenarien ($n = 100$ pro Studie) überprüft.

Zufällige Parameterwerte (Untersuchung 1.2)

Die Rangvergabe der Simulationsergebnisse für die FOCUS-Szenarien mit zufällig generierten TK-TD-Modellparametern führt im Vergleich zu den Deskriptoren PECmax und AUC zu Korrelationen, die in Abb. II.8-12 dargestellt sind.

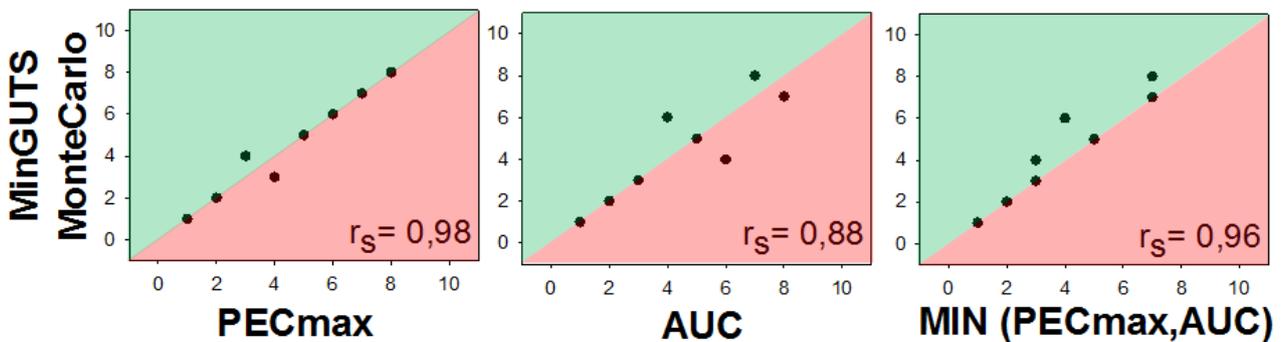


Abb. II.8-12: Auftragung der Ränge aller FOCUS-Szenarien, geordnet nach der berechneten Überlebenswahrscheinlichkeit in diesen Szenarien (minGUTS), gegen den jeweiligen Rang des Szenarios nach den Expositionsprofil-Deskriptoren PECmax, AUC und

min(PECmax, AUC). Die TK-TD-Simulationen erfolgte hier mit zufällig generierten Parameterwerten (Monte Carlo-Ansatz). Der Spearman-Korrelationskoeffizient r_s beschreibt die Korrelation zwischen den betrachteten Faktoren.

II.8.3.2 Zufällig generierte Expositionsszenarien

Die Korrelation zwischen den Rangzuordnungen aus GUTS und den betrachteten Deskriptoren sind für alle vier Datenpakete (n = 100 Szenarien) der zufällig generierten Expositionsprofile in Abbildung II.8-13 dargestellt.

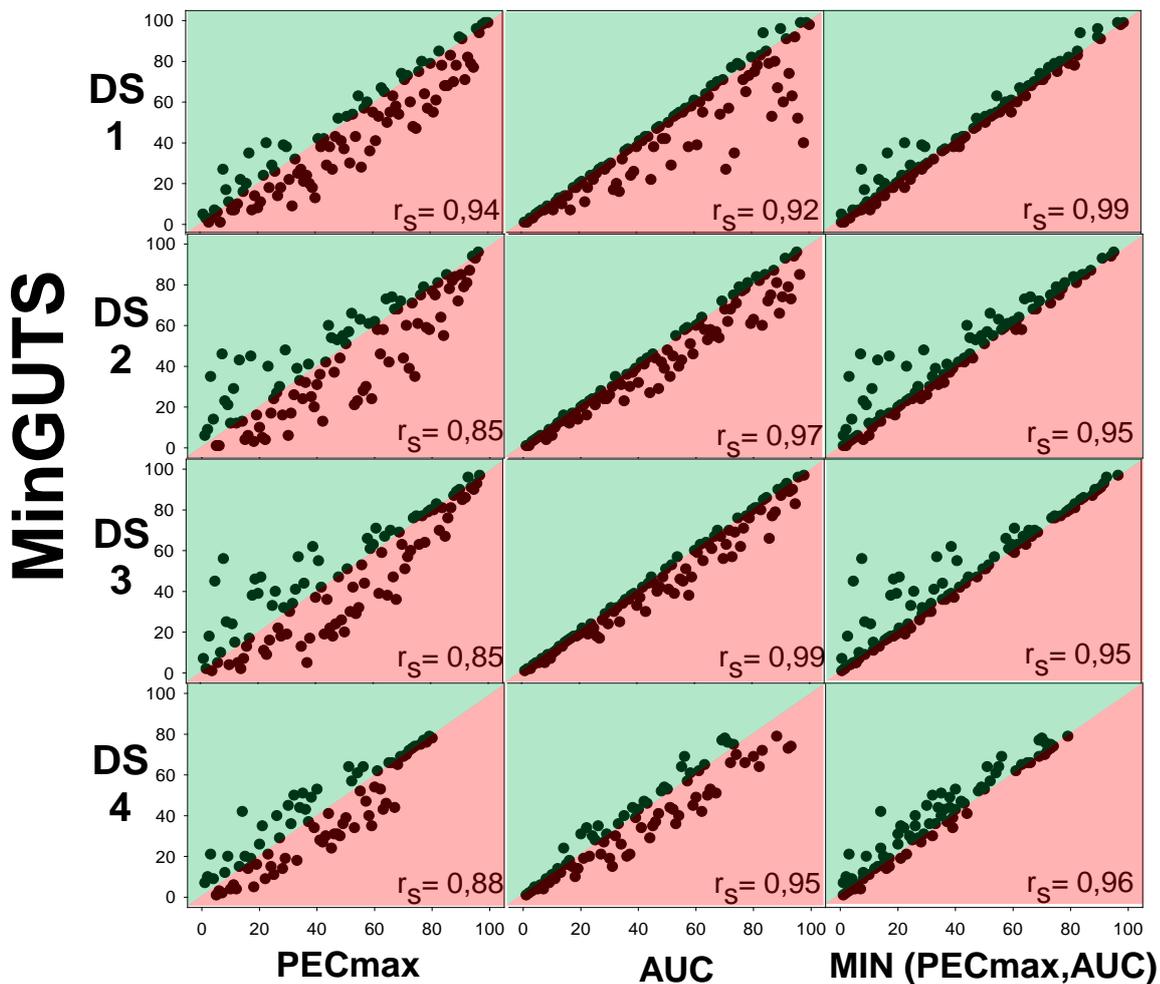


Abb. II.8-13: Auftragung der Ränge aller Szenarien, geordnet nach der Überlebenswahrscheinlichkeit der Organismen in diesen Szenarien (minGUTS), gegen den jeweiligen Rang des Szenarios nach den Expositionsprofil-Deskriptoren PECmax, AUC und min (PECmax, AUC) für die zufällig generierten Szenarien (Datensatz 1-4 mit je 100 Szenarien). Im grünen Bereich der Diagramme liegt der Szenario-Rang nach Mortalität (minGUTS) über den jeweiligen Szenario-Rang nach den Expositionsprofil-Merkmalen. In diesen Fällen ist das Expositionsprofil-Merkmal ein protektiver Vorhersagewert für die Einordnung des Szenarios nach ökotoxikologischer Relevanz. Der Spearman-Korrelationskoeffizient r_s beschreibt die Korrelation zwischen den betrachteten Faktoren.

Bei diesen Simulationsergebnissen zeigt sich wiederum, dass sowohl der PECmax-Wert als auch ein AUC-Wert als separate Bewertungsmittel keine protektive Vorhersage von worst case-Szenarien zulassen. Bildet man hingegen einen $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$ -Wert, stellt dies einen guten Vorhersagewert für die ökotoxikologische Relevanz eines Szenarios dar. Die Szenarien werden dadurch in eine Reihenfolge sortiert, die gelegentlich die ökotoxikologische Wirkung zwar überschätzt (grüner Bereich der Diagramme), die jeweilige Relevanz in den meisten Fällen aber sehr genau vorhersagt und nur sehr selten ein Szenario unterschätzt. Kein Szenario aller Datenpakete ($n = 400$) wurde durch den Deskriptor um mehr als 5 Ränge (= 5 % der Szenarien) unterschätzt.

Vergleich weiterer Deskriptoren

Die Rangzuordnungen auf Basis anderer Deskriptoren der Expositionsprofile im Vergleich zu den GUTS-Rängen der Szenarien sind in Abbildung II.8-14 dargestellt. Als Beispiel für die Resultate aller Untersuchungen wurden hier die Ergebnisse des Datenpakets 1 festgehalten.

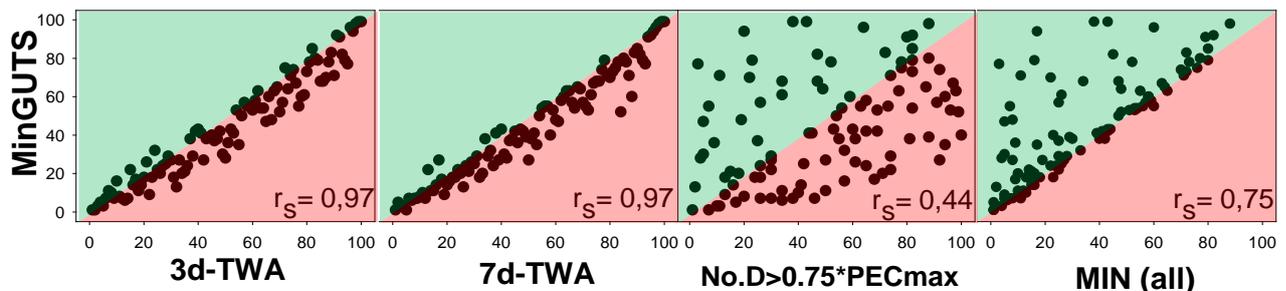


Abb. II.8-14: Auftragung der Ränge aller Szenarien des Datenpakets 1, geordnet nach der Überlebenswahrscheinlichkeit der Organismen in diesen Szenarien (minGUTS) gegen den jeweiligen Rang des Szenarios nach den Expositionsprofil-Deskriptoren 3d-TWA, 7d-TWA, No. of Days > 0.75*PECmax und min(all). Der Spearman-Korrelationskoeffizient r_s beschreibt die Korrelation zwischen den betrachteten Faktoren.

In diesen Vergleichen ist zu erkennen, dass vor allem die Deskriptoren 3D-TWA und 7D-TWA zwar gut mit den Ergebnissen aus dem TK-TD-Modell korrelieren (mit jeweils einem r_s -Koeffizienten von 0,97), jedoch in ihrer Gesamtheit im Vergleich zu den ökotoxikologischen Effekten eher zu einer unprotektiven Vorhersage (roter Bereich der Diagramme) führen. Der Deskriptor No. of Days > 0.75*PECmax zeigt hingegen keinerlei wechselseitige Beziehung zu den minGUTS-Resultaten. Bei min(all), das für jedes Szenario den geringsten Rang aller betrachteten Deskriptoren (PECmax, AUC, 3d-TWA, 7d-TWA, No. of Days > 0.75*PECmax) darstellt, sind die Anzahl der unprotektiven Vorhersagen (roter Bereich) selbstverständlich am geringsten. Die Korrelation zu den Ergebnissen aus GUTS ist insgesamt jedoch nicht besonders hoch (hier: 0,75), da in diesem Fall einige Szenarien auch als zu protektiv behandelt werden, also als relevanter vorhergesagt werden als sie tatsächlich sind. Diese sehr ungenauen Vorhersagen stammen überwiegend aus der Rangzuordnung des Deskriptors No. of Days > 0.75*PECmax (siehe Diagramm).

Da dem 7d-TWA (7 Tage als Standardzeitfenster für Invertebrate, Fische und Makrophyten) und 3d-TWA (wg. 72 Stunden Testdauer der Standardalgentests) in der aquatischen Risikobewertung nach dem neuen Guidance Document (EFSA, 2013) eine Bedeutung als Merkmal von Expositionsszenarien beigemessen wird, sind die Rangzuordnungen dieser Deskriptoren in Abbildung II.8-15 zum Vergleich gegen die Deskriptoren PECmax (als aktuell in FOCUS verwendeter Wert) und $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$ (in diesen Untersuchungen als sinnvollster Wert identifiziert) aufgetragen.

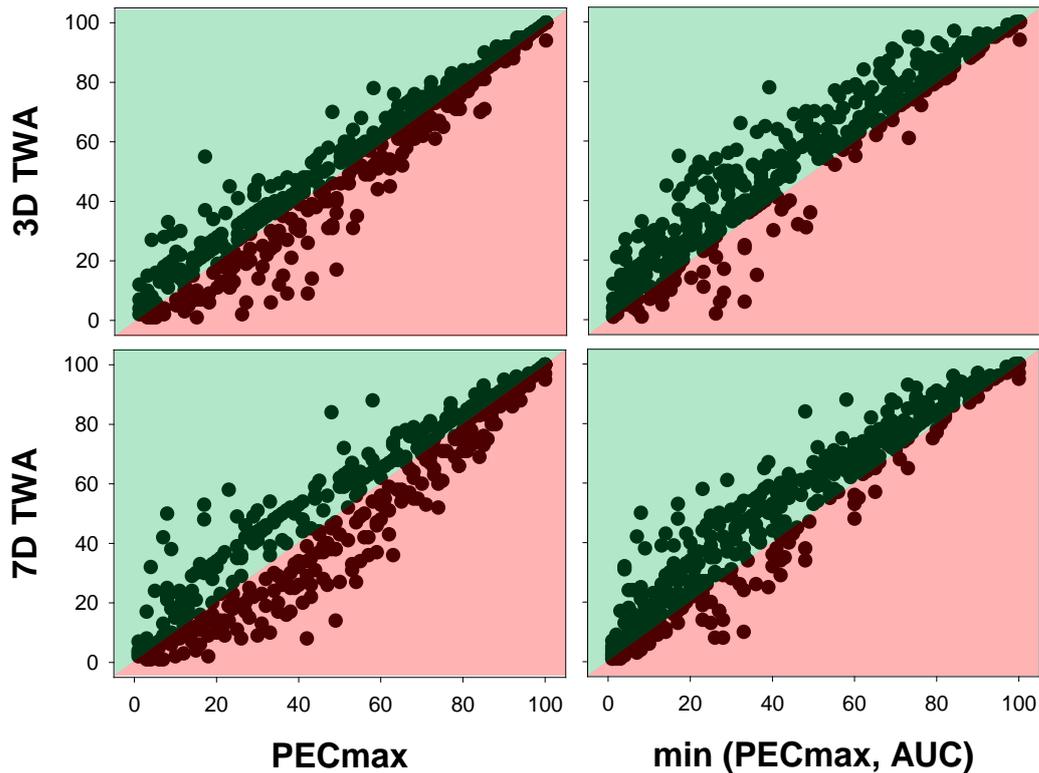


Abb. II.8-15:Ränge nach PECmax und $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$, aufgetragen gegen den 3D-TWA und 7D-TWA für jedes Szenario der Datenpakete 1-4.

Vor allem der 3d-TWA korreliert in den Rängen der Szenarien natürlich mit dem PECmax, aber auch mit dem $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$, da die errechneten Konzentrationen des 3d-TWA natürlich häufig stark vom PECmax der jeweiligen Expositionsprofils abhängen. Beim 7d-TWA ist dies auch noch zu erkennen, jedoch sind die Rangwerte hier schon breiter gestreut. Trotzdem zeigen diese Abbildungen, dass die betrachteten Deskriptoren in ihrer Rangreihenfolge wechselseitig jeweils nicht exakt vorhergesagt werden können. Der Vergleich des $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$ zu den beiden Tages-TWA zeigt zudem, dass einige Szenarien niedrigere 3d-/7d-TWA-Ränge erhalten. Der $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$ hat also nicht zwangsläufig auch die Rangreihenfolge nach 3d-/7d-TWA berücksichtigt. Sollten diese Deskriptoren in der Ermittlung von worst case-Szenarien zum Einsatz kommen, so wäre eine zusätzliche Betrachtung dieser Ränge neben den Rängen nach PECmax und AUC nötig.

II.8.3.3 GERDA-Szenarien

Abb. II.8-16 und II.8-17 zeigen die Korrelationen in 11 GERDA-Szenarien zwischen den Rängen nach PECmax bzw. min(PECmax, AUC) und GUTS für jeweils 30 Jahre. In Abb. II.8-18 sind alle diese Simulationen zusammengefasst. Es zeigt sich auch hier, dass PECmax und AUC alleine nicht protektiv sind, zusammen jedoch gut mit der Reihung nach GUTS korrelieren und eher die GUTS Ränge unter- als überschätzen.

II.8.3.4 Subletale Effekte auf Organismen und Effekte auf Populationen

GUTS ist für die Vorhersage der Überlebenswahrscheinlichkeit entwickelt worden. Wegen der generellen Anwendbarkeit von GUTS für alle Arten von Organismen, Stressoren und Expositionsdauern und der möglichen Vereinfachung auf nur 3 Modellparameter wurde GUTS hier verwendet, Expositionsprofile ökotoxikologisch zu bewerten. Da ein letaler Effekt als worst case Effekt für ein Individuum angesehen werden kann und Effekte zunächst auf Individuen wirken müssen, um auf die Populationsebene durchschlagen zu können, sind für GUTS abgeleiteten Schlussfolgerungen, insbesondere, dass bei der Auswahl von Expositionsszenarien für eine Risikobewertung PECmax und AUC berücksichtigt werden sollen, mit hoher Wahrscheinlichkeit auch für subletale Effekte und Effekte auf Populationsebene übertragbar.

Zur Überprüfung dieser angenommenen Übertragbarkeit wurden Simulationen zur Reproduktionshemmung von *Daphnia magna* mit einem Individuen-basierten Modell (IDamP; Preuss et al. 2009) und einem einfachen logistischem Populationsmodell durchgeführt.

In beiden Fällen zeigt sich, dass auch hier PECmax und AUC nur zusammen das ökotoxikologische Potential protektiv vorhersagen können (Abb. II.8-19 bis II.8-21).

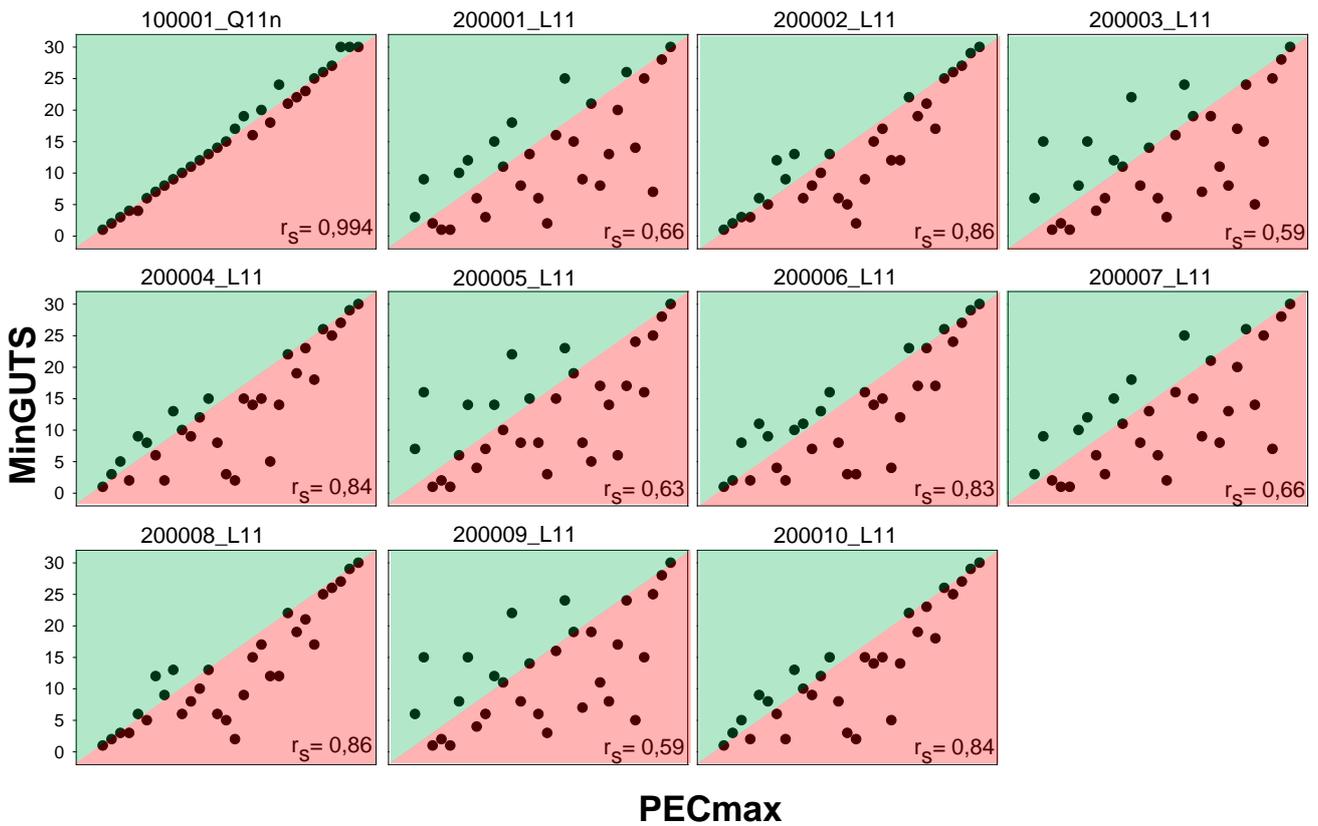


Abb. II.8-16: Darstellung der Ränge nach PECmax gegen die Rangvergabe nach minGUTS für die jährlichen Expositionsprofile bei allen GERDA-Szenaren (30 Jahre).

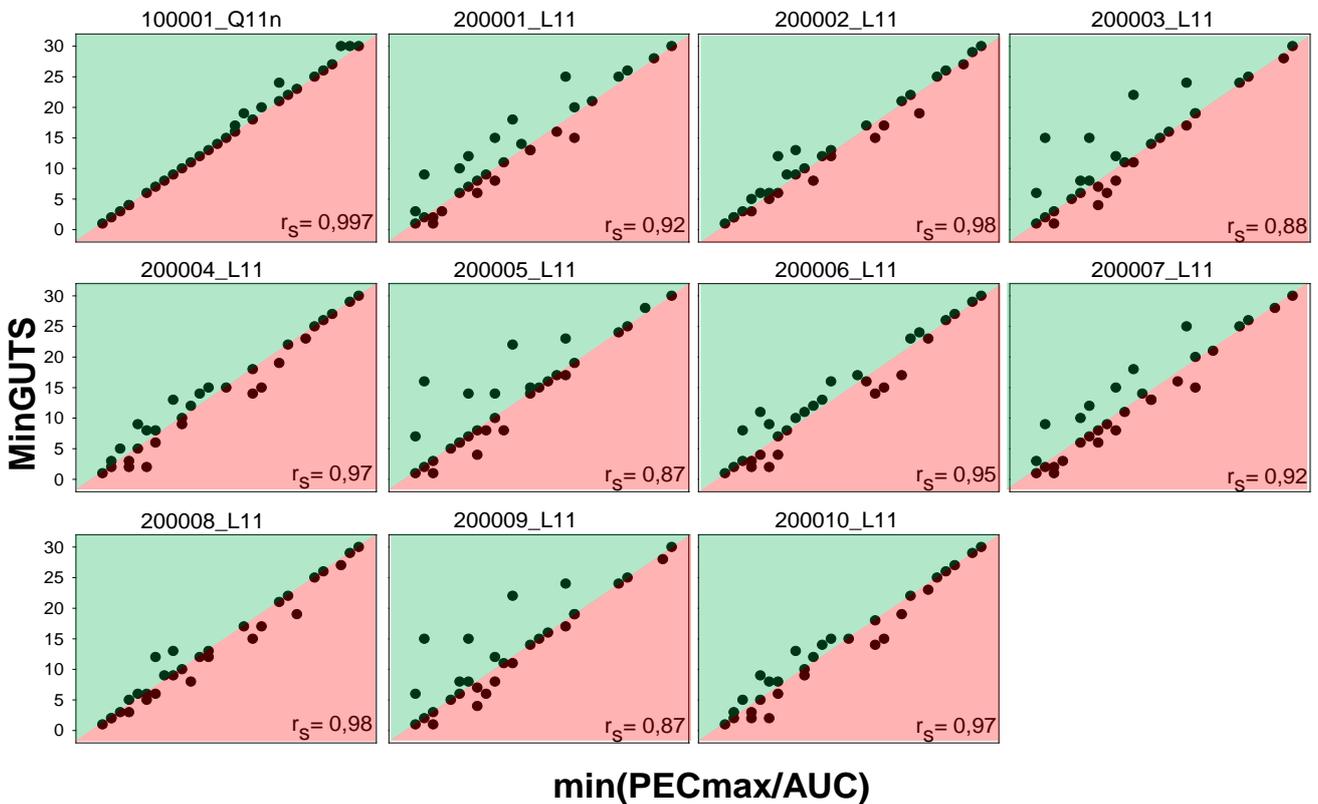


Abb. II.8-17: Darstellung der Ränge nach min(PECmax/AUC) gegen die Rangvergabe nach minGUTS für die jährlichen Expositionsprofile bei allen GERDA-Szenaren (30 Jahre).

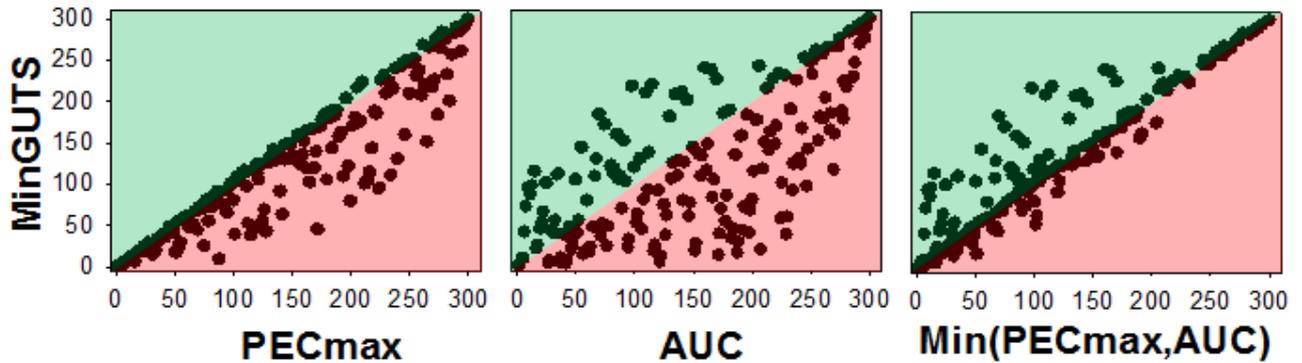


Abb. II.8-18: Auftragung der Ränge aller Jahres-Expositionsprofile von GERDA ($\Sigma=330$) nach den Expositionsprofil-Deskriptoren PECmax, AUC und min(PECmax, AUC) gegen die Ränge basierend auf der Überlebenswahrscheinlichkeit der Organismen in den jeweiligen Szenarien (minGUTS).

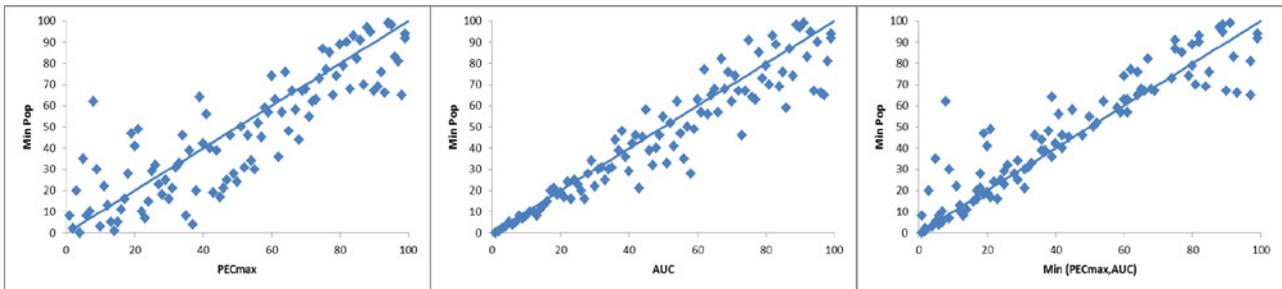


Abb. II.8-19: Korrelation der Ränge nach PECmax, AUC und min(PECmax, AUC) mit dem Rang nach minimalen Populationsgröße in IDamP bei konzentrationsabhängiger Hemmung de Reproduktion von *D. magna*.

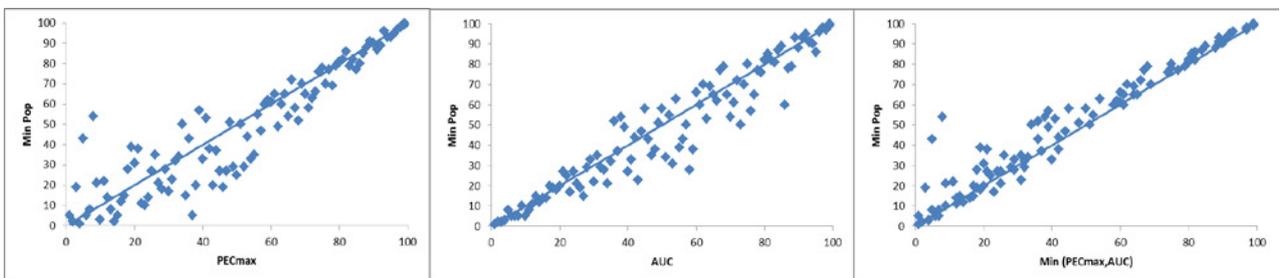


Abb. II.8-20: Korrelation der Ränge nach PECmax, AUC und min(PECmax, AUC) mit dem Rang nach minimaler Populationsgröße im logistischen Populationsmodell bei konzentrationsabhängiger Hemmung der Wachstumsrate.

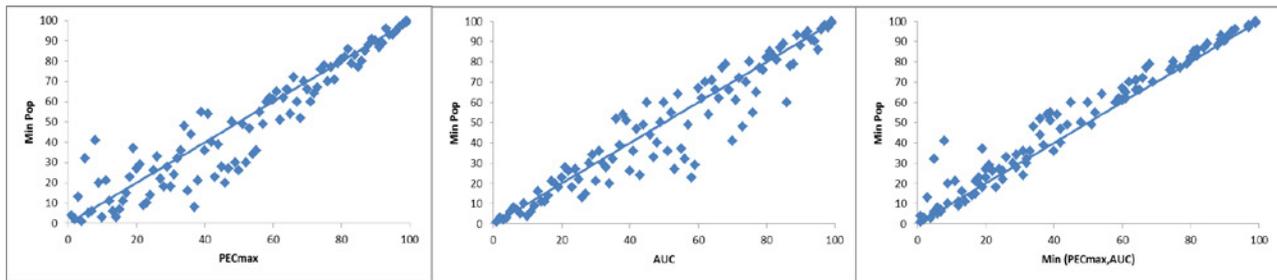


Abb. II.8-21: Korrelation der Ränge nach PECmax, AUC und $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$ mit dem Rang nach minimaler Populationsgröße im logistischen Populationsmodell bei konzentrationsabhängiger Mortalität.

II.8.4 Diskussion und Fazit

Für die Untersuchung hier wurden die PECmax, AUC, deren Kombination $\min[\text{PECmax}, \text{AUC}]$, die Anzahl der Expositionstage, Anzahl der Expositionstage mit einer Konzentration größer als 0,75 des PECmax, sowie 3d-TWA bzw. 7d-TWA als Deskriptoren eines Expositionsszenarios verwendet. Andere Deskriptoren wie z.B. Dauer der Peaks oder das Intervall zwischen den Peaks (s. Abb. II.8-2) wurden nicht berücksichtigt, da sie von Vorneherein keine Korrelation mit dem Effekt erwarten lassen. Das Intervall zwischen zwei Peaks kann keine sinnvolle Reihung von Expositionsmustern ergeben, da die Höhe und Dauer der Exposition darin überhaupt nicht berücksichtigt werden.

Bei der Untersuchung der FOCUS-Szenarien zeigt sich, dass die ökotoxikologische Relevanz eines Szenarios mit der Betrachtung der einzelnen Deskriptoren PECmax und AUC nicht immer adäquat abgebildet wird (Abbildung II.8-11 und -12). PECmax bzw. AUC als einzelne Deskriptoren zur Entscheidung über worst case-Szenarien auszuwählen, ist tendenziell also eine nicht ausreichend protektive Herangehensweise, auch wenn prinzipiell eine relativ hohe Korrelation zwischen den GUTS-Resultaten und diesen Expositionsmerkmalen besteht (siehe r_s -Korrelationskoeffizienten). Die Wahl von $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$ wäre hingegen protektiv (keine starken negativen Abweichungen), am genauesten (höchste Anzahl von Szenarien ohne Abweichungen) und mit einer sehr guten Korrelation zu den GUTS-Ergebnissen (r_s -Koeffizient).

Die Wahl von $\min(\text{all})$ als bestimmender Deskriptor der Szenarienwahl wäre zwar noch protektiver (geringere Anzahl negativer Abweichungen), viele Szenarien würden jedoch als zu relevant eingestuft und damit überschätzt, die Identifikation der tatsächlich gefährlichen Szenarien würde so erschwert werden da die Vorhersage insgesamt ungenauer ist. Dies ist auch durch den geringeren r_s -Koeffizient im Gegensatz zu $\min(\text{PECmax}, \text{AUC})$ nachzuvollziehen. Diese Ergebnisse lassen sich mit weiteren Datensätzen reproduzieren. Der Deskriptor No. Of Days $> 0.75 \cdot \text{PECmax}$ ist hingegen ein anschauliches Beispiel für einen vollkommen unpassenden und deshalb sinnlosen Vorhersagewert für die ökotoxikologische Relevanz eines Szenarios. Es besteht keinerlei Korrelationen zwischen der Rangvergabe nach diesem Deskriptor und den GUTS-Ergebnissen. Die Berücksichtigung von No. Of Days $> 0.75 \cdot \text{PECmax}$ in $\min(\text{all})$ ist dementsprechend auch der Hauptgrund für die protektive, aber zum Teil sehr ungenaue und überschätzende Vorhersage von $\min(\text{all})$.

Der Vergleich der Szenario-Ränge dieser Deskriptoren mit den Ergebnissen der TK-TD-Simulation (Abb. II.8-14) zeigt, dass der 3d- bzw. 7d-TWA für eine worst case-Vorhersage, ähnlich wie der PECmax, einen eher ungenauen Ansatz darstellt und nicht zu empfehlen ist. Unter

Berücksichtigung der Ergebnisse zum PECmax und der starken Abhängigkeit des 7d-TWA und vor allem des 3d-TWA vom diesem PECmax ist dieses Ergebnis nicht überraschend.

Aus wissenschaftlicher Sicht erschließt sich auch nicht, warum man einen dieser beiden Werte als Deskriptor der Expositionsprofile verwenden sollte. Wenn man berücksichtigt, dass chronische Toxizität von Substanzen mit Effekten über längeren Zeiträumen vor allem durch den AUC beschrieben werden kann und akut toxische Substanzen eher durch den PECmax bestimmt werden, dann sollten zwangsläufig beide Szenariomerkmale, die zusammen verschiedene TWAs abdecken, in die Bewertung der Expositionsprofile mit eingehen. Wie die TK-TD-Untersuchungen zeigen, können der 3d- und 7d-TWA diese Erwartungen nicht erfüllen. Die Aussagekraft der separaten Deskriptoren PECmax und AUC wird vielmehr durch diese Misch-Deskriptoren verwässert.

Bei sehr ähnlichen Expositionsprofilen sind die Rangvergaben und damit die Zuordnungen der Szenarien auf Basis ökotoxikologischer Relevanz zum Teil problematisch und können zu einer leichten Permutation der Ränge zwischen Szenarien führen. Dies hat unter Berücksichtigung der Zielsetzung der hier durchgeführten Untersuchung jedoch keine schwerwiegenden Folgen, da dies nur in Fällen vorkommt, in denen die Szenarien ohnehin einen sehr ähnlichen Einfluss auf das Überleben der Organismen haben (siehe FOCUS-Szenarien). Die so entstehenden Ungenauigkeiten können also vernachlässigt werden. Die Untersuchungen mit den zufällig generierten Expositionsprofilen zeigen zudem, dass es auf Basis des Deskriptors minPECmax/AUC zu keinen Rangvergaben kommt, die im Gegensatz zum jeweiligen minGUTS-Rang des betrachteten Szenarios um mehr als 4 Ränge kleiner sind. Bezogen auf die 100 betrachteten Szenarien pro Datenpaket würde das bedeuten, dass die Unsicherheit der Untersuchung für jedes Szenario in Richtung einer unprotektiven Vorhersage durch den Deskriptor bei unter 5 % liegt. Im Hinblick auf die oben diskutierten Gründe dieser Rangunterschiede, dass diese Szenarien in der Toxizität für Organismen nur sehr geringe Unterschiede besitzen, kann diese sehr geringe Unsicherheit weiter relativiert werden.

Der Min(PECmax, AUC) wurde in dieser Untersuchung als sinnvollster Deskriptor für die Vorhersage von worst case-Szenarien identifiziert. Als Kriterium für die Wahl eines gewissen Perzentil-Szenarios (Bsp. 5 %), um mit diesem die ökotoxikologische Relevanz von 95 % aller zu betrachtenden Szenarien abzudecken, ist dieser Faktor jedoch problematisch. Wenn man das 5 %-Grenzwert-Szenario dieser Rangvergabe wählen würde, könnte man nur sicherstellen dass 2,5 % bis 5 % aller Szenarien einen größeren PECmax bzw. TWA besitzen. Jedoch sind nicht 95 % der Szenarien automatisch ökotoxikologisch weniger relevant, da das betrachtete Perzentilszenario diesen Rang aufgrund einer niedrigen Einordnung bei einem der beiden Deskriptoren erreicht, andere Szenarien mit höherem min(PECmax, AUC) aufgrund einer großen Relevanz des anderen Deskriptors jedoch eine größere absolute Wirkung haben. Deshalb sollte bei der Ermittlung von Perzentil-worst case-Szenarien aus jedem Szenario-Ranking (nach PECmax und AUC) das 5 %-Perzentil ermittelt und diese Expositionsprofile jeweils getestet werden. Damit hat man berücksichtigt, dass für jeden relevanten Deskriptor separat ein statistischer Anteil aller möglichen Szenarien abgedeckt wird.

Zurzeit ist die Verwendung von TWAs als Ecotoxicological Relevant Concentration (ERC) zwar im neuen Entwurf des Guidance Documents (EFSA 2013) unter bestimmten Umständen empfohlen, in der Praxis aber noch nicht etabliert. Zusätzlich kann diskutiert werden, für welchen Zeitraum die TWA-Konzentration berechnet werden soll. Daher wurde für die Auswahl der Expositionsszenarien die PECmax und die AUC verwendet. In Zukunft könne GERDA aber auch erlauben, die Expositionsszenarien für die Risikoabschätzung auch aus der Reihung der

Szenarien nach einem bestimmten TWA zu bestimmen. Voraussetzung dafür ist aber, dass eine ERC für die spezifische Risikoabschätzung festgelegt werden kann.

Zusammenfassend bestätigen die durchgeführten Simulationen die *a priori* plausible Annahme: **PECmax und AUC sind die zwei am besten geeigneten Einzelparameter, um Expositionsprofile nach ihrem ökotoxikologischen Potential zu reihen.**

Das verwendete GUTS-Modell beschreibt letale Effekte. So wie GUTS mit unterschiedlichen Parametern Expositionsprofile unterschiedlich reiht, so können auch TK-TD-Modelle für subletale Effekte andere Reihungen ergeben. In den durchgeführten Simulationen (inklusive der Beispiele für Reproduktionshemmung und Populationseffekte) korrelierte eine Reihung nach PECmax oder AUC aber sehr gut mit einer Reihung nach Effekten. Diese beiden Parameter können auch als die beiden Extremwerte angesehen werden, die TWAs für unterschiedliche Zeitfenster einrahmen. Andere Expositionsparameter, die durchaus ökotoxikologisch relevant sein können, wie die Anzahl der Peaks oder das Intervall zwischen den Peaks, sind isoliert nicht für eine Reihung von Expositionsmustern geeignet, da sie keine Information über Höhe und Dauer der Exposition beinhalten.

Theoretisch wäre die beste Szenarienauswahl diejenige, in der mit einem TK-TD-Modell (eventuell sogar gekoppelt mit einem Populationsmodell) alle Expositionsszenarien durchgerechnet werden, so dass dann aus der Verteilung des Effektes ein bestimmtes Szenario für die Risikobewertung ausgewählt werden kann. Dieses wird jedoch aus folgenden Gründen für nicht realistisch angesehen: Zum einen liegen in der Regel keine Modelle für die (auch zu identifizierenden) relevanten Taxa vor. Zum anderen wäre der Aufwand unverhältnismäßig hoch, Tausende von Szenarien mit eventuell sogar mehreren Effektmodellen durchzurechnen. Für die Praxis wird daher zurzeit die Auswahl der Szenarien aus der Reihung nach PECmax und AUC als die beste Lösung angesehen.

II.9 Zur Verwendung von PEC-Zeitreihen in der Risikocharakterisierung

Vorbemerkung

Bestandteil des Projektauftrages (Arbeitspaket t) war es auch, „eine orientierende Einschätzung zu erarbeiten, inwiefern die in den vorliegenden Higher Tier-Effektstudien im aquatischen Bereich (insb. Mesokosmen) typischerweise realisierten Expositionen den typischerweise gemäß Expositionsmodellierung vorhergesagten Expositionsmustern entsprechen“. Dies wird im Folgenden so verstanden, dass auf der Basis real vorliegender Mesokosmen eingeschätzt werden soll, inwieweit diese Studien das für den jeweiligen Wirkstoff bei Anwendung „nach guter fachlicher Praxis“ zu erwartende Expositionsmuster abdecken (können). Darüber hinaus wurde im Projektverlauf vom UBA die Frage gestellt, ob und wie die Expositionsverläufe in Mesokosmen (oder anderen Higher-Tier-Studien) bei der Risikocharakterisierung für zeitvariable Expositionsmuster, wie sie von FOCUS oder GERDA vorhergesagt werden, verwendet werden sollen. Dabei wurde insbesondere die Frage nach der Validität und Aussagekraft von TK-TD-Modellen gestellt.

Ein Abgleich von konkreten GERDA-Prognosen mit den Ergebnissen einer realen Mesokosmenstudie wurde nur für ein Beispiel durchgeführt, da die in Mesokosmenstudien realisierten Expositionsmuster alle sehr ähnlich sind und durch Anzahl der Applikation, Intervall zwischen den Applikationen und Dissipationsrate bestimmt werden (s.u.). Eine Auswertung von Mesokosmenstudien und Berechnung von GERDA-Expositionsprofilen für die darin untersuchten Substanzen hätte aus Sicht des Projektnehmers einen unverhältnismäßigen Mehraufwand ohne Zuwachs an relevantem Erkenntnisgewinn bedeutet. Nur für eine der im Rahmen des Projekts untersuchten 13 Beispielwirkstoffe (s. Kap. I.5) beruhte die Effektabschätzung auf einer Mesokosmenstudie (Substanz UBA_2). Die Mesokosmenstudie war von einem der Autoren des hier vorliegenden Berichts durchgeführt worden, so dass die Expositionsdaten vorlagen. Für diese Beispielsubstanz wurde daher ein Vergleich mit den mit GERDA vorhergesagten Expositionsprofilen durchgeführt.

Die in diesem Kapitel dargelegten Einschätzungen und Empfehlungen geben die Meinung des verantwortlichen Autors (Udo Hommen) wieder und entsprechen nicht notwendigerweise der Meinung des Umweltbundesdamtes.

II.9.1 Vergleich von typischen Expositionsmustern in Mesokosmen mit modellierten Expositionsmustern

Das in Mesokosmenstudien getestete Applikationsmuster orientiert sich in der Regel an den empfohlenen Anwendungen (Good Agricultural Practice, GAP), d.h. an der Anzahl und den zeitlichen Abständen der Applikationen. Die in den Mesokosmen realisierten Einträge entsprechen somit dem Muster, das sich aus Drifteinträgen ergibt. Dieses Verfahren ist (für Drifteinträge) insofern worst case, als dass bei Mehrfachapplikationen (so zumindest Stand des Wissens des Autors, Udo Hommen, Nov. 2014) immer dieselbe Dosis gewählt wird, während bei der Expositionsrechnung für Mehrfachapplikationen geringere Perzentile der Abdriftverteilung verwendet werden.

Die Applikation selbst erfolgt oft nach dem sogenannten toxikologischen Ansatz, bei dem die Applikationslösungen direkt in den Wasserkörper eingebracht und (vorsichtig) vermischt werden, um eine möglichst homogene Verteilung im gesamten Wasserkörpers zu erreichen.

Mit diesem Verfahren wird eine Anwendung der Ergebnisse für Fälle mit dominanten Runoff- oder Drainageeinträge erleichtert, da die im Wasser gemessenen Konzentrationen direkt mit den vorhergesagten Konzentrationen verglichen werden können. Sprühapplikationen werden dagegen auch in Mesokosmenstudien vor allem dann durchgeführt, wenn Drifteinträge entscheidend sind und/oder das Verhalten des Oberflächenfilms für die Risikobewertung wichtig ist (z.B. schnelle Photolyse an der Oberfläche oder physikalischer Effekt des Oberflächenfilms, wie das bei Ölen zu erwarten ist).

Die Expositionsmuster (Konzentrationen im Wasser) im Mesokosmen ergeben sich somit aus der Anzahl der Applikationen, dem Applikationsintervall (nach den Anwendungsempfehlungen) und der Dissipation (DT50) im Wasser. Beispiele für mögliche Muster (hypothetische Verläufe sowie beispielhaft sechs in Mesokosmenstudiengemessene Profile) sind in den beiden folgenden Abbildungen zusammengestellt (Abb. II.9-1 und -2). Je nach Applikationsintervall und DT50 ergeben sich bei Mehrfachapplikationen jeweils ähnliche Pulse oder die Applikationen führen zu einer Akkumulation der Konzentration im Wasser. Im Unterschied dazu sind die von Modellen wie FOCUS oder GERDA modellierten PEC-Muster komplexer und durch die Berücksichtigung verschiedener Boden- und Klimabedingungen und Gewässertypen auch vielgestaltiger (s. Abb. II.9-1).

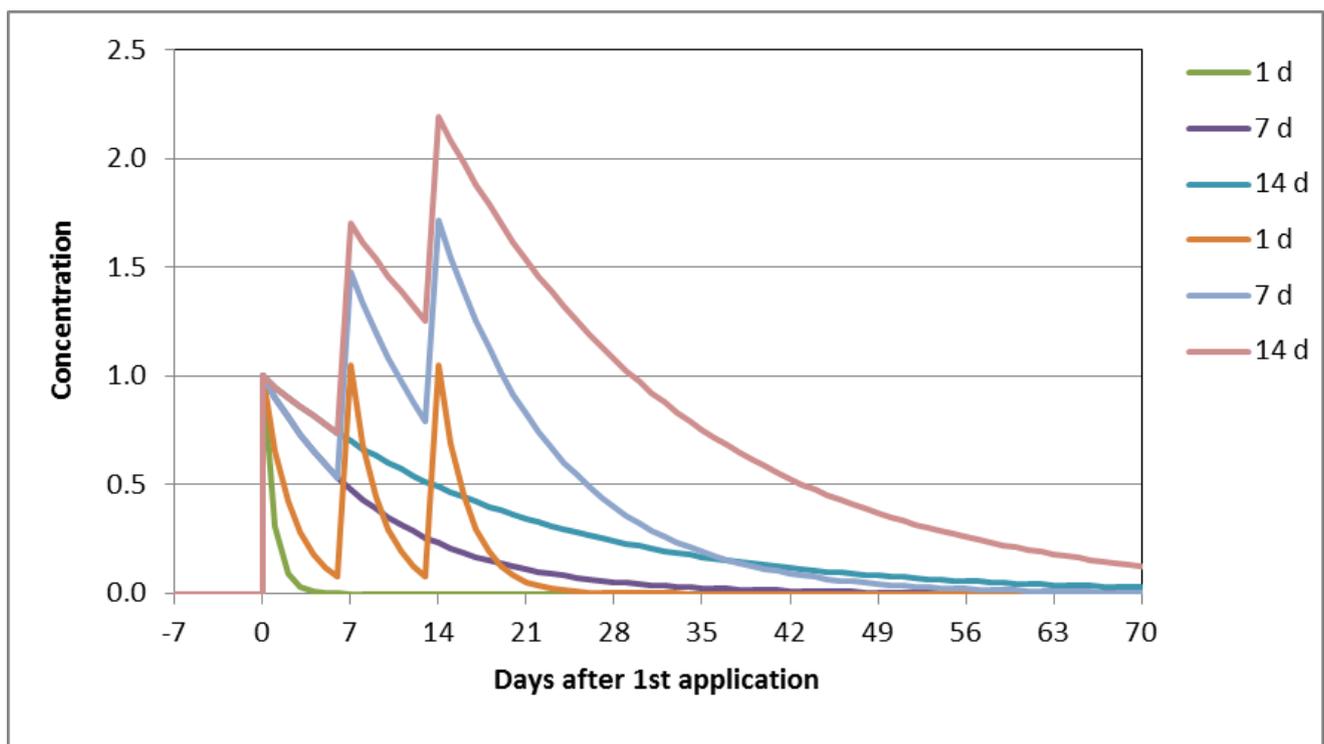


Abb. II.9-1: Theoretische Beispiele für typische Verläufe der Konzentration eines Pflanzenschutzmittelwirkstoffs im Wasser in Mesokosmenstudien. Eine bzw. drei Applikation mit 1 Woche Intervall und DT50 von 1, 7 oder 14 Tagen. Die gewünschte Konzentration durch eine Applikation wurde auf 1 gesetzt.

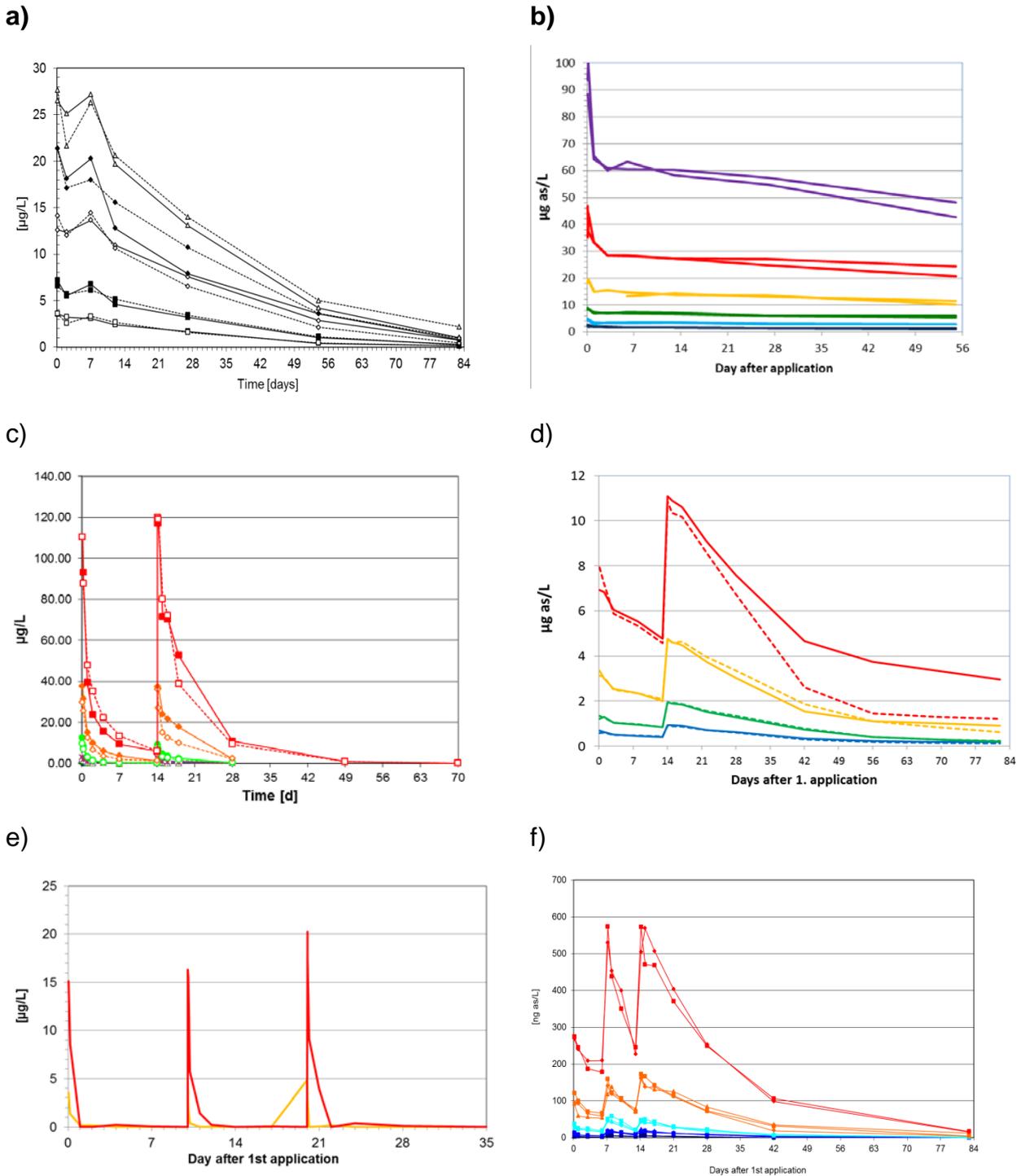


Abb. II.9-2: Beispiele von gemessenen Expositionsverläufen in Mesokosmenstudien des Fraunhofer Instituts IME (mehrere Kurven: verschiedene Konzentrationsstufen)

- a) 1 Applikation, mittlere DT50 = 21 d
- b) 1 Applikation, mittlere DT50 = 132 d
- c) 2 Applikationen im Abstand von 14 d, mittlere DT50 = 4 d
- d) 2 Applikationen im Abstand von 14 d, mittlere DT50 = 23 d
- e) 3 Applikationen im Abstand von 7 d, mittlere DT50 << 1 d
- f) 3 Applikationen im Abstand von 7 d, mittlere DT50 = 8.6, 14 d.

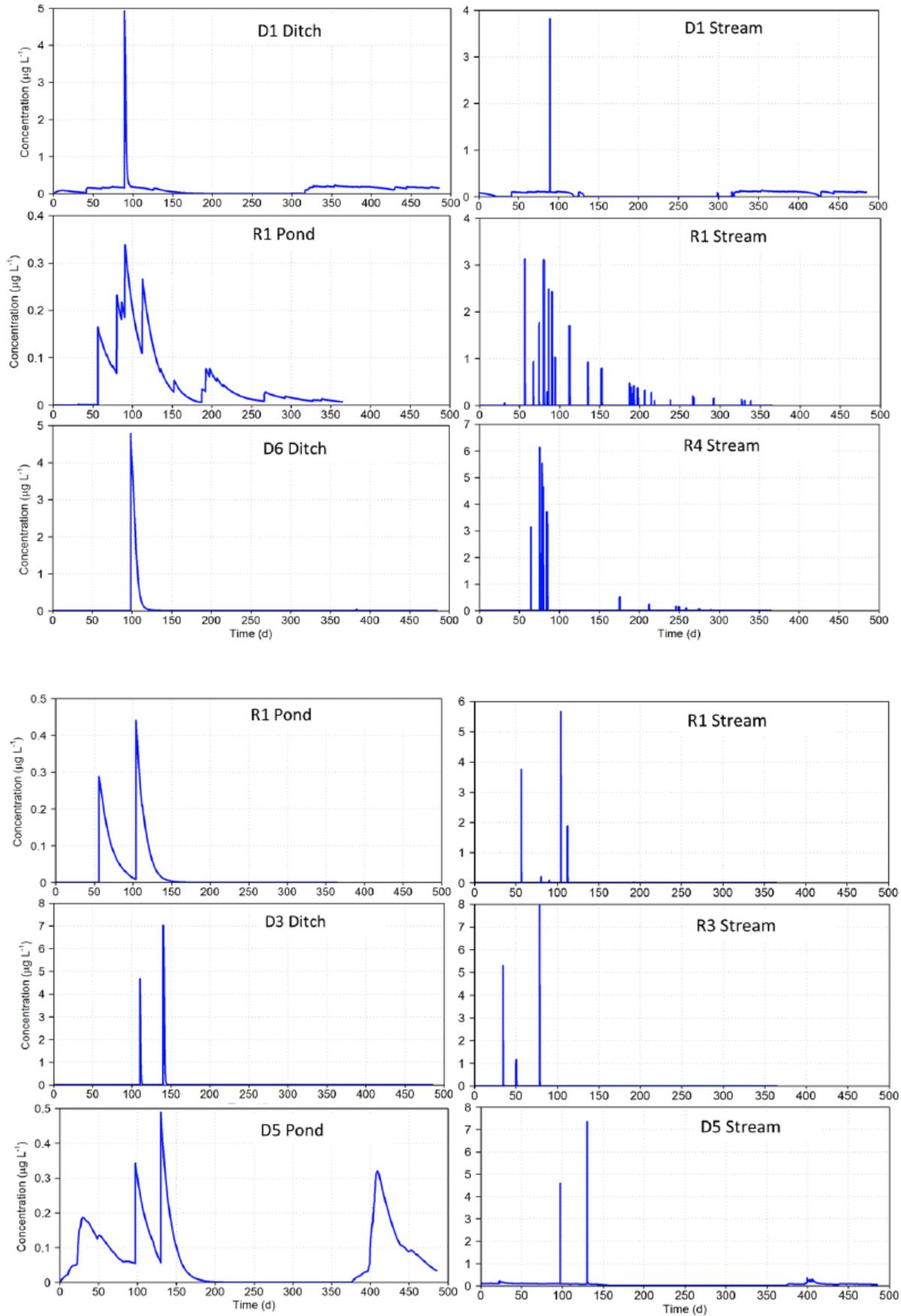


Abb. II.9-3: Beispiele für Expositionsmuster nach FOCUS, hier für ein Fungizid (obere sechs Diagramme) mit einer Applikation und ein Insektizid (untere sechs Abb.) mit zwei Applikationen (Figure H.4 und H.10 aus EFSA 2013).

Da nahezu alle GLP-Zulassungsstudien in Mesokosmen mit stehenden Testsystemen durchgeführt werden, spiegelt die Abnahme der Wasserkonzentration am besten die Gegebenheiten in einem Teich bzw. einem stehenden Graben wieder. Die Abnahmerate der Substanzkonzentration im Mesokosmoswasser oder Sediment lässt sich kaum experimentell beeinflussen. Mögliche Maßnahmen wie Beschattung oder Applikation am Abend dienen eher einer Verlangsamung der Abnahme. Insbesondere die für Bäche modellierten Expositionsspitzen (s. Bsp. für „stream“ in Abb. II.9-3) können daher in den meisten Mesokosmen nicht wiedergegeben werden. Es existieren zwar einige künstliche Fließgewässertestsysteme, die auch die Testung solcher Kurzzeitbelastungen erlauben (z.B. UBA Berlin, UFZ Leipzig, Universität Landau), diese Systeme besitzen aber keine GLP-Zulassung und werden daher für Zulassungsstudien nicht direkt verwendet (Kenntnisstand U. Hommen, 2014), können aber im Rahmen eines „Weight of Evidence“-Ansatzes berücksichtigt werden. Nur für im Wasser sehr instabile Substanzen können auch in stehenden Gewässern die sehr kurzen Expositionsspitzen realisiert werden, die häufig für Bäche vorhergesagt werden (s. Abb. II.9-2 e).

Die Abnahme der Konzentration in den stehenden Mesokosmen führt daher im Regelfall mutmaßlich zu einer konservativen Abschätzung in Bezug auf die Dauer der Exposition in fließenden Gewässern nach einem Eintrag, während die Anzahl der Eintragsereignisse unterschätzt werden kann.

Es ist zwar möglich, durch Applikationen unterschiedlicher Höhe und mit unterschiedlichem Intervall auch Drainage oder Runoff-Einträge zu simulieren, um z.B. Muster wie in R1 Pond oder D5 Pond in Abb. II.9-3 zu erzeugen. Dies wird nach aktuellem Kenntnisstand (U. Hommen 2014) in Zulassungsstudien bisher jedoch nicht durchgeführt, da nach Möglichkeit durch eine Studie mit einem relativ einfachen Expositionsmuster (Abb. II.9-1) die Muster verschiedener Szenarien und/oder GAPs abgedeckt werden sollen, anstatt nur ein PEC-Profil in einer doch relativ aufwändigen Studie möglichst genau nachzuspielen.

In Einzelfällen werden Mesokosmenstudien für unterschiedliche Applikationshäufigkeiten desselben Produktes durchgeführt, z.B. um die Auswirkung auf die den Zeitpunkt der Erholung von Populationen zu erfassen. Es ist aber zu erwarten, dass aus Kosten- und Zeitgründen in der Regel weiterhin nur eine einzige - in seltenen Fällen auch zwei (einfache) - Expositionsmuster in Mesokosmen getestet und diese dann für die Risikoabschätzung mehrerer bis vieler Expositionsmuster verwendet werden. Studien mit zusätzlichen Applikationen von z.B. Runoff- oder Drainage-Peaks sind zwar möglich, die Planung kann allerdings schwierig sein, da manchmal noch keine finalen Expositionsberechnungen vorliegen und eine Abwägung zwischen dem Testen von worst case-Mustern und der RAC-Ableitung für mehrere andere Szenarien getroffen werden muss. Eine Testung mehrerer Expositionsmuster in Mesokosmen ist vermutlich zeitlich und finanziell oft nicht realisierbar.

In Laborstudien sind aufgrund des geringeren Aufwands im Vergleich zu (stehenden) Mesokosmen vielfältigere Expositionsmuster durchführbar. Durch Umsetzen von Testorganismen zwischen belastetem und unbelastetem Medium sind Profile mit scharf abgegrenzten „Rechteckpulsen“ möglich, die in verschiedener Anzahl und in Bezug auf Höhe und Dauer eingestellt werden können. Mit höherem Aufwand können auch variable Expositionsverläufe in Durchflusstests erzeugt werden. Eine mögliche Vorgehensweise wäre daher auch die Testung eines (oder zwei) Expositionsmusters in Mesokosmenstudien zur Erfassung der Effekte auf Lebensgemeinschaften unter Freilandbedingungen. Für die in diesen (und eventuell auch anderen) Studien als kritisch identifizierte Arten können dann Einzelartentests mit anderen Expositions-

mustern im Labor durchgeführt werden, um deren direkte Effekte auf sensitive Arten zu erfassen.

Zusammenfassend bleibt festzustellen, dass die Expositionsmuster in Mesokosmen meistens nur durch die Anzahl der Applikation, deren Intervall und die Abnahmerate (Abbau oder Anlagerung an Partikel) bestimmt wird. Diese Expositionsmuster sind somit einfacher als die von Modellen wie FOCUS oder GERDA vorhergesagten, variableren Muster. Weiterhin ist durch die Verwendung stehender Testsysteme die DT50 im Vergleich zu Szenarien mit Durchfluss größer, was zu einer konservativeren Expositionsdauer in Mesokosmen im Vergleich zu fließendem Gewässer führt.

II.9.2 Risikocharakterisierung für variable Expositionsmuster

Bei der Risikocharakterisierung werden die erwartete Konzentration (PEC) mit einer regulatorisch akzeptablen Konzentration (RAC) verglichen. Aus Mesokosmenstudien lassen sich zwei Arten von RAC ableiten (s. EFSA 2013):

- ETO-RAC (Ecological Threshold Option): Konzentration, bei der keine oder nur leichte kurzfristige Effekte auftreten
- ERO-RAC (Ecological Recovery Option): Konzentration, bei der klare Effekte auftreten, aber die Dauer des Effekts auf vulnerable Arten weniger als 8 Wochen beträgt.

Die Risikocharakterisierung erfolgt mit Hilfe der ETR (Exposure Toxicity Ratio = PEC / RAC) (EFSA 2013)). ETR-Werte ab 1 zeigen dabei ein relevantes Risiko an.

Insbesondere für zeitlich dynamische Expositionsmuster stellt sich die Frage, in welcher Art von Konzentration PEC und RAC ausgedrückt werden sollen. Dieser Konzentrationstyp wird als Ecotoxicologically Relevant Concentration (ERC, Boesten et al. 2007, EFSA 2013) bezeichnet und gibt an, für welches Medium die Konzentration angegeben wird (z. B. Wasser, Sediment, Porenwasser, Biota) und ob es sich um eine maximale (PEC_{max}) oder eine über einen bestimmten Zeitraum gemittelte Konzentration (PECTWA) handelt.

Bei der Risikoabschätzung auf der Basis von Mesokosmosdaten wird in der Regel zunächst die **Maximale Konzentration** verwendet: die nominale oder maximal gemessene Konzentration mit akzeptablen Effekten im Mesokosmos wird mit der PEC_{max} des Expositionsprofils verglichen. Wegen der in der Regel statischen Bedingungen im Mesokosmos (s.o.) sollte dies in Bezug auf die Expositionsdauer meistens eine konservative Abschätzung ergeben. Allerdings kann die Dissipation in einem Mesokosmos auch schneller als in einzelnen Szenarien sein (z.B. wegen unterschiedlicher Licht- und Temperaturbedingungen) und es können Expositionsspitzen durch Runoff- oder Drainageeinträge vor oder nach dem Maximum vorhergesagt werden, die in einer Mesokosmenstudie, in welcher nur Drifteinträge simuliert werden, nicht auftreten (z.B. R1 Pond für das Fungizid in Abb. II.9-2 und -3).

Wenn die Mesokosmenstudie durch akute Laborstudien ausgelöst wurde und die Pulsdauer im Mesokosmos kürzer ist als vorhergesagt, wird empfohlen, die RAC **als Time Weighted Average Concentration** (TWA) über 48 oder 96 h (als typische Dauer akuter Tests) auszudrücken und diese mit der PEC_{max} zu vergleichen (EFSA 2013).

Wenn die Mesokosmenstudie durch chronische Tests ausgelöst wurde, sollte die Peak-Konzentration oder eine TWA-Konzentration verwendet werden. Zu Voraussetzungen und Details der Verwendung von TWA s. EFSA (2013, p. 125 ff.). Wenn TWAs nicht angewendet werden

können, sollte auch für die Abschätzung des Risikos chronischer Effekte die PECmax mit der RAC auf der Basis von nominalen, Peak- oder Durchschnittskonzentrationen verglichen werden. Nominale oder Peakkonzentrationen sollten allerdings nur verwendet werden, wenn das Profil im Experiment protektiv für das erwartete Expositionsprofil ist, d.h. die Dissipation nicht relevant schneller als im vorhergesagtem Expositionsprofil ist und die Anzahl der Applikationen mindestens so groß wie in der GAP ist oder weitere Applikationen als toxikologisch unabhängig angesehen werden können. Wenn durch Mehrfachapplikation die Konzentration kumuliert, erlaubt die Verwendung der Nominalkonzentration eine konservativere Abschätzung als die Verwendung von Peak-Konzentrationen.

Eine Alternative zum ETR-Ansatz bietet der graphische Vergleich von Expositionsprofilen (**Hüllkurvenkonzept, envelope approach**). Dieses Verfahren wurde zuerst in einer Veröffentlichung von Boesten et al. (2007) dargestellt, wird im aktuellen EFSA Guidance Document (EFSA 2013) allerdings nicht weiter behandelt. Das in der Mesokosmenstudie als regulatorisch akzeptabel angesehenes (gemessenes) Expositionsprofil wird über das zu bewertenden vorhergesagte Expositionsprofil gelegt. Wenn das gemessene Profil stets oberhalb des PEC-Profiles liegt, ist das Risiko akzeptabel (analog zu $PEC_{max} > RAC_{max}$ bzw. $PEC_{twa} > RAC_{twa}$).

Dieses Verfahren verhindert eine Unterschätzung des Risikos, wenn die Exposition im Experiment kürzer ist als im PEC-Profil, oder wenn z.B. nach einem Drifteintrag noch Runoff- oder Dränage-Einträge folgen (s. Abb. II.9-4).

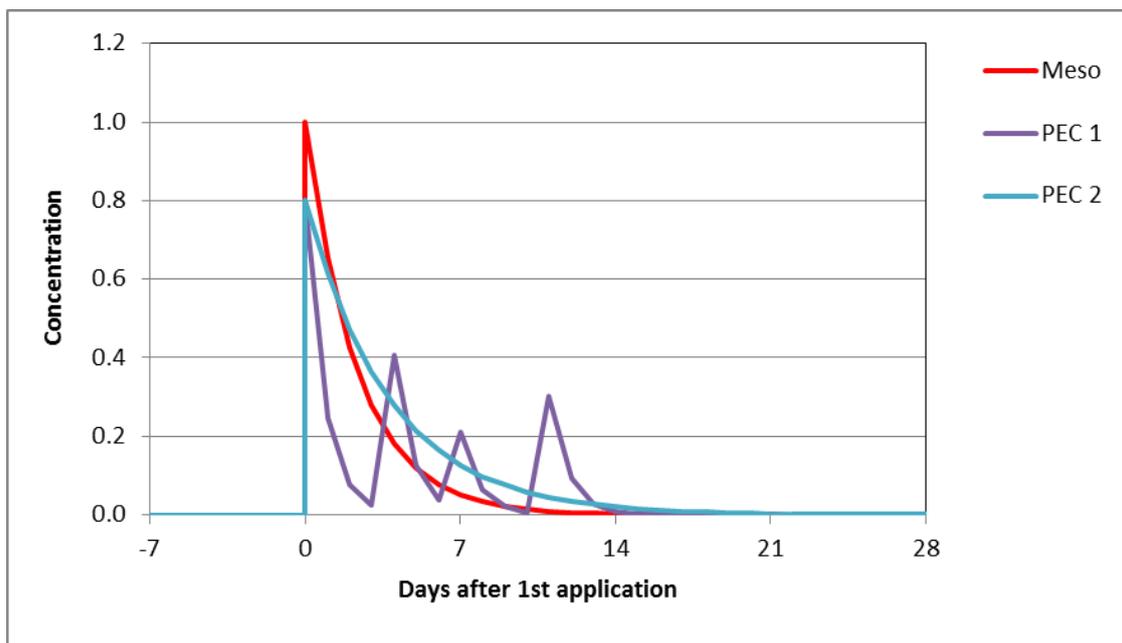


Abb. II.9-4: Vergleich eines hypothetischen RAC-Profiles einer Mesokosmenstudie (rot) mit modellierten Expositionsprofilen. Beispiele für mögliche Unterschätzung des Risikos durch Vergleich der maximalen Konzentrationen.

Andererseits kann dieses Verfahren jedoch auch das Risiko überschätzen, wenn z. B. ein gemessenes Profil mit langsamer Konzentrationsabnahme mit einem Runoff-Szenario für einen Bach mit kurzen Expositionsspitzen verglichen wird (Abb. II.9-5). Insbesondere für PEC 2 in Abb. II.9-5 ist fraglich, ob die kurzfristige und relativ geringfügige Überschreitung der RAC-Kurve am

Tag 28 (und einigen folgenden Tagen) tatsächlich ein Risiko anzeigt. Für eine genauere Bewertung müssen im Einzelfall Informationen zum zeitlichen Verlauf der Auswirkung eines Effektes in Verbindung mit der toxikologischen oder ökologischen Unabhängigkeit der einzelnen Belastungsspitzen berücksichtigt werden.

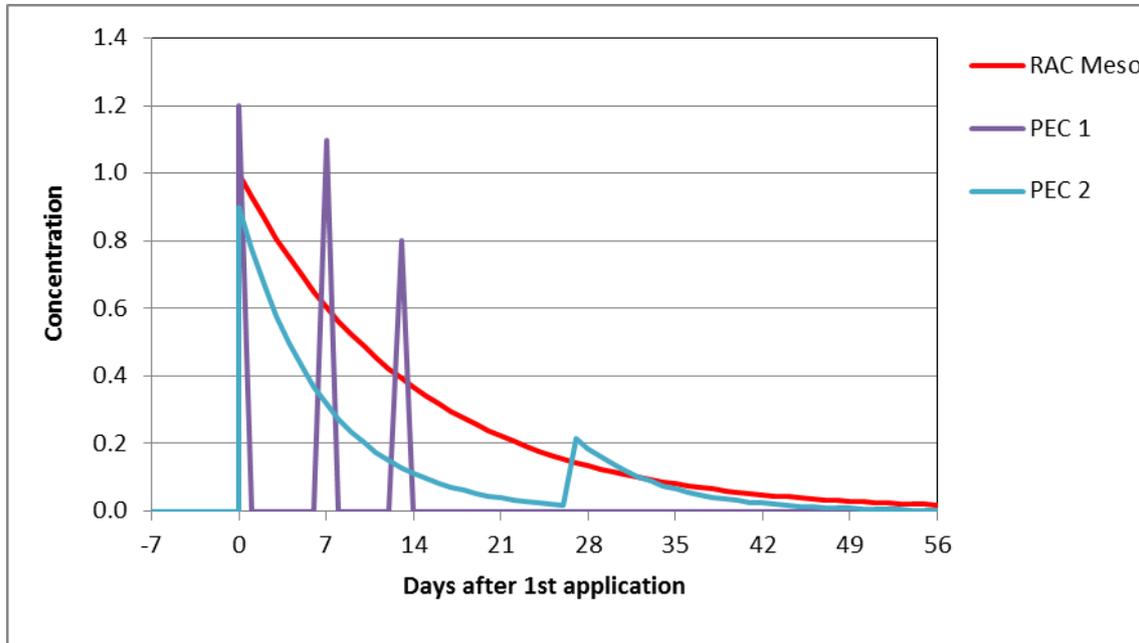


Abb. II.9-5: Vergleich eines hypothetischen RAC-Profiles einer Mesokosmenstudie mit Expositionsprofilen. Beispiele für mögliche Überschätzung des Risikos durch Vergleich der Profile.

II.9.3 Nutzung von Toxikokinetischen-Toxikodynamischen Modellen für die Bewertung von Expositionsprofilen

TK-TD-Modelle erlauben eine mechanistische Verbindung von zeitvariabler Exposition und Effekten, indem sie (i) Aufnahme, Metabolismus und Ausscheidung einer Substanz durch den Organismus (TK) beschreiben, und (ii) aus der sich daraus ergebenden Konzentration im Organismus, in Verbindung mit Annahmen zur Schadensausbildung im Organismus (z.B. interne Schwellenkonzentration, Reparaturmöglichkeiten), den Effekt ableiten (TD) (ausführliche Darstellung s. Kap. II.8). TK-TD-Modelle bzw. ihre Parameter sind jedoch Art- und Substanz-spezifisch, so dass sie für eine repräsentative sensitive und, falls die Wiedererholung von Populationen berücksichtigt werden soll, auch vulnerable Art zu erstellen sind. Für letale Effekte existiert ein generelles Modell (GUTS, Jager et al. 2011). Für subletale Effekte steht z. B. die Modellumgebung DEBtox zur Verfügung (Ashauer et al. 2011, Jager und Zimmer 2012, Jager et al. 2014, Martin et al., in press). TK-TD-Modelle können mit Populationsmodellen gekoppelt werden, um von Effekten auf Organismenebene auf Effekte auf Populationsebene extrapolieren zu können (z.B. Schmitt et al. 2013, Dohmen et al., 2016).

Im Gegensatz zum Vergleich von maximalen oder gemittelten Konzentrationen oder den gesamten Kurvenverläufen ist TK-TD-Modellierung kein Verfahren, mit dem Mesokosmendaten direkt für die Risikoabschätzung genutzt werden können. Vielmehr erlauben solche Modelle (sofern ihre Gültigkeit gezeigt wurde, s.u.) eine Vorhersage von Effekten auf bestimmte Arten

für beliebige Expositionsmuster. Beispiele für die Vorhersage der Effekte von FOCUS Step 3 Profilen finden sich im MODELINK-Bericht für das Überleben von Fischen, die Populationsdynamik von Invertebraten wie *Chaoborus* und das Wachstum von Wasserpflanzen (Ducrot et al., 2016; Dohmen et al., 2016; Hommen et al., 2016b).

TK-TD-Modelle werden an üblichen Labortests mit konstanter Exposition und/oder Tests mit Pulsbelastungen kalibriert und können dann an weiteren Tests mit anderen Belastungsmustern überprüft werden (s. z. B. Ashauer et al. 2014, Schmitt et al. 2013). Eine solche Modelltestung, insbesondere wenn ein TK-TD-Modell mit einem Populationsmodell gekoppelt wurde, kann auch an Hand von Mesokosmendaten erfolgen. Mit dem validierten Modell können dann die Effekte der vorhergesagten Expositionsmuster auf die betreffende Art simuliert werden.

Das folgende Beispiel stammt aus einer Fallstudie des MODELINK Workshops (Dohmen et al., 2016). Abb. II.9-6 zeigt als Beispiel für ein Insektizid die Ergebnisse der GUTS-Kalibrierung an einem 96 h-Test mit *Chaoborus crystallinus*.

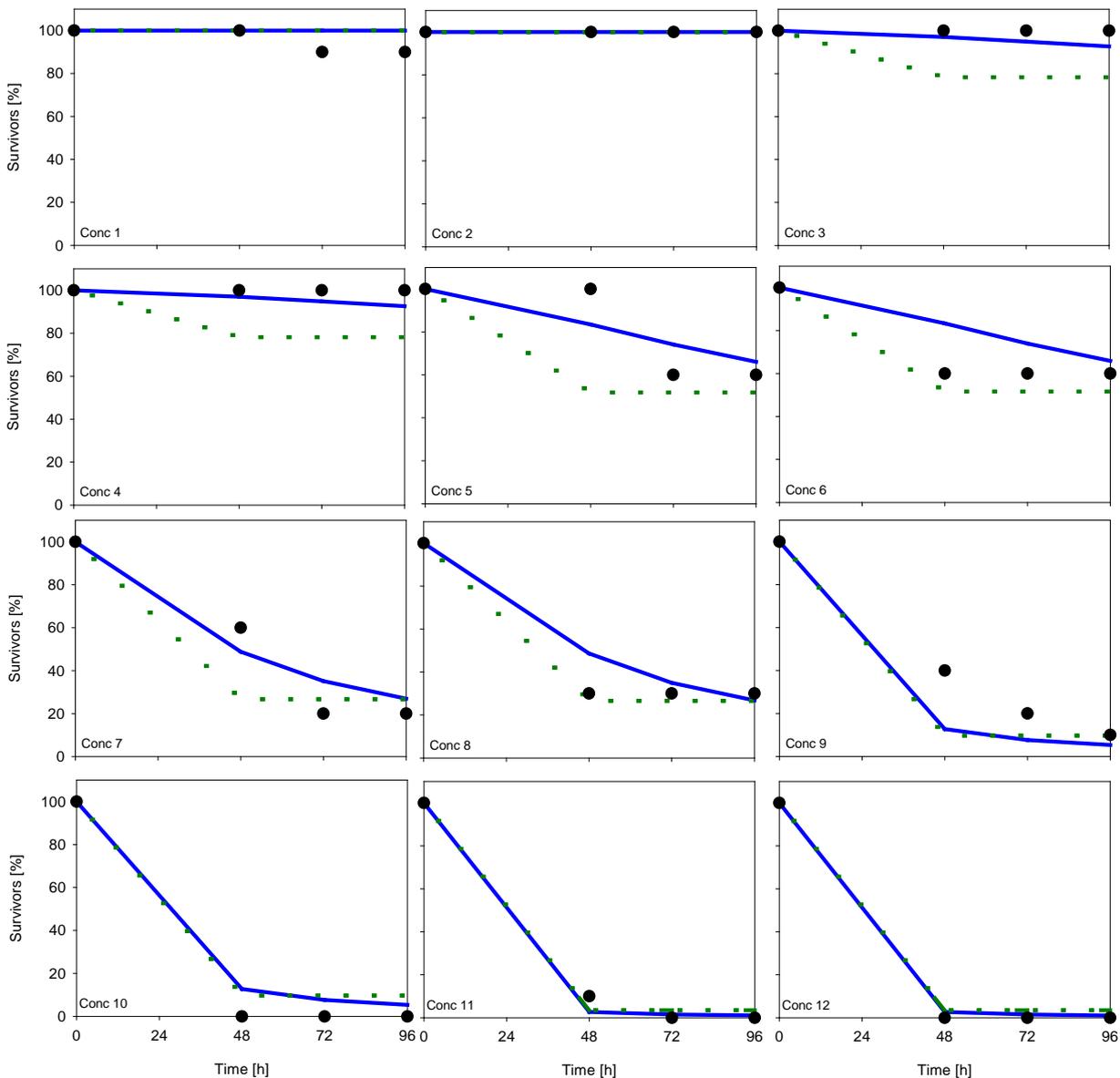


Abb. II.9-6: Beispiel für die Kalibrierung eines TK-TD-Modells für letale Effekte auf *Chaoborus spec.* (aus Dohmen et al., 2016: 'Example for the calibration of GUTS-SD and GUTS-IT on the

results of a 4-day toxicity test performed with *Chaoborus crystallinus*. Black dots: measured survival over time within a 96h toxicity test at constant exposure; green line: GUTS-IT; blue line: GUTS-SD'.

Das kalibrierte GUTS-Modell wurde mit einem Populationsmodell von *Chaoborus* gekoppelt und an den Ergebnissen einer vorhandenen Mesokosmenstudie überprüft (Abb. II.9-7). Die Ergebnisse wurden als hinreichend angesehen, um mit dem Modell auch komplexe FOCUS Expositionsmuster zu simulieren (Abb. II.9-8). Eine Auswertung erfolgte über die Dauer der Tage mit Abweichungen von mehr als 10 %, 20 %, 30 % usw. von der Abundanz in der Kontrolle.

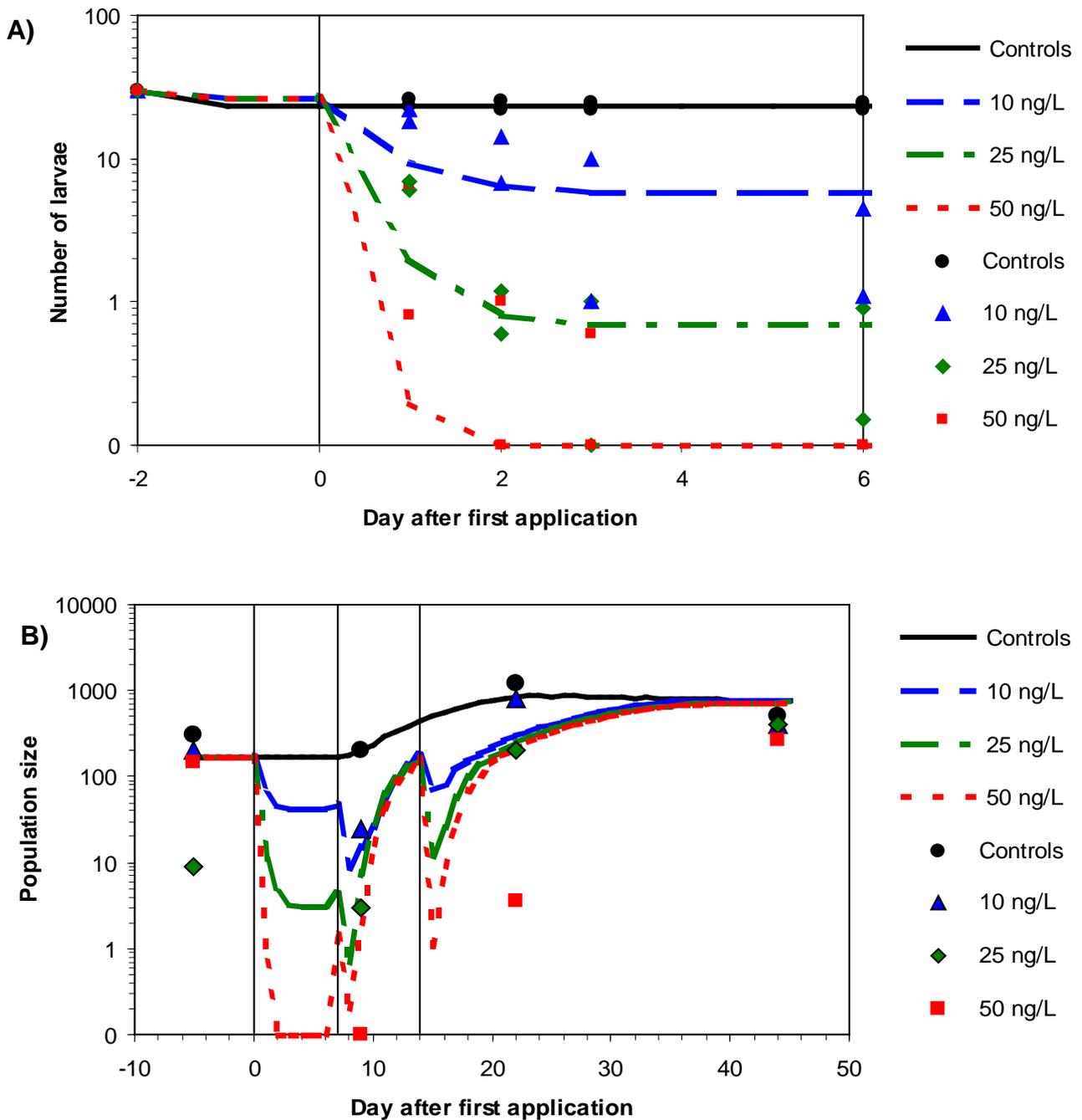


Abb. II.9-7: Beispiel für die die Testung eines TK-TD-Modells für *Chaoborus spec.* (aus Dohmen et al., 2016: 'In-situ bioassay in a mesocosm study (A) and the population dynamics in the same mesocosm experiment with three applications (right) using the SD approach (B). Lines: mean of 50 simulations; Dots: measurements').

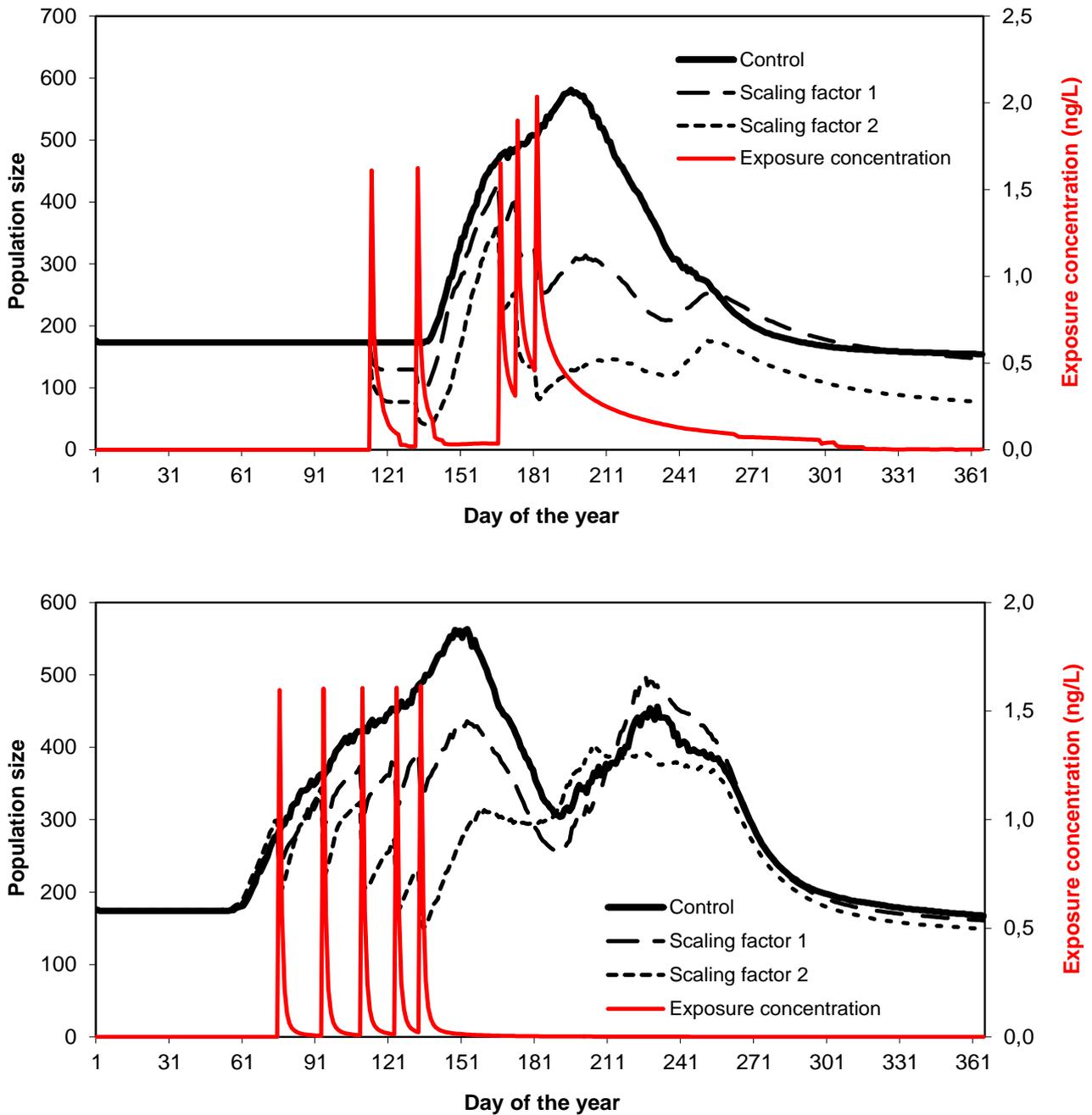


Abb. II.9-8: Vorhergesagte Populationsdynamik von *Chaoborus spec.* für zwei FOCUS-Expositionsszenarien (aus Dohmen et al., 2016: ‘Simulated dynamics of control (full line) and treated (dotted and dashed lines) *C. crystallinus* populations (connected populations) within one modelled year and predicted Modelmethrin exposure concentrations (FOCUS simulations) for the D1 (top) and the D3 (bottom) ditch scenario (secondary y-axis) with a 20 m buffer zone (red line, secondary y-axis)’).

Die Risikoabschätzung erfolgt in solch einem Ansatz also nicht mehr mit einer aus der Mesokosmenstudie abgeleiteten RAC (oder einem RAC-Verlauf), sondern auf der Basis der Effekte verschiedener Expositionsmuster (PECs), die für eine repräsentative sensitive oder vulnerable Art vorhergesagt werden. Die Mesokosmenstudie dient hier zur Identifikation der zu modellierenden Art und liefert Datensätze für die Prüfung des TK-TD-Populationsmodells. Dieser Ansatz

erfordert allerdings eine genauere Festlegung akzeptabler Effekte, in diesem Fall: wie lange darf die Abundanz von *Chaoborus*-Larve wie stark von der Kontrolle abweichen, um regulatorisch akzeptabel zu sein.

Für manche Taxa, wie z. B. langlebige Invertebraten oder Vertebraten, ist eine Validierung der Populationsdynamik in Mesokosmen aus praktischen Gründen nicht möglich und die Validierung muss an Laborversuchen erfolgen (s. z.B. Ashauer et al. 2013 mit Kalibrierung von GUTS an einem 96 h-Test mit der Dickkopfritze und Überprüfung der Modellvorhersage an einem Early Life Stage Test).

Bei der Verwendung von TK-TD-Modellen stellt sich die Frage nach der zu modellierenden Art und des zu testenden Expositionsmusters. Die zu modellierende Art ergibt sich in der Regel aus der vorhandenen Datenbasis. Man wird die Art wählen, für die erste Daten zur Kalibrierung vorliegen und die Risikoabschätzung bis dahin das größte Risiko anzeigt. Also z.B. die Fischart mit der niedrigsten LC50 oder das empfindlichste Taxon aus einer SSD. Dies ist natürlich nicht notwendiger Weise die empfindlichste Art, die im Freiland exponiert sein kann. Allerdings besteht diese Unsicherheit auch in der ‚normalen‘ Risikoabschätzung und wird dort mit Assessmentfaktoren berücksichtigt. Wenn ein TK-TD Modell benutzt wird, um von getesteter konstanter Exposition auf variable Exposition zu extrapolieren, bleibt diese Unsicherheit bei der Extrapolation auf andere Arten bestehen. Analog zur experimentellen Testung modifizierter Expositionen (Tier 2C nach EFSA 2013) sollte der Teil des Assessmentfaktors, der die Unsicherheit bei der Extrapolation auf andere Arten abbildet, daher beibehalten werden. Von Fall zu Fall kann die Unsicherheit in Bezug auf die Extrapolation auf andere Expositionsmuster durch die Verwendung des TK-TD-Modells verringert (z.B. wenn längere Expositionen als im Test berücksichtigt werden) oder vergrößert werden (z.B. wenn angenommen wird, dass durch die Modellierung weitere Unsicherheiten in die Abschätzung eingebracht werden). Andererseits kann argumentiert werden, dass durch die Verwendung eines mechanistischen Modells, welches an Daten (z.B. aus einem Standardtest) kalibriert und an anderen Daten (z.B. aus einem Test mit veränderter Exposition) geprüft wurde, eine realitätsnähere Extrapolation auf andere Expositionsmuster möglich ist als bei einer Abschätzung nur über den Vergleich von Schwellenkonzentrationen aus einem Test mit PECmax oder PEC_{tw}.

Wenn die mögliche Erholung von Populationen nach Effekten bei der Risikoabschätzung berücksichtigt werden soll (Ecological Recovery Option, ERO), muss für die Wahl der zu modellierenden Art neben ihrer toxikologischen Sensitivität auch ihre ökologische Sensitivität (resilience, recovery potential) berücksichtigt werden. Eine ERO-RAC kann experimentell nur aus einer Populations- oder Mesokosmenstudie abgeleitet werden. Eine typische Fragestellung ist, ob die im Experiment beobachtete Erholung auf andere Expositionsmuster übertragbar ist. Modelliert wird/werden dann wahrscheinlich (mit einem Populationsmodell, eventuell gekoppelt mit einem TK-TD-Modell) die vulnerable Art(en), welche in der Mesokosmenstudie die ERO-RAC bestimmt hat (haben). Ähnlich wie bei der Extrapolation von Labortests ist auch hier nicht ausgeschlossen, dass im Freiland eine Art exponiert wird, die stärker vulnerabel ist als die modellierte Art. Aber auch hier liefert die Modellierung nur eine Extrapolation zwischen Expositionen und kann nicht die Extrapolation auf nicht getestete Arten leisten. Diese Unsicherheit bleibt, so wie auch bei der direkten Nutzung experimenteller Daten, und sollte durch Assessmentfaktoren berücksichtigt werden.

Zur Planung von Studien mit veränderter Exposition und Mesokosmenstudien

Für die Durchführung von Labortest mit veränderter Exposition oder von Mesokosmenstudien ist zu entscheiden, welche Expositionsmuster getestet werden sollen.

- Ab welchem Zeitintervall können Pulse als toxikologisch unabhängig angesehen werden (s. EFSA 2013, p. 104 f. und die Empfehlungen dort)?
- Ab welchem Intervall sind Belastungsspitzen ökologisch unabhängig (s. EFSA 2013, p. 105f.)
- Welche Muster können experimentell überhaupt erzeugt werden?
- Welches experimentelle Muster ist protektiv für möglichst viele der vorhergesagten Expositionsmuster?
- Welches experimentelle Muster ist am besten geeignet, die Unsicherheit über die Ergebnisse eines TK-TD-Populationsmodells zu verringern?

In Labortests bestehen relativ große Möglichkeiten, das Expositionsmuster an eine bestimmte Fragestellung anzupassen und verschiedene Muster zu testen. In einer Mesokosmenstudie sind die Möglichkeiten erheblich eingeschränkt, da hier die Erfassung der Effekte auf viele Taxa und die Struktur der Lebensgemeinschaft zu Ableitung von RACs im Vordergrund steht.

Ein allgemein bestes Testdesign gibt es nicht. Die Auswahl ist substanzspezifisch, so dass nur ein Verfahren entwickelt werden könnte, wie im Einzelfall für die verschiedenen Randbedingungen das optimale Design zu finden ist. Um aus einer großen Bandbreite potenziell bzw. experimentell möglicher Muster ein bestimmtes auszuwählen, müssten – sinnvollerweise mittels TK-TD-Modellierung - zunächst Grundlagenkenntnisse über die Veränderung der Effekte für eine Spezies bei variierten Expositionsmustern entwickelt werden. Die Vorgehensweise wäre ähnlich der Überprüfung der Reihung von Expositionprofilen im Rahmen der Entwicklung des GERDA-Ansatzes. Der Unterschied wäre, dass die Profile im konkreten Fall mit geeigneten TK-TD-Modellen für (auf der Basis der Standardtests) des empfindlichsten Taxa beurteilt werden müssten. Die Entwicklung einer Optimierungsmethode unter Berücksichtigung der ökotoxikologischen Relevanz und der experimentellen Möglichkeiten ist allerdings im Rahmen des hier durchgeführten Forschungsprojektes nicht zu leisten.

II.9.4 Beispiel für Risikobewertung bei dynamischer Exposition

Die Effektbewertung der Beispielsubstanz UBA_2 (s. Kap. I.5) beruht auf der Auswertung einer Mesokosmenstudie und soll daher hier als ein Beispiel für die oben dargestellten Verfahren der Risikobewertung dienen. Bei der Substanz handelt es sich um ein Fungizid mit zwei empfohlenen Applikationen im Abstand von 3 Wochen in Wintergetreide im März und April.

In der Mesokosmenstudie wurden 6 Konzentrationsstufen mit zwei Applikationen im Abstand von 14 Tagen getestet. Zwei Stunden nach den Applikationen wurden im Mittel 109 % der Nominalkonzentrationen im Mesokosmoswasser gemessen, so dass die nominalen Konzentrationen als Maximalkonzentrationen verwendet werden können. Die gemessenen Konzentrationsverläufe sind in Abb. II.9-2c) dargestellt. Die mittlere Halbwertszeit (DT50) betrug 4 Tage. Die RAC von 0,1 µg/L wurde aus der niedrigsten Testkonzentration von 0,3 µg/L abgeleitet. Bei dieser Konzentration wurde zwar eine klare Hemmung des Fadenalgenwachstums beobachtet (Abb. II.9-9), sechs Wochen nach der ersten Applikation war allerdings wieder das Kontrollniveau erreicht. Acht Wochen nach der ersten Applikation zeigten die Fadenalgen auch in den Kosmen mit bis zu 3 µg/L eine klare Erholung. In den höheren Konzentrationen war die Erholung verzögert, aber bei Versuchsende bis 30 µg/L gegeben. Auf der Basis der Fadenalgen-

daten könnte ein ERO-RAC demnach auch von 3 µg/L abgeleitet werden. Allerdings wurde bei Versuchsende auch bei 0.3 µg/L eine erhöhte Makrophytenbiomasse, vermutlich als indirekter Effekt der Fadenalgenreduktion festgestellt. Um mit hoher Sicherheit solche indirekte Förderung von Makrophyten im Freiland zu vermeiden, wurde von der bewertenden Behörde ein Sicherheitsfaktor von 3 auf 0,3 µg/L zur Berechnung der RAC verwendet.

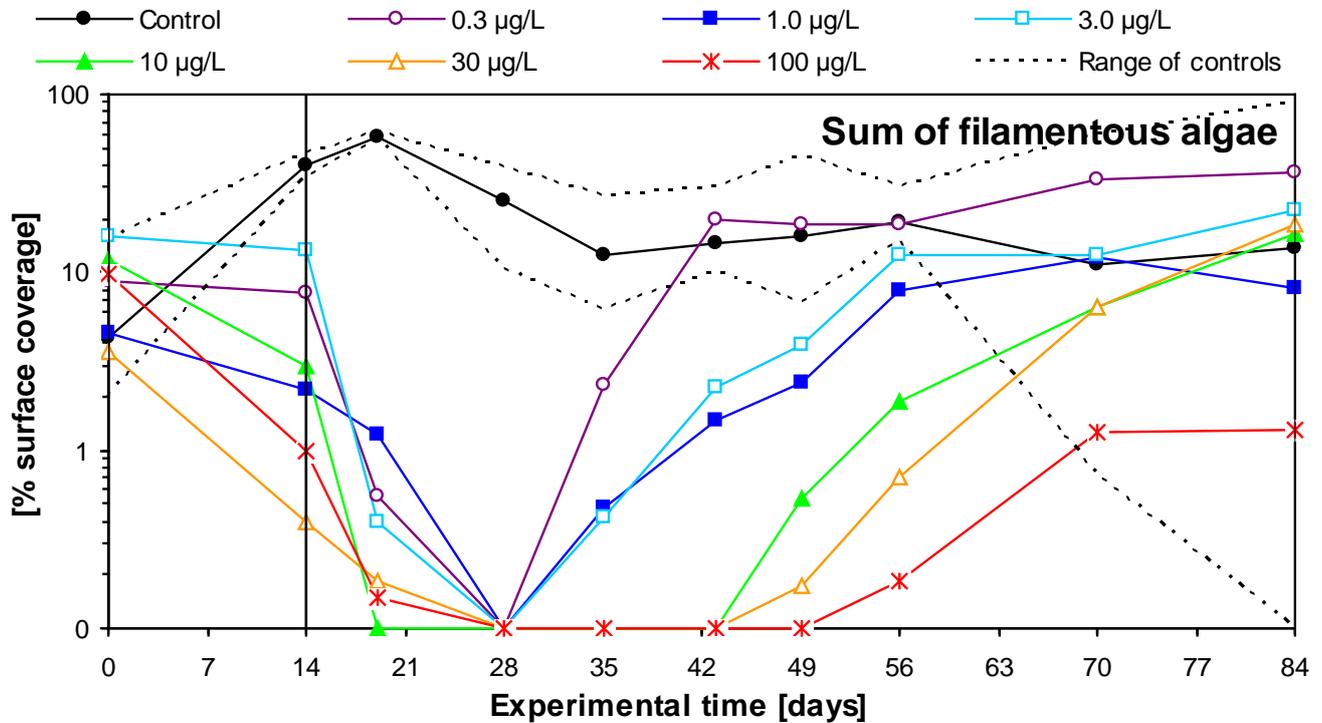
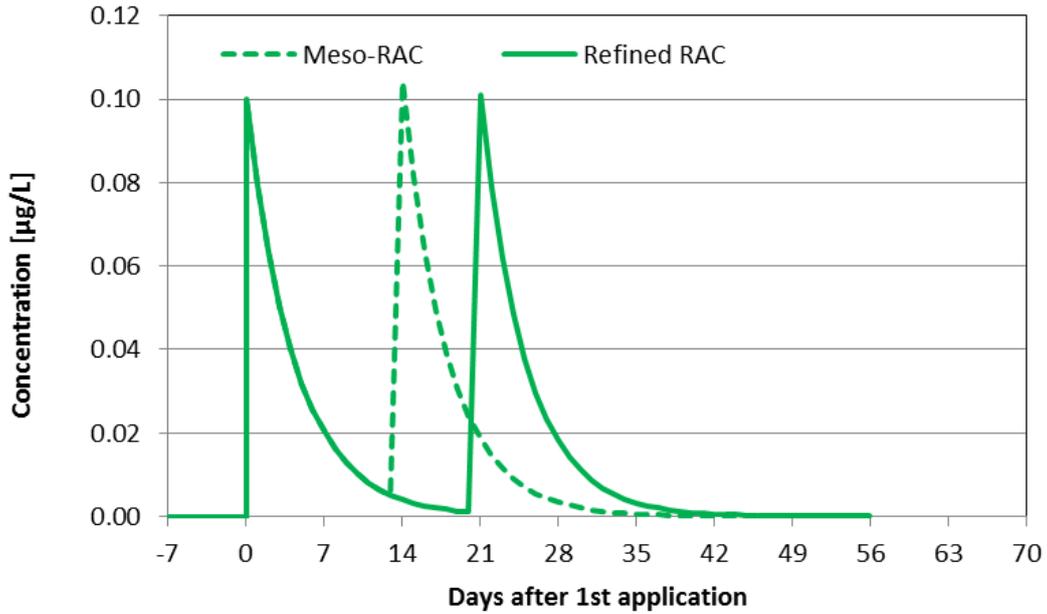


Abb. II.9-9: Deckungsgrad von Fadenalgen an der Wasseroberfläche und an der Mesokosmoswand.

Da die RAC somit unterhalb des getesteten Konzentrationsbereich liegt, wurde das RAC Profil aus der über alle Mesokosmen gemittelten DT50 von 3,4 d für die erste und 3,9 d für die zweite Applikation und 0,1 µg/L Peak-Konzentration gebildet. Im Versuch wurde die Testsubstanz an Tag 0 und Tag 14 appliziert, während die in GERDA simulierte Produkthanwendung ein Intervall von 21 Tage vorsah. Das in der Mesokosmenstudie simulierte Applikationsintervall von 2 Wochen kann als ausreichend protektiv im Vergleich zu dem Intervall von 3 Wochen angesehen werden, das in den PEC-Berechnungen angenommen wurde: Die Erholung der Algen begann bei 0,3 µg/L zwei Wochen nach der 2. Applikation. Nach der ersten Applikation wurde keine Abnahme der Algen, sondern nur eine Wachstumshemmung beobachtet. Eine um eine Woche spätere zweite Applikation hätte daher vermutlich in der Mesokosmenstudie schon eine teilweise Erholung erlaubt und somit die Effekte der 2. Applikation nicht verstärkt. Für den Hüllkurvenansatz wurde daher der 2. RAC-Peak um eine Woche verschoben, so dass die Termine der Drifteinträge der RAC und der PEC in Übereinstimmung gebracht werden konnten (Abb. II.9-10).



**Abb. II.9-10: RAC-Profile der Mesokosmenstudie für die Beispielsubstanz UBA_2 (s. Kap. I.5).
Original-Profil der Mesokosmenstudie mit 2 Wochen-Applikationsintervall und das an ein 3 Wochen-Intervall angepasste Profil.**

Der Vergleich von PECmax und der RAC auf der Basis der Nominalkonzentrationen zeigen alle ein nicht akzeptables Risiko an, wenn keine Risikominderung berücksichtigt wird (Tab. II.9-1). Für die Drainageszenarien sind 20 m Pufferstreifen in Verbindung mit 90 % Driftreduktion erforderlich, um PECmax unterhalb der RAC zu erreichen. In den Runoff-Szenarien haben die Risikominderungsmaßnahmen nur einen geringen Effekt und reichen nicht aus, die PECmax unter die RAC zu senken.

Tab. II.9-1: Exposure-Toxicity-Ratios (ETR) für die Beispielsubstanz UBA_2 (s. Kap. I.5) mit einer RAC von 0,1 µg/L nach GERDA ohne Risikominderung und mit verschiedenen Minderungsmaßnahmen.

Szenario		GERDA (Step 3) keine Risikominderung	GERDA (Step 4) mit Risikominderungsmaßnahmen		
			10 m Pufferstreifen*	20 m Pufferstreifen*	20 m Pufferstreifen* und 90 % Driftreduktion
Drainage	ditch	4,84	0,64	0,34	0,04
	stream	4,31	0,73	0,40	0,04
Runoff	ditch	7,75	3,59	3,43	3,43
	stream	5,13	2,28	2,14	2,14

* Für das Runoff-Szenario ist der Pufferstreifen als bewachsener Randstreifen definiert. .

Zur Verdeutlichung des Hüllkurvenansatzes wird im Folgenden für die Substanz UBA_2 das Peakmuster für das Jahr mit dem 80. Perzentil der PECmax betrachtet. Für beide Drainageszenarien (Graben und Bach) ist die PECmax durch Drifteinträge bestimmt (siehe Kapitel I.5.). Die PEC-Profile sind daher auch relativ einfach und nur durch zwei Spitzen gekennzeichnet (Abb. II.9-11). Der jeweils zweite Drift-Peak ist in allen Modellierungen höher als der erste, weil im GERDA-Ansatz bei multiplen Applikationen für die 1. bis n-1. Applikation das 50. und für die letzte Anwendung dann das 90. Perzentil der Abdriftwerte verwendet wird. Diese Annahme dient dazu, die Berechnung im GERDA-Tool zu vereinfachen, da Einzel- und Mehrfach-Anwendungen nicht mehr separat berechnet werden müssen (wie das bislang in FOCUS SW erforderlich ist, siehe dazu Kapitel I.4.4).

Bei einem Pufferstreifen von 20 m zum Gewässer wird das RAC-Profil bei beiden Drifteintragsereignissen kurzfristig überschritten (Abb. II.9-12).9 %. Zusätzliche Drift reduzierende Maßnahmen würden die PECs unter die RAC reduzieren (s. Tab. II.9-1), so dass das RAC-Profil die PECs umhüllt. In diesem Beispiel ist der Hüllkurvenansatz protektiv. Es ist jedoch zu beachten, dass in diesem Fall auch ohne Drift-reduzierende Technik die RAC nur sehr kurzfristig überschritten ist und die Exposition im Mesokosmos deutlich länger war als die durch Spraydrift verursachten Peaks in der Simulationsrechnung mit GERDA.

In der Expositionsmodellierung (FOCUSsw und GERDA) wie in der Praxis ist das Applikationsintervall als Mindestintervall zu betrachten und das realisierte Intervall hängt von den Wetterbedingungen ab. Für die Anwendung des Hüllkurvenansatzes heißt dies, dass unter Umständen das RAC-Profil nicht nur als Ganzes im Jahresverlauf so eingepasst werden muss, dass sich das erste RAC-Maximum mit dem ersten Driftpeak der PEC überlagert, sondern dass unter Umständen auch das RAC-Profil späterer Applikationen separat verschoben werden muss. In diesem Beispiel findet im Graben der 2. Eintrag später als am 21. Tag nach dem ersten Eintrag statt. In diesem Fall sollte der zweite RAC-Peak nach rechts verschoben werden, was allerdings in diesem Beispiel am Ergebnis nichts ändert.

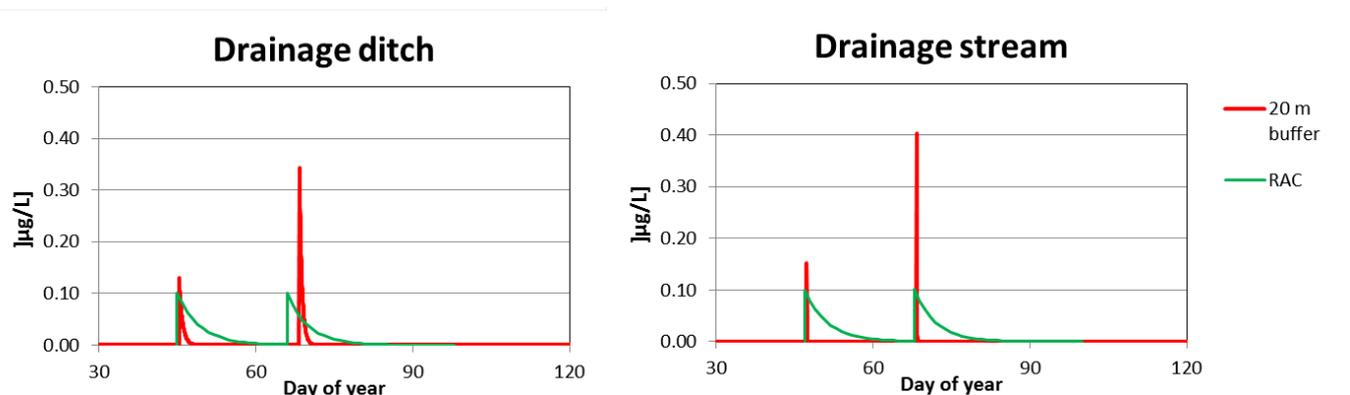


Abb. II.9-11: Vergleiche der RAC aus der Mesokosmenstudie mit den PEC-Profilen der Drainage-Szenarien für die Beispielsubstanz UBA_2 (s. Kap. I.5) mit 20 m Pufferstreifen als Risikominderungsmaßnahme.

Die Runoff-Szenarien sind deutlich komplexer als die nur durch Drifteinträge bestimmten Drainageszenarien, da viel mehr Eintragsereignisse stattfinden (Abb. II.9-13). Risikominderung durch 20 m Pufferstreifen und 90 % Driftreduktion reichen nicht aus, um PECs im Bereich der RAC zu erreichen. Wenn hypothetisch angenommen wird, dass die PECs insgesamt um den Faktor 10 niedriger wären, zeigt der Hüllkurvenansatz für den Graben noch ein nicht akzeptables Risiko an. Die vorhergesagte Konzentrationsabnahme ist zwar ähnlich wie im Mesokosmos-

versuch realisiert, aber die Maxima sind höher und es kommt in dem betrachteten Jahr (Jahr mit 80. Perzentil der PECmax) zu vier relevanten Einträgen, während im Mesokosmos nur die zwei Driftereignisse getestet wurden. Für den Bach sind die Belastungszeiten (Dauer der Peaks) deutlich kürzer und die Maxima liegen nur um ca. den Faktor 2 über den RAC-Maxima. In diesem Fall ist eine Anwendung für die ERO-RAC nur mit weiteren Informationen zu Ökologie der relevanten vulnerablen Arten möglich. Für die ETO-RAC sollten weitere Einträge nicht relevant sein, wenn die Konzentrationen unterhalb der ETO-RAC bleiben und die Belastungen als toxikologisch oder ökotoxikologisch unabhängig angesehen werden können (d.h. keine Akkumulation von Schadstoff oder Schädigung im Organismus stattfindet und somit keine „Carry-over-Effekte“ auftreten).

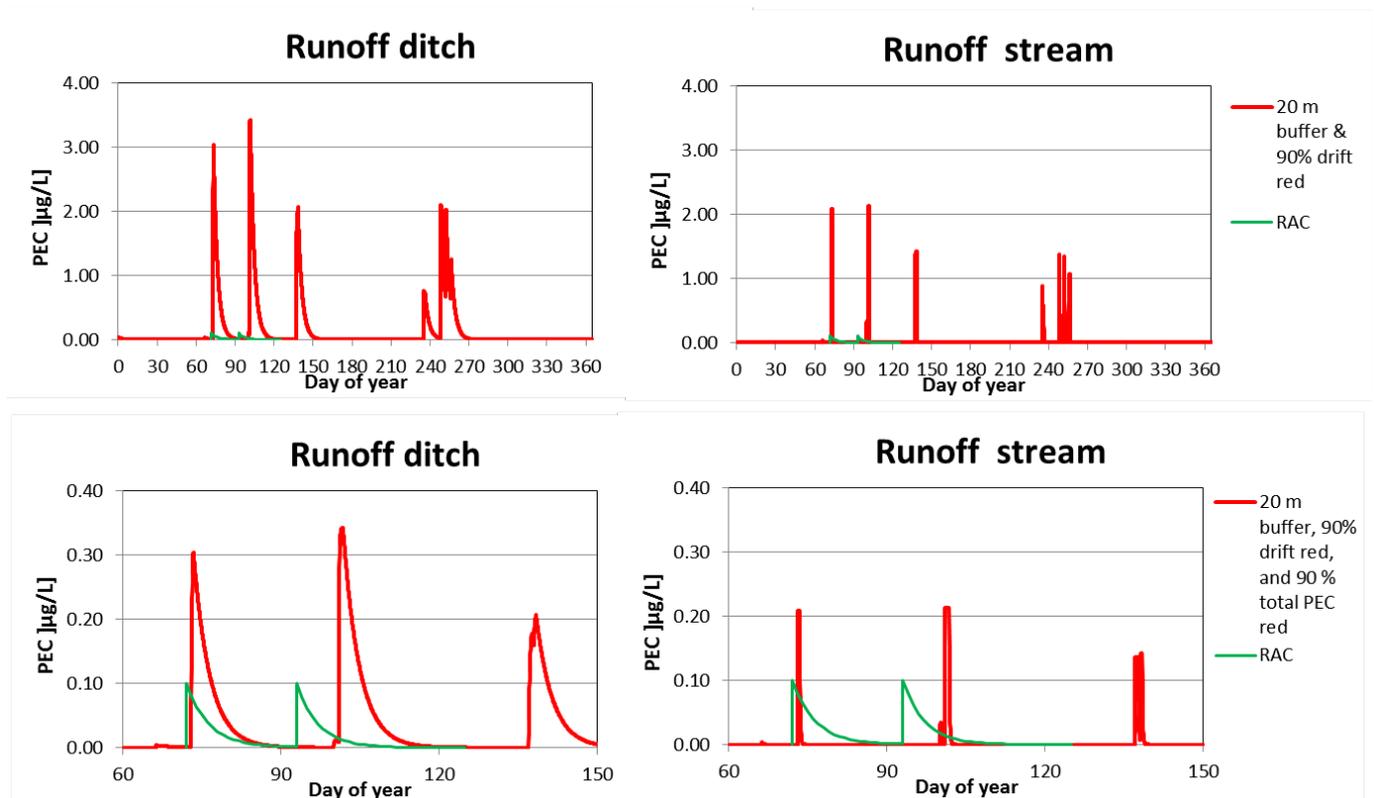


Abb. II.9-12: Vergleiche der RAC aus der Mesokosmenstudie und der PEC-Profile der Runoff-Szenarien für die Beispielsubstanz UBA_2 (s. Kap. I.5). Obere Reihe: Jahresgang für 20 m Pufferstreifen plus Einsatz von Drift um 90 % reduzierender Technik für das Jahr mit 80. Perzentil der PECmax; untere Reihe: PECs hypothetisch um weitere 90 % verringert für den Zeit-Ausschnitt mit den drei stärksten PEC-Spitzen. Eine mögliche Verschiebung des zweiten RAC-Peaks auf den Zeitpunkt des zweiten und dritten PEC-Peaks hat keine Auswirkung auf das Ergebnis, da die PECmax oberhalb der RACmax liegen.

EFSA (2013) nennt folgende Punkte, die bei der Beurteilung der Unabhängigkeit von Expositionspeaks herangezogen werden sollten:

- Anzahl und Dauer der Belastungen über den Tier 1-RACs (RACsw;acute and/or RACsw;chronic),
- Zeitlicher Verlauf der Wirkung in Test mit sensitiven Arten
- Generelle biologische Information über die potentiell gefährdeten Arten, und
- Read-across Information über Substanzen mit ähnlichem Wirkmechanismus.

Sofern Zweifel über die Möglichkeit von carry over-Effekten bzw. toxikologische oder ökotoxikologische Unabhängigkeit von Belastungspeaks bestehen, können konservativ die Tier 1 RACs für den Vergleich verwendet werden. Im Beispiel hier wurde die RAC auf der Basis eines indirekten Effekts abgeleitet, nämlich der Zunahme der Makrophyten durch verhinderte Konkurrenz mit Fadenalgen. Es ist fraglich, ob kurzfristige Belastungen, in deutlich längerem Abstand als in der Mesokosmosstudie realisiert, das Fadenalgenwachstum ausreichend unterdrücken würden, um solch eine Förderung der Makrophyten zu ermöglichen. Für die Abklärung dieser Frage wären Daten zu den Effekten kurzer Exposition auf Fadenalgen hilfreich.

II.9.5 Fazit zur Praktikabilität des Hüllkurvenansatzes im Rahmen der Expositionsbewertung

Das vorstehende Beispiel verdeutlicht in Bezug auf die Planung von Mesokosmenstudien, dass selbst für ein einfaches Driftszenario nicht alle modellierten Expositionsprofile im Hinblick auf die Intervalle zwischen den Expositionsmaxima angemessen abgebildet werden können, da diese Intervalle in den Expositionsmodellen (nach Wetterbedingungen) variabel sind. Es muss daher möglich sein, die Spitzen von RAC-Profilen für den Hüllkurvenansatz entsprechend zu verschieben.

Für Profile, die durch *mehrere* Eintragspfade und -ereignisse bestimmt sind, ist es praktisch nicht möglich, diese durch Mesokosmenstudien abzudecken. Wenn in solch einem Fall nicht nur die ETO-RAC verwendet werden, sondern auch die ERO-RAC in Betracht gezogen werden soll, müssen weitere Information herangezogen werden. In manchen Fällen kann möglicherweise aus der Ökologie der relevanten Taxa abgeleitet werden, ob weitere Peaks Auswirkungen haben (z.B. ob sie überhaupt oberhalb der ETO RAC liegen, ob eine Art zu einem anderen Zeitpunkt überhaupt mit einem sensitiven Stadium exponiert ist, usw.). In anderen Fällen können wahrscheinlich nur speziell geplante Experimente und/oder Modelle weiterhelfen.

In Bezug auf die Praktikabilität des Hüllkurvenansatzes selbst sind folgende Einschränkungen zu nennen: Im Moment liefert GERDA (wie FOCUS) in einer Textdatei PEC-Werte im Stundenintervall. Bei 30 simulierten Jahren werden also mehr als 260 000 Werte für ein Szenario erzeugt, die (nach gegenwärtigem programmtechnischem Stand der Modelle) z.B. über Excel weiterverarbeitet werden müssen. Für das Beispiel hier wurden nur die PEC-Werte des Jahres verwendet, in dem das 80. Perzentil der 30-Jahres-PECmax-Werte auftrat. Es ist allerdings nicht gesagt, dass dies das Jahr ist, das für den Vergleich der kompletten Konzentrationsverläufe relevant ist. Korrekterweise müssten für alle 30 Jahre die RAC- und PEC-Kurven verglichen werden und dann z.B. geprüft werden, ob 80 % der Fälle akzeptabel sind. Weiterhin ist nicht klar, dass der PECmax ausschlaggebend ist. Daher müsste das Gleiche auch für die AUC-Szenarien durchgeführt werden. Dies bedeutet, dass für eine Produktanwendung bei 4 Szenarien (Runoff und Drainage, jeweils mit Bach und Graben) und jeweils 30-jährige Zeitreihen der PECmax- und AUC-Reihungen insgesamt 240 Abbildungen zu erstellen und zu bewerten wären.

Die Erstellung dieser Abbildungen könnte sicher teilweise automatisiert werden. Die Einordnung des RAC-Profiles in den Jahresverlauf und insbesondere die eventuell notwendige Entkopplung und Verschiebung der einzelnen RAC-Peaks ist aber nicht trivial und müsste wahrscheinlich von Hand vorgenommen werden. Die 240 Abbildungen wären am Ende stets durch einen Bearbeiter visuell zu bewerten bzw. zu überprüfen, da nicht notwendigerweise jede

kurzzeitige Überschreitung der RAC-Kurve durch die PEC-Kurve auch ein nicht akzeptables Risiko darstellen muss.

Als zusammenfassendes Fazit ist festzuhalten, dass in jedem Fall für einen routinemäßigen Einsatz des Hüllkurvenansatzes noch weitere Arbeiten in Bezug auf vereinfachte Handhabung bzw. Automatisierung von Arbeitsschritten als auch auf die Auswertung und die Bewertungsregeln notwendig sind.

II.10 Übersicht der zur Eintragsminderung für die Pfade Runoff, Erosion und Drainage in den EU-Mitgliedsstaaten verwendeten nationalen Risikomanagementmaßnahmen

In den Mitgliedsstaaten der EU werden in den nationalen Zulassungsverfahren für PSM-Präparate unterschiedliche FOCUS_{sw} Runoff- und Drainage-Szenarien zugrunde gelegt; nicht alle EU-Mitgliedsstaaten akzeptieren die FOCUS_{sw} Tools für die PSM-Zulassung. Weiterhin werden unterschiedliche Maßnahmen (Optionen) berücksichtigt, die im FOCUS_{sw} Step 4 der Szenarien zur Minderung von Wirksamkeitseinträgen über Runoff & Erosion bzw. über Drainagen in das Zulassungsverfahren eingeführt werden können.

II.10.1 Verwendung der FOCUS_{sw}-Szenarien sowie Minderungsmaßnahmen in nationalen Zulassungsverfahren

Eine erste Übersicht zur unterschiedlichen Verwendung der FOCUS_{sw} Runoff- und Drainage Szenarien wurde auf Initiative der ECPA von Görlitz (2009) zusammengestellt. Im Rahmen des hier vorgestellten Projekts wurde diese Zusammenstellung durch die Fa. DR. KNOELL CONSULT GmbH, Mannheim (Bearbeitung: J. Zimmermann, 2012) aktualisiert und ergänzt. Die in Tab. 12-1 dargestellten Informationen gehen zurück (a) auf eine Auswertung der Guidelines auf Ebene der Mitgliedsstaaten, soweit entsprechende Guidelines vorhanden sind, und (b) auf die regulatorische Erfahrung der Fa. DR. KNOELL CONSULT GmbH (Stand: Sommer 2012)

Zusammenfassend zeigt sich, dass Minderungsmaßnahmen für Runoff und Erosion in 9 der 27 Länder explizit im Zulassungsverfahren eingeführt werden können, in allen Fällen in Form eines Filterstreifens (Runoff buffer), wobei dessen filterwirksame (zu berücksichtigende) Breite zwischen 5 m bis zu 20 m variiert. In vier Mitgliedsstaaten wird ein Runoff-Assessment generell als ‚nicht-relevant‘ angesehen. In den verbleibenden 14 Ländern gibt es keine explizite Angabe zu Mitigierungsoptionen, was in aller Regel bedeutet, dass die im Step 4 vorgesehenen Mitigierungsmaßnahmen (d.h. Runoff buffer mit einer Breite von bis zu 20 m) anerkannt werden, gemäß den Darstellungen in FOCUS (2007a, 2007b). Für Drainage-Einträge werden nur für zwei Länder Minderungsmaßnahmen aufgeführt, in den Mitgliedsstaaten SE und NL wird ein Drainage-Assessment als ‚nicht-relevant‘ angesehen. In Dänemark können für Drainage in Abhängigkeit von Bodentyp und Saison bis zu 90 % Reduktion angesetzt werden.

Im Zulassungsverfahren besteht grundsätzlich die Möglichkeit - sowohl auf Seiten der Expositionsmodellierung als auch auf Seiten der ökotoxikologischen Risikobewertung - im Rahmen eines Higher Tier Assessment sogenannte Refinements durchzuführen, wenn als Ergebnis der Risikobewertung eine TER-Wert- Unterschreitung in einem R- oder D-Szenario auftritt. In welchem Bereich derartige Refinements ansetzen, hängt im Einzelfall von zahlreichen Faktoren ab wie beispielsweise den Substanzeigenschaften, den naturräumlichen Gegebenheiten im betreffenden Land, der betreffenden Kulturart, der im jeweiligen Land spezifischen agronomischen Bedingungen oder der Vorlage weiterer Higher Tier Studien seitens des Antragstellers. Generelle Erfahrungen dazu können nicht abgeleitet werden, insbesondere nicht im Hinblick auf die Frage, in wie weit dann gegebenenfalls Minderungsmaßnahmen für Runoff, Erosion bzw. Drainagen eingestellt werden.

Tab. II.10-1: Übersicht zu den FOCUSsw Runoff & Erosion- (R&E) und Drainage-Szenarien, die im Rahmen der nationalen Zulassungsverfahren in den EU-Mitgliedsstaaten berücksichtigt werden, sowie der Option zur Berücksichtigung von Minderungsmaßnahmen für Runoff&Erosions- und Drainage-Einträge im Zulassungsverfahren (Quelle: s. Text).

Northern Europe					
Land	Runoff& Erosion		Drainage		Source
	relevant FOCUS R-scenarios	Mitigation options	relevant FOCUS D-scenarios	Mitigation options	
DK	Runoffnot adressed (only D scenarios are relevant)	(not relevant)	D3, D4 (input parameterisation must be based on studies that are relevant to Danish conditions).	Max. reduction in exposure via drainage of 90 % accepted (by application restrictions e.g. based on soil type and season)	Northern Zone Steering Committee (2011), DEPA (2011)
EE	R1	no information → FOCUS L&M ³	D1, D3, D4	no information	Northern Zone Steering Committee (2011)
FI	R1	no information → FOCUS L&M ³	D1 - D4, most relevant D1	no information	Northern Zone Steering Committee (2011)
LT	R1	Runoff buffer max. 10 m	D1, D3, D4	no information	Northern Zone Steering Committee (2011)
LV	R1, R2	no information → FOCUS L&M ³	D1, D3, D4	no information	Northern Zone Steering Committee (2011)
NOR	R1, R2, R3	no information → FOCUS L&M ³	D1 - D4	None	Northern Zone Steering Committee (2011), Norwegian Agricultural Inspection Service (2000)
SE	R1	Runoff buffer max. 10 m	D1, D4	None	Northern Zone Steering Committee (2011), KEMI (2011)
Central Europe					
AT	Most important scenarios: R1, R3	Runoff buffer 5 – 20 m	D4, D5; drainage mitigation not accepted	none	AGES (2011)
BE	R1	no information → FOCUS L&M ³	D3, D4	no information	Service public fédéral santé publique, sécurité d de la chaîne alimentaire et environnement (2010)
CZ	All R scenarios required	no information → FOCUS L&M ³	All D scenarios required	no information	SPA (2011)

DE	Model EXPOSIT (no FOCUS model used)	Runoff buffer 5, 10, 20 m	Model EXPOSIT (no FOCUS model used)	Label restriction 'Do not apply on drained soils'	BVL (2010)
HU	R1, R3, R4 national scenario under development	no information → FOCUS L&M ³	D3, D5	no information	no guidance document available ¹
IE	All R scenarios required	no information → FOCUS L&M ³	All D scenarios required	no information	no guidance document available Website: www.pcs.agriculture.gov.ie
LU	All R scenarios required	no information → FOCUS L&M ³	All D scenarios required	no information	Amtsblatt - Luxemburg (1994)

Tab. II.10-1: (Fortsetzung)

Land	Runoff& Erosion		Drainage		Source
	relevant FOCUS R-scenarios	Mitigation options	relevant FOCUS D-scenarios	Mitigation options	
NL	Runoffnot assessed (drift only)	(not relevant)	Drainage not assessed (drift only)	(not relevant)	CTGB (2010)
PL	All R scenarios, R1 most relevant	Runoff buffer max. 20 m accepted	All D scenarios required, most relevant D3, D4	no information	no guidance document available ¹
RO	All R scenarios required	no information → FOCUS L&M ³	All D scenarios required	no information	no guidance document available ¹
SK	All R scenarios required	no information → FOCUS L&M ³	All D scenarios required	no information	no guidance document available ¹ Website: www.uksup.sk
SL	FOCUS not accepted, Runoffnot considered (drift only)	(not relevant)	FOCUS not accepted, drainage not considered (drift only)	(not relevant)	Slovenia (2011)
UK	not assessed	(not relevant)	Spreadsheet-tool; MACRO British scenarios using SEISMIC database	(not relevant) ²	Guidance document: CRD (2009a, 2009b)
Southern Europe					
BG	All R scenarios required	no information → FOCUS L&M ³	All D scenarios required	no information	no guidance document available ¹
CY	All R scenarios required	no information → FOCUS L&M ³	All D scenarios required	no information	no guidance document available ¹
ES	All R scenarios required	Runoff buffer 10 - 20 m	All D scenarios required; most relevant: D5, D6	no information	no guidance document available ¹
FR	All R scenarios required	Runoff buffer 5 – 20 m	D2 - D6	Label restriction: 'do not apply on drained soils '	ANSES (2012)
GR	All R scenarios required; most relevant: R1, R2, R3	Runoff buffer accepted according to FOCUS L&M (2007)	All D scenarios required; most relevant D4 - D6	no information	no guidance document available ¹

IT	R3, R4 scenario	Runoff buffer accepted according to FOCUS L&M (2007)	D4, D6	no information	CCPF (2009a, b)
PT	All R scenarios required; most relevant: R2 - R4	no information → FOCUS L&M ³	All D scenarios required; most relevant: D4, D5, D6	no information	no guidance document available ¹

¹) Regulatory experience DR. KNOELL CONSULT GmbH

²) Argumentation possible: Crop is not growing on drained soil (exception for: cereals, oil seed rape, field beans, grassland), other crops also possible -> depending on agricultural practice Drainage-Info: personal communication with CRD (2011)¹

³) "No information → FOCUS L&M": No information is available on specific national mitigation options. The general recommendations of the FOCUS Landscape & Mitigation group are accepted (up to 20 m vegetated filter strip).

Grundsätzlich sollte gelten: wenn ein Mitgliedsstaat mehrere oder alle R- bzw. D-Szenarien als relevant erachtet und es kann auch im Higher Tier nicht gezeigt werden, dass negative Auswirkungen auf Oberflächengewässer und darin lebende Organismen nicht zu erwarten sind, dann kann zunächst keine Zulassung des PSM-Produktes erfolgen. Nach den Erfahrungen der DR. KNOELL CONSULT GmbH handelt es sich dabei aber i.d.R. um Einzelfallentscheidungen, so dass über die dargestellten Optionen hinausgehend keine verallgemeinernden Aussagen möglich sind, welche Anwendungsbeschränkungen generell von den Zulassungsbehörden akzeptiert werden (schriftl. Mittlg. W. Reiher, DR. KNOELL CONSULT GmbH, 24.10.2012).

II.10.2 Übersicht zu Optionen für Minderungsmaßnahmen nach FOCUS (2007a)

Für eine Modifikation der Szenarien im Step 4 des Zulassungsverfahrens werden im Final Report der FOCUS Working Group on Landscape and Mitigation (FOCUS 2007a) eine ganze Reihe von Möglichkeiten (Tab. II.10-2) aufgeführt. In Spalte 2 „Type of Modification“ dieser Tabelle ist aufgeführt, welche dieser Veränderungen als Mitigationsoption betrachtet werden können.

Welche der in Tab. II.10-2 aufgeführten Optionen in welchen EU-Mitgliedsländern und mit welcher Ausgestaltung (bspw. Formulierung einer Auflage) tatsächlich im Zulassungsverfahren genutzt werden, konnte im Rahmen der hier vorliegenden Untersuchung nicht recherchiert werden.

Tab. II.10-2: Beispiele für Änderungen der Annahmen zur Expositionsmodellierung in Step 4 des FOCUSsw-Ansatzes, mit denen die Realitätsnähe eines Szenarios verbessert und die Effekte von Minderungsmaßnahmen einbezogen werden können (i.e. Table 8 in FOCUS, 2007a).

Exposure component	Type of modification	Factor	Amenable to landscape analysis
Drift/Runoff/drainflow	Mitigation	Application rate	-
	Mitigation	Application timing	-
Drift/Runoff/aquatic fate	Chemical refinement	Chemical parameters	-
Runoff/drainflow	Scenario refinement	Probability of occurrence and intensity of event-driving rainfall and of antecedent moisture conditions	Yes
Drift	Simple scenario refinement	Drift values	-
	Complex scenario refinement	Distribution of natural margin distance between crop and surface water	Yes
	Complex scenario refinement	Interception by bankside vegetation	Yes
	Complex scenario refinement	Wind direction	Yes
	Mitigation	Influence of no-spray (or no-crop) buffer	-
	Mitigation	Influence of drift reducing technology	-
	Mitigation	Influence of windbreak	-
Runoff/drainflow	Complex scenario refinement	Irrigation method and schedule	-
	Simple scenario refinement	Cropping dates or parameters	-
	Simple scenario refinement	Soil profile properties	Yes
	Simple scenario refinement	Simulation year	-
	Complex scenario refinement	Spatial distribution of treated fields in catchment	Yes
	Mitigation	Formulation / application method	-
Runoff	Mitigation	Pesticide retention in buffer zone	Yes
Loadings to surface water	Complex scenario refinement	Upstream feeding area	Yes
	Complex scenario refinement	Proportion of catchment treated	Yes
	Complex scenario refinement	Timing of catchment hydrology	-
Aquatic fate	Complex scenario refinement	Dimensions of the water body	Yes

	Complex scenario refinement	Hydrology (e.g. weirs for ditches and streams, lack of seepage for ponds, baseflow assumptions)	-
	Simple scenario refinement	Influence of macrophytes on fate and retention of pesticides	-

II.10.3 On-site und off-site Maßnahmen als Risk Mitigation Options in der Expositionsabschätzung

Im Hinblick auf die Expositionsabschätzung in GERDA Stufe 4 wurde untersucht, in wieweit sogenannte on-site und off-site Maßnahmen möglicherweise als Risikominderungsmaßnahmen in das Zulassungsverfahren eingeführt werden können. Quantitativ auswertbare Ergebnisse liegen dabei nur zu den Wirkungen von konservierender Bodenbearbeitung und Bodenbedeckung vor. Der Effekt von kultur- oder landschaftsspezifischen Risikomanagementmaßnahmen kann bestenfalls qualitativ bewertet werden.

II.10.3.1 Bodenkonservierende Bodenbearbeitung und Bodenbedeckung

Es wurde eine Literaturlauswertung durchgeführt, in welchem Umfang durch bodenkonservierende Bearbeitungsverfahren (wie bspw. Mulchsaat, Direktsaatverfahren) und/oder durch die Förderung der Bodenbedeckung die Wirkstoff-Austräge über Runoff und Erosion reduziert werden können. Die nachfolgend dargestellten Ergebnisse stützen sich im Wesentlichen auf zwei umfangreiche Reviews:

- 1) Meaten et al. (2012): Review von rd. 100 Plot-Versuchen in Europa zur Verminderung von Runoff und Bodenaustrag durch verschiedene on-site-Maßnahmen.
- 2) Fawcett et al. (1994): Review von 10 Untersuchungen, in denen die Reduzierung des PSM-Austrags über Runoff und Erosion durch „No tillage“ und „Reduced tillage“.

Die Sichtung der deutschsprachigen Literatur zum Thema (u.a. Fiener und Auerswald 2003, Machulla et al. 2008, Nitsche et al. 2002, 2004, Seidel 2008, Sommer et al. 1995, Zimmerling 2004) sowie eine Abfrage von rund 15 Personen in Deutschland (Landesämter für Landwirtschaft, LUFA's, Universitäten etc.) zu eigenen Versuchen brachte keine verwertbaren Ergebnisse.

Begriffsbestimmung

Der Begriff „on-site-Maßnahmen“ zur Verminderung von Runoff und Erosion wird von verschiedenen Autoren nicht immer einheitlich verstanden. In Tab. II.10-3 wird daher zunächst versucht, die verschiedenen Maßnahmen zu präzisieren, die in den Bereichen Bodenbearbeitung, Boden- und Vegetationsbedeckung sowie Landschaftsgestaltung zur Verminderung von Runoff und Erosion in der Literatur genannt werden. Die Trennlinie zwischen on-site- und off-site Maßnahmen ist dabei nicht immer scharf zu ziehen, so können bspw. Filterstreifen (buffer strips) sowohl am unteren Ende einer Ackerfläche als auch in größerer Entfernung davon angeordnet sein. Auch die in Tab. II.10-3 unter „Landschaftsgestaltung“ angeführten Maßnahmen sind von ihrer Positionierung her als off-site-Maßnahmen zu charakterisieren. Im englischsprachigen Bereich werden die drei Bereiche auch mit „edge-of-field measures“, „in-field measures“ und „off-field measures“ bezeichnet (z.B. MAgPIE 2013).

Weiterhin ist anzumerken, dass insbesondere unter „reduzierter Bodenbearbeitung“ ein breites Spektrum von Bodenbearbeitungsverfahren subsummiert wird. Auf der einen Seite kann das nur den Verzicht auf Bodenwendung durch den Pflug bedeuten (bei ansonsten unveränderter Häufigkeit und Eingriffstiefe von Bearbeitungsvorgängen), am anderen Ende des Spektrums kann dabei die Bodenbearbeitung auf einen einzigen Grubberstrich während der gesamten Anbauperiode vermindert sein.

Tab. II.10-3: Maßnahmen zur Verminderung von Runoff und Erosion (durch Wasser) in den Bereich Bodenbearbeitung, Bodenbedeckung und Landschaftsgestaltung, Zusammenstellung n. Morgan (2005, veränd.).

Maßnahme (Abk.)	Beschreibung
Bodenbearbeitung (Soil management)	
NT: No tillage Keine-Bodenbearbeitung	Verzicht auf jede Form von Bodenbearbeitung, d.h. Eingriff in den Boden (mit Ausnahme Saatschlitzte); häufig auch als Direktsaat bezeichnet
RT: Reduced tillage Reduzierte Bodenbearbeitung (häufig auch als Conservation tillage bezeichnet)	Bodenbearbeitung mit reduzierter Eingriffsintensität (und meist auch mit verminderter Anzahl von Bearbeitungsgängen) im Vergleich zu herkömmlicher, wendender Bodenbearbeitung (Streichblechpflug), z.B. nur Grubber
CT: Contour Tillage Konturbearbeitung	Richtung der Bodenbearbeitung folgt den Höhenlinien (unabhängig von der Art der Bodenbearbeitung, d.h. kombinierbar mit z.B. Reduced tillage)
Boden- und Vegetationsbedeckung (Crop and vegetation management)	
CC: Cover crops Zwischenfrucht	Zwischenfrucht zur Bodenbedeckung nach der Ernte der Hauptfrucht bis zur Einsaat der folgenden Hauptfrucht
MU: Mulching Mulchen	Aufbringen, Anreicherung oder Belassen von organischem Material (i.d.R. Erntereste) auf der Bodenoberfläche
SC: Strip cropping Streifenanbau	Anbau von Feldfrüchten abwechselnd in Streifen quer zum Hang (i.d.R. eine erosionsanfälligerer im Wechsel mit einer weniger erosionsanfälligen Pflanzenart)
BS: Buffer strips Filterstreifen VBS: Vegetated buffer strips VFS: Vegetated filter strips	Temporäre oder dauerhafte Anlage von bewachsenen Vegetationsstreifen (üblicherweise Gras) quer zum Hang innerhalb bzw. unterhalb einer Ackerfläche (im weiteren Sinne sind auch Untersaaten in Reihenkulturen dazu zu rechnen)
Landschaftsgestaltung	
GWW: Grassed waterways	Anlage von dauerhaft bewachsenen Grasstreifen entlang der Fließwege von konzentriertem Oberflächenabfluss, innerhalb oder unterhalb von Ackerflächen
RBS: Riparian buffer strips Uferstreifen	Anlage von dauerhaft bewachsenen Vegetationsstreifen im Uferbereich von Oberflächengewässern
TER: Terraces Terrassierung	Anlage von hangparallelen Terrassen

Insbesondere ist auch das Verfahren „Mulch“ bzw. „Mulchsaat“ gegenüber Direktsaat bzw. reduzierter Bodenbearbeitung nicht präzise abzugrenzen (vgl. Brunotte 2007, Eichhorn 1999). Allen Verfahren ist gemeinsam, dass nach der Ernte infolge fehlender Einarbeitung der Pflanzen- und Erntereste der Vorfrucht (Stoppeln, Stroh, ggf. Zwischenfrucht) eine größere Menge an organischem Material auf der Bodenoberfläche verbleibt. Für die Einsaat der Folgekultur ist daher meist eine spezielle Sämaschine erforderlich. Die Wirkung der Maßnahme „Mulchen“ hängt entscheidend von der Menge an organischem Material auf der Bodenoberflä-

che respektive dem Anteil der mit Mulchmaterial bedeckten Oberfläche ab. Tab. II.10-4 gibt eine Übersicht zum Anteil der Bodenbedeckung mit Pflanzenresten (Mulch) in verschiedenen Versuchen zur Reduzierung der PSM-Austräge durch reduzierte Bodenbearbeitung.

Tab. II.10-4: Literaturoswertung zum Anteil der Bodenbedeckung bzw. der Menge des organischen Materials auf der Bodenoberfläche in Versuchen zur Reduzierung des Runoff-Austrags von Pflanzenschutzmitteln durch reduzierte Bodenbearbeitung.

Referenz	Bearbeitungs-system	Varianten	Mulchbedeckung Bodenoberfläche
Baker and Johnson (1979)	No tillage	Small watershed	45 %
Baker et al (1978)	No tillage	3 plots	46 – 63 %
Felsot et al. (1990)	No tillage	Year 1984 Year 1985	86 % 49 %
Franti et al. (1998)	No tillage	Iowa Missouri	30 – 45 % > 50 %
Jiang et al. (2011)	Mulch added	Straw	6.000 kg/ha
Locke et al. (2008)	No tillage	Weed residues	1.650 kg/ha
Mamo et al. (2006)	No tillage Disk		46 % 28 %
Mickelson et al. (2001)	No tillage	Year 1993 Year 1994	88 % 81 %
Pantone et al. (1996)	No tillage Chisel tillage		99 % 30 %
Rector et al. (2003)	No tillage	Year 1999 Year 2000	75 % 80 %
Sauer and Daniel (1987)	No tillage	Year 1983 Year 1984	78 % 57 %

Die Spannweite der Bodenbedeckung mit organischem Material reicht in den Varianten ohne Bodenbearbeitung (No Tillage) von 30 % bis zu nahezu vollständiger Bodenbedeckung (99 %), der Mittelwert der Angaben in Tab. II.10-4 beträgt rund 65 %. Ein Zusammenhang zwischen dem Anteil der Bodenbedeckung und der Höhe der Verminderung von Runoff und Boden-erosion sowie PSM-Austrag (sofern untersucht) ist in den Ergebnissen, die in den beiden Reviews von Fawcett et al. (1994) und Meatens et al. (2012) dargestellt werden, nicht zu erkennen.

Plot-Versuche zur Verminderung von Runoff und Bodenaustrag

Meatens et al. (2012) haben in einem umfassenden, aktuellen Review die Ergebnisse zur Verminderung von Runoff und Erosion (ohne Messung von PSM-Transport) durch Bodenbearbeitung und Bodenbedeckung von über 100 Feldversuchen in Europa und dem Mittelmeerraum ausgewertet. Insgesamt liegen Daten von mehr als 1000 Plot-Messjahren jeweils zu Runoff und Bodenabtrag vor; die Abb. II.10-1 und II.10-2 zeigen die Verteilung der Verminderung (bzw. Zunahme) des Runoff-Volumens und des Bodenabtrags mit einer Maßnahme relativ zu ohne diese Maßnahme.

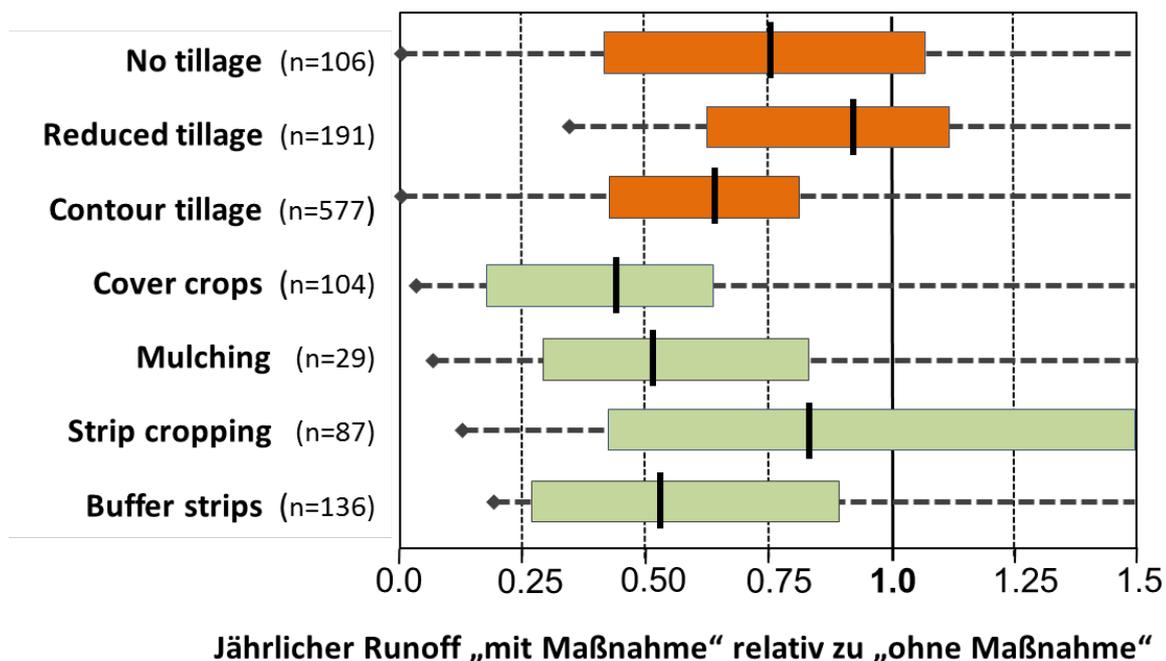
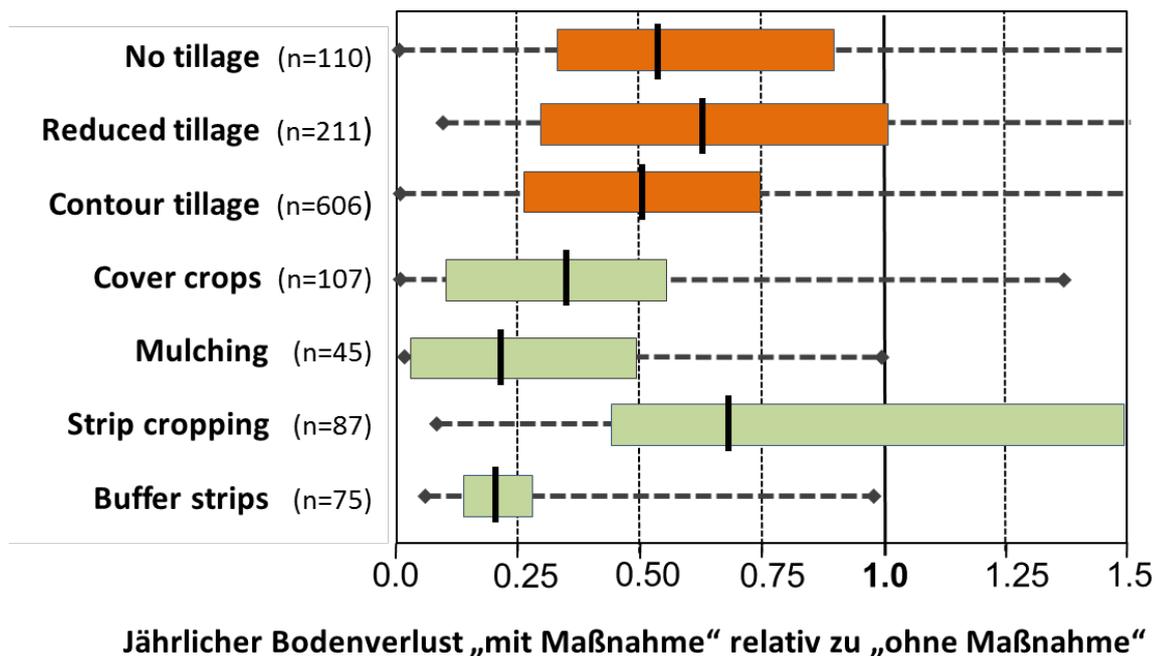


Abb. II.10-1: Wirkung von Maßnahmen zur Verminderung des Runoffs, Median und Verteilung der Ergebnisse aus Plot-Versuchen in Europa, insges. rd. 1000 Plot-Jahre ausgewertet (Maetens et al., 2012).

Säulen: 25 %/75 %-Quantil, Balken: 5 %/95 %-Quantil, in Klammern: Anzahl ausgewertete



Plot-Jahre.

Abb. II.10-2: Wirkung von Maßnahmen zur Verminderung des Bodenverlustes, Median und Verteilung der Ergebnisse aus Plot-Versuchen in Europa, insges. rd. 1000 Plot-Jahre ausgewertet (Maetens et al., 2012).

Säulen: 25 %/75 %-Quantil, Balken: 5 %/95 %-Quantil, in Klammern: Anzahl ausgewertete Plot-Jahre.

Aus den Ergebnissen sind als qualitative Aussagen festzuhalten: Maßnahmen im Bereich Boden- und Vegetationsbedeckung (Filterstreifen, Mulchen und Zwischenfruchtanbau) sind generell

wirksamer als Änderungen in der Bodenbearbeitung (keine oder reduzierte Bodenbearbeitung). Weiterhin ist im Regelfall bei allen Maßnahmen die Reduzierung der erodierten Bodenmenge stärker als die Verminderung des Runoff-Volumens. Eine Zeitreihenanalyse der länger laufenden Plot-Versuche ergab, dass die Verminderung des Runoff-Volumens durch „No tillage“ und „Reduced tillage“ im Laufe der Jahre geringer wurde, im Gegensatz zur Verminderung der Erosion.

Die meisten Wirkstoffe werden überwiegend über Runoff (gelöste Phase) transportiert, nur für stark sorbierende Wirkstoffe ist die Bodenerosion von größerer Bedeutung. Die Bewertung der Maßnahmen erfolgt daher vorrangig anhand ihrer Verminderung des Runoffs. Die *Mediane* der Reduktionswirkungen betragen für die Maßnahmen im Bereich Bodenbearbeitung: No Tillage 25 %, Reduced Tillage 8 % und Contour Tillage 36 %; für die Maßnahmen der Bodenbedeckung: Mulching 48 %, Cover Crops 55 %, Strip Cropping 17 % und Buffer Strips 47 % (s. Abb. II.10-1).

Insgesamt ist für alle Maßnahmen eine erhebliche Streuung der Ergebnisse festzustellen, in einer mehr oder weniger großen Zahl von Fällen wurde sogar eine *Zunahme* von Runoff bzw. Bodenabtrag gegenüber der Variante „ohne Maßnahme“ beobachtet. Weiterhin wurde für etliche Versuche festgestellt, dass die Reduktionswirkung der Maßnahme für Runoff und Erosion zum Teil signifikant negativ korreliert war mit dem Jahresniederschlag, der Plot-Länge und/oder der Hangneigung. Mit anderen Worten: die Angaben zu den prozentualen Verminderungen, die von den Autoren in ihren Versuchen ermittelt werden, gelten immer nur für die jeweils eingestellten Versuchsbedingungen, d.h. Niederschlagsmenge und -verteilung während der Messjahre, Bodentyp, Hangneigung, Feldlänge usw. Eine Verallgemeinerung einzelner Versuchsergebnisse ohne Beachtung der Randbedingungen, unter denen sie ermittelt worden sind, ist nicht ohne Weiteres zulässig.

Versuche zur Verminderung des Wirkstoff-Austrags durch Bodenbearbeitungsmaßnahmen

Freiland-Parzellenversuche mit Messungen der Verminderung des PSM-Austrags über Runoff und Erosion durch veränderte Bodenbearbeitung wurden vor allem in den 1990er Jahren durchgeführt. Für die folgenden Ergebnisse wurden ein Review von Fawcett et al. (1994) sowie weitere Veröffentlichungen ausgewertet (Hansen et al. 2001, Jiang et al. 2011, Locke et al. 2008, Mamo et al. 2006, Rector et al. 2003, Seifert et al. 2001).

Abb. II.10-3 zeigt die Verteilung der Ergebnisse aus diesen Versuchen, getrennt nach künstlichem und natürlichem Niederschlag. Die Angaben zur Reduzierung der Wirkstofffracht wurden von den meisten Autoren nicht getrennt nach einerseits Verminderung des Runoff-Austrags und andererseits Verminderung des Austrags mit erodiertem Boden. Im *Median* der No Tillage-Varianten unter natürlichem Niederschlag wird eine Verminderung der Wirkstofffracht um rd. 90 % erreicht, mit Reduced Tillage wird der Austrag mit 51 % annähernd halbiert.

Auch für diese Versuche ist gleichfalls eine erhebliche Varianz der Ergebnisse festzustellen, bei beiden Maßnahmen tritt in Einzelfällen auch eine Zunahme des PSM-Austrags auf. Die Einflussfaktoren, von denen die Veränderungen des PSM-Austrags abhängen, sind nicht quantifizierbar. Die Angaben zur prozentualen Verminderung gelten stets nur für die jeweiligen Versuchsbedingungen, d.h. Niederschlagsmenge, Wirkstoff, Bodentyp, Hangneigung, usw. Eine Verallgemeinerung der einzelnen Versuchsergebnisse ist nicht möglich.

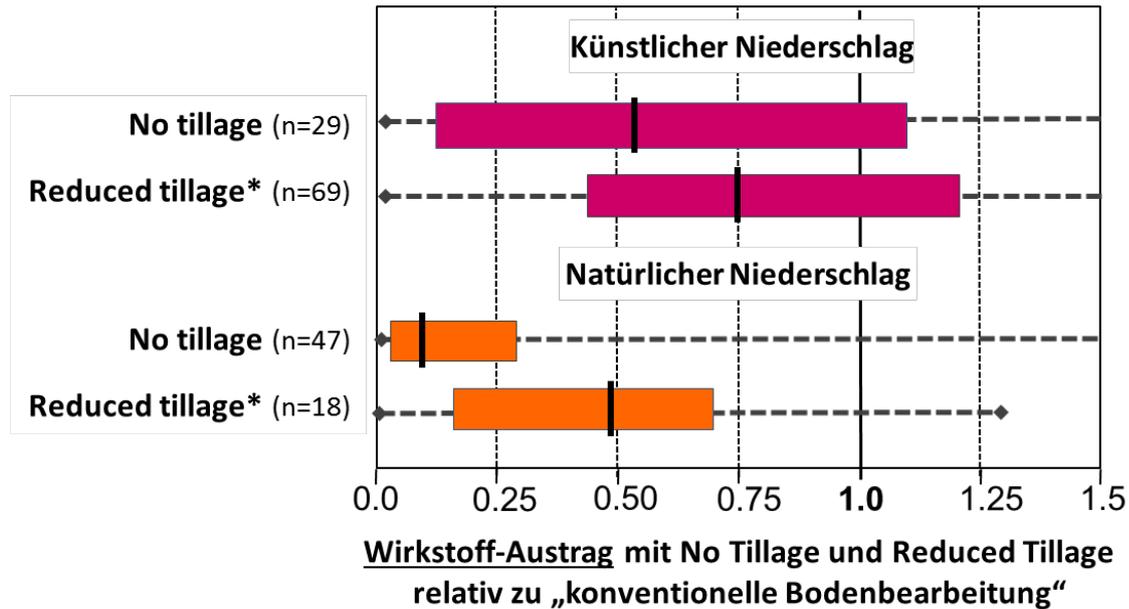


Abb. II.10-3: Verminderung von PSM-Austrag (Runoff und Erosion) durch veränderte Bodenbearbeitung: Median und Verteilung der Ergebnisse von rd. 70 Parzellen-Versuchen, USA (Fawcett et al. 1994, weitere Quellen s. Text). Säulen: 25 %/75 %-Quantil, Balken: 5 %/95 % Quantil, in Klammern: Anzahl ausgewertete Versuche. *) Reduced tillage: u.a. chisel, disk, ridge, strip till.

Anmerkung: Die vorstehenden Ausführungen beziehen sich ausschließlich auf die Wirkung von Bodenbearbeitungsmaßnahmen. Die Risikominderung durch Filterstreifen (buffer strips, VFS) wird von diesen Aussagen nicht berührt. Die Wirksamkeit dieser Maßnahme wird ausführlich im Rahmen der Bewertung des Modells VFSSMOD (Kap. II.7) sowie insbesondere im Zusammenhang mit der Regressionsgleichung von Sabbagh et al. (2009) (Kap. II.7.3) behandelt.

II.10.3.2 Weitere Risikomanagementoptionen

Als weitere on-site-Maßnahmen zur Verminderung von PSM-Austrägen kommen Zwischenfruchtanbau und Begrünung mit Untersaat, Verkürzung der erosiven Hanglänge sowie Streifensaart in Reihenkulturen (Mais, Rüben) in Betracht. Als weitere off-site-Maßnahme werden unter Anderem grasbewachsene Fließbahnen (grassed waterways) in der Landschaft diskutiert. Die Minderungswirkung der genannten Maßnahmen gegen Runoff und Bodenerosion ist allgemein anerkannt und wird regelmäßig in der Literatur angeführt, für eine quantitative Bewertung fehlen jedoch einschlägige Veröffentlichungen bzw. Versuchsergebnisse. Für Maßnahmen wie Zwischenfruchtanbau, Untersaaten oder Streifensaart, die eine höhere Bedeckung der Bodenoberfläche mit Pflanzenmaterial anstreben, können näherungsweise die Ergebnisse aus den Abb. II.10.3-1 und -2 für Cover Crops zur Bewertung herangezogen werden.

Die EU-Cross Compliance-Bestimmungen zur Minderung der Erosionsgefährdung von ackerbau-lich genutzten Flächen in Deutschland schreiben für die Gefährdungsstufen CCWasser1 und CCWasser2 kein bestimmtes Bearbeitungsverfahren vor, sondern beschränken nur den Pflugeinsatz (wendende Bodenbearbeitung) innerhalb bestimmter Zeitfenster.

II.10.3.3 Bewertung von on-site und off-site-Maßnahmen als Risk Mitigation Options in der Expositionsabschätzung

Zusammenfassend wird die Wirksamkeit von on-site und off-site Risikominderungsmaßnahmen (ausgenommen Filterstreifen, s. Anmerkung oben) wie folgt bewertet:

- Die Festlegung von fixen Prozentwerten (default-Werte) für die Reduktionsleistung von verschiedenen Maßnahmen, insbesondere im Bereich Bodenbearbeitung und Bodenbedeckung, erscheint auf Basis des derzeitigen Kenntnisstands wissenschaftlich nicht begründbar.
- Für den Fall, dass trotzdem default-Werte für die Reduktionsleistung von on-site-Maßnahmen (Bodenbearbeitung, Bodenbedeckung) oder off-site-Maßnahmen (vor allem VFS) mittels statistischer Auswertung (einer ausreichend großen Zahl) von Versuchsergebnissen festgelegt werden sollten, dann ist zu prüfen, ob der Median-Wert der experimentell gemessenen Reduktionsleistungen oder ob ein konservativeres Perzentil (bspw. die 90 Perzentil-Werte in Abb. II.10-1 bis -3) der Minderungsleistung herangezogen werden soll. Einerseits sind im Risk Assessment grundsätzlich konservative Annahmen bzw. Randbedingungen zu wählen, andererseits führt eine Kumulierung von worst case-Annahmen im Resultat zu einem extrem seltenen Ereignis. Hohe Perzentilwerte (s. Abb. II.10-1 bis -3) bedeuten außerdem nur geringe bis sehr geringe fixe Prozentwerte für die Verminderung durch die einzelnen Maßnahmen.
- Weiterhin ist gegen default-Werte einzuwenden, dass die Wirkung der Einflussfaktoren auf die Reduktionsleistung (Bodenart, Hanglänge, Hangneigung, Niederschlagsintensität, Bodenbedeckung usw.) nicht quantifiziert werden kann. Die Repräsentativität eines Runoff-Ereignisses bzw. der dabei gemessenen Reduktionswirkung kann nicht beurteilt werden. Über die Protektivität eines fixen Wertes kann daher nichts ausgesagt werden.
- Für eine dynamische Simulation der Verminderung der Wirkstoffausträge durch die verschiedenen Maßnahmen fehlt es bislang an geeigneten Modellansätzen (im Gegensatz zu grasbewachsenen Filterstreifen, die mit dem Modell VFSSMOD simuliert werden können). Grundsätzlich wäre für einige Maßnahmen im Bereich Bodenbearbeitung und Bodenbedeckung denkbar, dass ihre Wirkung auf Runoff und Erosion über eine Änderung des Wertes der Curve Number in das Modell PRZM eingeht, für eine Umsetzung fehlen bislang aber die fachlichen Grundlagen.

On-site Maßnahmen (wie bspw. reduzierte Bodenbearbeitung, Mulchbedeckung, Direktsaat etc.) stellen nach derzeitiger Bewertung somit *keine* Option als – quantitativ bewertbare – Risikominderungsmaßnahmen im Zulassungsverfahren mit dem Tool GERDA dar.

Im Rahmen des **MAGPIE** Workshops wurde ein Vorschlag für ein neues Konzept zur Berücksichtigung von Runoff Minderungsmaßnahmen im Zulassungsverfahren vorgestellt (MAGPIE 2013). Das Konzept sieht die Kombination von Filterstreifen und Maßnahmen im Feld vor. Für beide Arten von Maßnahmen schlägt MAGPIE die Verwendung von festen Faktoren für die Reduktionsleistung vor (Tab. II.10-5), die für die Berechnung einer Gesamteffizienz von zwei oder mehr (hintereinander geschalteten) Maßnahmen multiplikativ zu verknüpfen wären.

Tab. II.10-5: MAgPIE Workshop 2013: Proposed runoff mitigation measure efficiencies (not differentiated according to pesticide properties) (MAgPIE 2013, Annex I, gekürzt).

Runoff Mitigation measure	Average Mitigation Efficiency ¹	Proposed Modelling Parameter modifications
Edge-of-field measures		
3 m vegetated filter strip	40 % (factor 0,6) ²	VFSMOD
5 m vegetated filter strip	50 % (factor 0,5) ²	VFSMOD
10 m vegetated filter strip	75 % (factor 0,25) ³	VFSMOD
20 m vegetated filter strip	90 % (factor 0,1) ³	VFSMOD
Edge-of-field bunds	50 % (factor 0,5) ⁴	water retention calculation
Vegetated ditches	50 % (factor 0,5) ⁵	water retention calculation
In-field measures		
No-till / reduced tillage	75 % (factor 0,25) ^{6,7,8}	-3 curve number
In-field bunds (row crops)	50 % (factor 0,5) ⁴	?
3 m vegetated buffer strips	50 % (factor 0,5) ⁹	?
Inter-row vegetated strips (in permanent crops)	50 % (factor 0,5) ^{4,6}	?

References:

- 1) Factor used in multiplicative calculation method for efficiency of combinations of measures.
- 2) CCPF-Ministero della Salute, 2009.
- 3) Conservative mean of values for high- and low-sorbing pesticides from Reichenberger et al. (2007b)
- 4) Proposal of Swiss regulatory authority for runoff mitigation efficiency.
- 5) Moore et al. (2008)
- 6) UBA (2004)
- 7) Miao et al. (2004)
- 8) Deasy et al. (2010)
- 9) Reichenberger et al. (2007b), Fig. 1, and reflecting the fact that buffer strips closer to runoff source have higher efficiency than edge-of-field or riparian buffer strips.

Das Konzept von MAgPIE zielt zweifellos in die richtige Richtung, die von MAgPIE vorgeschlagenen Reduktionsleistungen (s. Tab. II.10-5) stellen aber nach Stand der Kenntnis eine optimistische und selektive Auswahl dar. Beispielsweise wird eine mitigation efficiency von 75 % für „reduced tillage“ den Literaturlauswertungen zufolge (s. Abb. II.10-1 bis -3) im Median der veröffentlichten Messungen bei Weitem nicht erreicht. Ebenfalls wäre im Fall einer Umsetzung des MAgPIE-Konzepts mit festen Reduktionsfaktoren kritisch zu prüfen, unter welchen Voraussetzungen die in Tab. II.10-5 aufgeführten Reduktionsleistungen von grasbewachsenen Filterstreifen unterschiedlicher Breite erreicht werden (zu den Einflussfaktoren s. Kap. II.7.6.4). Anschließend wäre zu ermitteln, mit welcher räumlichen und zeitlichen Häufigkeit diese Voraussetzungen in Deutschland gegeben sind, so dass dann Perzentil-basiert ein (oder mehrere) Filterstreifen-Szenarien (d.h. Parametrisierungen) für das Zulassungsverfahren definiert werden könnten.

Die Reduktionsleistung einer Minderungsmaßnahme stellt einen außerordentlich sensitiven Parameter im Zulassungsverfahren dar. Aus wissenschaftlicher Sicht erscheint es fahrlässig, einen solchen Parameter ausschließlich auf Basis von nur ein oder zwei Versuchsergebnissen festlegen zu wollen. Grundsätzlich sollte die Reduktionsleistung mit Hilfe eines Simulationsmodells (wie bspw. VFSMOD in Verbindung mit der Regressionsgleichung von Sabbagh et al.

2009) für die betreffenden Prozesse beschrieben werden. Dieser Ansatz erlaubt Sensitivitätsanalysen der prozessbestimmenden Variablen und Parameter und darauf aufbauend dann eine nachvollziehbar begründete, statistisch basierte Festlegung von Szenarien.

Das MAgPIE-Konzept sieht im Prinzip dieses Vorgehen auch vor: in Spalte 3 der Tab. II.10-5 werden die Modellansätze aufgeführt, deren Parameter für die Ermittlung der Reduktionseffizienz zu modifizieren wären. Für die Maßnahme „No till / reduced tillage“ wird dort vorgeschlagen, den Wert der Curve Number um 3 herunter zu setzen, was eine Verminderung des vom Modell PRZM nach SCS-Curve Number berechneten Runoffvolumens (s. Kap. II.4.2.4) zur Folge hätte.

Falls erwogen werden sollte, für das Zulassungsverfahren in Deutschland die Wirkung von Minderungsmaßnahmen über eine Änderung der Parametrisierung von PRZM bzw. der Curve Number umzusetzen, dann wären aus Sicht der Autoren vorab zwei zentrale Fragen zu prüfen:

- (i) Stellt der SCS-Curve Number Ansatz, in Anbetracht seiner grundsätzlichen konzeptionellen Probleme (s. Kap. II.4.2.4), überhaupt ein belastbares Modell dafür dar?
- (ii) Um wie viele Einheiten wäre der Curve Number-Wert dann zu vermindern, um die Reduktionseffizienz einer bestimmten Maßnahme (wie bspw. einer geänderten Bodenbearbeitung) adäquat abzubilden? (Eine erste Literaturrecherche zu dieser Frage brachte keine verwertbaren Ergebnisse.)

II.11 Überprüfung der Expositionsabschätzung anhand von Monitoring-untersuchungen

Regelmässig werden aus dem Gewässermonitoring für einige Wirkstoffe gehäufte Nachweise bzw. kritische Konzentrationen in Oberflächengewässern dokumentiert. Für die Zulassungsbehörden stellt sich die Frage, ob bzw. gegebenenfalls wie derartige Ergebnisse eines Nachzulassungsmonitorings im Zulassungsverfahren zu berücksichtigen sind. Insbesondere sollten in der hier durchgeführten Untersuchung die Ergebnisse einer Monitoringstudie in zwei landwirtschaftlich genutzten Gebieten in Deutschland (Bereswill und Schulz, 2011) evaluiert und ihre Aussagekraft für das Zulassungsverfahren kommentiert werden.

II.11.1 Anmerkungen zur Untersuchung Bereswill und Schulz (2011)

Das *Kooperationsprojekt im Auftrag des BVL: Prüfung von Managementmaßnahmen zur Risikominderung potenzieller Pflanzenschutzmittel-Einträge in aquatische Lebensräume auf die Implementierung in Deutschland und Entwicklung eines Anwendungstools* (Bereswill und Schulz, 2011) verfolgte das Ziel, (i) umsetzbare Managementmaßnahmen zur Verminderung der Einträge von Pflanzenschutzmitteln (PSM) in Fließgewässer über Abdrift sowie Runoff und Erosion zu identifizieren, (ii) diese Maßnahmen hinsichtlich Praktikabilität, Leistungsfähigkeit und ökologischer Wirksamkeit zu identifizieren, (iii) Maßnahmen an konkreten Gewässerabschnitten zu evaluieren und schließlich (iv) einen Leitfaden für die Identifizierung geeigneter Maßnahmen für Berater, Anwender und Kontrolleure zu entwickeln. Zu den Ansätzen und Ergebnissen der Studie ist aus Sicht der Autoren der hier vorliegenden Untersuchung folgendes anzumerken (die Ergebnisse wurden auch in Bereswill et al. 2013a, 2013b, 2014 publiziert; die Anmerkungen beziehen sich hier nur auf den Abschlussbericht des Kooperationsprojekts).

- Bereswill und Schulz wiederholen die Zusammenstellungen von landschaftsbezogenen und anwendungsbezogenen Risikomanagementmaßnahmen zur Minderung von PSM-Einträgen in Oberflächengewässern, die bereits in früheren Untersuchungen (FOCUS 2007a, 2007b, Reichenberger et al. 2007, Schulz et al. 2004) vorgestellt und zum Teil auch hinsichtlich Effektivität, Umsetzbarkeit, Praktikabilität und Kontrollierbarkeit bewertet worden sind. Die Literaturergebnisse zur Reduktionsleistung bewachsener Randstreifen für Runoff, Sediment und Pflanzenschutzmitteleinträge werden in tabellarischer Form für unterschiedliche Breiten wiedergegeben. In der Darstellung und Diskussion der Einflussfaktoren auf die Reduktionleistung werden neuere Entwicklungen und Veröffentlichungen nicht berücksichtigt. Insbesondere die Entwicklung des Modells VFSSMOD (Muñoz-Carpena and Parson 2004), der darauf aufbauenden Prognose des Wirkstoffrückhalts für PSM durch die Regressionsbeziehung von Sabbagh et al. (2009) und die daran anknüpfenden Untersuchungen u.a. von Muñoz-Carpena et al. (2010) und Fox et al. (2010) zur Sensitivität der Einflussfaktoren werden von Bereswill und Schulz nicht angesprochen.
- Im Projekt wurden nur Wirkstoffkonzentrationen gemessen, die auf Einträge über Runoff und/oder Drainagen (und ggf. auf punktuelle Einträge) zurückzuführen waren. Die mögliche Bedeutung von Drift-Einträgen auf die Aquatik wurde nur indirekt mittels biologischem Monitoring erfasst.
- Aufgrund des verwendeten Probenahmesystems geben die gemessenen Wirkstoff-Konzentrationen im Wasser nur die Konzentration für ein sehr kurzes Zeitintervall (wenige

Minuten) eines Runoff-Ereignisses wieder. Es können keine Aussagen gemacht werden, ob diese Messwerte der Maximalkonzentration während eines Hochwasserereignisses entsprechen, den Mittelwert repräsentieren oder darunter liegen.

- Für die Konzentrationsmesswerte in den Sedimentproben ist aufgrund des unterschiedlichen Probenahmeverfahrens ein Vergleich mit Messungen bspw. aus Mesokosmen-Studien nur eingeschränkt möglich. Bereswill und Schulz analysieren nur frisch sedimentiertes Sediment, das wöchentlich in Sedimentfallen gesammelt worden ist; in Mesokosmen wird dagegen die gesamte obere Sedimentschicht (2 cm oder 5 cm) analysiert. Tendenziell ist die mittlere Konzentration in einer Probe umso geringer, je größer die entnommene Schichtmächtigkeit. Daher sind auch die Aussagen von Bereswill und Schulz zu Überschreitungen der MPC (maximum permissible concentration) im Sediment nicht übertragbar oder vergleichbar mit Untersuchungen, die das Standardverfahren verwenden.
- Zur Bewertung der Drainage-Einträge wurden die Konzentrationen in Drainage-Ausläufe analysiert. Eine Aussage über das aquatische Risiko ist aber nicht möglich, da das aufnehmende Gewässer selbst nicht beprobt wurde, d.h. die Verdünnung des Drainage-Auslaufs im Gewässer nicht ermittelt wurde.
- Bereswill und Schulz führten weiterhin eigene Feldmessungen zur Drift-Deposition und den dadurch zu erwartenden Konzentrationen ausgewählter Wirkstoffe im Gewässer durch. Sie kommen zu dem Ergebnis, dass Effekte auf die biologische Gemeinschaft des Fließgewässerabschnitts durch Drift nicht zu erwarten sind.
- Bereswill und Schulz folgen in ihrer Untersuchung der Sichtweise der FOCUS Working Group on Landscape & Mitigation auf die Landschaft und betrachten ausschließlich die unmittelbar gewässerangrenzenden Flächen als Quellen von Runoff-Einträgen. Wirkstoff-Einträge können jedoch von allen behandelten Flächen innerhalb eines Einzugsgebietes, die hydraulisch an den Vorfluter angebunden sind, über Runoff in das Gewässerbefrachtung gelangen - im Regelfall sind das *alle* Flächen, das heißt nicht nur die unmittelbar gewässerangrenzenden. Die nicht-angrenzenden Flächen wurden beim Landschafts-Monitoring der Einzugsgebiete jedoch nicht berücksichtigt.
- Dem Abschlussbericht ist ebenfalls nicht zu entnehmen, ob in den untersuchten Einzugsgebieten Einträge von den Betriebsflächen der Landwirtschaftsbetriebe sicher auszuschließen sind, oder ob möglicherweise nicht auch punktuelle Einträge zur Gewässerfracht beigetragen haben.
- Bei der Interpretation ihrer Ergebnisse zu Runoff-bedingten Konzentrationen im Gewässer betonen die Autoren die teilweise großen Fundhäufigkeiten sowie die Überschreitungen der RAC (regulatory acceptable concentration) für einzelne Wirkstoffe im Jahr 2009. Die wesentlich geringeren bzw. selteneren Funde in der zweiten Monitoringphase 2010 werden dagegen nicht gewürdigt, um die Gewässergefährdung zusammenfassend über die Gesamtdauer der Untersuchung zu bewerten.
- Die Schlussfolgerungen zur Entwicklung von Maßnahmenkonzepten für die Untersuchungsgebiete in Niedersachsen und Rheinland-Pfalz sind sehr allgemein gehalten. Es werden die bekannten Empfehlungen wiederholt, bewachsene Uferstreifen anzulegen oder zu verbreitern sowie die Ackerflächen erosionsmindernd zu bewirtschaften. Weiterhin wird die Anlage von bewachsenen Rückhaltebecken (retention ponds) vorgeschlagen. Für die Weinbauregion in Rheinland-Pfalz werden ergänzend mit Gras bewachsene Feldwege empfohlen.

Für die praktische Umsetzung und die Verbesserung der Akzeptanz von Risikominderungsmaßnahmen ist es aber unabdingbar, den Aufwand bzw. die Einschränkungen für die betroffenen Landwirte so gering wie möglich zu halten. Die Art, Platzierung und Kosten von Maßnahmen sind daher unter Effizienzkriterien zu optimieren. Eine Konzeptentwicklung im Sinne einer planerischen Optimierung erfolgt in dem Projekt jedoch nicht. Es werden keine Instrumente bereitgestellt, mit denen entschieden werden könnte, welche der vorgeschlagenen Maßnahmen an welchen Stellen in den Einzugsgebieten in welcher Ausgestaltung (z.B. erforderliche Breite der Uferstreifen, Volumen Rückhaltebecken) vorzusehen sind, damit der aquatische Lebensraum sicher geschützt wird.

II.11.2 Zur Problematik der Überprüfung von Expositionsmodellen anhand von Monitoringstudien

Aufgabe der Expositionsmodellierung im Zulassungsverfahren ist es *nicht*, die Wirkstoffkonzentration in einem Oberflächengewässer nach einer PSM-Applikation möglichst genau zu simulieren. Expositionsmodelle sind vielmehr protektiv angelegt, das heißt sie sollen gewährleisten, dass in einem vorgegebenen Anteil der Expositionsfälle (bspw. 90 %) die tatsächlichen Gewässerkonzentrationen unterhalb eines ökologisch unbedenklichen Schwellenwerts liegen.

In einem realen Expositionsfall, der in einer Freilanduntersuchungen erfasst wird, werden die spezifischen Werte der Randbedingungen, die für das Szenario der Modellierung festgelegt sind, jedoch regelmäßig nicht anzutreffen sein. A priori ist daher davon auszugehen, dass Freilandmessungen und modellierte Konzentrationen aus Expositionsszenarien *nicht* miteinander vergleichbar sind. Die Annahme, dass die Messergebnisse in Freilandgewässern und die Ergebnisse von Szenarien-basierten Modellierungen direkt miteinander vergleichbar wären, ist unter anderem auch in den Veröffentlichungen von Knäbel et al. (2012, 2014) der grundlegende Fehler.

Wenn die Expositionsmodellierung zur Risikoabschätzung ausreichend protektiv ist, dann sollte allerdings in Monitoringstudien, die eine größere Zahl von – zufällig ausgewählten – Messstellen und Applikationssituationen erfassen, ein Wirkstoff nicht (wesentlich) häufiger mit Konzentrationen oberhalb des Schwellenwertes im Freiland nachgewiesen wird, als das Schutzniveau (Perzentil) des Expositionsszenarios gewährleisten soll. Wenn dies nicht der Fall ist, stellt sich die Frage nach den möglichen Ursachen für die beobachtete Diskrepanz.

Das EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues geht auf die Unsicherheiten bei der Übertragung und Überprüfung von modellbasierten Risk Assessment Ergebnissen auf Fließgewässer im Freiland ein (EFSA 2013, Kap. 12.3). Unter anderem werden Veröffentlichungen von Dabrowski et al. (2001), Liess and Schulz (1999), Liess and von der Ohe (2005), Liess et al. (2005), Muschal and Warne (2003) sowie Schäfer et al. (2012) angeführt, in denen die Autoren jeweils Wirkstoffkonzentrationen oberhalb der regulatorischen Grenzwerte und/oder ökotoxikologisch relevante Effekte nachweisen.

Knäbel et al. (2012) und Knäbel et al. (2014) werteten eine größere Zahl von Veröffentlichungen mit Monitoringergebnissen zur Konzentration von Fungiziden und Insektiziden in Flüssen aus. Die Autoren interpretieren die - nach ihrer Meinung - hohe Zahl von Überschreitungen der PEC (ermittelt nach FOCUSsw Step 3) dahingehend, dass die FOCUSsw Szenarien nicht hinreichend protektiv sind und daher überarbeitet werden müssten.

Alle aufgeführten Veröffentlichungen betonen (ebenso wie Bereswill und Schulz, 2011), dass - gemäß der Zielvorgabe der FOCUSsw Risikoabschätzung - derartige Effekte überhaupt nicht oder zumindest nicht mit der beobachteten Häufigkeit auftreten dürften. Die Autoren schlussfolgern aus ihren Befunden, dass die derzeit verwendeten Ansätze zur aquatischen Risikobewertung offensichtlich nicht hinreichend protektiv seien.

Als mögliche Erklärungen für die Diskrepanz zwischen dem Postulat der Expositionsmodellierung und den tatsächlich auftretenden Gewässerkonzentrationen kommt nach EFSA (2013) eine Reihe von Ursachen in Betracht.

- Die Gewässer wurden zusätzlich über Eintragspfade mit PSM befrachtet, die in der jeweiligen Untersuchung nicht erfasst worden sind, insbesondere durch Einträge aus dem Hofbereich.
- Einzelne Landwirte haben bei ihrer PSM-Applikation die Regeln der guten fachlichen Praxis nicht beachtet. Namentlich die Einhaltung von Auflagen zur Vermeidung von Drift- und/oder Runoff-Einträgen ist in der Praxis nicht überprüfbar.
- Die Einwirkung eines PSM-Wirkstoffs auf eine Population wird überlagert und verstärkt durch zusätzliche Stressoren (u.a. Temperatur, Hydrodynamik) für die Spezies, so dass der Sicherheitsfaktor von 10 in der Expositionsbewertung nicht ausreicht.
- Die beobachteten Effekte wurden nicht durch einen einzelnen Wirkstoff, sondern durch die Überlagerung der Schadwirkungen mehrerer Wirkstoffe hervorgerufen (Tankmischungen, Einträge mehrerer Wirkstoffe von verschiedenen Flächen gleichzeitig in ein Gewässer).
- Die beobachteten Effekte sind bislang nicht Gegenstand der Risikobewertung.

Bach und Hollis (2013) sowie Reichenberger (2013, 2014) setzen sich in ihren Kommentaren ausführlich mit Knäbel et al. (2012) und Knäbel et al. (2014) auseinander und zeigen, dass deren Vorgehensweise nicht dazu geeignet ist, die Aussagekraft des FOCUSsw Ansatzes zu falsifizieren.

Neben den aufgeführten Ursachen sind, unter anderem als Ergebnis der Untersuchungen im GERDA-Projekt, weitere Faktoren zu nennen, worauf die vergleichsweise häufigen Wirkstofffunde mit erhöhten Konzentrationen in Freilanduntersuchungen zurückgeführt werden können.

- Im FOCUS stream Szenario wird angenommen, dass 20 % des upstream catchment mit dem gleichen Wirkstoff behandelt werden (s. Abb. II.4-1 stream). Daraus resultiert eine Verdünnung des Wirkstoffeintrags über Runoff im Gewässer um den Faktor 5 gegenüber der Konzentration im Runoff am Feldrand (edge-of-field). Die zeitliche Platzierung der Applikationen im upstream catchment wird dabei (inherent) so angenommen, dass diese Wirkstoffeinträge gleichmässig in dem (fließenden) Wasserkörper verteilt sind, der die Verdünnung des Eintrags entlang des bewertungsrelevanten 100 m Gewässerabschnitts verursacht. Es bleibt zu prüfen, wie realistisch bzw. wie konservativ diese Annahme ist, dass in einem Einzugsgebiet 20 % der Fläche innerhalb eines relativ engen Zeitfensters (in der Größenordnung von einigen Stunden) mit dem gleichen Wirkstoff behandelt wird. Für geschlossene Sonderkulturgebiete oder auch in Ackerbaugebieten mit sehr hohem Anteil einer einzigen Kulturart (Getreide, Mais) erscheint es nicht unwahrscheinlich, dass unter Umständen auch ein größerer Flächenanteil als 20 % innerhalb von Stunden mit dem gleichen Wirkstoff behandelt wird.

- Das Wasservolumen wird im FOCUS stream Szenario mit 300 L/m Gewässerstrecke (Ausgangssituation für Runoff) deutlich größer angenommen, als dies beispielsweise in den von Bereswill und Schulz (2012) untersuchten Gewässern gemessen wurde: der Median beträgt dort 130 L/m (Niedersachsen, n = 10) bzw. 120 L/m (Rheinland-Pfalz, n = 9; jeweils an den Probenahmestellen). Die reale Verdünnung von Einträgen ist somit um den Faktor 2 bis 3 geringer im Vergleich zur Annahme des FOCUS Szenario.
- Die Konzentration infolge von Drift-Eintrag hängt maßgeblich vom Breite/Tiefe-(B/T)-Verhältnis des Gewässers ab. Im FOCUS stream Szenario hat B/T den Wert 3,3; in den von Bereswill und Schulz (2011) untersuchten Gewässern beträgt der Median des B/T 7,3 (Niedersachsen, n = 10) bzw. 10 (Rheinland-Pfalz, n = 9).
- Der Konzentrationspeak im Gewässer infolge von Runoff-Einträgen wird aufgrund der Modellkoppelung PRZM-TOXSWA systematisch zu niedrig berechnet. PRZM-Berechnung und -Ausgaben erfolgen mit Zeitschritt 1 d. TOXSWA rechnet dagegen mit Zeitschritt 1 h, so dass die PRZM-Tageswerte zu Runoff-Volumen und Wirkstoff-Austrag (egde-of-field) in stündliche Werte gewandelt werden müssen. Dazu wird der zunächst der Tagesniederschlag durch eine Niederschlagsintensität von 2 mm/h dividiert, das Ergebnis definiert die Dauer des Runoff-Ereignisses (in Stunden). Anschließend wird die Runoff-Höhe durch diese Zeitdauer geteilt und damit die Runoff-Intensität für TOXSWA festgelegt (Bsp.: für einen 18 mm Tagesniederschlag berechnet PRZM 4,1 mm Runoff, 18 mm / 2 mm pro Stunde = 9 h Runoff-Dauer, daraus ergibt sich als Modelleingang für TOXSWA eine Runoff-Höhe von 4,1 mm / 9 h = 0,46 mm/h Runoff von Mitternacht bis 9 Uhr; s. EFSA, 2013, p. 66). Die Sedimentfracht und der Wirkstoffeintrag werden analog aufgeteilt.

Aus den genannten Punkten geht hervor, dass mehrere Annahmen im Ansatz von FOCUS surface water offensichtlich nicht konservativ gewählt sind. Die Intensität von Drift- und Runoff-Einträgen sowie die hydrologischen Bedingungen in realen Gewässern bzw. Einzugsgebieten sind häufig ungünstiger als die in FOCUS eingestellten Randbedingungen, d.h. die tatsächlichen Einträge sind höher und/oder die Verdünnung ist geringer, als im FOCUS Szenario unterstellt wird.

Der Untersuchung von Bereswill und Schulz (2011) sowie den meisten der von EFSA (2013) zitierten Veröffentlichungen ist entgegen zu halten, dass sie von ihrer Versuchsanlage her nicht dazu geeignet sind, die Protektivität der Expositionsmodellierung im Sinne einer Stichprobenziehung zu überprüfen.

- Die Untersuchungsstandorte wurden nicht zufällig gewählt, sondern es wurden gezielt Fließgewässer beprobt, in denen ausgeprägte Effekte zu erwarten waren. Für die Überprüfung der Protektivität der Expositionsmodellierung müsste aber eine größere Zahl von stochastisch ausgewählten Gewässern untersucht werden und anschließend ausgewertet werden, ob das im Zulassungsverfahren vorgegebene räumlich-zeitliche Perzentil der Unter-/Überschreitungen der RAC mit dieser Stichprobe bestätigt wird.
- In der Realität verteilt sich die Intensität des Runoff-Eintrags nicht gleichmäßig über die gesamte Dauer eines Ereignisses, vielmehr tritt typischerweise ein ausgeprägter Peak auf. Auch der Wirkstoff-Konzentrationsverlauf im Gewässer ist dann durch einen entsprechenden Peak gekennzeichnet. Wenn die Beprobung des Gewässers auf eine einzige Probe pro Runoff-Ereignis in einem sehr kurzen Zeitintervall (wenige Minuten) beschränkt wird - wie das aufgrund der verwendeten Probenahmetechnik in allen Untersuchungen von Schulz und Mitarbeitern der Fall ist -, dann wird damit ein singulärer Wert bestimmt. Dieser Wert ist

mutmaßlich nicht repräsentativ für die mittlere Konzentration über das gesamte Runoff-Ereignis und kann somit auch nicht zur Bewertung der Güte der Expositionsmodellierung herangezogen werden.

Als Fazit ist festzuhalten: Monitoringstudien sind nur eingeschränkt dazu geeignet, die Güte von Expositionsmodellen zu überprüfen. Die an einem Probenahmepunkt gemessene Konzentration eines Wirkstoffs in einem Fließgewässer, beispielsweise infolge Runoff-Einträgen, ist das Ergebnis des Zusammenwirkens zahlreicher Prozesse: Entstehung von Oberflächenabfluss auf behandelten Flächen, Desorption des Wirkstoffs von den Austauschern im oberflächennahen Bodenbereich, Transport mit dem Oberflächenabfluss und dabei möglicher Wirkstoffverlust durch Sorption, Wirkstoffrückhalt durch Versickerung und/oder Sorption in Filterstreifen, räumlich-zeitliche Überlagerung von Runoff-Einträgen (und ggf. weiteren Einträgen aus anderen Quellen) aus verschiedenen Flächen entlang eines Gewässerabschnitts, und schließlich hydrodynamische Dispersion, Austausch mit dem Sediment sowie Abbau in der fließenden Welle.

Die Modellkomponenten, die zur Abbildung dieser Prozesse für die PSM-Risikobewertung herangezogen werden, weisen alle mehr oder weniger große Vereinfachungen und konzeptionelle Elemente auf. Für die Beschreibung der Prozesse mit der notwendigen Genauigkeit, die einen Vergleich mit realen Bedingungen erlauben würde, sind diese Ansätze nur mit erheblichen Einschränkungen geeignet. Als eine Voraussetzung für einen aussagefähigen Vergleich müssten die Werte aller (sensitiven) Modelleingabegrößen während der Freilanduntersuchung erfasst worden sein. Dies ist in realen Fließgewässern und deren Einzugsgebieten im Regelfall nicht zu leisten. Die Modellkette „Drift/PRZM/MACRO - TOXSWA/STEPS-3 – Minderungsmaßnahmen“ kann daher grundsätzlich nicht gegen Messergebnisse validiert werden. Es kann immer nur die Modellierung von einzelnen Komponenten (wie bspw. Runoff-Bildung, Erosionsaustrag, Wirkstoff-Desorption, Rückhalt in Filterstreifen usw.) separat mit Messungen verglichen und dann ggf. verbessert werden.

Andererseits können Monitoringstudien unter bestimmten Voraussetzungen durchaus eine Aussage darüber erlauben, ob die Randbedingungen von Expositionsmodellen tatsächlich einen „realistic worst case“ abbilden. Häufigere und/oder höhere Wirkstofffunde, als nach Modellannahmen zu erwarten wären, sollten Anlass dazu sein, Modelle und Szenarien kritisch zu überprüfen und ggf. zu modifizieren.

II.12 Danksagung - Acknowledgements

The participants of the GERDA project are greatly indebted to numerous persons and institutions for their support and their contributions to the study and the development of the GERDA tool. Particularly we thank the following persons:

Wim Beltman und Paulien Adriaanse (Alterra) for help with getting TOXSWA running and with understanding the TOXSWA hydrology and the various error messages.

Rafael Muñoz Carpena und Bob Rooney (Univ. Florida) for providing us with a most convenient Matlab package for optimized Morris sampling and Morris postprocessing.

Stefano Tarantola und Marco Ratto (JRC, Ispra) for help with the scientific understanding of the Morris method.

Julien Moeys (SLU) for help with the automatic generation of plots in R.

II.13 Literaturverzeichnis

- Adriaanse PI, Beltman WHJ, 2009. Transient water flow in the TOXSWA model (FOCUS versions); concepts and mathematical description. Wageningen, Statutory Research Tasks Unit for Nature and the Environment. WOt-rapport No. 101, Wageningen, 78 p. (<http://edepot.wur.nl/133776>; 10.11.2014)
- Adriaanse PI, 1997. Exposure assessment of pesticides in field ditches: The TOXSWA model. *Pesticide Science* 49, 210-212.
- AG Boden, 1994. *Bodenkundliche Kartieranleitung*, 4. Auflage. E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 392 p.
- AGES, 2011. National risk assessment for the authorization of plant protection products in Austria: Fate and behaviour in the environment - PEC calculation - Information for applicant (2011).
- Altfelder S, Streck T, Richter J, 2000. Nonsingular sorption of organic compounds in soil: The role of slow kinetics. *J. Environ. Qual.* 29, 917-925.
- Amtsblatt des Großherzogtums Luxemburg, 1994. Produits Phytopharmaceutiques-Réglement grand-ducal du 14 décembre 1994 concernat la mise sur le marché et l'utilisation des produits phytopharmaceutiques, 95 p. (<http://faolex.fao.org/docs/pdf/lux8541.pdf>; 10.11.2014).
- ANSES, 2012. Advices to applicants in the framework of Regulation (EC) n° 1107/2009 for the evaluation of plant protection product dossiers. (<https://www.anses.fr/sites/default/files/documents/DPR-Ft-AdvicesApplicants.pdf>; 10.11.2014).
- Arora K, Mickelson SK, Baker JL, 2003. Effectiveness of vegetated buffer strips in reducing pesticide transport in simulated Runoff. *Trans. ASAE* 46, 635-644.
- Arora K, Mickelson SK, Baker JL, Tierney DP, Peters CJ, 1996. Herbicide retention by vegetative buffer strips from Runoff under natural rainfall. *Trans. ASAE* 39, 2155-2162.
- Ashauer R, Boxall A, Brown C, 2006. Uptake and elimination of chlorpyrifos and pentachlorophenol into the freshwater amphipod *Gammarus pulex*. *Arch Environ Contam Toxicol* 51(4), 542-548.
- Ashauer R, Hintermeister A, Caravatti I, Kretschmann A, Escher BI, 2010 Toxicokinetic and Toxicodynamic Modeling Explains Carry-over Toxicity from Exposure to Diazinon by Slow Organism Recovery. *Environmental Science & Technology* 44(10), 3963-3971.
- Ashauer R, Agatz A, Albert C, Ducrot V, Galic N, Hendriks AJ, Jager T, Kretschmann A, O'Connor I, Rubach M N, Nyman A-M, Schmitt W, Stadnicka J, van den Brink P J, Preuss TG, 2011. Toxicokinetic-toxicodynamic modelling of quantal and graded sub-lethal endpoints: a brief discussion of concepts. *Environmental Toxicology and Chemistry* 30: 2519-2524.
- Ashauer R, Brown CD. 2013. Highly time-variable exposure to chemicals—toward an assessment strategy. *Integrated Environmental Assessment and Management* 9(3), e27-e33. DOI: 10.1002/ieam.1421.
- Ashauer R, Thorbek P, Warinton JS, Wheeler JR, Maund S, 2013. A method to predict and understand fish survival under dynamic chemical stress using standard ecotoxicity data. *Environmental Toxicology and Chemistry* 32(4), 954-965. doi: 10.1002/etc.2144.
- Bach M, Hollis J, 2013. Comment on "Regulatory FOCUS Surface Water Models Fail to Predict Insecticide Concentrations in the Field". *Environ. Sci. Technol* 47, 1177-1178.
- Baker JL, Johnson HP, 1979. The Effect of Tillage Systems on Pesticides in Runoff from Small Watersheds. *Transactions of the ASAE* 22(3), 0554-0559.
- Baker JL, Laflen JM, Johnson HP, 1978. Effect of Tillage Systems on Runoff Losses of Pesticides, A Rainfall Simulation Study. *Transactions of the ASAE* 21(5), 0886-0892.

- Banton O, Larocque M, 1993 - 2003. AgriFlux. Logiciel d'évaluation des risques de contamination des eaux superficielles et souterraines reliés à l'épandage au champ d'engrais et de pesticides. Version 2.01. Manuel d'utilisation, 146 p. (<http://www.hydiad.com/sitebuildercontent/sitebuilderfiles/manuelagriflux.pdf>; 09.11.2014).
- Barfield BJ, Blevins RL, Fogle AW, Madison CE, Inamdar S, Carey DI, Evangelou VP, 1998. Water quality impacts of natural filter strips in Karst areas. *Trans. ASAE* 41, 371–381.
- Barnthouse LW, 2004. Quantifying population recovery rates for ecological risk assessment. *Environmental Toxicology and Chemistry* 23(2), 500-508.
- Bedos C, Génèrmont S, Le Cadre E, Garcia L, Barriuso E, Cellier P, 2009. Modelling pesticide volatilization after soil application using the mechanistic model Volt'Air. *Atmospheric Environment* 43, 3630–3639.
- Beigel C, Berardozzi M, Cecchi M, Domange N, Guyot C, Hammel K, Huber S, Kahl G, Knowles S, Loiseau L, 2010. FROGS – French Refinement of Groundwater Scenarios. Report of the UIPP Environmental Methodology Working Group. Version dated 20.09.2010, 301 p.
- Beketov MA, Liess M, 2008. Acute and delayed effects of the neonicotinoid insecticide thiacloprid on seven freshwater arthropods. *Environmental Toxicology and Chemistry* 27(2), 461-470.
- Beltman WHJ, Ter Horst MMS, Adriaanse PI, De Jong A, 2006. Manual of FOCUS_TOXSWA version 2.2.1. Wageningen, Alterra, Alterra-rapport 586. 198 pp.
- Beltman WHJ, Adriaanse PI, 1999. User's manual TOXSWA 1.2. Simulation of pesticide fate in small surface waters. SC-DLO Technical Document 54, Wageningen, The Netherlands.
- Bereswill R, Golla B, Strelake M, Schulz R, 2013b. Entry and toxicity of organic pesticides and copper in vineyard streams: Erosion rills jeopardise the efficiency of riparian buffer strips. *Agriculture Ecosystems Environment* 146(1), 81–92.
- Bereswill R, Schulz R, 2011. Prüfung von Managementmaßnahmen zur Risikominderung potenzieller Pflanzenschutzmittel-Einträge in aquatische Lebensräume auf ihre Implementierung in Deutschland und Entwicklung eines Anwendungstools. Endbericht. Univ. Koblenz-Landau, Inst. f. Umweltwissenschaften, 145 S.
- Bereswill R, Strelake M, Schulz R, 2013a. Current-use pesticides in stream water and suspended particles following Runoff: Exposure, effects, and mitigation requirements. *Environmental Toxicology and Chemistry* 32(6), 1254–1263.
- Bereswill R, Strelake M, Schulz R, 2014. Risk mitigation measures for diffuse pesticide entry into aquatic ecosystems: Proposal of a guide to identify appropriate measures on a catchment scale. *Integrated Environm Assess Managm* 10(2), 286–298.
- BGR, 2007. Nutzungsdifferenzierte Bodenübersichtskarte der Bundesrepublik Deutschland 1:1000000 (BÜK 1000 N 2.3). Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover (Digitales Archiv FISBo BGR).
- Blenkinsop S, Fowler HJ, Dubus IG, Nolan BT, Hollis JM, 2008. Developing climatic scenarios for pesticide fate modelling in Europe. *Environmental Pollution* 154, 219-231.
- Boesten JJTI, Köpp H, Adriaanse PI, Brock TCM and Forbes VE, 2007. Conceptual model for improving the link between exposure and effects in the aquatic risk assessment of pesticides. *Ecotoxicology and Environmental Safety* 66, 291–308.
- Brisson N, Mary B, Ripoche D, Jeuffroy MH, Ruget F, Nicollaud B, Gate P, Devienne-Barret F, Antionioletti R, Durr C, Richard G, Beaudoin N, Recous S, Tayot X, Plenet D, Cellier P, Machet JM, Meynard JM, Delécolle R, 1998. STICS: a generic model for the simulation of crops and their water and nitrogen balances. I. Theory and parameterization applied to wheat and corn. *Agronomie* 18, 311-346.
- Brock TCM, Brown AC, Capri E, Gottesbueren B, Heimbach F, Lythgo C, Schulz R, Strelake M, 2009. *Linking Aquatic Exposure and Effects*. SETAC Press & CRC Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, London, New York. 410 pp.
- Brown C, Balderacchi M, van Beinum W, Capri E, Trevisan M, 2012. Definition of vegetative filter strip scenarios for Europe. Final Report. Univ. of York, Heslington, York, UK. 71 p.

- (<http://www.york.ac.uk/media/environment/documents/people/brown/pesticides2012/VFSMod%20Final%20Report%2022052012.pdf>; 09.11.2014)
- Brown CD, Bellamy PB, Dubus IG, 2002. Prediction of pesticide concentrations found in rivers in the UK. *Pest Management Science* 58, 363-373.
- Brunotte J, 2007. Konservierende Bodenbearbeitung als Beitrag zur Minderung von Bodenschadverdichtungen, Bodenerosion, Run off und Mykotoxinbildung im Getreide. *Landbauforschung Völkenrode, Sonderheft* 305, 159 S.
- Burns LA, 2001. Probabilistic Aquatic Exposure Assessment for Pesticides I: Foundations. EPA/600/R-01/071, U.S. Environmental Protection Agency, Athens, Georgia, USA, 49 p.
- Burns M, Dubus I, Reichenberger S, Pires J, Tripault H, Grand-Perret B, Briand S, Dubus H, 2014. Proziris – a new tool to support pesticide registration at the national and zonal levels. SETAC Europe 24th Annual Meeting, 11-15 May 2014, Basel, Switzerland, oral presentation (http://www.researchgate.net/profile/Stefan_Reichenberger/publication/264577594_SETAC_2014_Proziris_extended_abstract/links/53e8b27f0cf25d674ea84f0b?origin=publication_detail; 10.11.2014)
- BVL, 2010. Gegenseitige Anerkennungen von Zulassungen nach § 15b Pflanzenschutzgesetz. Bundesamt für Verbraucherschutz und Lebensmittelsicherheit, Braunschweig.
- Campolongo F, Cariboni J, Saltelli A, 2007. An effective screening design for sensitivity analysis of large models. *Environmental Modelling and Software* 22(10), 1509–1518.
- Carsel RF, Imhoff JC, Hummel PR, Cheplick JM, Donigian AS jr., 2003. PRZM-3, A model for predicting pesticide and nitrogen fate in the crop root and unsaturated soil zones: Users Manual for Release 3.12. Center for Exposure Assessment Modeling (CEAM), U.S. Environmental Protection Agency (USEPA), Athens, GA, USA.
- Carsel RF, Smith CN, Mulkey LA, Dean JD, Jowise P, 1984. User's manual for the Pesticide Root Zone Model (PRZM). Technical Report Release 1.EPA-600/3-84-109.U.S. Environmental Protection Agency (USEPA), Athens, GA, USA, 227p.(<http://nepis.epa.gov/Adobe/PDF/2000HNQM.PDF>; 10.11.2014)
- CCPF, 2009a. Prodotti fitosanitari - criteri e scenario nazionali per la valutazione del rischio ambientale: acque superficiali e di falda. Gruppo di lavoro as hoc della CCPF, 28p. (http://www.minambiente.it/sites/default/files/archivio/allegati/vari/Prodotti_fitosanitari_-_Criteri_e_scenari_nazionali.PDF; 10.11.2014)
- CCPF Ministero della Salute, 2009a. Misure di mitigazione del rischio per la riduzione della contaminazione dei corpi idrici superficiali da deriva e ruscellamento. Documento di orientamento. CCPF/MitRis/Finale- 20 July 2009, Italy, 27 p.
- CCPF Ministero della Salute, 2009b. Criteria for fate and behaviour evaluation (2009). Gruppo di lavoro ad hoc della CCPF (unpublished draft version).
- CRD, 2009. Data Requirements Handbook. Version 01/10/2009. Chapter 6: Environmental Fate and Behaviour. Chemicals Regulation Directorate, York, UK.
- CRD, 2009b. Guidance on the Presentation of Higher Tier Drainflow Modelling Results for Use in Aquatic Risk Assessments. Regulatory Update 09/2009. Chemicals Regulation Directorate, York, UK. (<http://www.pesticides.gov.uk/guidance/industries/pesticides/topics/pesticide-approvals/pesticides-registration/applicant-guide/updates/presentation-of-higher-tier-drainflow-modelling-results>; 10.11.2014)
- CTGB, Cornelese A, Pol W, 2010. Evaluation Manual for the Authorisation of Plant Protection Products and Biocides. NL part. Plant Protection Products. Chapter 6 Fate and behaviour in the environment: behaviour in air. Version 1.0, January 2010. Board for the Authorisation of Plant Protection Products and Biocides, 8 p.
- Dabrowski JM, Peall SKC, Reinecke AJ, Liess M, Schulz R, 2001. Runoff-related pesticide input into the Lourens river, South Africa: Basic data for exposure assessment and risk mitigation at the catchment scale. *Water, Air and Soil Pollution* 135, 265–283.
- Deasy C, Quinton JN, Silgram M., Bailey AP, Jackson B, Stevens CJ, 2010. Contributing understanding of mitigation option for phosphorus and sediment to a review of the

- efficacy of contemporary agricultural stewardship measures. *Agricultural Systems* 103, 105-109.
- Deneer JW, Beltman WHJ, Adriaanse PI, 2010. Transformation reactions in TOXSWA; Transformation reactions of plant protection products in surface water. Alterra, Wageningen. Alterra Report 2074, 94 pp.
- DEPA, 2011. Framework for the assessment of plant protection products.05/2011, revised Version 1.2 (from Feb. 2013). Danish Environmental Protection Agency.
- Dohmen P, Preuss TG, Hamer M, Galic N, Strauss T, Van den Brink P, De Laender F, Bopp S, 2016. Population-level effects and recovery of aquatic invertebrates after multiple applications of an insecticide. *Integrated Environm Assessm Managem*, 12(1), 67–81
- Doppler T, Camenzuli L, Hirzel G, Krauss M, Lück A, Stamm C, 2012. Spatial variability of herbicide mobilisation and transport at catchment scale: insights from a field experiment. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 16, 1947–1967.
- Douzals JP, 2011. Drift mitigation techniques for surface water protection: another French paradox? Euraqua-PEER conference 2011, 26-28 October 2011, Montpellier. Poster presentation.
- Dubus IG, Brown CD, 2002. Sensitivity and first-Step uncertainty analyses for the preferential flow model MACRO. *Journal of Environmental Quality* 31, 227-240.
- Dubus IG, Brown CD, Beulke S, 2003. Sensitivity analyses for four leaching models. *Pest Management Science* 59, 962-982.
- Dubus IG, Reichenberger S, Allier D, Azimonti G, Bach M, Barriuso E, Bidoglio G, Blenkinsop S, Boulahya F, Bouraoui F, Burton A, Centofanti T, Cerdan O, Coquet Y, Feisel B, Fialkiewicz W, Fowler H, Galimberti F, Green A, Grizzetti B, Højberg A, Hollis JM, Jarvis NJ, Kajewski I, Kjær J, Krasnicki S, Lewis KA, Lindahl A, Lobnik F, Lolos P, Mardhel V, Moeys J, Mojon-Lumier F, Nolan BT, Rasmussen P, Réal B, Šinkovec M, Stenemo F, Suhadolc M, Surdyk N, Tzilivakis J, Vaudour-Dupuis E, Vavoulidou-Theodorou E, Windhorst D, Wurm M, 2009. FOOTPRINT – Functional tools for pesticide risk assessment and management. Final report of the EU project FOOTPRINT (SSPI-CT-2005-022704), 221 p.
- Ducrot V, Ashauer R, Bednarska AJ, Hinarejos S, Thorbek P, Weyman G, 2016. Using toxicokinetics-toxicodynamics modeling as an acute risk assessment refinement approach in vertebrates ecological risk assessment. *Integrated Environm Assessm Managem* 12(1), 32-45
- ECPA, 2008. Surface Water Assessment eNabler v.1.1.4. Developed by Tessella Support Services plc., Abingdon Science Park, Oxfordshire OX143YS, UK. Copyright: European Crop Protection Association (ECPA), Brussels, Belgium.
- ECPA, 2012. Surface Water Assessment eNabler v.3.0.0. Developed by Tessella Support Services plc., Abingdon Science Park, Oxfordshire OX143YS, UK. Copyright: European Crop Protection Association (ECPA), Brussels, Belgium.
- Eichhorn H (Hg.), 1999: Landtechnik. 7. Auflage, Ulmer, Stuttgart.
- EFSA, 2012. Scientific Opinion on the science behind the guidance for scenario selection and scenario parametrisation for predicting environmental concentrations of Plant Protection Products in soil. EFSA Panel on and their Residues (PPR), European Food Safety Authority (EFSA), *EFSA Journal* 10(2), 2562-2638. (<http://www.efsa.europa.eu/de/efsajournal/doc/2562.pdf>; 10.11.2014).
- EFSA, 2013a. Scientific Opinion on the report of the FOCUS groundwater working group (FOCUS, 2009): assessment of lower tiers. EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues (PPR), European Food Safety Authority (EFSA), *EFSA Journal* 11(6), 3291. (<http://www.efsa.europa.eu/de/efsajournal/doc/3291.pdf>; 10.11.2014).
- EFSA, 2013b. Scientific Opinion. Guidance on tiered risk assessment for plant protection products for aquatic organisms in edge-of-field surface waters. EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues (PPR), European Food Safety Authority (EFSA), *EFSA Journal* 11(7), 3290-3558. (<http://www.efsa.europa.eu/en/efsajournal/doc/3290.pdf>; 10.11.2014).

- EFSA, 2014. EFSA Guidance Document for evaluating laboratory and field dissipation studies to obtain DegT50 values of active substances of plant protection products and transformation products of these active substances in soil. *EFSA Journal* 2014;12(5):3662
- European Commission, 2014. Assessing Potential for Movement of Active Substances and their Metabolites to Ground Water in the EU. Report of the FOCUS Ground Water Work Group, EC Document Reference Sanco/13144/2010 version 3, 613 pp.
- FAO, 1998. World Reference Base for Soil Resources, by ISSS-ISRIC-FAO. World Soil Resources Report No. 84, Rome. (<http://www.fao.org/docrep/w8594e/w8594e00.htm>; 10.11.2014).
- Fawcett RS, Christensen DR, Tierney DP, 1994. The impact of conversion tillage on pesticide runoff into surface water: A review and analysis. *J. Soil Water Conserv.* 1994, 126-135.
- Felsot AS, Mitchell JK, Kenimer AL, 1990. Assessment of Management Practices for Reducing Pesticide Runoff from Sloping Cropland in Illinois. *J. Environm Qual* 19, 539-545.
- Fent G, 2004. Short-range Transport and Deposition of volatilized Pesticides. Shaker Verlag (ISBN: 3-8322-3568-X).
- FEMVTF, Jones RL (eds.), Russell MH (eds.), 2001. FIFRA Environmental Model Validation Task Force: Final Report. USEPA MRID 45433201, 768 p. (<http://femvtf.com/femvtf/index.htm>; 13.10.2014).
- Fiener P, Auerswald K, 2003. Effectiveness of Grassed Waterways in Reducing Runoff and Sediment Delivery from Agricultural Watersheds. *J. Environ. Qual.* 32, 927-936.
- Flury, M, Flühler H, Jury WA, Leuenberger J, 1994. Susceptibility of soils to preferential flow of water: a field study. *Water Resources Research* 30(7), 1945-1954.
- Franti TG, Peter CJ, Tierney RS, Fawcett RS, Myers SA, 1998. Reducing herbicide losses from tile-outlet terraces. *J. Soil Water Conserv.* 53(1), 25-32.
- FOCUS (2000) "FOCUS groundwater scenarios in the EU review of active substances" Report of the FOCUS Groundwater Scenarios Workgroup, EC Document Reference Sanco/321/2000 rev.2, 202 p.
- FOCUS, 2001. FOCUS surface water scenarios in the EU evaluation process under 91/414/EEC. Report of the FOCUS Working Group on Surface Water Scenarios, EC Document Reference SANCO/4802/2001 rev.2., 245 p.
- FOCUS, 2006. Guidance Document on Estimating Persistence and Degradation Kinetics from Environmental Fate Studies on Pesticides in EU Registration. Report of the FOCUS Work Group on Degradation Kinetics, EC Document Reference Sanco/10058/2005 version 2.0, 434 p. (<http://focus.jrc.ec.europa.eu/dk/docs/finalreportFOCDegKin04June06linked.pdf>; 10.11.2014).
- FOCUS, 2007a. Landscape and mitigation factors in aquatic risk assessment. Volume 1. Extended summary and recommendations. The Final Report of the FOCUS Working Group on Landscape and Mitigation Factors in Ecological Risk Assessment, SANCO/10422/2005, version 2.0, September 2007, 169 p. (http://eusoils.jrc.ec.europa.eu/esdb_archive/eusoils_docs/other/focus_vol1.pdf; 10.11.2014).
- FOCUS, 2007b: Landscape and mitigation factors in aquatic risk assessment. Volume 2. Detailed Technical Reviews. The Final Report of the FOCUS Working Group on Land-scape and Mitiga-tion Factors in Ecological Risk Assessment, SANCO/10422/2005, version 2.0, September 2007, 436 p. (http://eusoils.jrc.ec.europa.eu/esdb_archive/eusoils_docs/other/FOCUS_Vol2.pdf; 10.11.2014).
- FOCUS, 2008. Pesticides in Air: Considerations for Exposure Assessment. Report of the FOCUS Working Group on Pesticides in Air, EC Document Reference SANCO/10553/2006 Rev 2 June 2008, 327 p.
- FOCUS (2009). Assessing Potential for Movement of Active Substances and their Metabolites to Ground Water in the EU. Report of the FOCUS Ground Water Work Group. EC Document Reference Sanco/13144/2010 version 1, 604 p.

- Footways, 2011. Développement d'un modèle national pour l'évaluation des risques de contaminations diffuses des milieux aquatiques par les produits phytosanitaires dans le cadre de la mise en oeuvre de la Directive Cadre sur l'Eau et de mesures de gestion nationale de certaines molécules. Mémoire technique – post-negotiation, septembre 2011. 54-55.
- Fox GA, Muñoz-Carpena R, Sabbagh GJ, 2010. Influence of flow concentration on parameter importance and prediction uncertainty of pesticide trapping by vegetative filter strips. *Journal of Hydrology* 384, 164–173.
- Fox GA, Sabbagh GJ, 2010. Parameter Importance and Uncertainty in Predicting Runoff Pesticide Reduction with Filter Strips. *J. Environ. Qual.* 39, 630–641.
- Frey MP, Schneider MK, Dietzel A, Reichert P, Stamm C, 2009. Predicting critical source areas for diffuse herbicide losses to surface waters: Role of connectivity and boundary conditions. *Journal of Hydrology* 365, 23–36.
- Garen DC, Moore DS, 2005. Curve Number Hydrology in Water Quality Modeling: Uses, Abuses, and Future Directions. *J. American Water Resources Assoc.* 04, 377-388. (ftp://www.wcc.nrcs.usda.gov/downloads/factpub/wsf/Garen_and_Moore_JAWRA_2005.pdf 13.10.2014).
- Ghodrati M, Jury WA, 1990. A field study using dyes to characterize preferential flow of water. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 54, 1558-1563.
- Golla B, 2008. Verfeinerte Betrachtung der Exposition von Gewässern durch PSM-Abdrift in den Obstbauregionen Deutschlands – Ergebnisse gewässermorphologischer Aufnahmen. Julius-Kühn Institut (JKI), Institut für Strategien und Folgenabschätzung im Pflanzenschutz, Kleinmachnow (unveröff.).
- Golla B, Strassemeyer J, Koch H, Rautmann D, 2011. Eine Methode zur stochastischen Simulation von Abdriftwerten als Grundlage für eine georeferenzierte probabilistische Expositionsabschätzung. *Journal für Kulturpflanzen* 63(2), 33-44.
- Görlitz G, 2009. Mögliche Auflagen zur Risikoreduktion: Risk Mitigation – Overview of the European Situation. Vortrag- BLW/ACW – Outline Workshop, Wädenswil, 20. Oct. 2009.
- Gottesbüren B, 1991. Konzeption, Entwicklung und Validierung des wissensbasierten Herbizid-Beratungssystems HERBASYS. Dissertation, Universität Hannover.
- Hall JK, Hartwig NL, Hoffman L, 1983. Application mode and alternative cropping effects on atrazine losses from a hillside. *J. Environ. Qual.* 12, 336–340.
- Hansen NC, Moncrief J, Gupta SC, Capel PD, Olness AE, 2001. Herbicide banding and tillage system interactions on runoff losses of alachlor and cyanazine. *J Environm Qual* 30, 2120-2126.
- Hendrickx JMH, Flury M, 2001. Uniform and preferential flow, mechanisms in the vadose zone, *Conceptual Models of Flow and Transport in the Fractured Vadose Zone*. National Research Council, National Academy Press, Washington, DC, 149–187.
- Hollis J, Jones R, Marshall C, Holden A, Van De Veen J, Montanarella L, 2006. SPADE 2: The Soil Profile Database for Europe version 1.0. Report for the European Crop Protection Association and EC Joint Research Centre, European Soil Bureau Research Report No. 19, EUR 22127. Office for the Official Publications of the European Communities, Luxembourg, 52 p. (http://eusoils.jrc.ec.europa.eu/esdb_archive/eusoils_docs/esb_rr/n19_EUR22127.pdf; 10.11.2014)
- Hommen U, Forbes V, Grimm V, Preuss TG, Thorbek P, Ducrot V, 2016a. How to use mechanistic effect models in environmental risk assessment of pesticides: case studies and recommendations from the SETAC workshop MODELINK. *Integrated Environm Assessm Managem* 12(1), 12-31.
- Hommen U, Schmitt W, Heine S, Brock TCM, Duquesne S, Manson P, Meregalli G, Ochoa-Acuna H, van Vliet P, Arts G., 2016b. How TK-TD and population models for aquatic macrophytes could support the risk assessment for plant protection products. *Integrated Environm Assessm Managem* 12(1), 82-95.
- Jager T, Kooijman S, 2005. Modeling receptor kinetics in the analysis of survival data for organophosphorus pesticides. *Environmental Science & Technology* 39, 8307-8314.

- Jager T, Kooijman S, 2009. A biology-based approach for quantitative structure-activity relationships (QSARs) in ecotoxicity. *Ecotoxicology* 18(2), 187-196.
- Jager T, Zimmer EI, 2012. Simplified Dynamic Energy Budget model for analysing ecotoxicity data. *Ecological Modelling* 225, 74-81 (DOI: 10.1016/j.ecolmodel.2011.11.012).
- Jager T, Albert C, Preuss TG, Ashauer R, 2011. General Unified Threshold Model of Survival - a Toxicokinetic-Toxicodynamic Framework for Ecotoxicology. *Environmental Science & Technology* 45(7), 2529-2540.
- Jager T, Barsi A, Hamda NT, Martin BT, Zimmer EI, Ducrot V, 2014. Dynamic energy budgets in population ecotoxicology: Applications and outlook. *Ecological Modelling* 280, 140-147.
- Jarvis N, Lindahl A, Messing I, Stenemo F, Hollis J, Reichenberger S, Dubus IG, 2007. Algorithm to completely parameterize MACRO from basic soil property data. Report DL21 of the FP6 EU-funded FOOTPRINT project, 18 p.
- Jarvis NJ, 1991. MACRO - A model of water movement and solute transport in macroporous soils. Reports and Dissertations 9, Dept. Soil Sci., Swedish Univ. Agric. Sci., Uppsala, 58 p.
- Jarvis NJ, 2007. A review of non-equilibrium water flow and solute transport in soil macropores: principles, controlling factors and consequences for water quality. *Eur. J. Soil Sci.* 58, 523-546.
- Jiang L, Dami I, Mathers HM, Warren AD, Doohan D, 2011. The Effect of Straw Mulch on Simulated Simazine Leaching and Runoff. *Weed Science* 59(4), 580-586.
- Jolliffe IT, 1972. Discarding variables in a principal component analysis, I: artificial data. *Applied Statistics* 21, 160-173.
- Jolliffe IT, 1986. *Principal Component Analysis*. Springer-Verlag, New York, 271 p.
- JRC, 2008. SIMLAB 2.2., a free development framework for Sensitivity and Uncertainty Analysis. Joint Research Centre (JRC), Institute for the Protection and Security of the Citizens (Download: <http://ipsc.jrc.ec.europa.eu/?id=756>).
- Jury A, Wang Z, Tuli A, 2003. A conceptual model of unstable flow in unsaturated soil during redistribution. *Vadose Zone Journal* 2, 61-67.
- Kaiser HF, 1960. The application of electronic computers to factor analysis. *Educational and Psychological Measurement* 20, 141-151.
- Kaletta T, 2012. Kleingewässer in Brandenburg – Vorkommen, Gefährdung, Schutz. PowerPoint-Vortrag 13.10.2012, Hochschule f. Nachhaltige Entwicklung, Eberswalde (download <http://www.naturschutzbeiraete-brandenburg.de/Downloads/Kalettkapdf>; access 15.04.2015).
- KEMI, 2011. Plant protection products. Guidance for applications. Swedish Chemical Agency, June 2011.
- Klein CI, 2005. Einfluss von Vegetationsfilterstreifen auf den Austrag ausgewählter Herbizidwirkstoffe mit dem Oberflächen- und Zwischenabfluss in ackerbaulich genutzten Böden einer Mittelgebirgslandschaft. Diss. Institut für Bodenkunde, Universität Bonn (<http://hss.ulb.uni-bonn.de/2005/0486/0486.pdf>; 15.10.2014).
- Klein M, 2007. Long-term surface water simulations with STEPS-1-2-3-4. In: Re AAM, del; Capri E, Fragoulis G, Trevisan M (eds.): Environmental fate and ecological effects of pesticides. Proc. XIII Symposium Pesticide Chemistry, 950-957.
- Knäbel A, Meyer K, Rapp J, Schulz R, 2014. Fungicide Field Concentrations Exceed FOCUS Surface Water Predictions: Urgent Need of Model Improvement. *Environ. Sci. Technol.* 48, 455-463.
- Knäbel A, Stehle S, Schäfer RB, Schulz R, 2012. Regulatory FOCUS Surface Water Models Fail to Predict Insecticide Concentrations in the Field. *Environ. Sci. Technol.* 46, 8397-8404.
- Klöppel H, Kördel W, Stein B, 1997. Herbicide transport by runoff and herbicide retention in a filter strip. *Chemosphere* 35, 129-141.
- Kördel W, Klöppel H, 1994. Erfassung des Run-off bei der Anwendung von Pflanzenschutzmitteln, F&E-Vorhaben 126050087, Umweltbundesamt FB94-083.

- Kördel W, Klöppel H, 1996. Belastung aquatischer Ökosysteme durch Drainagewasser. F&E-Vorhaben 126050089, Umweltbundesamt FB97-064.
- Krutz LJ, Senseman SA, Zablutowicz RM, Matocha MA, 2005. Reducing herbicide Runoff from agricultural fields with vegetative filter strips: A review. *Weed Sci.* 53, 353–367.
- Kubiak R, Hommen U, Bach M, Classen S, Gergs A, Golla B, Guerniche D, Klein M, Krumpe J, Preuss TG, Ratte HAT, Roß-Nickol M, Schäfers C, Strauss T, Toschki A, Trapp M, 2014. Georeferenced Probabilistic Risk Assessment of Pesticides. Umweltbundesamt, UBA Texte 05/2014, 477 p. (<http://www.umweltbundesamt.de/publikationen/georeferenced-probabilistic-risk-assessment-of>; 10.11.2014).
- Kulkarni D, Daniels B, Preuss TG, 2013. Life-stage-dependent sensitivity of the cyclopoid copepod *Mesocyclops leuckarti* to triphenyltin. *Chemosphere* 92(9), 1145–1153.
- Lamouroux N, Capra H, 2002. Simple predictions of instream habitat model outputs for target fish populations. *Freshwater biology* 47, 1543-1556.
- Lamouroux N, Souchon Y, Herouin E, 1995. Predicting velocity frequency distributions in stream reaches. *Water Resources Research* 31(9), 2367-2375.
- Lamouroux N, Statzner B, Fuchs U, Kohmann F, Schmedtje U, 1992. An unconventional approach to model spatial and temporal Variability of local shear stress in stream segments. *Water Resources Research* 28(12), 3251-3258.
- Larocque M, Banton O, Lafrance P, 1998. Simulation par le modèle AgriFlux du devenir de l'atrazine et du dééthylatrazine dans un sol du Québec sous maïs sucré. *Rev. Sci. Eau* 11, 191-208.
- Larsbo M, Jarvis N, 2003. MACRO 5.0 - A model of water flow and solute transport in macroporous soil. Technical description. *Emergo* 2003:6, Studies in the Biogeophysical Environment, SLU, Dept. Soil Sci., Uppsala, 47 pp. (http://www-mv.slu.se/webfiles/bgf/Emergo/Emergo_2003_6.pdf; 10.11.2014).
- Larsbo M, Roulier S, Stenemo F, Kasteel R, Jarvis N, 2005. An improved dual-permeability model of water flow and solute transport in the vadose zone. *Vadose Zone Journal* 4, 398-406.
- Larsson MH, Jarvis NJ, 1999. Evaluation of a dual-porosity model to predict field-scale solute transport in a macroporous soil. *J. Hydrol.* 215, 153-171.
- Lauvernet C, Muñoz-Carpena R, Carlier N, 2011. Evaluation of a mechanistic algorithm to calculate the influence of a shallow water table on hydrology sediment and pesticide transport through vegetative filter strips by sensitivity analysis. XIV Symposium Pesticide Chemistry, Piacenza, 30/08 – 01/09/2011; poster presentation. (http://convegni.unicatt.it/meetings_spc2011_posters_Lauvernet.pdf; 10.11.2014)
- Le Bas C, King D, Jamagne M, Daroussin J, 1998. The European Soil Information System. In: Heineke H., Ecklemann W., Thomasson A., Jones R., Montanarella L, Buckley B, editors. Land Information Systems: Developments for planning the sustainable use of land resources. European Soil Bureau Research Report No. 4, EUR 17729 EN, Office for Official Publications of the European Communities, Luxembourg, 33-42.
- Lee JH, Landrum PF, Koh CH, 2002. Prediction of time-dependent PAH toxicity in *Hyalella azteca* using a damage assessment model. *Environmental Science & Technology* 36(14), 3131-3138.
- Leistra M, van der Linden AMA, Boesten JJTI, Tiktak A, van den Berg F. 2000. PEARL model for pesticide behaviour and emissions in soil-plant systems. Description of processes. Alterra report 013, Alterra, Wageningen, the Netherlands, 177 p. (<http://www.pearl.pesticidemodels.nl/pdf/pearlthe.pdf>, 09.11.2014).
- Liess M, Schulz R, 1999. Linking insecticide contamination and population response in an agricultural stream. *Environmental Toxicology and Chemistry* 18, 1948–1955.
- Liess M, von der Ohe PC, 2005. Analysing effects of pesticides on invertebrate communities in streams. *Environmental Toxicology and Chemistry* 24, 954–965.
- Liess M, Brown C, Dohmen P, Duquesne S, Hart A, Heimbach F, Kreuger J, Lagadic L, Maund S, Reinert W, Streloke M and Tarazona J, 2005. Effects of pesticides in the field. EPIF, Brussels, Belgium, SETAC Press, 136 p.

- Liss PS, Slater PG, 1974. Flux of gases across the air-sea interface. *Nature* 247, 181-184.
- Liu G, Craig JR, Soulis ED, 2011. Applicability of the Green-Ampt infiltration model with shallow boundary conditions. *J. Hydrologic Eng.* 16(3), 266-273.
- Locke MA, Zablatowicz RM, Reddy KN, Steinriede RW, 2008. Tillage management to mitigate herbicide loss in runoff under simulated rainfall conditions. *Chemosphere* 70(8), 1422-1428.
- Loubet B, Milford C, Sutton MA, Cellier P, 2001. Investigation of the interaction between sources and sinks of atmospheric ammonia in an upland landscape using a simplified dispersion-exchange model. *J. Geophysical Research-Atmospheres* 106(D20), 24183-24195.
- Loubet B, Panic I, Bedos C, Briand O, Seux R, Cellier P, 2006. Local deposition of volatilised pesticides may be as large as drift. A modelling study. Poster; Conference on Pesticide behaviour in soils, water and air, 27-29 March 2006, Warwick, UK.
- Machulla G, Nitzsche O, Schmidt W, 2008. Stoffaustrag und Bodenbearbeitung (download <http://www.smul.sachsen.de/lfl/publikationen/jsp/inhalt.jsp>).
- Maetens W, Poesen J, Vanmaercke M, 2012. How effective are soil conservation techniques in reducing plot runoff and soil loss in Europe and the Mediterranean? *Earth-Science Reviews* 115, 21-36.
- MAGPIE, 2013. Proposal for a New EU Regulatory Runoff Mitigation Concept. SETAC Europe Workshop MAGPIE (Mitigating the Risk of Plant Protection Products in the Environment), 13 - 15 Nov 2013, Madrid, Conference paper, 13 p.
- Mamo M, Kranz WL, Douskey ER, Kamble ST, Witkowski JF, 2006. Impact of Tillage and Placement of Terbufos Insecticide Runoff. *Applied Engineering Agriculture* 22 (4), 555 - 560.
- Martin BT, Jager T, Nisbet RM, Preuss TG, Grimm V, in press. Limitations of extrapolating toxic effects on reproduction to the population level. *Ecological Applications*. DOI: 10.1890/14-0656.
- Massop HTL, van der Gaast JWJ, Hermans AGM, 2006. Kenmerken van het ontwateringstelsel in Nederland. *Alterra Rapport* 1397, 95 p.
- McCready MS, Dukes MD, 2011. Landscape irrigation scheduling efficiency and adequacy by various control technologies. *Ag. Water Manag.* 98, 697-704. doi: 10.1016/j.agwat.2010.11.007.
- Menzel RG, 1980. Enrichment ratios for water quality modeling. In: *CREAMS, A Field Scale Model for Chemicals, Runoff, and Erosion from Agricultural Management Systems*, W.G. Knisel (ed.) USDA Conservation Service Report No. 26, Volume III. Supporting documentation, 486-493. (<http://www.tifton.uga.edu/sewrl/Gleams/creams4.pdf>; 23.10.2014).
- Miao Z, Vicari A, Capri E, Ventura F, Padovani L, Trevisan M, 2004. Modeling the effects of tillage management practices on herbicide runoff in northern Italy. *J Environ. Qual.* 33, 1720-1732.
- Mickelson SK, Boyd P, Baker JL, Ahmed SI, 2001. Tillage and herbicide incorporation effects on residue cover, runoff, erosion, and herbicide loss. *Soil Tillage Research* 60(1), 55 - 66.
- Moeys J, Stenemo F, Kreuger J, Jarvis NJ, 2011. MACRO-SE, a versatile tool for scenario-based pesticide risk assessments: presentation and application. *Proceedings XIV Symposium Pesticide Chemistry*, 30.08.- 01.09.2011, Piacenza, Italy. (http://convegna.unicatt.it/meetings_3667.html; 23.10.2014).
- Moore D, 2001. Introduction to probabilistic methods. In Hart, A. (ed.): *Probabilistic risk assessment for pesticides in Europe: implementation & research needs*. Report of the European workshop on probabilistic risk assessment for the environmental impacts of plant protection products (EUPRA). Central Science Laboratory, York, UK, 57-58. (<http://fera.co.uk/events/pastConferences/documents/eupraReport.pdf>; 10.11.2014).
- Moore MT, Denton DL, Cooper CM, Wrynski J, Miller JL, Reece K, Crane D, Robins P, 2008. Mitigation assessment of vegetated drainage ditches for collecting irrigation runoff in California. *J. Environm Qual* 37, 486-493.

- Morris MD, 1991. Factorial sampling plans for preliminary computational experiments. *Technometric* 33(2), 161–174.
- Moussa R, Voltz M, Andrieux P, 2002. Effects of the spatial organisation of agricultural management on the hydrological behaviour of a farmed catchment during flood events. *Hydrological Processes* 16(2), 393-412.
- Muñoz-Carpena R, 2012a. Continuous-simulation components for pesticide environmental assessment with VFSMOD. 1. VFS soil water dynamics between events. Technical Report. Agricultural and Biological Engineering, University of Florida, Gainesville, FL, 35 p.
- Muñoz-Carpena R, 2012b. Continuous-simulation components for pesticide environmental assessment with VFSMOD. 2. VFS pesticide residue between Runoff events. Technical Report. Agricultural and Biological Engineering, University of Florida, Gainesville, FL, 35 p.
- Muñoz-Carpena R, Fox GA, Sabbagh GJ, 2010. Parameter Importance and Uncertainty in Predicting Runoff Pesticide Reduction with Filter Strips. *J. Environ. Qual.* 39, 630–641.
- Muñoz-Carpena R, Lauvernet C, Carluer N (in preparation). Simplified mechanistic algorithm for unsteady rainfall infiltration and water content distribution in soils with a shallow water table. *Advances in Water Resources*.
- Muñoz-Carpena R, Lauvernet C, Carluer N, 2011. Development and testing of a mechanistic algorithm to calculate the influence of a shallow water table on flow dynamics through vegetative filter strips. XIV Symposium Pesticide Chemistry, 30/08 – 01/09/2011, Piacenza, Italy. Extended abstract, 2 p.
- Muñoz-Carpena R, Parson JE, 2004. A design procedure for vegetative filter strips using VFSMOD-W. *Transactions of the ASAE* 47, 1933-1941.
- Muñoz-Carpena R, Parsons JE, 2011. VFSMOD-W Vegetative Filter Strips Modelling System. Model documentation & User's Manual version 6.x. 182 p. (http://abe.ufl.edu/carpena/files/pdf/software/vfsmod/VFSMOD_UsersManual_v6.pdf; 23.10.2014).
- Muschal M, Warne MS, 2003. Risk posed by pesticides to aquatic organisms in rivers of Northern inland New South Wales, Australia. *Human and Ecological Risk Assessment*, 9, 1765–1787.
- Nemes A, Wösten JHM, Lilly A, Oude Voshaar JH 1999. Evaluation of different procedures to interpolate particle-size distributions to achieve compatibility within soil databases. *Geoderma* 90, 187-202.
- Nijboer R, Verdonschot P, Van den Hoorn M, 2003. Macrofauna en vegetatie van de Nederlandse sloten. *Alterra-rapport 688*, Wageningen, the Netherlands, 255 p.
- Nitzsche O, Krück S, Zimmermann M, 2002. Entwicklung von dauerhaft umweltgerechten Landbewirtschaftungsverfahren im sächsischen Einzugsgebiet der Elbe. (download: <http://www.landwirtschaft.sachsen.de/landwirtschaft/10895.htm>).
- Nitzsche O, Krück S, Zimmerling B, Schmidt W, 2004. Innovative Bodenbearbeitungsverfahren zur Minderung von Bodenerosion und Nährstoffeinträgen in Gewässer. S. 343-361. In: Becker A, Lahmer W (Hrsg.), *Wasser- und Nährstoffhaushalt im Elbegebiet und Möglichkeiten zur Stoffeintragsminderung*. Weißensee Verlag, Berlin.
- Nolan BT, Dubus IG, Surdyk N, Fowler HJ, Burton A, Hollis JM, Reichenberger S, Jarvis NJ, 2008. Identification of key climatic factors regulating the transport of pesticides in leaching and to tile drains. *Pest Management Science* 64(9), 933-944.
- Northern Zone Steering Committee, 2011. Guidance document on work-sharing in the northern zone in the registration of plant protection products (July, 2011).
- Norwegian Agricultural Inspection Service, 2000. Pesticide Risk indicators for health and environment - Norway Version 3 (2000), Aas.
- NRCS, 2004. National Engineering Handbook, Part 630, Hydrology. Chapter 10, Estimation of Direct Runoff from Storm Rainfall. 79 p. (<http://directives.sc.egov.usda.gov/OpenNonWebContent.aspx?content=17752.wba>; 23.10.2014).

- Onema, 2011. Développement d'un modèle national pour l'évaluation des risques de contaminations diffuses des milieux aquatiques par les produits phytosanitaires dans le cadre de la mise en oeuvre de la directive cadre sur l'eau et de mesures de gestion nationale de certaines molécules. Cahier de Clauses Particulières, 25 p.
- Pantel S, 2003. Vorschläge zur multivariaten Strukturanalyse varianzreicher Tiergemeinschaften am Beispiel von Makroinvertebraten-Zönosen landwirtschaftlicher Fließgewässer in Südostniedersachsen. Dissertation. Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen. 163p. (<https://www.deutsche-digitale-bibliothek.de/binary/QHJWHDPNH7YV6DLVKSCQBYSUMFYOPIFL/full/1.pdf>; 09.11.2014)
- Pantone DJ, Potter KN, Torbert HA, Morrison JE, 1996. Atrazine Loss in Runoff from No-Tillage and Chisel-Tillage Systems on a Houston Black Clay Soil. *J. Environm Qual* 25, 572-577.
- Passeport E, 2010. Efficiency of an artificial wetland and a forest buffer for pesticide pollution mitigation in a tile-drained agricultural watershed. PhD thesis, AgroParisTech Paris/Cemagref Antony, France, 280 p.
- Patty L, Real B, Gril J, 1997. The use of grassed buffer strips to remove pesticides, nitrate and soluble phosphorus compounds from Runoff water. *Pestic. Sci.* 49, 243-251.
- Pätzold S, Klein C, Brümmer GW, 2007. Run-off transport of herbicides during natural and simulated rainfall and its reduction by vegetated filter strips. *Soil Use Management* 23, 294-305.
- Perez-Ovilla O, 2010. Modeling Runoff pollutant dynamics through vegetative filter strips: a flexible numerical approach. PhD thesis, University of Florida, Gainesville, FL, USA. 195 p.
- Personne E, Loubet B, Herrmann B, Mattsson M, Schjoerring JK, Nemitz E, Sutton MA, Cellier P, 2009. SURFATM-NH3: a model combining the surface energy balance and bidirectional exchanges of ammonia applied at the field scale, *Biogeosciences* 6, 1371-1388. doi:10.5194/bg-6-1371-2009.
- Plackett RL, Burman JP, 1946. The Design of Optimum Multifactorial Experiments. *Biometrika* 33, 305-325.
- Poletika NN, Coody PN, Fox GA, Sabbagh GJ, Dolder SC, White J, 2009. Chlorpyrifos and atrazine removal from Runoff by vegetated filter strips: experiments and predictive modeling. *Journal of Environmental Quality* 38(3), 1042-1052.
- Popov VH, 2005. A catchment approach to managing agricultural pesticides in the environment – A case study with the herbicide atrazine. PhD Diss. Univ. of Western Sydney, NSW, Australia, 219 p.
- Preuss TG, Hammers-Wirtz M, Hommen U, Rubach MN, Ratte HT, 2009. Development and validation of an individual based *Daphnia magna* population model: The influence of crowding on population dynamics. *Ecological Modeling* 220, 310-329.
- Rautmann D, Streloke M, Winkler R, 2001. New basic drift values in the authorisation procedure for plant protection products. In: Forster, R. and M. Streloke (eds.): Workshop on Risk Assessment and Risk Mitigation Measures in the Context of the Authorization of Plant Protection Products (WORMM). Mitt. Biol. Bundesanst. Land-Forstwirtschaft. Berlin-Dahlem, Heft 381, 133-142.
- Rector RJ, Regehr DL, Barnes PL, Loughin TM, 2003. Atrazine, S-metalochlor and isoxaflutole loss in runoff as affected by rainfall and management. *Weed Science* 51(5), 810-816.
- Reichenberger S, 2013. Comment on "Regulatory FOCUS Surface Water Models Fail to Predict Insecticide Concentrations in the Field". *Environ. Sci. Technol.* 47(6), 3015-3016.
- Reichenberger S, Pires J, 2013. Comparative simulation study of the surface water fate models STEPS and TOXSWA. 25 p. (http://www.researchgate.net/publication/264421436_Comparative_simulation_study_of_the_surface_water_fate_models_STEPS_and_TOXSWA; 09.11.2014).
- Reichenberger S, 2014. Comment on "Fungicide Field Concentrations Exceed FOCUS Surface Water Predictions: Urgent Need of Model Improvement". *Environ. Sci. Technol.* 48, 5345-5346.

- Reichenberger S, Bach M, Frede HG, 2007a. Auswertung der prädiktiven PRZM-Simulationen aus Reichenberger (2005) zum Austrag von PSM-Wirkstoffen über Runoff und Erosion in Deutschland. Dokumentation für den Industrieverband Agrar (IVA), 143 p.
- Reichenberger S, 2005. Field-scale risk assessment for diffuse-source pesticide inputs into German surface waters. Dissertation an der Justus-Liebig-Universität Gießen. Boden und Landschaft, Band 44, 254 p.
(http://www.pfmodels.org/downloads/PhD_Stefan_Reichenberger.pdf; 10.11.2014).
- Reichenberger S, Bach M, Skitschak A, Frede HG, 2007b. Mitigation strategies to reduce pesticide inputs into ground and surface water and their effectiveness; A review. *Science of the Total Environment* 384, 1-35.
- Reichenberger S, Dubus I, Lambeau M, Tellier S, Talva R, Rivals D, Stamm C, 2011. Evaluation of the model structure and parameterisation of the FOOT-CRS tool. *Geophysical Research Abstracts* 13, EGU2011-2773.
- Reichenberger S, Dubus IG, Boulahya F, Hollis JM, Jarvis NJ, 2008. Database containing complete PRZM parameterisation for FOOTPRINT soil, climate and crop scenarios. Report DL20 of the FP6 EU-funded FOOTPRINT project, 32p.(http://www.eu-footprint.org/downloads/FOOTPRINT_DL20.pdf; 10.11.2014)
- Reichenberger S, Pires J, 2013. Comparative simulation study of the surface water fate models STEPS and TOXSWA. 25 p.; verfügbar auf www.researchgate.net.
- Reinert KH, Giddings JA, Judd L, 2002. Effects analysis of time-varying or repeated exposures in aquatic ecological risk assessment of agrochemicals. *Environmental Toxicology and Chemistry* 21(9), 1977-1992.
- Rico A, Van den Brink PJ, 2015. Evaluating aquatic invertebrate vulnerability to insecticides based on intrinsic sensitivity, biological traits, and toxic mode of action. *Environmental Toxicology and Chemistry* 34, 1907–1917. DOI: 10.1002/etc.3008.
- Rico A, Van den Brink PJ, Gylstra R, Focks A, Brock TCM, 2016. Developing ecological scenarios for the prospective risk assessment of pesticides. *Integrated Environmental Assessment and Management* 12(3), 510-521. DOI: 10.1002/ieam.1718
- Rinaldo A, Marani A, Rigon R, 1991. Geomorphological dispersion. *Water Resour. Res.* 27 (4), 513–525.
- Ruano MV, Ribes J, Seco A, Ferrer J, 2012. An improved sampling strategy based on trajectory design for application of the Morris method to systems with many input factors. *Environmental Modelling & Software* 37, 103-109.
- Sabbagh GJ, Fox GA, Kamanzi A, Roepke B, Tang JZ, 2009. Effectiveness of Vegetative Filter Strips in Reducing Pesticide Loading: Quantifying Pesticide Trapping Efficiency. *J. Environ. Qual.* 38, 762–771.
- Saltelli A, 1999. Sensitivity analysis: could better methods be used? *Journal of Geophysical Research* 104(D3), 3789–3793.
- Saltelli A, Ratto M, Andres T, Campolongo F, Cariboni J, Gatelli D, Saisana M, Tarantola S, 2008. *Global Sensitivity Analysis: The Primer*. John Wiley & Sons, Chichester, 304 p.
- Saltelli A, Ratto M, Tarantola S, Campolongo F, 2005. Sensitivity Analysis for Chemical Models, *Chemical Reviews* 105(7), 2811–2828.
- Salvucci GD, Entekhabi D, 1995. Pondered infiltration into soils bounded by a water table. *Water Resour. Res.* 31, 2751-2759.
- Sauer TC, Daniel TC, 1987. Effect of Tillage System on Runoff Losses of Surface-applied Pesticides. *Soil Science Society of America Journal* 51(2), 410-415.
- Schäfer RB, von der Ohe PC, Rasmussen J, Kefford BJ, Betekov MA, Schulz R, Liess M, 2012. Thresholds for the Effects of Pesticides on Invertebrate Communities and Leaf Breakdown in Stream Ecosystems. *Environm. Sci. Technol.* 46, 5134-5142.
- Schäfers C, Hommen U, Dembinski M, Gonzales-Valero JE, 2006. Aquatic macroinvertebrates in the Altes Land, an intensely used orchard region in Germany: Correlation between community structure and potential for pesticide exposure. *Environ Toxicol Chem* 25(12), 3275-3288.

- Schmitt TJ, Dosskey MG, Hoagland KD, 1999. Filter strip performance and processes for different vegetation, widths, and contaminants. *J. Environ. Qual.* 28, 1479–1489.
- Schmitt W, Bruns E, Dollinger M, Sowig P., 2013. Mechanistic TK-TD-model simulating the effect of growth inhibitors on Lemna populations. *Ecological Modelling* 255, 1–10 (<http://dx.doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2013.01.017>).
- Schroll R, Becher HH, Dörfler U, Gayler S, Grundmann S, Hartmann HP, Ruoss J, 2006. Quantifying the effect of soil moisture on the aerobic microbial mineralization of selected pesticides in different soils. *Environmental Science & Technology* 40, 3305-3312.
- Schuler LJ, Landrum PF, Lydy MJ, 2006. Comparative toxicity of fluoranthene and pentachlorobenzene to three freshwater invertebrates. *Environ Toxicol Chem* 2006, 25(4), 985-94.
- Schulz R, 2004. Field studies on exposure, effects, and risk mitigation of aquatic nonpoint-source insecticide pollution: a review. *J. Environ. Qual.* 33, 419-448.
- Schulz R, Elsaesser D, Ohlinger R, Stehle S, Zenker K, 2007. Umsetzung der georeferenzierten probabilistischen Risikobewertung in den Vollzug des PflSchG - Pilotphase Dauerkulturen. Endbericht UBA-Vorhaben 206 63 402, Umweltbundesamt, Institut für Umweltwissenschaften Universität Koblenz- Landau, Campus Landau, Landau, 129 p.
- Schwartz R, Juo A, McInnes K, Cervantes C, 1998. Anion transport in a fine-textured Ultisol in Costa Rica. Proceedings of the 16th World Congress of Soil Science in Montpellier, France, August 20-26-1998. Symp. No. 5, scientific registration no. 1773. CD-ROM, Cirad 1998.
- Seidel N, 2008. Untersuchung der Wirkung verschiedener Landnutzungen auf Oberflächenabfluss und Bodenerosion mit einem Simulationsmodell. PhD-Thesis, Univ. Freiberg, 168 S.
- Seifert S, Shaw DR, Kingery WL, Snipes CE, Wesley RA, 2001. Imazaquin mobility and persistence in a Sharkey clay soil as influenced by tillage systems. *Weed Sci* 49, 571-577.
- Service public fédéral santé publique, sécurité de la chaîne alimentaire et environnement, 2010. Pesticides à usage agricole en Belgique. Guide destiné aux demandeurs d'agrément. Exigences en matière de sort et comportement dans l'environnement.
- Siebers J, Binner R, Wittich KP, 2001. Investigation on downwind short-range transport of pesticides after application in agricultural crops. *Chemosphere* 51, 397-407.
- Slovenia, 2011. National requirements for registration of plant protection products (PPPs) in Slovenia for Efficacy, Toxicology with Exposure assessment, Fate and Behaviour in the Environment and Ecotoxicology. Ljubljana, 8 p. (http://www.uvhvvr.gov.si/fileadmin/uvhvvr.gov.si/pageuploads/DELOVNA_PODROCJA/Fito_farmaceutska_sredstva/REGISTRACIJA_FFS/19102011_national_requirements_SLO.doc; 10.11.2014).
- Sommer C, Brunotte J, Ortmeier B, 1995. Einführung von Verfahren der konservierenden Bodenbearbeitung in die Praxis. Abschlussbericht FuE-Vorhabens 87 UM 01. Kuratorium für Technik und Bauwesen in der Landwirtschaft (KTBL), Darmstadt, 368 S.
- SPA, 2011. Zonal evaluation of applications for plant protection products in the Czech Republic. V1/12/2010, Brno, 7p. (http://eagri.cz/public/web/file/130422/Zonal_evaluation_of_applications_for_plant_protection_products_in_the_Czech_Republic_1_.pdf; 10.11.2014).
- Stenemo F, 2012. Creation of TOXSWA files outside MACRO in FOCUS. Memo, 2 p. (http://focus.jrc.ec.europa.eu/sw/software/FOCUS_MACRO_5_5_3.zip; 23.10.2014).
- Stenemo F, 2012. Creation of TOXSWA files outside MACRO in FOCUS. Geosigma, Memo Nr. 602652.
- Sur R, Gourlay V, Fent G, Schmitt W, Görlitz G, 2012. Determination of plant uptake factors for pesticide fate modelling. SETAC Europe 22nd Annual Meeting, 20-24 May 2012, Berlin, Poster TU102.
- Ter Horst MMS, Adriaanse PI, Boesten JJTI, 2009. Mitigation of Runoff in the FOCUS Surface Water Scenarios. Note of the fate group of the Environmental Risk Assessment team of Alterra on the interpretation of the mitigation of Runoff in the FOCUS Landscape and Mitigation Report (2007). Alterra Rapport 1794, Wageningen, Alterra. 35 p.

- Tiktak A, Adriaanse PI, Boesten JJTI, van Griethuysen C, ter Horst MMS, Linders JBJH, van der Linden AMA, van de Zande JC, 2012. Scenarios for exposure of aquatic organisms to plant protection products in the Netherlands: Part 1: Field crops and downward spraying. RIVM Report 607407002/2012, Wageningen, Alterra, 129 p.
(https://www.wageningenur.nl/upload_mm/2/0/6/c50130d2-1ad3-461f-b8d7-1651b5047bef_dsresource.pdf; 10.11.2014).
- Tingle CH, Shaw DR, Boyette M, Murphy GP, 1998. Metolachlor and metribuzin losses in Runoff as affected by width of vegetative filter strips. *Weed Sci.* 46, 475–479.
- Tranter G, Moeys J, Jarvis NJ, 2012. Digital soil mapping of soil properties at the County scale for pesticide fate modeling: Methodology and test case in Västra Götaland, Sweden. (pers. communication).
- UBA 2004. Bodenschutz und landwirtschaftliche Bodennutzung - Umweltwirkungen am Beispiel der konservierenden Bodenbearbeitung. Gemeinsame Fachveranstaltung der Gesellschaft für konservierende Bodenbearbeitung (GKB e.V.) des Umweltbundesamtes (UBA) und der Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft (FAL), Braunschweig 2003.
- UBA, 2011. EXPOSIT 3.0. Umweltbundesamt. Beta-Version vom 08.03.2011.
(http://www.bvl.bund.de/DE/04_Pflanzenschutzmittel/03_Antragsteller/04_Zulassungsverfahren/07_Naturhaushalt/psm_naturhaush_node.html; 23.10.2014).
- Walker A, 1974. A simulation model for prediction of herbicide persistence. *J. Environ. Qual.* 3, 396-401.
- Wang Z, Wu L, Harter T, Lu J, Jury WA, 2003. A field study of unstable preferential flow during soil water redistribution. *Water Resources Research* 39(4), 1075-1089.
- White AB, Kumar P, Saco PM, Rhoads BL, Yen BC, 2004. Hydrodynamic and geomorphologic dispersion: scale effects in the Illinois River Basin. *J. Hydrol.* 288, 237-257.
- Williams JR, 1975. Sediment Yield Prediction with Universe Equation Using Runoff Energy Factor. In: U.S. Department of Agriculture: Present and Prospective Technology for Predicting Sediment Yields and Sources. Washington, D.C. ARS-S-40, 244-252.
- Wischmeier WH, Smith DD, 1978. Predicting rainfall erosion losses – A guide to conservation planning. *Agriculture Handbook No. 537*, U.S. Department of Agriculture, Washington, D.C., 58 p.
- Wogram J, 1996. Zur Ökologie des Dreistachligen Stichlings (*Gasterosteus aculeatus L.*) in Agrarfließgewässern. Diploma thesis, Technical University of Braunschweig.
- Wösten JHM, Lilly A, Nemes A, Le Bas C, 1998. Using existing soil data to derive hydraulic parameters for simulation models in environmental studies and in land use planning. Report 156, DLO-Staring Centre, Wageningen, NL, 104 p.
(http://eusoils.jrc.ec.europa.eu/ESDB_Archive/eusoils_docs/other/Hypres.pdf; 10.11.2014).
- Zimmerling B, 2004. Berechnungsversuche zum Infiltrationsverhalten von Ackerböden nach Umstellung der konventionellen auf konservierende Bodenbearbeitung. *Horizonte Herrenhäuser Forschungsbeiträge zur Bodenkunde*, Band 15. Diss. Univ. Hannover, 183 S., Der Andere Verlag Osnabrück.

Anhang

Tabellen und Methodenbeschreibungen

A1 Einzelergebnisse der Vergleichsrechnungen der PECmax nach EXPOSIT, FOCUSsw und GERDA

Tab. A1-1: Ökotoxikologische Daten und RAC-Werte (Regulatory Acceptable Concentration) für die in den Vergleichsrechnungen verwendeten Beispielsubstanzen. Die für die minimale RAC relevanten Toxizitätsdaten sind fett gesetzt.
Zu den physiko-chemischen Eigenschaften und den Anwendungsdaten der Beispielsubstanzen s. Tab. I.5-1 und I.5-2 im Hauptteil.

Example Substanz	Ecotoxicological data										
	Acute		Chronic				Mesocosm	RAC			
	Fish LC50 (mg/L)	Invertebrate EC50 (mg/L)	Algae EC50 (mg/L)	Lemna EC50 (mg/L)	Fish NOEC (mg/L)	Invertebrate NOEC (mg/L)	NOEAEC (mg/L)	Tier 1 RAC _{sw,ac} (µg/L)	Tier 1 RAC _{sw,ch} (µg/L)	ERO-RAC _{sw Mesocosm} (µg/L)	Min RAC (µg/L)
FOCUS_1	0,115	0,41	1,4	--	--	0,11		1,15	11		1,15
FOCUS_2	11	87	0,043	0,02	0,25	0,04		110	2		2
FOCUS_3	18	<100	9,8	12,3	0,2	0,1		180	10		10
FOCUS_4	0,00026	0,00025	>9,1	--	0,000032	0,0000041		0,0025	0,00041		0,00041
FOCUS_5	1,9	>5	0,014	1,4	0,3	0,648		19	1,4		1,4
FOCUS_6	14,3	>100	49,8	12,3	0,2	0,1		143	10		10
FOCUS_6M	39	>49	>45	--	--	--		390			390
FOCUS_7	>18	4	>1,02	--	0,05	1,95		40	5		5
UBA_1	18	0,58	0,026	0,031	1	0,12		5,8	2,6		2,6
UBA_2							0,0003			0,1	0,1
UBA_3	3,14	8,69	1,19	0,0043	0,01	0,63		31,4	0,43		0,43
UBA_4a	4,4	2,79	3,8	0,144	0,012	0,01		27,9	1		1
UBA_4b	4,4	2,79	3,8	0,144	0,012	0,01		27,9	1		1
UBA_5	0,21	0,000016	>0,3	n,a,	0,00025	0,000006		0,00016	0,0006		0,00016

UBA_6	0,098	0,68	>10	n,a,	n,a,	0,002		0,98	0,2		0,2
-------	-------	------	-----	------	------	-------	--	------	-----	--	-----

Tab. A1-2: **RAC und PECmax-Werte [µg/L]** für die Beispielsubstanzen bzw. -anwendungen nach EVA (ohne Drift-reduzierende Technik) und EXPOSIT. PECmax nach EVA werden für Flächenkulturen für mindestens 1 m Abstand und für Raumkulturen für mindestens 3 m Abstand berechnet. Zur Berechnung der PEC-Werte s. Screenshots der EVA- und EXPOSIT-Anwendungen im Anhang A12. Verflüchtigung ist nur für die Substanzen FOCUS_7, UBA_2 und UBA_6 relevant.

Substanz	RAC	EVA Drift and Volatilization						EXPOSIT Runoff with buffers**				EXPOSIT Drainage*
		1 m	3 m	5 m	10 m	15 m	20 m	No buffer	5 m buffer	10 m buffer	20 m buffer	
		PECmax (µg/l) -										
FOCUS_1	1,15							8,97	7,78	6,67	4,67	6,63
FOCUS_2	2	9,23	-	1,90	0,97	0,67	0,50	7,22	6,26	5,36	3,85	2,98
FOCUS_3	10	9,23	-	1,90	0,97	0,67	0,50	1,26	1,09	0,93	0,65	2,86
FOCUS_4	0,00041	-	1,22	0,83	0,49	0,23	0,12	0,20***	0,18	0,06	0,03	0,0018
FOCUS_5	1,4	-	2,40	1,07	0,36	0,19	0,12	1,50	1,30	1,11	0,78	0,03
FOCUS_6	10	3,69		0,76	0,39	0,27	0,20	2,81	2,44	2,09	1,46	3,57
FOCUS_6M	390	-	-	-	-	-	-	0,24				0,33
FOCUS_7	5	-	20,91	9,82	3,66	2,07	1,39	1,14	0,99	0,85	0,59	0,41
UBA_1	2,6	13,85	-	2,85	1,45	1,00	0,75	10,66	9,24	7,92	5,54	13,53
UBA_2	0,1	14,92	-	4,83	3,09	2,24	1,70	2,24	1,94	1,66	1,16	0,33
UBA_3	0,43	1,77	-	0,35	0,18	0,12	0,09	0,49	0,42	0,36	0,25	0,01
UBA_4a	1	3,89	-	0,77	0,39	0,26	0,20	0,36	0,28	0,24	0,17	0,14
UBA_4b	1	-	6,72	2,99	0,99	0,53	0,33	0,28	0,24	0,21	0,15	0,12
UBA_5	0,00016	0,10	-	0,019	0,010	0,007	0,005	0,12***	0,10	0,04	0,02	0,01
UBA_6	0,2		40,77	18,70	6,61	3,60	2,37	10,78	9,34	8,00	5,60	3,91

*) Ergebnis für EXPOSIT Drainage für Timing „Sp/Su“ oder „Au/Wi“ gemäß den Anwendungsdaten für die Substanz (s. Tab. I.5.2)

RAC: Regulatory Acceptable Concentration

GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

**)PEC(Exposit) = PEC(Runoff)

***) PEC(Exposit) = PEC(Gesamtaustrag = Runoff + Erosion)

Tab. A1-3: Exposure Toxicity Ratios (ETR) für die Beispielsubstanzen bzw. -anwendungen nach EVA (ohne Drift-reduzierende Technik) und EXPOSIT.

PECmax nach EVA werden für Flächenkulturen für mindestens 1 m Abstand und für Raumkulturen für mindestens 3 m Abstand berechnet.

Substanz	EVA Drift und Volatilization						EXPOSIT Runoff mit Pufferstreifen				EXPOSIT Drainage*
	1 m	3 m	5 m	10 m	15 m	20 m	No buffer	5 m buffer	10 m buffer	20 m buffer	
	ETR										
FOCUS_1							7,8	6,8	5,8	4,1	5,8
FOCUS_2	4,6	-	1,0	0,5	0,3	0,3	3,6	3,1	2,7	1,9	1,5
FOCUS_3	0,9	-	0,2	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,3
FOCUS_4	-	2967,5	2021,3	1200,2	564,0	281,5	487,8	439,0	146,3	73,2	4,5
FOCUS_5	-	1,7	0,8	0,3	0,1	0,1	1,1	0,9	0,8	0,6	0,0
FOCUS_6	0,4	-	0,1	0,0	0,0	0,0	0,3	0,2	0,2	0,1	0,4
FOCUS_6M	-	-	-	-	-	-	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
FOCUS_7	-	4,2	2,0	0,7	0,4	0,3	0,2	0,2	0,2	0,1	0,1
UBA_1	5,3	-	1,1	0,6	0,4	0,3	4,1	3,6	3,0	2,1	5,2
UBA_2	149,2	-	48,3	30,9	22,4	17,0	22,4	19,4	16,6	11,6	3,3
UBA_3	4,1	-	0,8	0,4	0,3	0,2	1,1	1,0	0,8	0,6	0,0
UBA_4a	3,9	-	0,8	0,4	0,3	0,2	0,4	0,3	0,2	0,2	0,1
UBA_4b	-	6,7	3,0	1,0	0,5	0,3	0,3	0,2	0,2	0,2	0,1
UBA_5	606,9	-	119,8	61,2	40,8	30,6	750,0	625,0	250,0	125,0	62,5
UBA_6	-	203,9	93,5	33,1	18,0	11,8	53,9	46,7	40,0	28,0	19,6

*) Ergebnis für EXPOSIT Drainage für Timing „Sp/Su“ oder „Au/Wi“ gemäß den Anwendungsdaten für die Substanz (s. Tab. I.5.2)

Tab. A1-4: PECmax-Werte [$\mu\text{g/L}$] für die Beispielanwendungen nach GERDA Step 3 und Step 4 unter Berücksichtigung von Risikominderung

Substanz	GERDA (Step 3)				GERDA (Step 4) mit 10 m VFS*				GERDA (Step 4) mit 20 m VFS*				GERDA (Step 4) mit 20 m VFS* und 90 % driftmindernde Technik			
	Drainage		Runoff		Drainage		Runoff		Drainage		Runoff		Drainage		Runoff	
	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream
PECmax ($\mu\text{g/L}$)																
FOCUS_1	0,92	0,59	56,60	51,19	0,92	0,59	26,63	25,40	0,92	0,59	22,38	23,00	0,92	0,59	22,38	23,00
FOCUS_2	5,33	4,98	46,07	41,71	0,83	0,95	20,35	19,25	0,45	0,53	16,91	14,77	0,05	0,05	16,86	14,77
FOCUS_3	6,45	5,74	14,63	20,93	0,85	0,97	9,83	13,61	0,46	0,54	8,82	13,02	0,05	0,05	8,82	13,02
FOCUS_4	0,98	1,08	0,98	1,08	0,27	0,30	0,27	0,30	0,07	0,08	0,07	0,08	0,01	0,01	0,01	0,01
FOCUS_5	1,29	1,29	1,76	1,33	0,18	0,21	0,67	0,48	0,08	0,09	0,57	0,37	0,01	0,01	0,57	0,37
FOCUS_6	2,58	2,30	13,09	16,46	0,34	0,39	6,03	5,77	0,19	0,22	3,77	4,70	0,02	0,02	5,48	4,70
FOCUS_6M	0,34	0,22	0,01	0,01	0,34	0,22	0,00	0,00					0,34	0,22	0,00	0,00
FOCUS_7	13,17	12,90	14,46	12,90	1,85	2,07	4,68	4,11	0,80	0,91	3,77	2,84	0,08	0,09	3,77	2,84
UBA_1	9,67	8,61	63,99	59,50	1,27	1,46	28,38	26,40	0,69	0,81	25,02	23,28	0,07	0,08	25,01	23,28
UBA_2	4,84	4,31	7,75	5,13	0,64	0,73	3,62	2,36	0,34	0,40	3,43	2,21	0,03	0,04	3,43	2,21
UBA_3	0,81	0,72	1,49	1,08	0,11	0,12	0,67	0,43	0,06	0,07	0,60	0,40	0,01	0,01	0,60	0,40
UBA_4a	1,61	1,44	3,87	2,51	0,21	0,24	1,77	1,16	0,11	0,13	1,59	1,08	0,01	0,01	1,59	1,08
UBA_4b	1,73	1,72	1,73	1,72	0,24	0,28	0,31	0,28	0,10	0,12	0,25	0,21	0,01	0,01	0,25	0,21
UBA_5	0,05	0,04	0,05	0,04	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00	0,01	0,01
UBA_6	25,89	25,80	25,92	42,60	3,64	4,13	7,98	9,88	1,57	1,82	6,79	7,50	0,16	0,18	6,79	7,50

*) VFS: für Szenario Drainage: Abstand, Szenario Runoff: bewachsener Randstreifen (mindert sowohl Runoff als auch Spraydrift)

VFS für Szenario Runoff mit FWIDTH 50 m für ditch und 10 m für stream

Tab. A1-5: RAC und Exposure Toxicity Ratios (ETR) Werte für die Beispielanwendungen nach GERDA Step 3 und Step 4 unter Berücksichtigung von Risikominderung

Substanz	RAC (µg/L)	GERDA (Step 3)				GERDA (Step 4) mit 10 m VFS*				GERDA (Step 4) mit 20 m VFS*				GERDA (Step 4) mit 20 m VFS* und 90 % driftmindernde Technik			
		Drainage		Runoff		Drainage		Runoff		Drainage		Runoff		Drainage		Runoff	
		ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream	ditch	stream
ETR																	
FOCUS_1	1,15	0,8	0,5	49,2	44,5	0,8	0,5	23,2	22,1	0,8	0,5	19,5	20,0	0,8	0,5	19,5	20,0
FOCUS_2	2	2,7	2,5	23,0	20,9	0,4	0,5	10,2	9,6	0,2	0,3	8,5	7,4	0,0	0,0	8,4	7,4
FOCUS_3	10	0,6	0,6	1,5	2,1	0,1	0,1	1,0	1,4	0,0	0,1	0,9	1,3	0,0	0,0	0,9	1,3
FOCUS_4	0,00041	2398,8	2632,7	2398,8	2632,7	668,3	736,6	668,3	736,6	181,0	206,6	180,5	206,6	18,0	20,7	18,0	20,7
FOCUS_5	1,4	0,9	0,9	1,3	0,9	0,1	0,1	0,5	0,3	0,1	0,1	0,4	0,3	0,0	0,0	0,4	0,3
FOCUS_6	10	0,3	0,2	1,3	1,6	0,0	0,0	0,6	0,6	0,0	0,0	0,4	0,5	0,0	0,0	0,5	0,5
FOCUS_6M	390	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
FOCUS_7	5	2,6	2,6	2,9	2,6	0,4	0,4	0,9	0,8	0,2	0,2	0,8	0,6	0,0	0,0	0,8	0,6
UBA_1	2,6	3,7	3,3	24,6	22,9	0,5	0,6	10,9	10,2	0,3	0,3	9,6	9,0	0,0	0,0	9,6	9,0
UBA_2	0,1	48,4	43,1	77,5	51,3	6,4	7,3	36,2	23,6	3,4	4,0	34,3	22,1	0,3	0,4	34,3	22,1
UBA_3	0,43	1,9	1,7	3,5	2,5	0,2	0,3	1,6	1,0	0,1	0,2	1,4	0,9	0,0	0,0	1,4	0,9
UBA_4a	1	1,6	1,4	3,9	2,5	0,2	0,2	1,8	1,2	0,1	0,1	1,6	1,1	0,0	0,0	1,6	1,1
UBA_4b	1	1,7	1,7	1,7	1,7	0,2	0,3	0,3	0,3	0,1	0,1	0,3	0,2	0,0	0,0	0,3	0,2
UBA_5	0,00016	302,5	269,4	313,1	269,4	39,4	45,6	58,8	45,6	21,3	25,0	54,4	36,9	1,9	2,5	54,4	36,9
UBA_6	0,2	129,5	129,0	129,6	213,0	18,2	20,7	39,9	49,4	7,8	9,1	33,9	37,5	0,8	0,9	33,9	37,5

*) VFS für Szenario Drainage: Abstand, Szenario Runoff: bewachsener Randstreifen (mindert sowohl Runoff als auch Spraydrift);

GERDA (Geobased runoff, erosion, and drainage risk assessment for Germany)

VFS für Szenario Runoff mit FWIDTH 50 m für ditch und 10 m für stream

A2 Klassifizierung der Bodeneinheiten der BUEK1000 in FOOTPRINT Soil Types (FST) mit Hilfe des FST Selector

A2.1 Aufbau des FOOTPRINT Soil Type Selector

Alle in der BUEK auftretenden 1936 Bodenformen (das Analogon der STUs der SGDBE) wurden mit Hilfe des von John Hollis entwickelten Klassifikations-Flowcharts („FOOTPRINT Soil Type Selector“) in FOOTPRINT Soil Types (FST) klassifiziert. Das Konzept und die Systematik der FOOTPRINT Soil Types sind ausführlich in Kap. II.1.1 beschrieben. Der FOOTPRINT Soil Type Selector ist ein generischer Klassifikationsschlüssel zur Klassifizierung von Bodenprofilen in FOOTPRINT Soil Types. Der FOOTPRINT Soil Type Selector wurde im Rahmen des FOOTPRINT-Projekts in 3 verschiedenen Formaten umgesetzt.

1) Flow Chart in Word

- 4 Word-Dokumente
 - Full-FST_Mitigations Flow chart part1-final.doc
 - Full-FST_Mitigations Flow chart part2-final-revised06-03-12.doc
 - Full-FST_Mitigations Flow chart part3-final.doc
 - Full-FST_Mitigations Flow chart-part4-final.doc
- unpraktisch zu benutzen.

2) Flow Chart in Excel

- Datei « drop down menus-v9-revised06-03-12.xls » liefert die FHG und die Texturklassen
- das 4. Word-Dokument (Full-FST_Mitigations Flow chart-part4-final.doc; s.o.) liefert den organic matter code
- mäßig praktisch.

3) FOOTPRINT Soil Type Selector Software (FOOT-FS)

- Submodul der Software FOOT-FS v. 1.31 (Dubus et al., 2009)
- nutzerfreundlich
- Oberfläche enthält Begriffsdefinitionen
- nur in der englischen Originalversion verlässlich (französische und deutsche Übersetzungen enthalten Fehler).

Die erwähnten Dokumente bzw. die Software FOOT-FS v. 1.31 sind nicht veröffentlicht, liegen aber allen Mitgliedern des FOOTPRINT-Konsortiums vor und sind von diesem auf Anfrage erhältlich. Für dieses Projekt wurden sie von der Universität Gießen bereitgestellt.

Für die Klassifizierung der Böden der BUEK 200 bzw. BUEK 1000 in FOOTPRINT Soil Types wurde von Footways ein automatisierter Schlüssel in der Datenbank implementiert (s. Kap. II.1.2.3).

Struktur des Entscheidungsbaums:

- Eine Folge von 4 bis 7 Fragen führt zu den Einstufungen von
 - FOOTPRINT Soil Type (FST) → MACRO / PRZM

- o Flow Pathway Category (FPC) → Modell der Fließpfade (Sickerung, Oberflächenabfluss, Drainage, Zwischenabfluss) in der trockenen und in der feuchten Saison (s. Abb. II.1-1)

Hinweise zur Nutzung: (i) manchmal führen verschiedene Wege zum gleichen FST, und (ii) die Beziehung FST / FPC relation ist nicht 1 : 1 oder n : 1, sondern m : n.

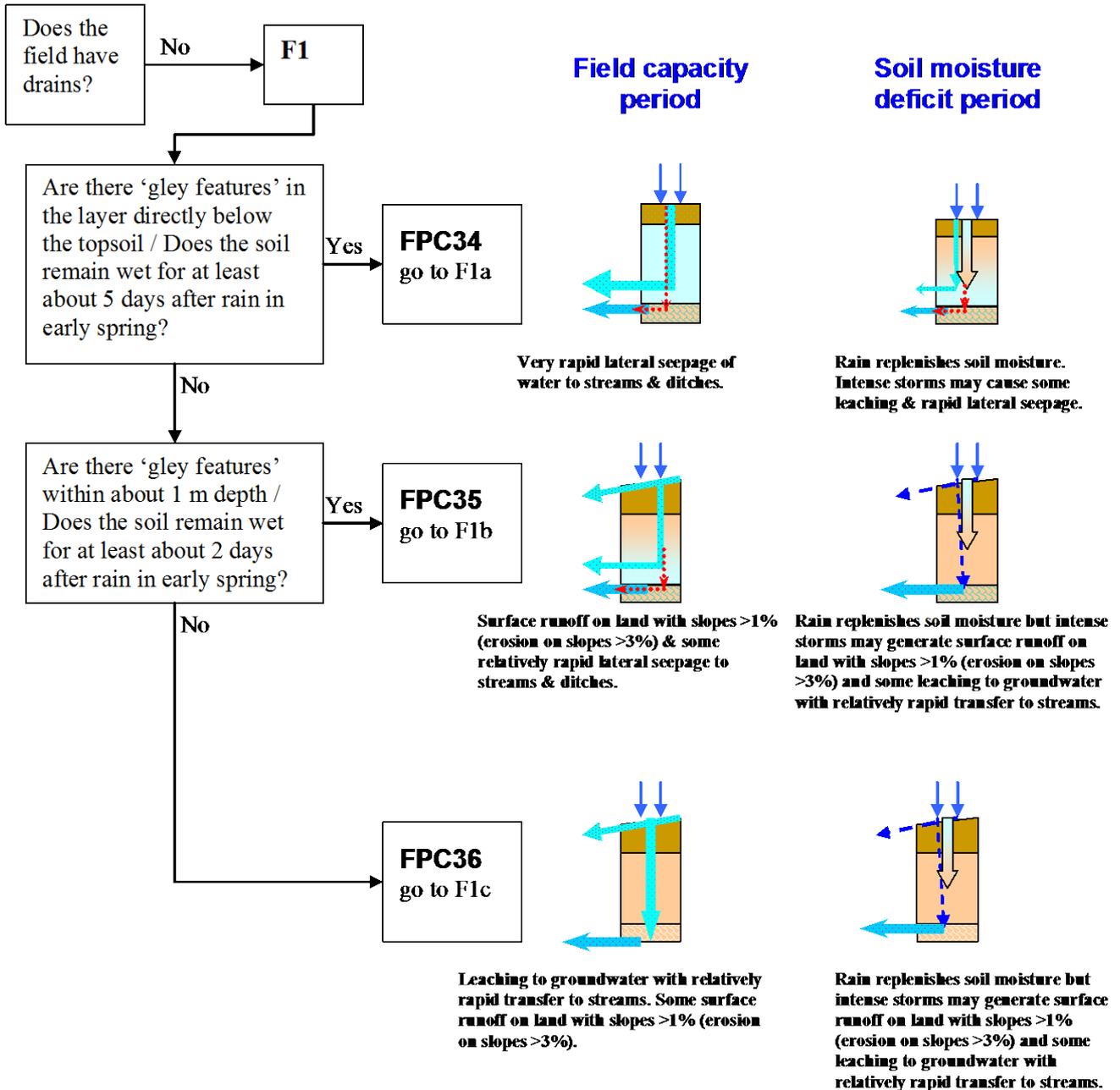


Abb. A2-1: Beispiele von Flow Pathway Categories (FPC)

A2.2 Klassifizierung der bodentypologischen Einheiten der BUEK1000 mit Referenzprofil in FOOTPRINT Soil Types

Für 432 der 1936 in der Tabelle Bodenform der BUEK1000 gelisteten BOFORM_IDs sind Referenzprofile vorhanden. Diese sind in der Tabelle Horizont zu finden. Da eine manuelle Klassifikation einer derartigen Anzahl von Bodenprofilen in FOOTPRINT Soil Types äußerst zeit- aufwändig und außerdem fehleranfällig wäre, wurde der FST-Flowchart von Footways in die Datenbank integriert, so dass eine automatisierte Klassifikation aller 432 Referenzprofile in FOOTPRINT Soil Types erfolgen konnte. (Hinweis: die Klassifikation der bodentypologischen Einheiten *ohne* Referenzprofil wird im Kap. A2.3 beschrieben).

Entscheidungsbaum zur Klassifizierung für jede BOFORM_ID

Die Klassifizierung eines Bodenprofils in einen FOOTPRINT Soil Type erfolgt über ein von John Hollis entwickeltes Flowchart (hierarchischer Entscheidungsbaum), das mittels einer Abfolge von (maximal) sieben Fragen einen FST zuweist, wobei die nächste Frage von der Beantwortung der vorherigen Frage abhängt. Es gibt 7 Typen von Fragen, von denen allerdings nicht immer alle gestellt werden. Um die Automatisierung der Klassifizierung zu erleichtern, wurden jedoch zunächst die 7 Fragen für alle 432 Referenzprofile beantwortet.

Frage 1: Substrat (Are your soils formed on ...)

Hier ist folgendes zu beachten:

- 1) Die ersten 4 Fragen dienen dazu, die Standorthydrologie (die von der FOOTPRINT Hydro- logic Group FHG, dem Anfangsbuchstaben des FST-Codes, angezeigt wird) zu ermitteln.
- 2) Da der Schlüssel hierarchisch ist, ist es besonders wichtig, die 1. Frage korrekt zu beantworten.
- 3) Der Begriff "Substrat" ist etwas vage und bedeutet nicht notwendigerweise, dass der Boden sich aus diesem Material entwickelt hat. Manchmal liegen mehrere geologische Schichten übereinander (z.B. Loess oder periglaziäre Lagen über anstehendem Gestein). Es ist daher am besten, „Substrat“ als Synonym zu „Untergrund“ zu betrachten.

Es werden 7 Substrattypen zur Auswahl gestellt (Tab. A2-1):

Tab. A2-1: Die sieben Substrattypen, die im FOOTPRINT Soil Type Selector zur Auswahl stehen.

Substrat- typ	Beschreibung (Englisch)	Beschreibung (Deutsch)
G	Recent alluvium or thick peat	Rezentes Alluvium oder dicker Torf
A	Either massive, pre-Quaternary clays or hard & non-porous rocks	Entweder massive, vor-quartäre Tone oder harte + nichtporöse Gesteine
B	Some combination of boulder clays, glacial till ¹⁾ , marls or mudstones	irgendeine Kombination von Geschiebelehm/ Geschiebemergel, Mergel oder Schlammstein
C	Loose sands, gravels or river terraces	Lose Sande, Kiese oder Flussterrassen
D	Sandy or granular limestone, or chalk or 'clay with flints' or deep permeable loam or clay, or loose volcanic materials	sandiger oder körniger Kalkstein oder Kreide oder "Ton mit Feuersteinen" oder tiefgründiger durchlässiger Lehm oder Ton oder lose vulkanische Materialien
E	Non-karstic limestone or sandstone	nicht-verkarsteter Kalkstein oder Sandstein

Substrat- typ	Beschreibung (Englisch)	Beschreibung (Deutsch)
F	Karstic limestone or volcanic rocks	verkarsteter Kalkstein oder vulkanisches Gestein (insbesondere Basalt)

) boulder clay und glacial till bezeichnet tatsächlich das gleiche: Geschiebelehm/Geschiebemergel
Obwohl die Substrattypen A-G nicht direkt bestimmten FHGs (L-Y) entsprechen, gibt es einige
allgemeingültige Beziehungen (Tab. A2-2).

Tab. A2-2: Korrespondenztable zwischen Substrattypen und FOOTPRINT Hydrologic Groups (FHG).

Substrate type	possible resulting FOOTPRINT hydrologic groups	answering the second question (presence of artificial drains?) with « yes » leads to
G	Q, P, O	Q
A	U, V, T, S, R	U, V
B	Y, X, W	Y
C	Q, O, L	Q
D	Q, P, O, L, N	Q
E	Q, P, O, L, N	Q
F	Q, P, O, M	Q

Aus Tabelle A2-2 ergeben sich eine Reihe von Schlussfolgerungen:

- Dann und nur dann, wenn Substrattyp A gewählt wird, wird der Boden als Boden mit undurchlässigem Substrat (kluffreies, nichtporöses Festgestein oder massiver Ton) klassifiziert
- Eine ganze Reihe von Substrattypen kann zu einem Boden mit Gley-Dynamik (O, P, Q) führen.
- Dann und nur dann, wenn Substrattyp B gewählt wird, wird der Boden als Boden mit langsam durchlässigem Substrat definiert. Folglich, wenn man Pseudogley-Dynamik mit temporärem Stauwasser (perched water table) auf wenig durchlässigen (aber nicht undurchlässigen) Horizonten widerspiegeln will, muss man B auswählen.
- Wenn Substrattyp G gewählt wird, wird der Boden immer als hydromorph mit Grundwasser im Profil behandelt (als Resultat von Auen-Dynamik oder Lage in einem Feuchtgebiet)
- Ausschließlich Substrattyp F führt zu Böden mit FHG M.

Weitere Empfehlungen von John Hollis (Entwickler des FOOTPRINT Soil Type Selectors):

- Für kluffreien Granit am besten A auswählen.
- Für geklüfteten Granit am besten E auswählen. Wenn der Granit jedoch zusätzlich stark verwittert ist, so dass nur noch weniger harte „Kerne“ verbleiben, die von stark verwittertem Material (Saprolith) umgeben sind, ist D wahrscheinlich die beste Wahl.
- Feinmaterial (z.B. Schluff) gemischt mit kiesigem Material: Wenn der Skelettanteil (>2 mm Durchmesser) größer als ca. 50 % ist, am besten C wählen, ansonsten D.

- Für geschichtetes hartes Gestein, z.B. Schiefer (schist) und Tonschiefer (slate), ist A am passendsten.
- Tonstein (shale) ist weicher als Tonschiefer und verwittert zu tonigem Material. Für Tonstein ist daher B angemessen.
- Aus dem Ausgangsmaterial Loess entstandene Böden (z.B. Pararendzinen, Parabraunerden) gehören normalerweise zu Substrattyp D. Loess ist implizit in der Beschreibung von D als „tiefgründiger durchlässiger Lehm“ enthalten.
- Wenn jedoch ein aus Loess entstandener Boden so stark lessiviert wurde, dass er schließlich wenig durchlässig und hydromorph geworden ist ((sekundärer) Pseudogley = Stagnic Luvisol), sollte Substrattyp B gewählt werden und *nicht* D. Mit D würde die Auswahl künstlicher Drainagen in Frage 2 zu FHG Q führen, was mit der tatsächlichen Standorthydrologie nicht zusammenpassen würde (Gleydynamik vs. Pseudogleydynamik).
- Unverwittertem Basaltgestein sollte wegen der großen Häufigkeit von Klüften und Spalten Substrattyp F zugewiesen werden.

Basierend auf diesen Empfehlungen wurden zunächst für jeden Bodenhorizont in der Tabelle „Horizont“ (Bestandteil der BEUK geodatabase, hier nicht wiedergegeben) der nutzungsdifferenzierten BUEK 1000 das Substrat (hier im Sinne von Ausgangsmaterial) bestimmt: Jeder in der BUEK auftretenden unique combination aus den Spalten GEOGEN (Kennzeichnung der Geogenese nach KA4) und HERK (petrographische Kennzeichnung des Bodenausgangsgesteins nach KA4) wurde nach Tabelle A2-3 ein Substrattyp nach FOOTPRINT (A - G) zugewiesen. In den wenigen Fällen, wo einer Kombination über Tabelle A2-5 kein eindeutiger Substrattyp zugewiesen werden konnte (die Fälle mit „or“ in Tabelle A2-5), wurde im Anschluss dem betreffenden Horizont manuell ein Substrattyp zugewiesen.

Tab. A2-3: Zuordnung des FOOTPRINT-Substrattyps (letzte Spalte) zu jeder Kombination von GEOGEN (Kennzeichnung der Geogenese nach KA4) und HERK (petrographische Kennzeichnung des Bodenausgangsgesteins n. KA4).

GEOGEN	geogen_description	HERK	HERK_description	Gruppe_Bodenausgangsgestein	FP_Q1 substrate
a	äolisch	Lo	Loess	äolische Lockergesteine	D
a	äolisch	Lol	Loesslehm	äolische Lockergesteine	D
a	äolisch	Los	Sandloess	äolische Lockergesteine	D
a	äolisch	Sa	Flugsand	äolische Lockergesteine	C
a	äolisch	Sa, h	äolisches Solumsediment	äolische Lockergesteine	C
a	äolisch	Slo	Loess-Sand	äolische Lockergesteine	C
c	zersetzt, verwittert	^c	Konglomerat	sedimentäres Festgestein	E
c	zersetzt, verwittert	^k	Kalkstein	sedimentäres Festgestein	F
c	zersetzt, verwittert	^mk	Mergelstein	sedimentäres Festgestein	B
c	zersetzt, verwittert	^s	Sandstein	sedimentäres Festgestein	E
c	zersetzt, verwittert	^t	Tonstein	sedimentäres Festgestein	B
c	zersetzt, verwittert	^to	Tongesteine (Pelite)	sedimentäres Festgestein	B
c	zersetzt, verwittert	^tsf	Tonschiefer	sedimentäres Festgestein	A
c	zersetzt, verwittert	+B	Basalt	magmatisches Festgestein	E
c	zersetzt, verwittert	+G	Granit	magmatisches Festgestein	E
f	fluvilimnogen	Lf	Auenlehm	fluvilimnogenes Lockergestein	G
f	fluvilimnogen	Sf	Auensand	fluvilimnogenes Lockergestein	G
ff	fluviatil (ohne Auen)	Gf	Terrassenschüttungen	fluvilimnogenes Lockergestein	C
ff	fluviatil (ohne Auen)	S	Sand	fluvilimnogenes Lockergestein	C
ff	fluviatil (ohne Auen)	Sf	Auensand	fluvilimnogenes Lockergestein	C

GEOGEN	geogen_description	HERK	HERK_description	Gruppe_Bodenausgangsgestein	FP_Q1 substrate
fg	glazifluviatil	Gf	Terrassenschüttungen	fluvilimnogenes Lockergestein	C or D
fg	glazifluviatil	sdr	Sander-Sand	fluvilimnogenes Lockergestein	C
fg	glazifluviatil	Sf	Auensand	fluvilimnogenes Lockergestein	C
fg	glazifluviatil	Sp	Geschiebedecksand	periglaziale Bildungen	C
fo	fluviatil (in Auen)	Lf	Auenlehm	fluvilimnogenes Lockergestein	G
fo	fluviatil (in Auen)	Lhf	Hochflutablagerungen	fluvilimnogenes Lockergestein	G
fo	fluviatil (in Auen)	Sf	Auensand	fluvilimnogenes Lockergestein	G
fo	fluviatil (in Auen)	Tf	Auenablagerungen, schluffig-tonig	fluvilimnogenes Lockergestein	G
ge	abgelagert als Endmoräne	Lg	Geschiebelehm	glazigenes Lockergestein	B
ge	abgelagert als Endmoräne	Mg	Geschiebemergel	glazigenes Lockergestein	B
ge	abgelagert als Endmoräne	Sg	Geschiebesand	glazigenes Lockergestein	B
ge	abgelagert als Endmoräne	Sp	Geschiebedecksand	periglaziale Bildungen	C
gm	abgelagert als Grundmoräne	Lg	Geschiebelehm	glazigenes Lockergestein	B
gm	abgelagert als Grundmoräne	Mg	Geschiebemergel	glazigenes Lockergestein	B
gm	abgelagert als Grundmoräne	Sg	Geschiebesand	glazigenes Lockergestein	B
gm	abgelagert als Grundmoräne	Sp	Geschiebedecksand	periglaziale Bildungen	B
mb	brackisch (tidal- brackisch)	lt	Lehmtone	Umlagerungsbildungen	G
mb	brackisch (tidal- brackisch)	ut	Schlufftone	Umlagerungsbildungen	G
mp	perimarin (tidal- fluviatil)	lt	Lehmtone	Umlagerungsbildungen	G
mp	perimarin (tidal- fluviatil)	lu	Lehmschluffe	Umlagerungsbildungen	G
mp	perimarin (tidal- fluviatil)	tu	Tonschluffe	Umlagerungsbildungen	G
mp	perimarin (tidal- fluviatil)	ut	Schlufftone	Umlagerungsbildungen	G
ms	marin (tidal-marin)	ls	Lehmsande	Umlagerungsbildungen	G
ms	marin (tidal-marin)	sl	Sandlehme	Umlagerungsbildungen	G
ms	marin (tidal-marin)	tu	Tonschluffe	Umlagerungsbildungen	G
ms	marin (tidal-marin)	us	Schluffsande	Umlagerungsbildungen	G
ms	marin (tidal-marin)	ut	Schlufftone	Umlagerungsbildungen	G
nd	diagenetisch verfestigt	^d	Dolomitstein	sedimentäres Festgestein	E
nd	diagenetisch verfestigt	^fs	Feinsandstein	sedimentäres Festgestein	E
nd	diagenetisch verfestigt	^k	Kalkstein	sedimentäres Festgestein	E
nd	diagenetisch verfestigt	^mk	Mergelstein	sedimentäres Festgestein	B
nd	diagenetisch verfestigt	^ms	Mittelsandstein	sedimentäres Festgestein	E
nd	diagenetisch verfestigt	^q	Quarzit	sedimentäres Festgestein	E
nd	diagenetisch verfestigt	^s	Sandstein	sedimentäres Festgestein	E
nd	diagenetisch verfestigt	^t	Tonstein	sedimentäres Festgestein	B

GEOGEN	geogen_description	HERK	HERK_description	Gruppe_Bodenausgangsgestein	FP_Q1 substrate
nd	diagenetisch verfestigt	^to	Tongesteine (Pelite)	sedimentäres Festgestein	B
nd	diagenetisch verfestigt	^tsf	Tonschiefer	sedimentäres Festgestein	A
nd	diagenetisch verfestigt	^u	Schluffstein	sedimentäres Festgestein	B
nm	magmatisch	+B	Basalt	magmatisches Festgestein	F
nm	magmatisch	+G	Granit	magmatisches Festgestein	A
nm	magmatisch	+Pl	Plutonite	magmatisches Festgestein	A
ns	sonstige Festgesteine	+VTb	Basischer Tuff	pyroklastisches Festgestein	E
nv	metamorph	*Gl	Glimmerschiefer	metamorphes Festgestein	A
nv	metamorph	*Gn	Gneis	metamorphes Festgestein	A
og	organogen	Hh	Hochmoortorf	organische Bildungen	G
og	organogen	Hn	Niedermoortorf	organische Bildungen	G
p	periglaziär	Sp	Geschiebedecksand	periglaziale Bildungen	B
pfl	solifluidal, solimixtiv	*Gn	Gneis	metamorphes Festgestein	D
pfl	solifluidal, solimixtiv	^fs	Feinsandstein	sedimentäres Festgestein	C
pfl	solifluidal, solimixtiv	^k	Kalkstein	sedimentäres Festgestein	D
pfl	solifluidal, solimixtiv	^mk	Mergelstein	sedimentäres Festgestein	B
pfl	solifluidal, solimixtiv	^ms	Mittelsandstein	sedimentäres Festgestein	C
pfl	solifluidal, solimixtiv	^q	Quarzit	sedimentäres Festgestein	B
pfl	solifluidal, solimixtiv	^s	Sandstein	sedimentäres Festgestein	C
pfl	solifluidal, solimixtiv	^t	Tonstein	sedimentäres Festgestein	B
pfl	solifluidal, solimixtiv	^to	Tongesteine (Pelite)	sedimentäres Festgestein	B
pfl	solifluidal, solimixtiv	^tsf	Tonschiefer	sedimentäres Festgestein	B
pfl	solifluidal, solimixtiv	^u	Schluffstein	sedimentäres Festgestein	B
pfl	solifluidal, solimixtiv	+B	Basalt	magmatisches Festgestein	B
pfl	solifluidal, solimixtiv	+G	Granit	magmatisches Festgestein	D
pfl	solifluidal, solimixtiv	Lo	Loess	äolische Lockergesteine	D
pfl	solifluidal, solimixtiv	Lol	Loesslehm	äolische Lockergesteine	D
pfl	solifluidal, solimixtiv	Lou	Schwemmoess	periglaziale Bildungen	D
pfl	solifluidal, solimixtiv	Slo	Loess-Sand	äolische Lockergesteine	D
pky	kryoturbat	*Gn	Gneis	metamorphes Festgestein	D
pky	kryoturbat	^d	Dolomitstein	sedimentäres Festgestein	C or D
pky	kryoturbat	^fs	Feinsandstein	sedimentäres Festgestein	D
pky	kryoturbat	^k	Kalkstein	sedimentäres Festgestein	B, C or D
pky	kryoturbat	^mk	Mergelstein	sedimentäres Festgestein	B
pky	kryoturbat	^ms	Mittelsandstein	sedimentäres Festgestein	C
pky	kryoturbat	^s	Sandstein	sedimentäres Festgestein	C
pky	kryoturbat	^t	Tonstein	sedimentäres Festgestein	B
pky	kryoturbat	^to	Tongesteine (Pelite)	sedimentäres Festgestein	B
pky	kryoturbat	^tsf	Tonschiefer	sedimentäres Festgestein	B
pky	kryoturbat	+B	Basalt	magmatisches Festgestein	B
pky	kryoturbat	+G	Granit	magmatisches Festgestein	D
pky	kryoturbat	+Pl	Plutonite	magmatisches Festgestein	B
pky	kryoturbat	+VTb	Basischer Tuff	pyroklastisches Festgestein	D
s	nicht verfestigt	lt	Lehmtone	Umlagerungsbildungen	D
s	nicht verfestigt	ut	Schlufftone	Umlagerungsbildungen	D
uk	kolluvial	tu	Tonschluffe	Umlagerungsbildungen	D

Da der Substrattyp im FST-Flowchart hauptsächlich zur Auswahl der unteren Randbedingung für die Modellierung mit MACRO benötigt wird (daher Substrat im Sinne von Untergrund), wurde in der Datenbank jedem der 432 Profile der Substrattyp des untersten Horizonts als Substrattyp (Antwort auf Frage 1) zugewiesen.

Frage 2: Vorhandensein künstlicher Drainagen

Hier wurde zunächst für jeden Bodenhorizont in Tabelle „Horizont“ der nutzungsdifferenzierten BUEK 1000 ein Grad an Hydromorphie (hydromorphy level; präziser: Ausprägungsgrad redoximorpher Merkmale wie z.B. Nassbleichung oder Rostfleckigkeit durch temporäre oder permanente Wassersättigung) zugewiesen:

- 0 = keine Hydromorphie
- 1 = leichte oder mäßige Hydromorphie
- 2 = starke Hydromorphie.

Dies geschah mittels der der genetischen Horizontbezeichnung nach KA 4 (AG Boden, 1994). Allen 281 verschiedenen Werten der genetischen Horizontbezeichnung HORIZ der Tabelle „Horizont“ wurde nach den Tabellen in Anhang A3 ein Hydromorphiegrad zugewiesen. Im Wesentlichen erhielten

- anhydromorphe Horizonte (z.B. Ah, Bv) einen Hydromorphiegrad von 0
- die meisten Übergangshorizonte mit einem anhydromorphen Anteil und einem hydromorphen Anteil (z.B. Al-Sw, Sd-Bt) einen Hydromorphiegrad von 1
- alle anderen Horizonte (z.B. Go, Gr, Sd) einen Hydromorphiegrad von 2.

Im Anschluss wurden in der Datenbank mittels SQL-Abfragen für jedes Profil in Tabelle „Bodenform“ der BUEK folgende Größen ermittelt:

- Bodentiefe, in der die Hydromorphie beginnt (level 1 oder 2) (Boolean OR)
- Bodentiefe, in der Hydromorphie level 1 beginnt
- Bodentiefe, in der Hydromorphie level 2 beginnt.

Im folgenden Schritt wurde jedem der 432 Profile das Attribut „Gedrängt“ oder „Nicht gedrängt“ nach folgenden Regeln zugewiesen:

- Landnutzungskategorien (NUTZ_NR) 23 (Grünland) oder 31 (Wälder) → nicht gedrängt
- Landnutzungskategorien 21 (Ackerflächen) oder 24 (landwirtschaftliche Flächen heterogener Struktur)
 - Beginn von Hydromorphie level 2 in ≤ 80 cm Bodentiefe → gedrängt
 - ansonsten nicht gedrängt.

Für andere Landnutzungskategorien als die o.g. vier Kategorien waren keine Profile definiert.

Die Beantwortung der Frage 2 lieferte 69 gedrängte Profile von 432.

Frage 3: Vorhandensein von Hydromorphiemerkmalen innerhalb von 40 bzw. 80 cm Tiefe

Hier gibt es drei Auswahlmöglichkeiten:

- 1) Gibt es Hydromorphiemerkmale in der Lage direkt unter dem Oberboden? Bleibt der Boden nach einem Regenereignis im frühen Frühjahr für mindestens ca. 5 Tage nass?
- 2) Gibt es Hydromorphiemerkmale innerhalb des obersten Meters (aber nicht direkt unter dem Oberboden)? Bleibt der Boden nach einem Regenereignis im frühen Frühjahr für mindestens ca. 2 Tage nass?
- 3) Keines von den obigen.

Gemäß der operationellen Definition von Oberboden und Unterboden als Bereich 0 - 40 cm bzw. 40 - 80 cm wurde die Frage in der Datenbank folgendermaßen umgesetzt:

- 1) Beginn von Hydromorphie (level 1 oder 2) in ≤ 40 cm Bodentiefe
- 2) Beginn von Hydromorphie (level 1 oder 2) in $> 40 - 80$ cm Bodentiefe
- 3) Keines von den obigen.

Falls Frage 2 (Drainage) mit "nein" beantwortet wurde, aber in Frage 3 Option 1) gewählt wurde, setzt der Flowchart sich über die Antwort „nicht gedränt“ hinweg und betrachtet den Boden als gedränt. Grund ist, dass der Flowchart von ackerbaulich genutzten Böden ausgeht. Böden, für die „Gibt es Hydromorphiemerkmale in der Lage direkt unter dem Oberboden / Bleibt der Boden nach einem Regenereignis im frühen Frühjahr für mindestens ca. 5 Tage nass?“ zutrifft, wären ohne Drainage nicht für Ackerbau geeignet. Analog ergibt der Flowchart niemals Böden mit FHG Z, weil ungedränter Torf ebenfalls nicht für Ackerbau geeignet ist.

Frage 4: Vorhandensein von hartem Gestein oder Schutt innerhalb von 40 bzw. 80 cm Tiefe

Hier gibt es ebenfalls drei Auswahlmöglichkeiten:

- 1) Beginn von hartem Gestein oder Schutt („solid rock or rock rubble“) in ≤ 40 cm Bodentiefe
- 2) Beginn von hartem Gestein oder Schutt in $> 40 - 80$ cm Bodentiefe
- 3) Keines von beiden.

Zunächst wurde jedem Bodenhorizont in Tabelle Horizont der nutzungsdifferenzierten BUEK 1000 ein Wert für das Attribut „hartes Gestein oder Schutt?“ zugewiesen:

- 0 = Sonstige
- 1 = hartes Gestein oder Schutt.

Als „hartes Gestein oder Schutt“ zählen nur Horizonte, die nicht grabbar sind. Im deutschen Bodenklassifikationssystem nach KA 4 (AG Boden, 1994) sind das ausschließlich

- C-Horizonte mit vorangestellten m (mC), z.B. cmC oder emC
- Übergangshorizonte mit dominantem mC-Charakter, z.B. Sd-mC.

Im Anschluss wurden in der Datenbank mittels SQL-Abfragen für jedes Profil in Tabelle Bodenform der Beginn von „hartem Gestein oder Schutt“ ermittelt (als Obergrenze des obersten Horizonts, der als „hartes Gestein oder Schutt“ klassifiziert wurde).

Fragen 5 und 6: Textur des Oberbodens bzw. des Unterbodens

Die Grundidee für die Ermittlung der Textur von Ober- und Unterboden zur Beantwortung von Fragen 5 und 6 ist folgende (John Hollis, persönliche Mitteilung, 2012):

„The idea is to split the soil profile into two broad sections: 0 to 40 cm and 40 to 80 cm or rock. However, for those horizons that span the 40 cm depth, it may be best to allocate them to an ‘upper’ or ‘lower’ section depending on which layer they most resemble texturally. You should then use a thickness-weighted average texture for each section, unless this produces a texture that is not reflected in any of the horizons used to characterize the section, in which case you have some significantly contrasting textures within the section and you should apply a ‘common-sense’ approach to allocating upper and lower textures.“

Zunächst wurden alle Horizonte in der Tabelle „Horizont“ als „Oberboden“, „Unterboden“ oder „keines davon“ klassifiziert:

- 1) WENN Obergrenze in ≥ 0 Tiefe UND Untergrenze in ≤ 40 cm Tiefe UND NICHT „hartes Gestein oder Schutt“ \rightarrow Oberboden
- 2) WENN Untergrenze in ≥ 40 Tiefe UND NICHT „hartes Gestein oder Schutt“ \rightarrow Unterboden (damit werden auch Horizonte als Unterboden klassifiziert, die eigentlich schon zum Untergrund gehören, also z.B. Cv-Horizonte; das ist aber hier kein Problem, da nur Tiefen ≤ 80 zur Texturberechnung herangezogen werden)
- 3) WENN Obergrenze in < 40 cm Tiefe UND Untergrenze in > 40 cm Tiefe UND Mittelpunkt in < 40 cm Tiefe UND NICHT „hartes Gestein oder Schutt“ \rightarrow Oberboden
- 4) WENN Obergrenze in < 40 cm Tiefe UND Untergrenze in > 40 cm Tiefe UND Mittelpunkt in ≥ 40 cm Tiefe UND NICHT „hartes Gestein oder Schutt“ \rightarrow Unterboden.

Im Anschluss wurde für jeden Horizont die Textur in internationalen Partikelgrößenklassen (Schluff = 2 - 50 μm , Sand = 50 - 2000 μm) ermittelt, unter Verwendung einer Korrespondenztabelle (Anhangtab. A2-6), die für jede Texturklasse (= Bodenart) der KA 4 das Klassenmittel der Textur im System 2 - 50 - 2000 μm angibt.

Diese Tabelle wurde bereits ca. 2002 erstellt nach folgender Methodik

- 1) Berechnung der Klassenmittelwerte von Sand, Schluff und Ton (deutsches System: 2-63-2000 μm) aus den Texturklassen in Tabelle Horizont (Spalte FEINBOD) unter Benutzung des Texturdreiecks in der KA4 (AG Boden, 1994)
- 2) Umrechnung der Texturen vom deutschen System ins USDA/FAO-System (2-50-2000 μm). Die Interpolation der Fraktion 2-50 μm wurde freundlicherweise von Attila Nemes (USDA-ARS Hydrology & Remote Sensing Lab, Beltsville, MD, USA) und Henk Wösten (Alterra, NL) mit Hilfe der in Nemes et al. (1999) beschriebenen Ähnlichkeitsprozedur und der HYPRES-Datenbank (Wösten et al., 1998) durchgeführt.

Im nächsten Schritt wurden für jedes Bodenprofil tiefengewichtete Mittel der Textur berechnet:

- Oberboden: Mittel über alle als „Oberboden“ klassifizierte Horizonte; Wichtungsfaktor: Horizontmächtigkeit (Untergrenze – Obergrenze)
- Unterboden: Mittel über alle als „Unterboden“ klassifizierte Horizonte; Wichtungsfaktor: Horizontmächtigkeit bis maximal 80 cm Tiefe (Min(80 cm, Untergrenze) – Obergrenze).

Das Problem ggf. auftretender kontrastierender Texturen in aufeinanderfolgenden Horizonten wurde, um die Automatisierung zu ermöglichen, vernachlässigt. Dies ist nach Meinung der Autoren vertretbar, da die Texturklassen der FAO ohnehin sehr grob sind. Eine Mittelung über etwaige Horizonte mit stark kontrastierenden Texturen würde fast immer zu Texturklasse 2 (mittel) oder 4 (fein) führen.

Schließlich wurden, anhand der berechneten tiefengewichteten Mittel der Textur, jedem Profil Texturklassen nach WRB (FAO, 1998) für den Oberboden und den Unterboden zugewiesen (s. Kap. II.2.1.2.2). Oberböden und Unterböden, für die keine mittlere Textur berechnet werden konnte, sind automatisch organisch (Klasse 6 = Torf), da Horizonte aus hartem Gestein oder Schutt bereits vorher bei der Klassifikation in „Oberboden“ oder „Unterboden“ ausgeschlossen wurden (s.o.). Tatsächlich tritt Texturklasse 6 für Ober- oder Unterboden nur bei Bodenprofilen mit bodensystematischer Einheit Hochmoor oder Niedermoor auf, und umgekehrt.

Frage 7: Tiefenprofil der organischen Bodensubstanz

Hier treten im Klassifikations-Flowchart Full-FST_Mitigations Flow chart-part4-final.doc 10 verschiedene Entscheidungsbäume auf (vgl. Abb. A2-2).

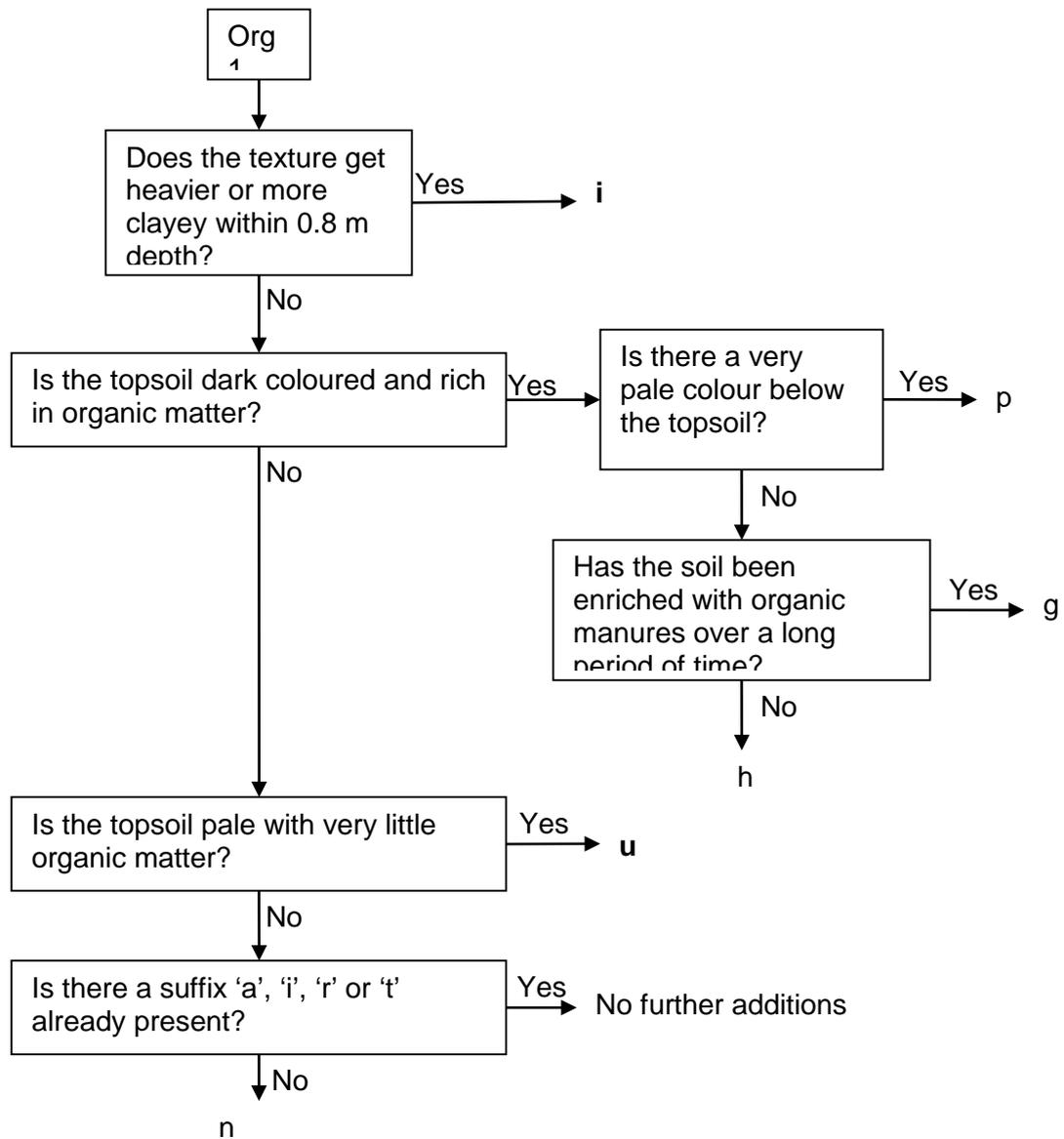


Abb. A2-2: Organic matter tree Nr. 1 (aus Full-FST_Mitigations Flow chart-part4-final.doc)-

Je nach Beantwortung der vorherigen Fragen kommt ein anderer organic matter tree (oder gar keiner) zum Einsatz. Die zehn Entscheidungsbäume beinhalten aber nur eine begrenzte Anzahl von Bausteinen, d.h. einzelnen Fragen (Tab. A2-4):

Tab. A2-4: Gegenüberstellung der Bausteine der Entscheidungsbäume für den organic matter code (organic matter trees) in der Originalversion und der deutschen Übersetzung.

Nr.	Text (Deutsch)	Originalversion (Englisch)
1	Wird die Textur innerhalb der obersten 80 cm schwerer oder toniger? ¹⁾	Does the texture get heavier or more clayey within 0.8 m depth?
2	Ist der Boden über einen langen Zeitraum hinweg mit organischen Düngern (Mist) angereichert worden?	Has the soil been enriched with organic manures over a long period of time?
3	Ist der Boden auf vulkanischen ¹⁾ Materialien entstanden?	Is the soil formed on volcanic materials?
4	Ist der Oberboden ²⁾ dunkel und reich an organischer Substanz?	Is the topsoil dark coloured and rich in organic matter?
5	Ist der Oberboden bleich mit sehr wenig organischer Substanz?	Is the topsoil pale with very little organic matter?
6	Gibt es eine bleiche Lage unerhalb des Oberbodens oder der Torfdecke?	Is there a pale coloured layer below the topsoil or peaty top?
7	Tritt unterhalb des Oberbodens eine sehr bleiche Farbe auf?	Is there a very pale colour below the topsoil?
8	Ist ein Suffix a, i, r oder t bereits vorhanden?	Is there a suffix a, i, r or t already present?

¹⁾ Diese Frage zielt auf Tonverlagerung (Lessivierung) ab

²⁾ Diese Frage ist für Andosols gedacht. „Vulkanisches Material“ bezieht sich nur auf pyroklastisches Material, nicht auf Lava. Für Basalt ist die Frage somit mit nein zu beantworten.

³⁾ Oberboden bedeutet hier, anders als bei der Texturberechnung, im Wesentlichen „Ah-Horizont“.

Die Fragen wurden folgendermaßen als Regeln in der Datenbank umgesetzt (Tab. A2-5):

Tab. A2-5: Umsetzung der Bausteine der organic matter trees in der BUEK.

Frage	Entsprechende Regel	Erklärung
Wird die Textur innerhalb der obersten 80 cm schwerer oder toniger?	Enthält das Feld REFERENZ-PROFIL in Tabelle BODENFORM den Substring "LL" or "LF" (Großbuchstaben)?	Bodensystematische Einheit des Profils = „Parabraunerde“ oder „Fahlerde“; oder Übergangssubtypen anderer Böden mit Parabraunerde- oder Fahlerdeigenschaften
Ist der Boden über einen langen Zeitraum hinweg mit organischen Düngern (Mist) angereichert worden?	Enthält das Feld REFERENZ-PROFIL in Tabelle BODENFORM den Substring "YE" (Großbuchstaben)?	Bodensystematische Einheit des Profils = „Plaggenesch“; oder Übergangssubtypen anderer Böden mit Plaggenescheigenschaften
Ist der Boden auf vulkanischen Materialien entstanden?	Grundsätzlich Nein.	Es war kein Profil unter den 432 mit nennenswertem Anteil an pyroklastischem Ausgangsmaterial, daher keine Regel nötig.
Ist der Oberboden dunkel und reich an organischer Substanz?	Hat das Feld Humositätsgrad in Tabelle Horizont für den Horizont mit OTIEF = 0 einen Wert ≥ 4 ?	Gehalt an organischer Substanz im obersten Mineralbodenhorizont > 4 % (Klasse h4 oder höher)?
Ist der Oberboden bleich mit sehr wenig organischer Substanz?	Hat das Feld Humositätsgrad in Tabelle Horizont für den Horizont mit OTIEF = 0 einen Wert ≤ 1 ?	Gehalt an organischer Substanz im obersten Mineralbodenhorizont < 1 % (Klasse h1 oder niedriger)?
Gibt es eine bleiche Lage unerhalb des Oberbodens oder der Torfdecke?	Hat das Feld Humositätsgrad in Tabelle Horizont für den Horizont mit dem kleinsten positiven OTIEF	Gehalt an organischer Substanz im zweiten Mineralbodenhorizont um mindestens eine Klasse niedriger als

Frage	Entsprechende Regel	Erklärung
Tritt unterhalb des Oberbodens eine sehr bleiche Farbe auf?	einen Wert, der um mindestens eine Einheit kleiner ist als für den Horizont mit OTIEF = 0?	im obersten?
Ist ein Suffix a, i, r oder t bereits vorhanden?	Kontrolle des vorläufigen FST codes als Resultat des Excel-Flowcharts	

Technische Implementierung des Entscheidungsbaums

Der Entscheidungsbaum der Klassifikation der Bodenprofile der BUEK in FSTs wurde von Benjamin Grand-Perret (Footways S.A.S., Orleans, FR) mittels SQL und VBA umgesetzt, auf Basis

- der bereits beantworteten Fragen 1 - 6 (siehe vorstehende Abschnitte),
- den formulierten Regeln für die Bausteine der organic matter trees (Tabelle A2-7),
- dem in Access importierten Excel-Flowchart von John Hollis (drop down menus-v9-revised06-03-12.xls), und
- den 10 organic matter trees (Full-FST_Mitigations Flow chart-part4-final.doc).

A2.3 Klassifizierung der bodentypologischen Einheiten der BUEK1000 ohne Referenzprofil in FOOTPRINT Soil Types

Da die Benutzung des FST-Flowcharts die Verfügbarkeit eines Bodenprofils voraussetzt, war für die bodentypologischen Einheiten (BOFORM_ID) *ohne* Referenzprofil war nur eine extrapolative Klassifikation möglich; was immerhin 1504 von 1936 Profilen betrifft.

Die 1504 BOFORM_IDs ohne Referenzprofil gehören 90 verschiedenen Bodentypen nach KA4 an (n:1-Beziehung). Die Klassifizierung wurde für jeden Bodentyp (= bodensystematische Einheit) nach KA4 folgendermaßen vorgenommen (Ergebnisse siehe Anhang A5):

- Wenn unter den 432 Referenzprofilen Profile mit der gleichen bodensystematischen Einheit (Spalte REFERENZPROFIL) wie der zu klassifizierenden Einheit waren und damit FST-Klassifizierungen vorlagen, wurde einer der zur Auswahl stehenden FSTs ausgewählt. Für Böden wie Braunerde und Parabraunerde, die vielen verschiedenen FSTs entsprechen können, stellt die Auswahl eines bestimmten FSTs zwangsläufig eine erhebliche Fehlerquelle für die Flächenverteilung dar.
- Wenn von den zur Auswahl stehenden FSTs keiner passend schien oder überhaupt kein FST zur Auswahl stand, wurde per *expert judgement* (Durchführung: Stefan Reichenberger) anhand der typischen Horizontabfolge und der Definition des Bodentyps in der KA4 (AG Boden, 1994) ein typischer und konsistenter FST ermittelt; beispielsweise sollten Pseudogleye immer mit Y anfangen und Gleye immer mit Q.

Im Anschluss wurde jeder der 1504 BOFORM_IDs ohne Referenzprofil ein FST anhand der Korrespondenztabelle in Tabelle A2-6 zugewiesen.

Tab. A2-6: Korrespondenztabelle zwischen bodensystematischen Einheiten der KA4 und FSTs (nur benutzt für BOFORM_IDs ohne Referenzprofil).

Bodensystematische Einheit nach Bodenkundlicher Kartieranleitung (KA4)		zugeordneter FOOTPRINT Soil Type (FST)
Kürzel	Name	
ABn	Norm-Vega	P22a
AQn	Norm-Paternia	O11a
ATn	Norm-Tschernitza	P22ah
AZn	Norm-Kalkpaternia	O11a
BB\VV	Braunerde über Fersiallit	N34i
BB\VW	Braunerde über Ferrallit	N24i
BB\DD	flache Braunerde über Pelosol	W24i
BB\VV	flache Braunerde über Fersiallit	N34i
BB\VW	flache Braunerde über Ferrallit	N24i
BB-CF	Braunerde-Terra fusca	L45ir
BB-DD	Braunerde-Pelosol	W24i
BB-GG	Braunerde-Gley	Q11n
BB-LL	Braunerde-Parabraunerde	N23ih
BBn	Norm-Braunerde	N22n
BB-PP	Braunerde-Podsol	L11p
BBp-PP	Acker-Braunerde-Podsol	L11h
BB-RN	Braunerde-Ranker	L20r
BB-RQ	Braunerde-Regosol	L11n
BB-RR	Braunerde-Rendzina	L22r
BB-SS	Braunerde-Pseudogley	Y12i
BB-TT	Braunerde-Tschernosem	N33h
CFn	Norm-Terra fusca	L50r
CF-RR	Terra fusca-Rendzina	L40r
DDn	Norm-Pelosol	W44n
DD-SS	Pelosol-Pseudogley	Y44i
GG	Gley	Q22n
GGa	Auengley	Q22a
GG-AB	Gley-Vega	P44a
GG-BB	Gley-Braunerde	P22n
GGh	Humusgley	Q22h
GGn	Norm-Gley	Q22n
GG-PP	Gley-Podsol	O11p
GG-SS	Gley-Pseudogley	Y12i
GG-TT	Gley-Tschernosem	P33h
GH	Moorgley	Q62t
GHn	Norm-Moorgley	Q62t
GMn	Norm-Anmoorgley	Q11p
GNn	Norm-Nassgley	Q22h
HHn	Norm-Hochmoor	Q66t
HH-YU	Tiefumbruchboden aus Hochmoor	Q66t
HNn	Norm-Niedermoor	Q66t
HNu	Übergangsmoor	Q66t
HN-YU	Tiefumbruchboden aus Niedermoor	Q66t
LFn	Norm-Fahlerde	W12i

Bodensystematische Einheit nach Bodenkundlicher Kartieranleitung (KA4)		zugeordneter FOOTPRINT Soil Type (FST)
Kürzel	Name	
LF-SS	Fahlerde-Pseudogley	Y12i
LL-BB	Parabraunerde-Braunerde	N22i
LLd	Bänderparabraunerde	W22i
LLn	Norm-Parabraunerde	N33i
LL-PP	Parabraunerde-Podsol	N12i
LL-SS	Parabraunerde-Pseudogley	Y22i
LL-TT	Parabraunerde-Tschernosem	N22ih
MCb	Brackkalkmarsch	Q22a
MCf	Flusskalkmarsch	Q22a
MCn	Norm-Kalkmarsch	Q22a
MKn	Norm-Knickmarsch	Q24a
MNn	Norm-Kleimarsch	Q22a
MOHN	flache Organomarsch über Niedermoor	Q46a
MO n	Norm-Organomarsch	Q44ah
OLn	Norm-Lockersyrosem	L11u
pBBn	podsolige Braunerde	L11p
PP-BB	Podsol-Braunerde	L11p
PP-GG	Podsol-Gley	Q11p
PPn	Norm-Podsol	L11p
PP-RQ	Podsol-Regosol	L11u
PP-SS	Podsol-Pseudogley	Y12i
PP-YU	Tiefumbruchboden aus Podsol	L11h
RNn	Norm-Ranker	L20r
RQ-BB	Regosol-Braunerde	L11n
RQn	Norm-Regosol	L11n
RR-BB	Rendzina-Braunerde	L20r
RRn	Norm-Rendzina	L20rh
RZn	Norm-Pararendzina	N22n
SGn	Norm-Stagnogley	Y24i
SS-BB	Pseudogley-Braunerde	X22n
SS-DD	Pseudogley-Pelosol	X44i
SS-GG	Pseudogley-Gley	Q12i
SS-LF	Pseudogley-Fahlerde	X12i
SS-LL	Pseudogley-Parabraunerde	X33i
SSn	Norm-Pseudogley	Y22i
SS-PP	Pseudogley-Podsol	X11p
SS-RZ	Pseudogley-Pararendzina	X22n
SS-TT	Pseudogley-Tschernosem	X33i
TT-GG	Tschernosem-Gley	Q33h
TTn	Norm-Tschernosem	N33h
TT-SS	Tschernosem-Pseudogley	Y33h
YEn	Norm-Plaggenesch	L11g
YKn	Norm-Kolluvisol	N33h
YU	Tiefumbruchboden	L11h
YUn	Norm-Tiefumbruchboden	L11h
YY	Rigosol	N22n

A2.4 Beziehung der BUEK zur SGDBE

Die SGDBE (Soil Geographical Database of Europe) basiert für das Gebiet der Bundesrepublik Deutschland auf der (nicht nutzungsdifferenzierten) BUEK 2000. Aufgrund der unterschiedlichen Datengrundlagen (Geometrie und verknüpfte Sachdaten) ist daher nicht möglich, eine direkte Verbindung der SMUs und STUs der SGDBE mit den SMUs und STUs der nutzungsdifferenzierten BUEK 1000 herzustellen.

Die Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) als Quelle zur BUEK gibt dazu die folgenden Erläuterungen (Andreas Richter, schriftl. Mitteilung, veränd.):

„Im Begleittext „Zuordnung der Legendeneinheiten“ wird die schrittweise Entwicklung von der BUEK1000, über die BUEK2000 zur SGDBE (für Deutschland) dargestellt. Auf die Auswirkungen der räumlichen Generalisierung wird dabei hingewiesen. Die Grenzanpassung an die Nachbarländer ist ebenfalls beschrieben. Daraus ergibt sich, dass eine grafische Verschneidung von SGDBE und BUEK1000 zu einer Vielzahl von Verschnittflächen führen würde und daher im Rahmen von GERDA nicht in Frage kommt

Das Bodeninventar der BUEK2000 wurde Anfang der 90er Jahre in von meinem Kollegen von KA4 nach FAO (revised legend) übersetzt. Dieser Arbeitsschritt war aber gleichzeitig auch mit einer Zusammenfassung und Konzentration auf Leitböden bzw. typische Begleitböden verbunden, um Unschärfen in der Übersetzung wenigstens z. T. ausgleichen zu können. Eine 1:1-Zuordnungstabelle für eine rein technische Verknüpfung auf der Ebene der Böden gibt es also auch an dieser Stelle nicht.

Für die Zuordnung von Bodenformen zu FST wird in GERDA die Nutzungsdifferenzierte Bodenübersichtskarte 1:1.000.000 (BUEK1000 N2.3) verwendet, die aber erst nach Ableitung der SGDBE erarbeitet wurde. Diese Karte baut (von den Aktualisierungen einiger Einzelpolygone abgesehen) in ihrer bodenkundlichen Legendengliederung prinzipiell auf der Bodenübersichtskarte 1:1.000.000 (BUEK1000) auf. Die Besonderheit der BUEK2000 besteht aber darin, dass die Legendeneinheiten in der Kartengrafik nochmals nach Nutzungsarten und Klimagebieten unterteilt vorliegen. Die Legendeneinheiten (Legendentext, Bodeninventar und Referenzprofile), die sich jetzt auf die Hauptnutzungsarten, d.h. auf die Teilflächen mit Acker-, Grünland- und Waldnutzung in jeder Legendeneinheit beziehen und z. T. auch nach Klimagebieten differenziert sind, wurden dabei komplett überarbeitet.

Im Ergebnis ist festzuhalten, dass sich das neue Bodeninventar in den Legendeneinheiten der BUEK1000 N2.3 im Vergleich zur BUEK1000 nur auf Teilflächen bezieht. Da der BGR außerdem bei der Erarbeitung der BUEK1000 N2.3 ein bereits wesentlich differenzierteres Ausgangsmaterial zur Verfügung stand, war dieser Arbeitsschritt auch mit einer Aktualisierung verbunden. Aus diesen beiden Gründen hat die BGR darauf verzichtet, eine Beziehung zwischen dem ursprünglichen Bodeninventar der BUEK1000 und dem nutzungsdifferenzierten und aktualisierten Bodeninventar der BUEK1000 N2.3 nachträglich herzustellen. Eine Tabelle, die eine Verbindung herstellt zwischen den STUs der SGDBE und den Böden der BUEK1000 N2.3, gibt es somit nicht.“

A3 Zuordnung des Hydromorphiegrads zu den genetischen Horizontbezeichnungen, die in der BUEK 1000 auftreten

Tab. A3-1 a) Einstufung in Hydromorphiegrad 0 (Erläuterungen s. Anhang A2.3, Frage 2).

Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung
A(el)p	Axh+IC	Cc1	IIcV-Bv
aAh	Axh-AI	Cc2	IleC
aAh1	Axh-Bht	Ccn	IleCv
aAh2	Axh-Bv	cCv	IlelCv
Ae	Axh-IC	cmC	IlemC
Ae1	B(h)s	Cn	IIICv
Ae2	B(s)h	Cn1	IlieC
aeAh1	bAh	Cn2	IImC
aeAh2	Bbhs-Bsv	Cv	IImCn
Aeh	Bcv	Cv1	IImCv
Aehp	Bh	Cv2	IIP
Ael	Bhs	Cv-Bs	ilC1
Ael+Bt	Bht	Cv-Bv	ilC2
aelC	Bhv	eAh	L
aelC1	Bs	eAh1	L+Of
aelC2	Bsh	eAh2	L1
Aep	Bsv	eAh-Bv	L2
Ah	Bt	eAp	ICc
Ah1	Bt1	eC	IIcCv
Ah2	Bt2	eCv	mC
Aha	Bt-Axh	eCv-Ah	mCv
Ah-Ap	Bv	elCv	Of
Ah-Bv	Bv+(Aeh)	emC	Of+Oh
Ah-Bv1	Bv+Bbt	IC(c)	Ofh
Ah-Bv2	Bv+eCv	ICc	Of-Oh
Ah-cCv	Bv+IIC	ieC	Oh
Ah-Cv	Bv+IIcV	IIalC	Oh1
Ahe	Bv1	IIaM1	Oh2
Ah-Es-Bs	Bv2	IIaM2	Oh3
Ahl	Bv3	IIBj	Oh-Ahe
Ah-T	Bv4	IIBj-Cv	Ol+Of
Al	Bv-Cv	IIBv-T	P
aM	Bv-eCv	IIC	pAh
aM1	Bv-elCv	IICc	T
aM2	Bv-IIC	IICj	T-elCv
aM3	Bv-P	IICmC	
aMc-Bv	Bvs	IICv	
Ap	C	IIcV1	
Axh	Cc	IIcV2	

Tab. A3-1 b) Einstufung in Hydromorphiegrad 1.

Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung
(Sw)-Axx	Bv-Sw	IISd-Cj	Sdw-Bv
aGco-Bv	Bvt-Sd	IISd-Cv	Sw-Ae
Al-Sw	Cv-Sd	IISd-mC	Sw-Ael
aM-Go1	eCv-Sd	IISd-mCn	Sw-Ah1
aM-Go2	Gco-Aa	IISd-mCv	Sw-Ah2
Axx-Sw	Go-Aa	IISw-Bv	Sw-Al
Bhs-Sw	IIBt-Sd	IISw-Cv	Sw-B(h)s
Bh-Sw	IIBv-Sw	Of-nH	Sw-B(s)h
Bt-Sd	IIC-Sd	Sd-Bt	Sw-Bhs
Bt-Sd1	IICv-Sw	Sd-Bv	Sw-Bv
Bt-Sd2	IISd-Bj	Sd-IImCv	Sw-Cc
Bv-(Sw)	IISd-Bv	Sd-mC	Swd-Bt
Bv-Go	IISd-C	Sd-P	

Tab. A3-1 c) Einstufung in Hydromorphiegrad 2.

Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung	Horizontbezeichnung
(Bv)-Go	emGo	hHw2	nHw
(Bv)-Sw	G(c)o	Hp	pGo
(jAh)+nHw	Gcr	IlaG	S(e)w
aelG	Go	IleGr	Scd1
aG	Go1	IIfAhe-Gr	Scd2
aGco1	Go2	IIGhr	Scd3
aGco2	Gor	IIGor	Sd
aGcr1	Go-Sd	IIGr	Sd1
aGcr2	Gr	IIIaGo	Sd2
aGo	Gr1	IIScd	Sd-Gr
aGor	Gr2	IISd	Sdw
aGr	Gro	IISd1	Sw
Axx-G(c)o	hHr	IISd2	Sw1
bGo	hHr1	IISd-Go	Sw2
Cc-Gr	hHr2	IISw	Swd
Cv-rGo	hHr3	IISw-Sd	Sw-Go
e(b)Gro	hHr4	nHr	zemGr
eGo	hHr5	nHr1	zemGro
eGor	hHw	nHr2	
eGr	hHw1	nHv	

Bei Übergangshorizonten (z.B. Bv-Go) ist zu beachten, dass in der Nomenklatur der KA4 (AG Boden, 1994) der dominante Anteil *hinten* steht. Ein Horizont Bv-Go ist also einem Go ähnlicher als einem Bv.

A4 Korrespondenz der Schluff- und Sandgehalte zwischen internationalem und deutschem Partikelgrößenklassensystem für die Texturklassen der Bodenkundlichen Kartieranleitung (KA4)

Tab. A4-1: Klassenmittelwerte der Korngrößenfraktionen (%) für die Texturklassen (= Bodenarten) nach Bodenkundlicher Kartieranleitung (KA 4; AG Boden 1995) (Erläuterungen s. Anhang A2.3, Frage 5 und 6).

Bodenart	Internationales System (FAO, 1998)			Deutsches System (AG Boden, 1994)	
	Ton <2 µm	Silt (Schluff) ¹⁾ 2-50 µm	Sand 50-2000 µm	Schluff 2-63 µm	Sand 63-2000 µm
	-----gravimetrischer Anteil an der Gesamtfeinerde (%) ----- -----				
fS	2,5	3,808	93,692	5	92,5
fSms	2,5	4,235	93,265	5	92,5
mS	2,5	4,477	93,023	5	92,5
gS	2,5	4,525	92,975	5	92,5
gSms	2,5	4,525	92,975	5	92,5
mSgs	2,5	4,525	92,975	5	92,5
fSgs	2,5	4,544	92,956	5	92,5
Ss	2,5	4,59	92,91	5	92,5
mSfs	2,5	4,745	92,755	5	92,5
gSfs	2,5	4,825	92,675	5	92,5
Su2	2,5	12,921	84,579	17,5	80
Uu	3,67	82,175	14,155	88,17	8,16
Su3	4	25,814	70,186	32,5	63,5
Su4	4	36,501	59,499	45	51
Us	4	53,909	42,091	65	31
Sl2	6,5	14,469	79,031	17,5	76
Ut2	9,95	70,674	19,376	77,53	12,52
Sl3	10	21,814	68,186	25	65
St2	11	5	84	5	84
Slu	12,5	36,699	50,801	45	42,5
Uls	12,5	45,745	41,755	57,5	30
Ut3	14,33	64,731	20,939	71,53	14,14
Sl4	14,5	21,836	63,664	25	60,5
Ut4	20,62	66,487	12,893	72,19	7,19
St3	21	7,5	71,5	7,5	71,5
Ls4	21	19,087	59,913	22,5	56,5
Ls3	21	30,105	48,895	35	44
Ls2	21	37,112	41,888	45	34
Lu	23,5	49,691	26,809	57,5	19
Tu4	28,333	64,152	7,515	68,333	3,334
Ts4	30	7,5	62,5	7,5	62,5
Lt2	30	36,952	33,048	40	30

Bodenart	Internationales System (FAO, 1998)			Deutsches System (AG Boden, 1994)	
	Ton <2 µm	Silt (Schluff) ¹⁾ 2-50 µm	Sand 50-2000 µm	Schluff 2-63 µm	Sand 63-2000 µm
	-----gravimetrischer Anteil an der Gesamtfeinerde (%) ----- -----				
Lts	35	19,805	45,195	22,5	42,5
Tu3	36	51,793	12,207	56	8
Ts3	40	7,5	52,5	7,5	52,5
Lt3	40	37,926	22,074	40	20
Tu2	52,78	36,588	10,632	38,61	8,61
Ts2	55	7,5	37,5	7,5	37,5
Tl	55	21,808	23,192	22,5	22,5
Tt	76,67	11,67	11,66	11,67	11,66

¹⁾ Interpolation durchgeführt 2002 von Attila Nemes und Henk Wösten

A5 Flächenanteile der verschiedenen FOOTPRINT Soil Types (FST) an der ackerbaulich relevanten Fläche in Deutschland (BUEK 1000 - Nutzungskategorien 21 und 24)

**Tab. A5-1: Absolute Flächen und prozentuale Flächenanteile der einzelnen FSTs an den ackerbaulich relevante Landnutzungs-Kategorien (NUTZ_NR) in der BUEK 1000 (Erläuterungen s. AnhangA2.4).
Summe [CodeNr. 21 (Ackerflächen) + CodeNr. 24 (landwirtsch. Flächen heterogener Struktur)] = 193114 km²**

FOOTPRINT Soil Type (FST)	absolute Fläche FST in NUTZ_NR 21 + 24 Km²	Flächenanteil des FST %
N22n	21.700,00	11,2347
N33i	16.910,00	8,7590
Y22i	12.030,00	6,2270
Q22n	8.696,00	4,5028
W22i	8.662,00	4,4854
L11n	8.509,00	4,4060
Y12i	7.485,00	3,8761
X33i	7.313,00	3,7869
L11p	5.250,00	2,7189
Q66t	4.578,00	2,3708
X22n	4.130,00	2,1385
P22a	4.126,00	2,1366
Q22a	4.055,00	2,0997
N33h	3.900,00	2,0197
L21r	3.636,00	1,8830
X11p	3.134,00	1,6229
Q33i	2.954,00	1,5296
W24i	2.930,00	1,5174
Q11n	2.864,00	1,4833
L20rh	2.603,00	1,3481
L11g	2.528,00	1,3091
N33n	2.462,00	1,2750
L22r	2.448,00	1,2678
W12i	2.340,00	1,2120
L11h	2.283,00	1,1820
L50r	2.246,00	1,1631
S22rh	2.113,00	1,0942
W11n	2.103,00	1,0892
Y11n	1.993,00	1,0321
O11p	1.903,00	0,9856
L45ir	1.813,00	0,9386

FOOTPRINT Soil Type (FST)	absolute Fläche FST in NUTZ_NR 21 + 24 Km²	Flächenanteil des FST %
X12i	1.755,00	0,9089
N22i	1.690,00	0,8749
U22r	1.658,00	0,8585
N22ih	1.370,00	0,7096
W44n	1.369,00	0,7089
X22i	1.260,00	0,6523
Q11p	1.247,00	0,6457
O11a	1.152,00	0,5967
Q11a	1.117,00	0,5782
P22n	1.106,00	0,5730
Q21a	1.038,00	0,5373
L11r	1.001,00	0,5184
P44a	922,90	0,4779
Y22n	869,90	0,4504
W22h	766,20	0,3968
Q22i	757,00	0,3920
N32i	747,90	0,3873
W44rh	720,70	0,3732
L22n	659,20	0,3414
P22ah	657,60	0,3405
Q22ah	651,40	0,3373
L11rh	635,50	0,3291
N24i	625,40	0,3239
S24ir	619,50	0,3208
M22r	551,20	0,2854
P23i	529,70	0,2743
Q12i	509,80	0,2640
R22n	504,30	0,2611
Q44a	447,00	0,2315
X44i	439,80	0,2277
W22r	437,40	0,2265
N23i	426,40	0,2208
W32n	422,90	0,2190
L20r	360,50	0,1867
L22rh	359,70	0,1863
S44r	340,70	0,1764
Y22h	281,00	0,1455
S22r	262,40	0,1359
V22r	255,70	0,1324
M24irh	250,70	0,1298
W34ir	240,60	0,1246
W22n	193,80	0,1004
R23n	171,60	0,0889

FOOTPRINT Soil Type (FST)	absolute Fläche FST in NUTZ_NR 21 + 24 Km²	Flächenanteil des FST %
Q24a	149,00	0,0772
Q44ah	149,00	0,0772
Y24i	125,00	0,0647
Q34a	123,90	0,0642
Y11p	107,80	0,0558
Q32i	106,20	0,0550
P33h	100,70	0,0521
X21i	100,70	0,0521
N12i	92,59	0,0479
L40r	90,46	0,0468
L11u	50,92	0,0264
Q22h	50,33	0,0261
M21n	45,59	0,0236
Q46a	41,30	0,0214
N23ih	33,10	0,0171
M23i	24,35	0,0126
Y33h	22,38	0,0116
Q33h	22,38	0,0116
P24i	14,05	0,0073
Y22rh	13,55	0,0070
Q20r	9,95	0,0052
N34i	8,75	0,0045
V24i	1,27	0,0007

Tab. A5-2: Absolute Flächen und prozentuale Anteile der einzelnen FOOTPRINT Soil Types (FSTs) an den ackerbaulich relevanten Landnutzungs-Kategorien (Code-Nr.) in der Bodenübersichtskarte Deutschland 1:1 Mio (BUEK 1000), getrennt nach Klassifizierbarkeit.

Summe [Code-Nr. 21 (Ackerflächen) + Code-Nr. 24 (landwirtsch. Flächen heterogener Struktur)] = 193.114 km²; davon exakt klassifizierbar: 74.514 km²; nur unscharf klassifizierbar: 118.046 km².

Der Flächenanteil in Spalte 4 bezieht sich für Klassifizierbarkeit = 1 auf 74.514 km²; für Klassifizierbarkeit = 0 bezieht sich der Anteil auf 118.046 km²

FOOTPRINT Soil Type (FST)	Klassifizierbarkeit (0 = unscharf, 1 = exakt)	Fläche des FST in der Kombination (Code_Nr: = 21 od. 24) / Klassifizierbarkeit km²	Flächenanteil des FST an der Kombination %
L11n	1	8.252,00	11,0749
W22i	1	5.226,00	7,0137
Q22a	1	3.744,00	5,0246
L21r	1	3.636,00	4,8801
Q33i	1	2.954,00	3,9643
Y12i	1	2.628,00	3,5263
Q66t	1	2.589,00	3,4749
N33n	1	2.462,00	3,3044
N33i	1	2.390,00	3,2079
Q11n	1	2.342,00	3,1433
W24i	1	2.318,00	3,1105
S22rh	1	2.113,00	2,8358
W11n	1	2.103,00	2,8227
N22n	1	2.010,00	2,6972
Y11n	1	1.993,00	2,6747
U22r	1	1.658,00	2,2250
N22i	1	1.412,00	1,8951
X22i	1	1.260,00	1,6905
L22r	1	1.232,00	1,6540
Q11a	1	1.117,00	1,4986
W12i	1	1.040,00	1,3953
Q21a	1	1.038,00	1,3924
Y22i	1	1.034,00	1,3875
L11r	1	1.001,00	1,3436
P22a	1	944,10	1,2670
Y22n	1	869,90	1,1674
W22h	1	766,20	1,0283
Q22i	1	757,00	1,0159
N32i	1	747,90	1,0038
L50r	1	723,70	0,9712
W44rh	1	720,70	0,9671
L22n	1	659,20	0,8847
Q22ah	1	651,40	0,8741

FOOTPRINT Soil Type (FST)	Klassifizierbarkeit (0 = unscharf, 1 = exakt)	Fläche des FST in der Kombination (Code_Nr: = 21 od. 24) / Klassifizierbarkeit km²	Flächenanteil des FSTan derKombination %
L11rh	1	635,50	0,8529
N24i	1	625,40	0,8394
S24ir	1	619,50	0,8314
L45ir	1	580,10	0,7785
X11p	1	558,10	0,7489
M22r	1	551,20	0,7397
P23i	1	529,70	0,7109
R22n	1	504,30	0,6768
Q44a	1	447,00	0,5999
W22r	1	437,40	0,5871
N23i	1	426,40	0,5722
W32n	1	422,90	0,5676
L22rh	1	359,70	0,4828
S44r	1	340,70	0,4572
Q11p	1	331,50	0,4449
X12i	1	284,80	0,3822
Y22h	1	281,00	0,3771
Q22n	1	264,00	0,3543
S22r	1	262,40	0,3522
V22r	1	255,70	0,3431
M24irh	1	250,70	0,3364
W34ir	1	240,60	0,3229
W22n	1	193,80	0,2601
R23n	1	171,60	0,2303
Q34a	1	123,90	0,1663
Y11p	1	107,80	0,1447
Q32i	1	106,20	0,1425
X21i	1	100,70	0,1351
M21n	1	45,59	0,0612
M23i	1	24,35	0,0327
P24i	1	14,05	0,0189
Y22rh	1	13,55	0,0182
Q20r	1	9,95	0,0134
V24i	1	1,27	0,0017
N22n	0	19.690,00	16,6767
N33i	0	14.520,00	12,3041
Y22i	0	10.990,00	9,3111
Q22n	0	8.432,00	7,1426
X33i	0	7.313,00	6,1950
L11p	0	5.250,00	4,4478
Y12i	0	4.858,00	4,1151
X22n	0	4.130,00	3,4984

FOOTPRINT Soil Type (FST)	Klassifizierbarkeit (0 = unscharf, 1 = exakt)	Fläche des FST in der Kombination (Code_Nr: = 21 od. 24) / Klassifizierbarkeit km²	Flächenanteil des FSTan der Kombination %
N33h	0	3.900,00	3,3042
W22i	0	3.436,00	2,9105
P22a	0	3.182,00	2,6954
L20rh	0	2.603,00	2,2054
X11p	0	2.576,00	2,1822
L11g	0	2.528,00	2,1416
L11h	0	2.283,00	1,9336
Q66t	0	1.989,00	1,6850
O11p	0	1.903,00	1,6124
L50r	0	1.522,00	1,2897
X12i	0	1.470,00	1,2457
N22ih	0	1.370,00	1,1608
W44n	0	1.369,00	1,1597
W12i	0	1.301,00	1,1019
L45ir	0	1.232,00	1,0440
L22r	0	1.216,00	1,0300
O11a	0	1.152,00	0,9761
P22n	0	1.106,00	0,9373
P44a	0	922,90	0,7818
Q11p	0	915,40	0,7755
P22ah	0	657,60	0,5570
W24i	0	612,50	0,5189
Q11n	0	522,30	0,4425
Q12i	0	509,80	0,4318
X44i	0	439,80	0,3726
L20r	0	360,50	0,3054
Q22a	0	310,80	0,2633
N22i	0	277,40	0,2350
L11n	0	256,20	0,2170
Q24a	0	149,00	0,1262
Q44ah	0	149,00	0,1262
Y24i	0	125,00	0,1059
P33h	0	100,70	0,0853
N12i	0	92,59	0,0784
L40r	0	90,46	0,0766
L11u	0	50,92	0,0431
Q22h	0	50,33	0,0426
Q46a	0	41,30	0,0350
N23ih	0	33,10	0,0280
Q33h	0	22,38	0,0190
Y33h	0	22,38	0,0190
N34i	0	8,75	0,0074

A6 Flächenanalyse der auftretenden Boden- und Klima-Kombinationen

Die Kenntnis der Flächenverteilung der in der ackerbaulich relevanten Fläche Deutschlands auftretenden Kombinationen aus FOOTPRINT Soil Types (FST) und Klimazonen wird benötigt, um anhand der Ergebnisse der Simulationen mit MACRO und PRZM die Boden-Klima-Szenarien zur Einbindung in das Tool GERDA zu ermitteln, die jeweils einem definierten räumlichen Perzentil der Vulnerabilität in Bezug auf die Austragspfade Drainage, Oberflächenabfluss und Erosion entsprechen.

Die Flächenanalyse wurde wie folgt ausgeführt.

Inputdaten

- Polygonlayer der BÜK 1:1000000 (bk1_clc_reg3_polygon)
- Polygonlayer der in Kap. II.2.2 erhaltenen Klimazonen für die ackerbaulich relevante Fläche Deutschlands (diese Karte enthält *nur* Flächen der ATKIS-Kategorien „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“)
- FST-Klassifikationsergebnisse für alle Bodenformen (BOFORM_ID), Tabelle Bodenform_final_all_BOFORMIDs_classified_final (Flächenanalyse_FSTs_und_Einordnung_FOCUS_Scenarios_20120817.mdb).

Methoden

- 1) Das Polygonlayer der 12 Klimazonen für die ackerbaulich relevante Fläche Deutschlands wurde mit dem Polygonlayer der BUEK 1:1000000 verschnitten. Anschließend wurden in ArcGIS 10 ein „Dissolve“ mit den Feldern KG_LBA_NUTZ und cluster (= Klimazone) durchgeführt und die Flächen der resultierenden Polygone berechnet. Das Ergebnis war ein Polygonlayer (Cluster_itsBUEK_disscluster_dissKGLBANutz) mit 2837 multipart-Polygonen, wobei jedes Polygon einer eindeutigen Kombination von KG_LBA_NUTZ und Klimazone entspricht.
- 2) Die Attributtabelle des neuen Boden-Klima-Polygonlayers wurde in Access importiert (Flächenanalyse_FSTs_Boden_Klima_20120827.accdb) und mittels einer INNER JOIN-Abfrage über das gemeinsame Feld KG_LGA_NUTZ bzw. KG_BOD_NUTZ_ID mit der Tabelle der in FST klassifizierten Bodenformen (Bodenform_final_all_BOFORMIDs_classified_final) verknüpft.
- 3) In der resultierenden Tabelle BoformID_areas_for_KG_Bod_Nutz_climate (Primärschlüssel climate_zone / BOFORM_ID) wurde durch Multiplikation des Felds FLANT_class_mean_scaled (den Flächenanteil der BOFORM_ID an der KG_BOD_NUTZ_ID = KG_LBA_NUTZ) mit der Polygonfläche die absolute Fläche jeder auftretenden Kombination von Bodenform und Boden-Klima-Polygon berechnet.
- 4) Schließlich wurden mit Hilfe von GROUP BY-Abfragen die prozentualen Flächenanteile und absoluten Flächen aller erhaltenen FSTs-Klima-Kombinationen in verschiedenen Aggregierungsgraden berechnet.

Ergebnisse

Alle Ergebnisse sind in der Datenbank Flächenanalyse_FSTs_Boden_Klima_20120827.accdb zu finden.

Der INNER JOIN der Attributtabelle des Boden-Klima-Polygonlayers mit der Tabelle der in FST klassifizierten Bodenformen ergab 10103 Kombinationen von Bodenform (BOFORM_ID) und Klimazone. Diese 10103 Kombinationen entsprechen, bedingt durch die n:1-Beziehung von Bodenform (BOFORM-ID) und potenziellem FST, 1153 Kombinationen von potenziellen FST und Klimazone.

Beim INNER JOIN fielen einige Flächen heraus:

- 23 Bodenformen fielen heraus, weil die KG_BOD_NUTZ-Kombination nicht im Boden-Klima-Polygonlayer vertreten war. Dies lässt sich dadurch erklären, dass das Polygonlayer im Zuge seiner Entstehung einmal mit ATKIS verschnitten wurde und nur Flächen der ATKIS-Kategorien „Ackerbau“ und „Sonderkulturen“ enthält.
- 649 Kombinationen von KG_LBA_NUTZ und Klima fielen heraus, weil sich ihnen keine Bodenform zuweisen ließ. Diese Kombinationen hatten eine Nutzungskategorie nach BUEK, für die keine Bodenformen definiert sind. Zur Erinnerung: Bodenformen sind nur definiert für die Nutzungskategorien 21 (Ackerflächen), 23 (Grünland), 24 (landwirtschaftliche Flächen heterogener Struktur) und 31 (Wälder) auf; für Sonderkulturen (BUEK-Nutzungskategorie 22 = Dauerkulturen) sind *keine* Bodenformen definiert. Dass in dem Boden-Klima-Polygonlayer auch andere Nutzungskategorien nach BUEK auftreten als Ackerbau und Sonderkulturen (z.B. Siedlungsflächen oder Meeresgewässer), liegt an der wesentlich geringeren räumlichen Auflösung der BUEK 1000 im Vergleich zum ATKIS Basis-DLM.

Die Gesamtfläche des Boden-Klima-Polygonlayers betrug 131.888 km². Die Gesamtfläche der 10103 Bodenform-Klima-Kombinationen nach dem INNER JOIN betrug noch 129.480 km². Der Flächenverlust durch den INNER JOIN ist also nicht kritisch für die Aussagekraft der Flächenanalyse.

Die prozentualen Flächenanteile und absoluten Flächen aller erhaltenen FSTs in verschiedenen Aggregierungsgraden finden sich in den Tabellen (hier im Abschlussbericht nicht wiedergegeben)

- frac_FST_areas_for_total_area_after_innerjoin (bezogen auf die Gesamtfläche der Bodenform-Klima-Kombinationen)
- frac_FST_areas_for_climate (1153 auftretende FST/Klima-Kombinationen)
- frac_FST_areas_for_NutzNr (FST/Nutzungskategorie-Kombinationen)
- frac_FST_areas_for_NutzNr_climate (FST/Nutzungs/Klima-Kombinationen)
- frac_FST_areas_for_KG_Bod_Nutz (FST/KG_BOD_NUTZ-Kombinationen)
- frac_FST_areas_for_KG_Bod_Nutz_climate (FST/KG_BOD_NUTZ/Klima-Kombinationen, d.h. FST-Polygon-Kombinationen)

Die letzten 5 aufgeführten Tabellen enthalten sowohl die relativen Flächenanteile der FSTs an einer bestimmten Gruppe (z.B. Klimazone) als auch die relativen Flächen der Kombinationen (z.B. FST/Klimazone) an der Gesamtfläche von 129.480 km².

Bezogen auf die Gesamtfläche der Klima-Bodenform-Kombinationen von 129.480 km² von ist der FST mit dem höchsten Flächenanteil (von 126 auftretenden potenziellen FSTs) N22n

(10,82 %), gefolgt von N33i (8,33 %), Y22i (6,28 %), Q22n (4,60 %), W22i (4,48 %) und L11n (4,08 %), Hierbei ist wiederum darauf hinzuweisen, dass die Fläche der ersteren vier FSTs, bedingt durch die Methode der Klassifikation ohne Referenzprofil, überschätzt wird (s. Kap. I.2.1.3.1.2), was aber derzeit nicht geändert werden kann.

Die fünf FST-Klima-Kombinationen mit dem höchsten Anteil an der Gesamtfläche (von 1153 auftretenden FST-Klima-Kombinationen) sind N22n/cli12 (2,07 %), N22n/cli9 (2,04 %), N33i/cli12 (1,74 %), W22i/cli9 (1,67 %) und N33i/cli2 (1,33 %).

Tabelle A6-1 zeigt die 10 Kombinationen von FST, BUEK-Nutzungskategorie und Klimazone (von 2446 Kombinationen) mit dem höchsten Flächenanteil an der Gesamtfläche der Bodenform-Klima-Kombinationen. Die Flächenanteile der Kombinationen sind relativ ungleichmäßig verteilt: Die 74 Kombinationen (entsprechend 3,0 %) mit den höchsten Flächenanteilen decken bereits 50 % der Gesamtfläche ab, die ersten 523 Kombinationen (21,4 %) repräsentieren 90 % der Gesamtfläche.

Tab. A6-1: Die 10 FST/Nutzungs/Klima-Kombinationen mit dem höchsten Flächenanteil an der Gesamtfläche.

FST ¹	Nutzungs-kategorie nach BUEK (NUTZ_NR)	Klima-zone	Fläche der Nutzungs/Klima-Kombination (km ²)	relativer Anteil des FST an der Nutzungs/Klima-Kombination (%)	Fläche der FST/Nutzungs/Klima-Kombination (km ²)	relativer Anteil der FST/Nutzungs/Klima-Kombination (%) ²
N22n	21	12	20.210,8	12,73 %	2573,6	1,99 %
N22n	21	9	20.826,8	11,64 %	2423,9	1,87 %
N33i	21	12	20.210,8	11,04 %	2232,2	1,72 %
W22i	21	9	20.826,8	10,35 %	2156,5	1,67 %
N33i	21	2	12.527,5	13,63 %	1707,3	1,32 %
W22i	21	12	20.210,8	8,33 %	1682,6	1,30 %
N33n	21	9	20.826,8	7,94 %	1653,1	1,28 %
Y22i	21	12	20.210,8	8,12 %	1641,1	1,27 %
Q22n	21	9	20.826,8	7,47 %	1555,4	1,20 %
X33i	21	12	20.210,8	7,52 %	1520,6	1,17 %

¹) FST: FOOTPRINT Soil Type

²) bezogen auf relevante Gesamtfläche von 129.480 km²

A7 Auswertung der REGNIE-Daten

Die REGNIE-Daten (REGionalisierte NIEderschlagshöhen; DWD, 2011) liegen als ASCII-Datensätze vor. Für jeden Tag in der Jahresreihe 1980 – 2009 ist ein Datensatz mit Niederschlagsdaten vorhanden. Das REGNIE-Raster ist aus 611 (West/Ost-Richtung) x 971 (Nord/Süd) Rasterzellen aufgebaut.

Die Analyse der Periode von 1980 bis 2009 umfasst 10958 einzelne ASCII-Dateien. Aus diesen Originaldateien wurden mittels R-basierter Skripte bestimmte Variablen automatisiert abgefragt, ohne dass die Datensätze einzeln in ArcGIS eingelesen werden mussten. Für jede Rasterzelle wurden die Zielwerte berechnet und in eine Ergebnistabelle (dBase Format) geschrieben. Über eine eindeutige ID konnten die Werte dann den jeweiligen Rasterzellen zugeordnet werden. Die Rasterzellen-ID wurde als durchlaufende Nr. von oben links nach unten rechts festgelegt (1 bis 593.281).

Um eine flächenbezogene Auswertung im GIS zu ermöglichen, musste dort zunächst ein Polygongitter (Funktion „create Fishnet“) erzeugt werden, das die identische Anordnung der Raster-ID enthielt und auch der geografischen Lage nach den Vorgaben des DWD entsprach. Die Koordinate des Zentrums der linken oberen Rasterzelle war mit $x = 5,833^\circ$ und $y = 55,0833^\circ$ gegeben, die Rastergröße betrug $1/60^\circ$ in x-Richtung und $1/120^\circ$ in y-Richtung.

Über die ID jedes „Raster-Polygons“ konnten die Ergebnisse aus den R-basierten Skriptanalysen mit der Geometrie verknüpft werden. Für die Flächenauswertung musste der Polygon-Datensatz in einen Rasterdatensatz umgewandelt werden. Da dieses Raster im Referenzkoordinatensystem WGS 84 projiziert ist und die Rasterzellen somit nicht exakt quadratisch sind (die Ausdehnung in West/Ost-Richtung von $1/60^\circ$ ist im Norden des Landes kürzer als im Süden) musste für die Flächenanalyse eine Umprojektion in das Referenzkoordinatensystem ETRS89, UTM Zone 32N erfolgen. Dafür wurde eine Ziel-Zellgröße von 1000 m x 1000 m gewählt. Durch die Umprojektion und das damit einhergehende Interpolationsverfahren zur Berechnung der Zellwerte ändert sich die Rasterzellenzahl auf 775 x 923. Im Umprojektionstool zur Ermittlung der neuen Zellwerte wurde das Interpolationsverfahren „bilinear“ gewählt, bei dem sich der Wert aus einem gewichteten Distanz-Durchschnitt aus den umliegenden Rasterzellen ergibt.

Für jede der 20 Variablen (s. Kap. II.2.1.1 und II.2.1.2), die zur Repräsentativitätsanalyse des Faktors Klima ausgewertet werden, steht als Ergebnis der Auswertung zunächst ein Deutschland-weiter Rasterdatensatz zur Verfügung. Da für die Gewässerexposition mit Pflanzenschutzmittel nur die Landnutzungen "Ackerbau" und "Sonderkulturen" von Bedeutung sind, werden die Ergebnisraster mit den entsprechenden Landnutzungsklassen Ackerbau und Sonderkultur (nach ATKIS) ausgeschnitten. Damit dabei die Grenzverläufe nicht zu grob sind, werden die Raster auf eine Zellgröße von 100 m x 100 m „resampelt“. Die Attributtabelle der Raster wurden exportiert und anschließend die Flächenanteile ausgewertet (bei einer Zellgröße von 100 m x 100 m entspricht die Anzahl der Rasterzellen der Fläche in Hektar). Im Anschluss wurde für jede der 20 Variablen eine räumliche kumulative Verteilungsfunktion für die relevanten Flächen erstellt.

A8 Ergänzende Erläuterungen zur Methodik der Flächenanalyse Gewässer und Einzugsgebiet

Ableitung der Einzugsgebiete (EZG)

Zu Beginn der Repräsentativitätsanalyse „Gewässer“ stand die Berechnung bzw. Ableitung der Einzugsgebietsabgrenzungen. Dazu wurde zunächst aus dem 10 m x 10 m aufgelösten Höhenmodell (DGM10, vgl. Abb. A8-1) die Fließrichtung berechnet (wahlweise mittels „Hydrology-Tool“ in den „Spatial Analyst Tools“ oder in den „ArcHydro Tools“ in ArcGIS). Die Fließrichtung gibt an, in welche Himmelsrichtung sich Wasser auf der Oberfläche aufgrund der Hangneigung bewegt (vgl. Abb. A8-2). Der Abfluss aus einer Rasterzelle erfolgt immer in Richtung der tiefstgelegenen von 8 Nachbarzellen. Im zweiten Schritt musste die Fließakkumulation berechnet werden. Diese gibt an, aus wie vielen „flussaufwärts“ gelegenen Zellen sich der Abfluss in einer Rasterzelle aufsummiert. Auf Basis des Fließakkumulationsrasters konnten dann die Abflussbahnen erzeugt werden. Allgemein wird dabei ein Schwellwert für die Anzahl beitragender Zellen festgelegt. D.h. jede Zelle aus dem Fließakkumulationsraster mit einem Wert größer/gleich dem Schwellwert wird als Teil der Abflussbahn definiert. Generell gilt, dass je niedriger der Schwellwert gewählt wird, desto feiner verästelt sind die Abflussbahnen dargestellt. Für die Ausweisung der Einzugsgebiete wurden hier die Abflussbahnen mit den Schwellenwerten 50000 und 100000 erzeugt. Zudem wurden die Abflussbahnen mit Schwellenwert 1000 erzeugt, da diese für die Analyse einzelner der betrachteten Einzugsgebietseigenschaften benötigt wurden. Die Abgrenzungen der EZG ergeben sich aus der für die jeweiligen Seitenarme bzw. Abschnitte des Abflussnetzes beitragenden Fläche, d. h. alle Zellen aus dem Höhenmodell, die letzten Endes in den jeweiligen Seitenarm bzw. Abschnitt der Abflussbahnen „entwässern“ werden als EZG-Fläche zusammengefasst (vgl. Abb. A8-3 und A8-4).

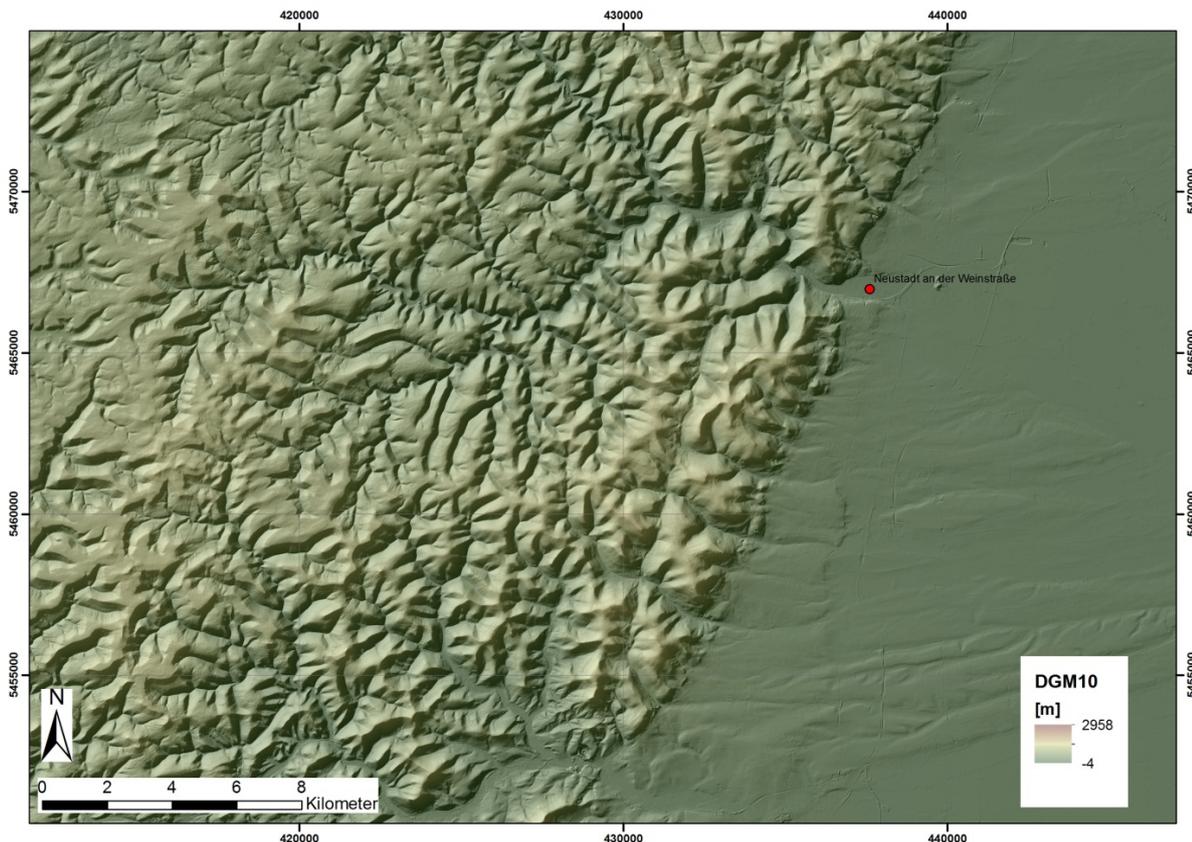


Abb. A8-1: Ausschnitt des DGM10 bei Neustadt an der Weinstraße.

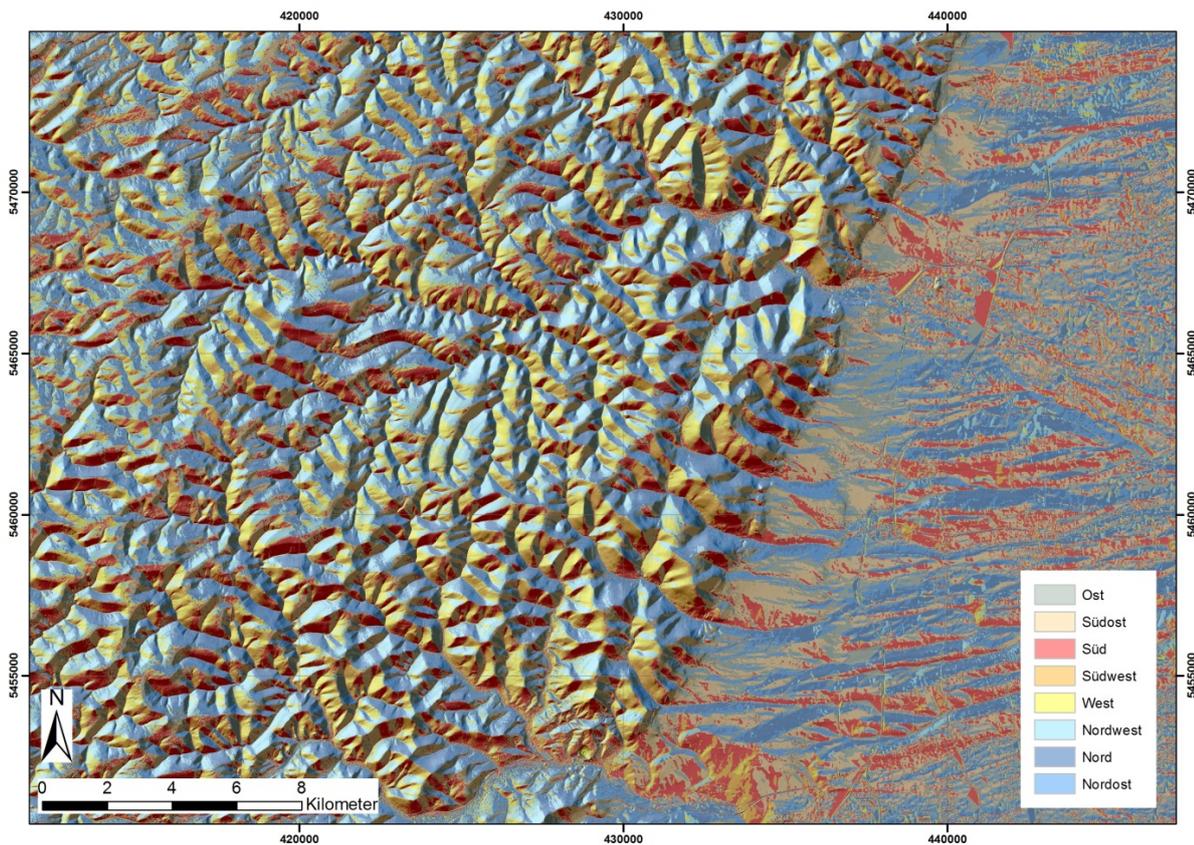


Abb. A8-2: Ausschnitt des Fließrichtungsrasters bei Neustadt an der Weinstraße.

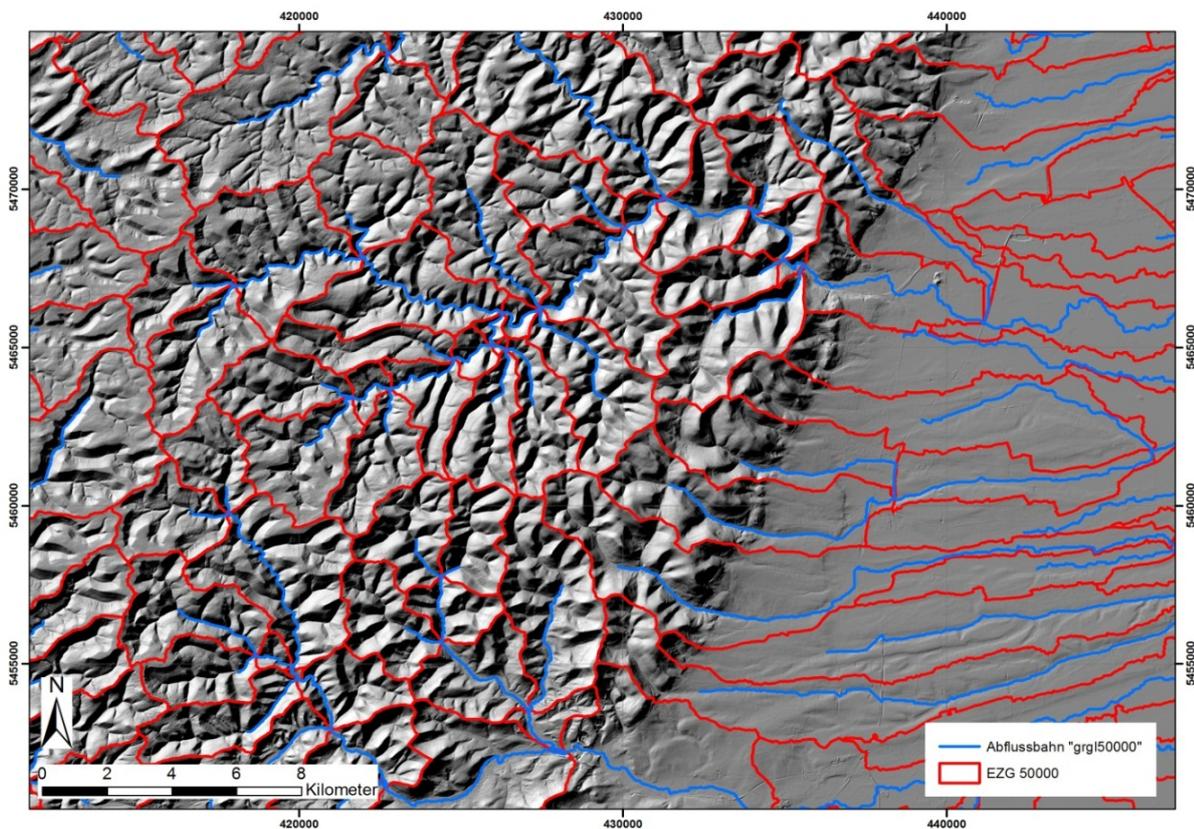


Abb. A8-3: Ausschnitt der Abflussbahnen (mit Schwellwert 50000 beitragende Zellen) und der daraus abgeleiteten EZG-Abgrenzungen.

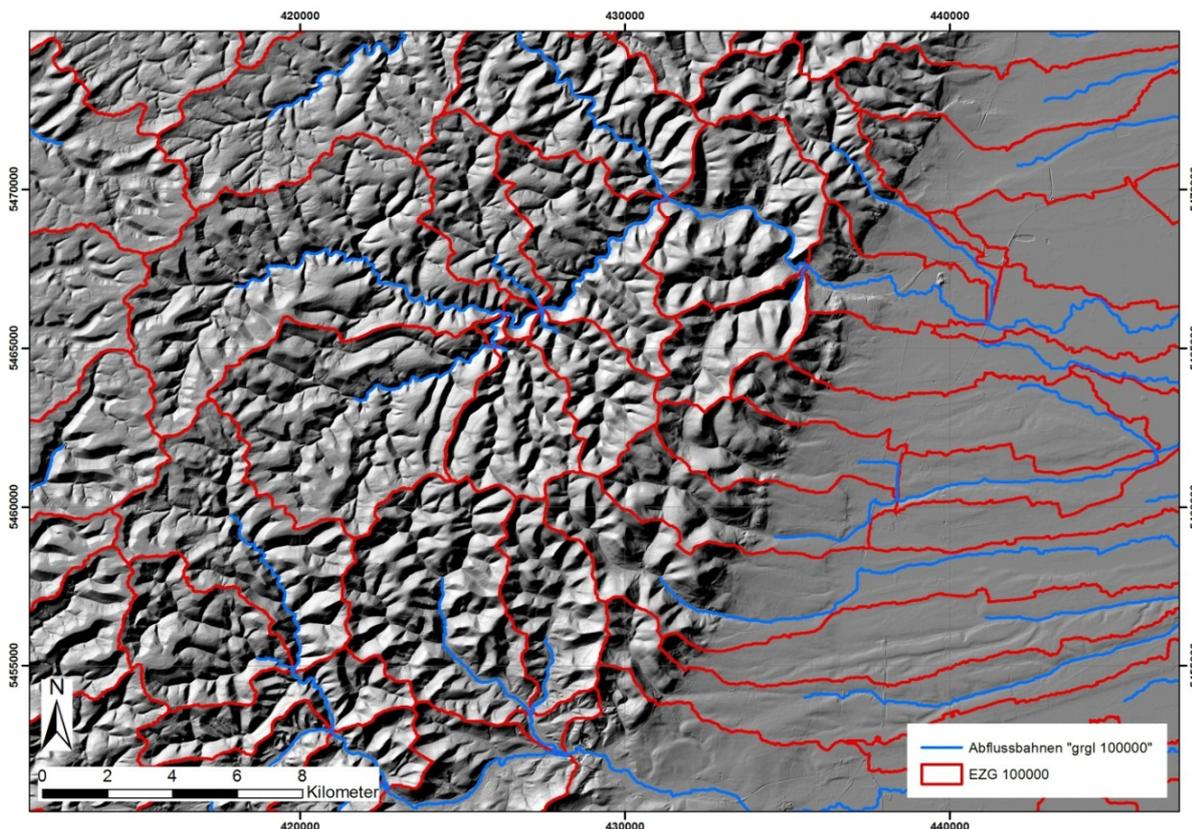


Abb. A8-4: Ausschnitt der Abflussbahnen (mit Schwellwert 100000 beitragende Zellen) und der daraus abgeleiteten EZG-Abgrenzungen.

Mittlere Distanz zum Outlet

Für die Berechnung bestimmter EZG Parameter (mittlere Distanz zum Outlet, maximale Fließstrecke und mittleres Sohlgefälle) wurden zunächst die Abflussbahnen mit dem Schwellwert 1000 beitragende Zellen erzeugt. Das resultierende Abflussbahnnetz zeichnet sich durch einen relativ hohen Verzweigungs- bzw. Genauigkeitsgrad aus. Die Abflussbahnen 1000 wurden als angenäherter Ersatz für das ATKIS-Gewässernetz im Zuge der Ermittlung der drei oben genannten Parameter verwendet. Dies liegt darin begründet, dass diese Parameter aus dem Höhenmodell abgeleitet werden und die ATKIS-Gewässer oft nicht mit dem Geländere relief aus dem Höhenmodell übereinstimmen. Dies kann zum einen daran liegen, dass die Lage der Gewässerläufe anthropogen beeinflusst sein können, aber auch daran, dass bei der Erzeugung der ATKIS-Daten ungenau digitalisiert wurde (so kann es beispielsweise sein, dass ATKIS-Gewässer über kleine Geländeerhebungen im DGM10 hinwegfließen). Andererseits besteht auch die Möglichkeit, dass bestimmte Feinheiten des tatsächlichen Gewässerverlaufs durch Glättungseffekte im Höhenmodell nicht zu finden sind. Da das Abflussbahnnetz 1000 relativ fein verästelt ist und dadurch viel länger ist als das tatsächliche Gewässernetz, wurde es für die hier durchgeführten Analysen mit einem Puffer von 100 m um die ATKIS-Gewässer ausgeschnitten (vgl. Abb. A8-5 bis A8-9). Somit wurde gewährleistet, dass die Abflussbahnen nur im Bereich von tatsächlich vorhandenen Gewässern für die weitere Analyse berücksichtigt werden.

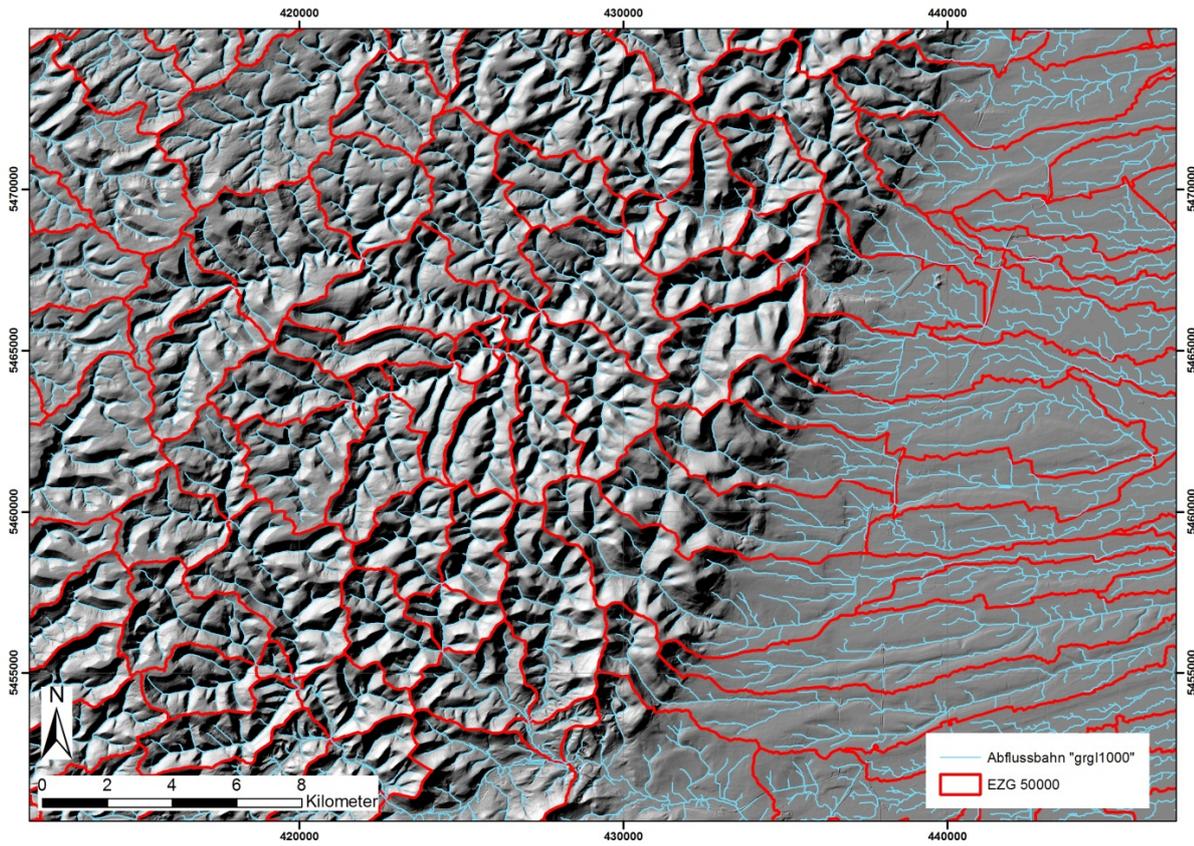


Abb. A8-5: Ausschnitt der Abflussbahnen (mit Schwellwert 1000 beitragende Zellen).

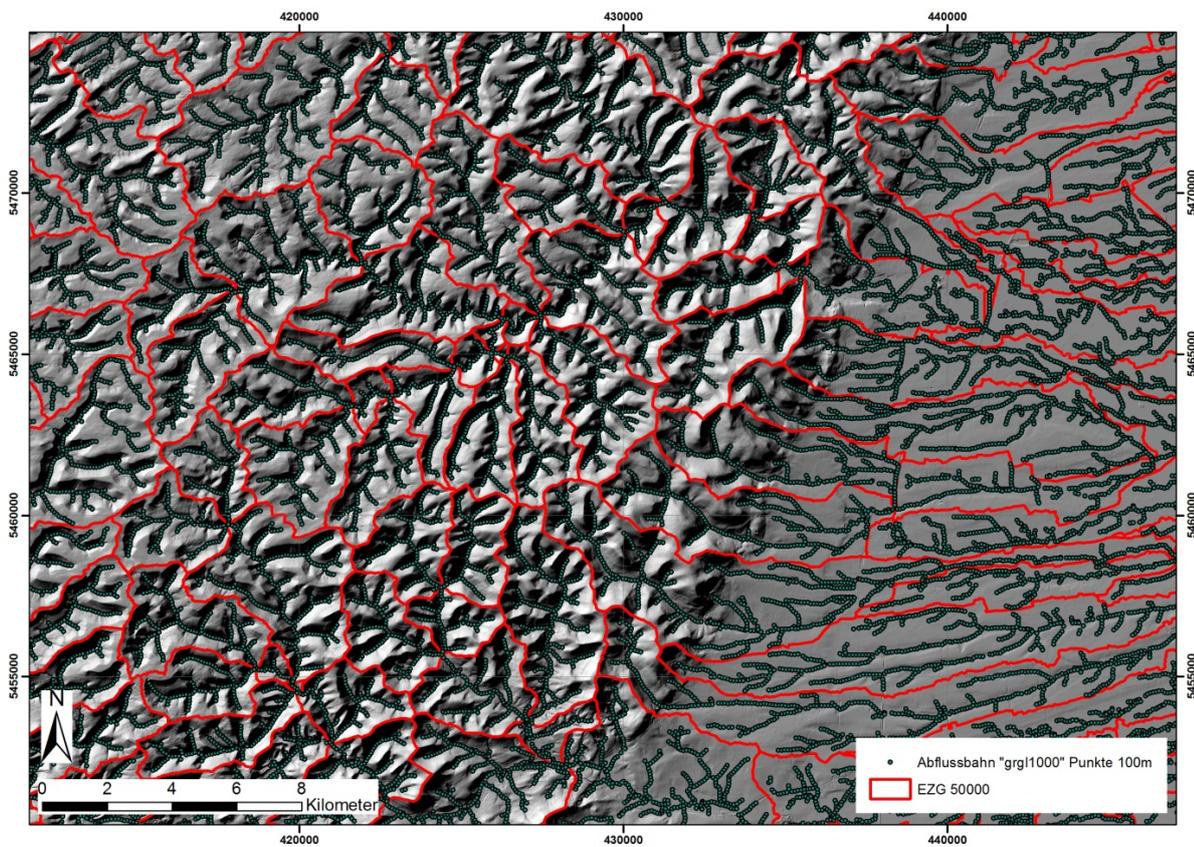


Abb. A8-6: Ausschnitt der in Punkte im 100 m Abstand umgewandelten Abflussbahnen 1000.

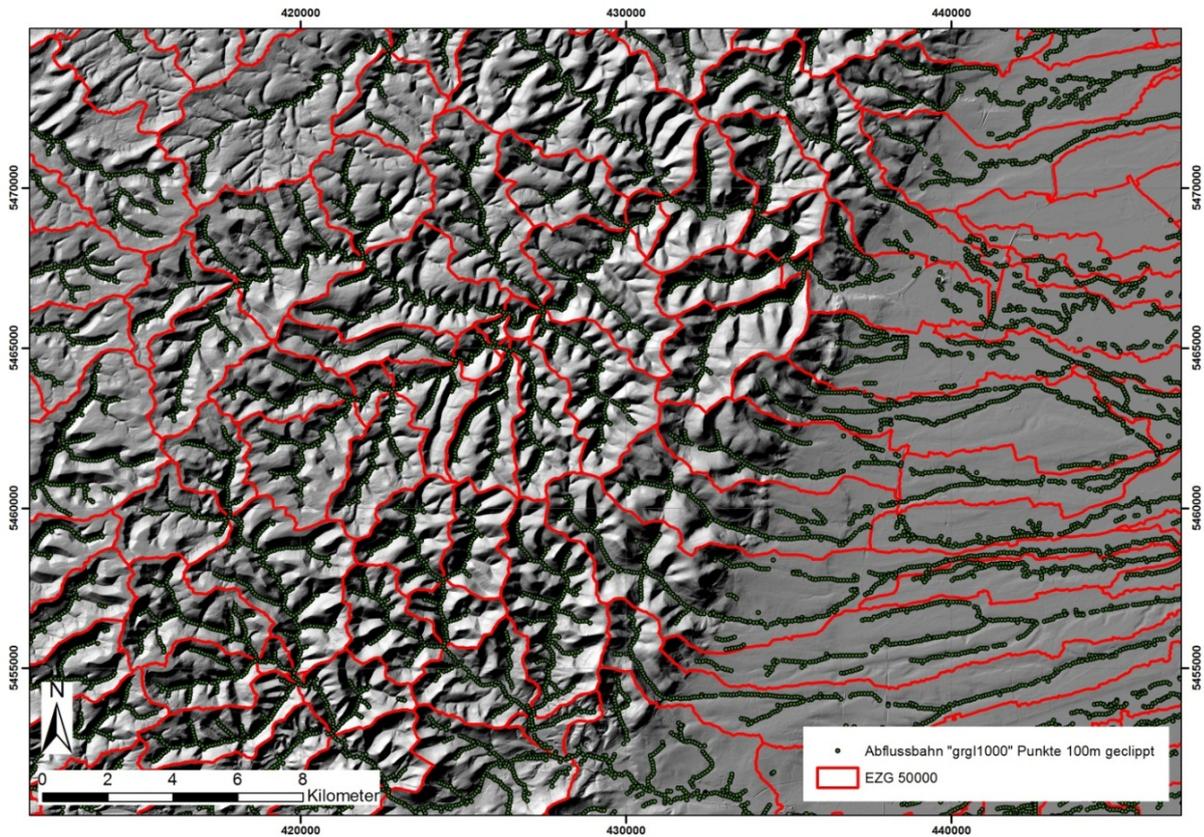


Abb. A8-7: Ausschnitt der in Punkte im 100 m Abstand umgewandelten Abflussbahnen 1000, ausgeschnitten auf ein 100m-Puffer um die ATKIS Gewässer.

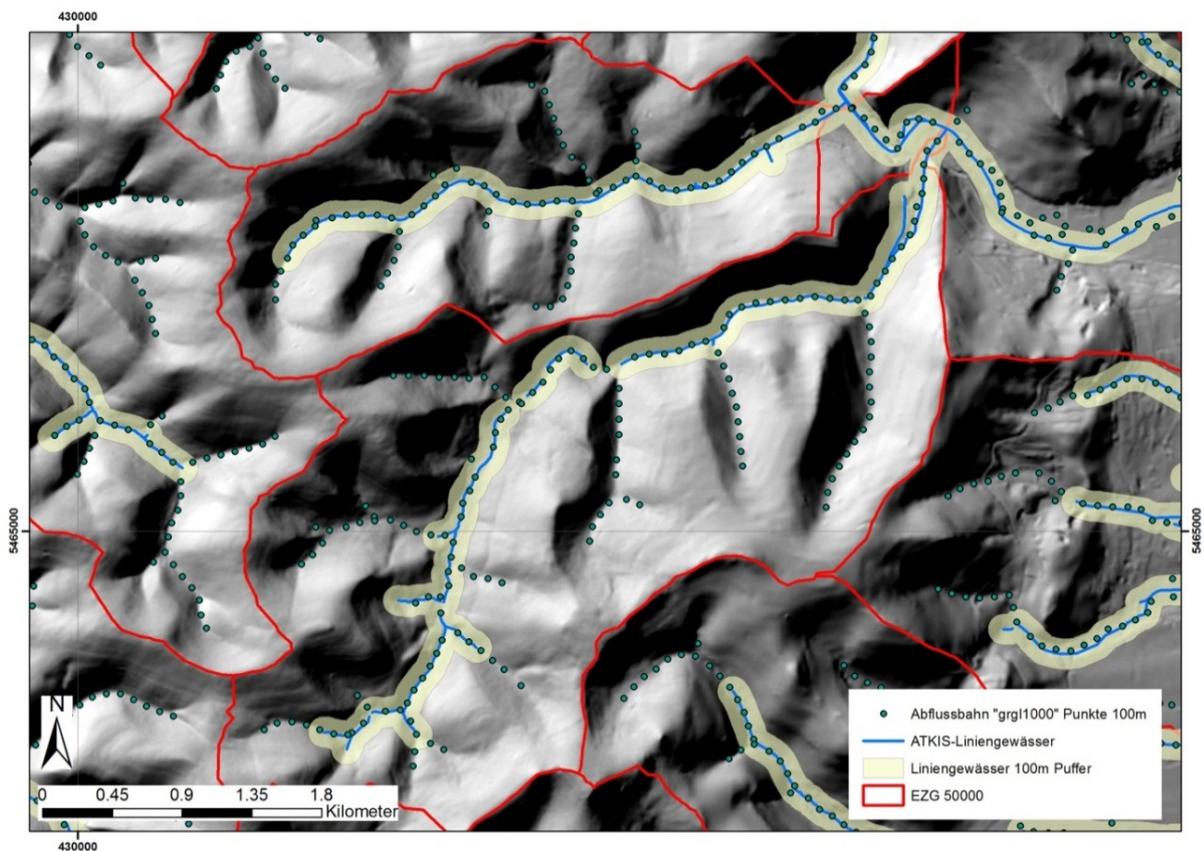


Abb. A8-8: Detailausschnitt der in Punkte im 100 m Abstand umgewandelten Abflussbahnen 1000 und der ATKIS-Gewässerverläufe.

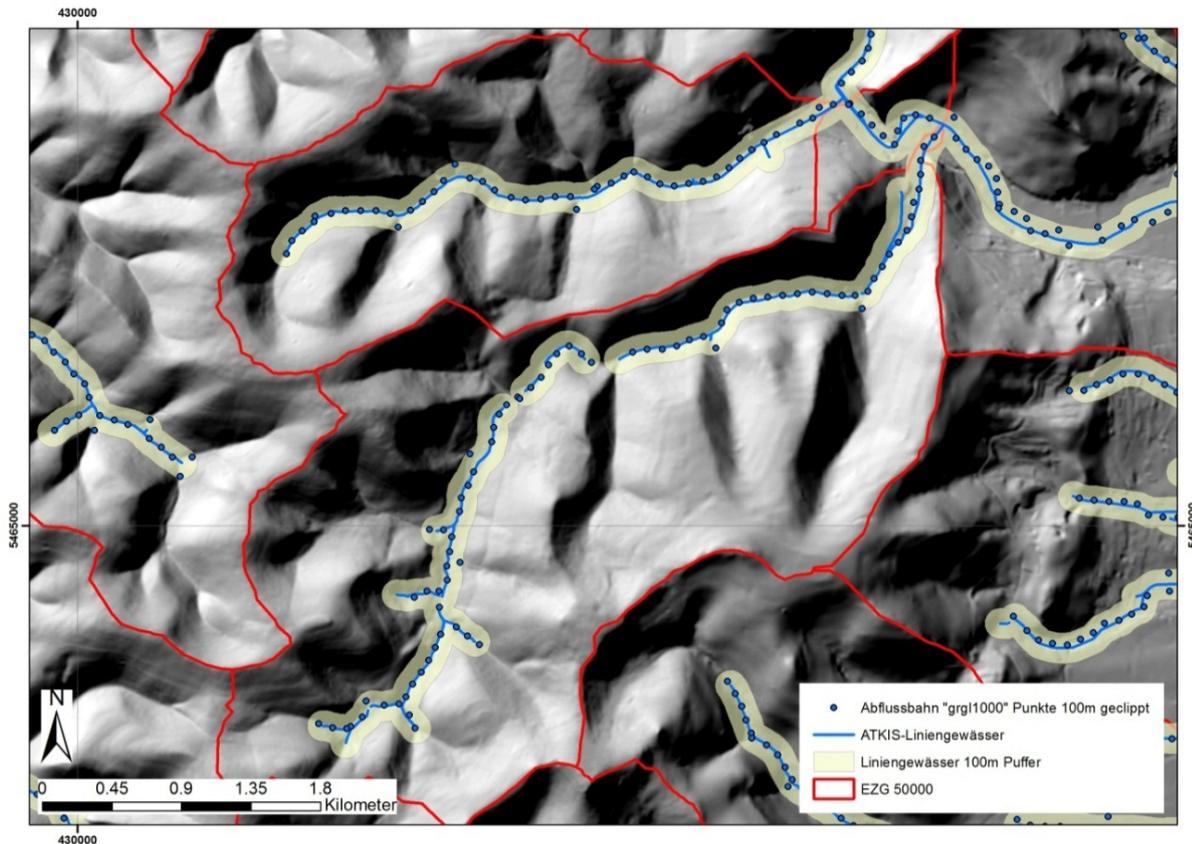


Abb. A8-9: Detailausschnitt der in Punkte im 100 m Abstand umgewandelten Abflussbahnen 1000, ausgeschnitten auf ein 100m-Puffer um die ATKIS Gewässer.

Für die zur Bestimmung der mittleren Distanz zum Outlet notwendigen Analyseschritte wurde zunächst das Raster „downstream-length“ aus dem DGM 10 flächendeckend berechnet. Diese Größe gibt die abwärts gerichtete Distanz entlang der Abflussbahn bis hin zu einer Senke oder dem Rand des Höhenmodellrasters an.

Zur Identifizierung des Outlets der Einzugsgebiete wurden die Abflussbahnen mit den EZG verschnitten (output type „point“). Aus den daraus resultierenden Multipoints (Abflussbahnen schneiden die EZG-Umgrenzungen sowohl beim „Eintritt“ als auch beim Ausfluss) wurden Einzelpunkte gebildet. Dann erfolgte eine Abfrage der „downstream-length“ für diese Einzelpunkte. Der Einzelpunkt mit dem geringsten Wert ist der Outlet.

Anschließend wurde das zuvor auf den Gewässerpuffer ausgeschnittene Abflussbahnnetz mit Schwellenwert 1000 in Punkte im Abstand von 100 m umgewandelt. Für diese Punkte wurde dann die „downstream-length“ bestimmt. An jeden Punkt wurde dann die „downstream-length“ des outlets in der Attributtabelle angefügt. Dadurch konnte jeweils die Differenz aus der „downstream-length“ des Punktes und des Outlets gebildet werden. Anschließend wurden die Punkte nach EZG-ID „dissolved“. Dabei wurde die „Differenz-mean“, „Differenz-min“ und „Differenz-max“ ermittelt. „Differenz-mean“ stellt die mittlere Distanz zum Outlet dar. Die „Differenz-max“, also der längste Fließpfad, pro EZG wurde als das „Hauptgerinne“ definiert.

A9 Ergebnisdiagramme der Sensitivitätsanalyse nach Morris

Dieser Anhang enthält nur Diagramme für die Outputvariablen PEC_{sw,max} und PEC_{sed,max}. Diagramme weiterer Outputvariablen können bei den Autoren nachgefragt werden.

In dem für das Postprocessing benutzten Skript wurde sigma nicht als Standardabweichung, sondern als Standardfehler der elementary effects berechnet. Um die Standardabweichung zu erhalten, müssen die Werte von sigma mit $\sqrt{20} \approx 4.472$ multipliziert werden.

Die Kürzel in den Abbildungsüberschriften bedeuten:

MM:	Morris-Maße
EXPOSIT; FOCUS(standard):	Verfahren der Expositonsabschätzung
RE; D:	Runoff & Erosion; Drainage
PEC _{sw} ; PEC _{sed}	Maximum der PEC im Oberflächengewässer /im Sediment

EXPOSIT Drainage

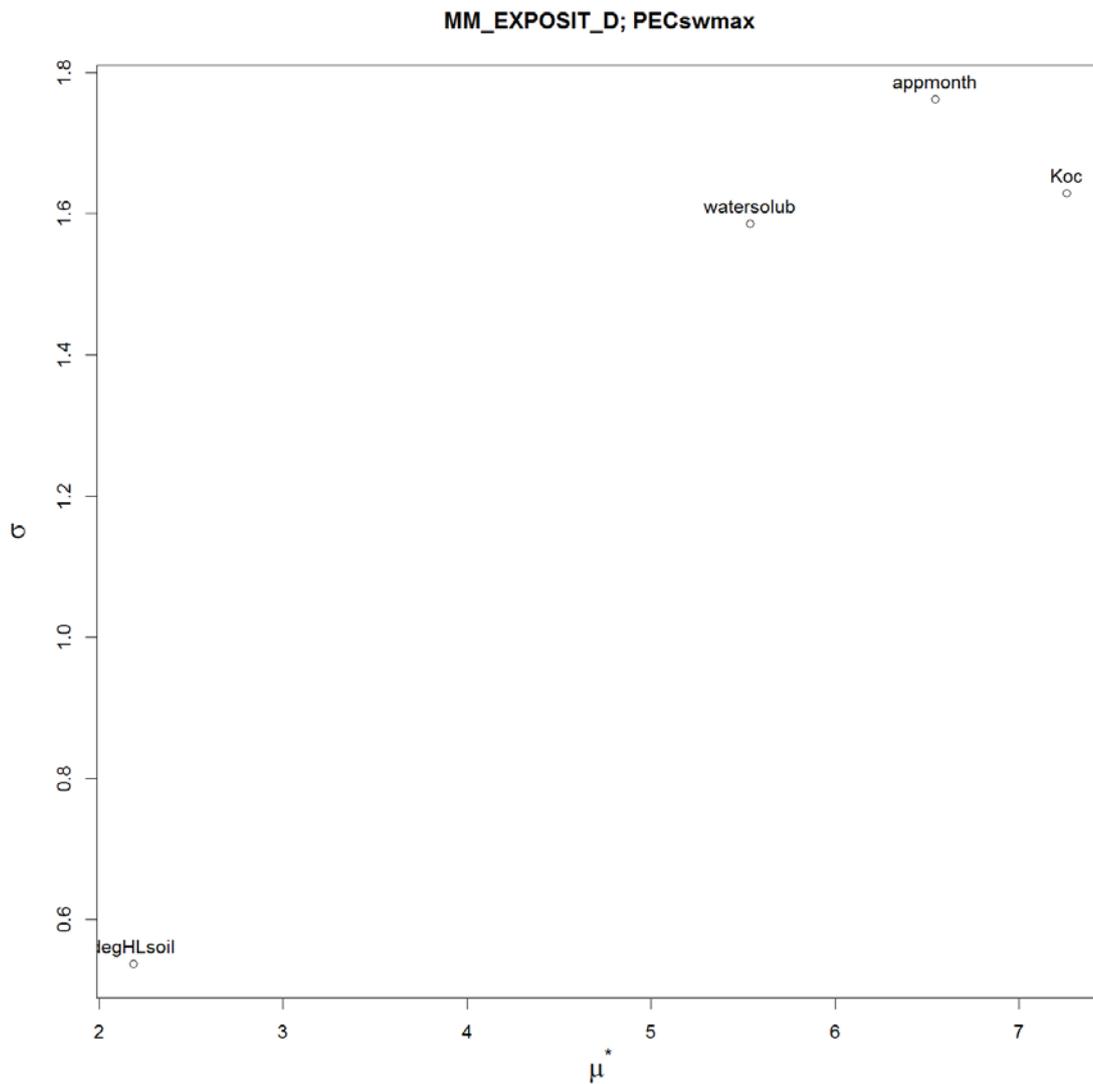


Abb. A9-1: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse EXPOSIT Drainage. Outputvariable $PEC_{sw,max}$ (= PEC initial Graben; $\mu\text{g/L}$).

EXPOSIT R+E

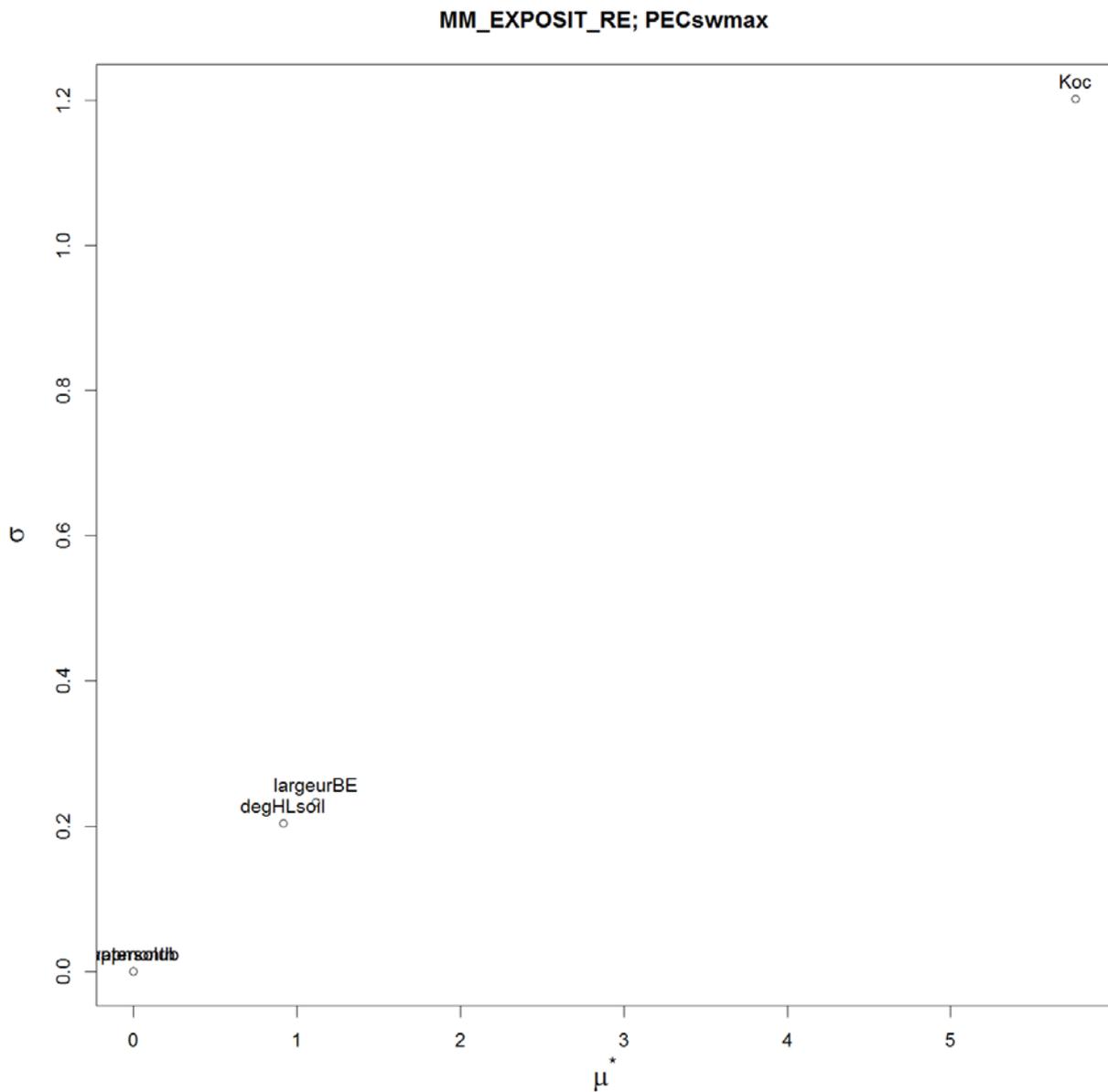


Abb. A9-2: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse EXPOSIT R+E. Outputvariable PECsw,max (= PEC initial Graben; $\mu\text{g/L}$).

FOCUSstd Drainage Ditch

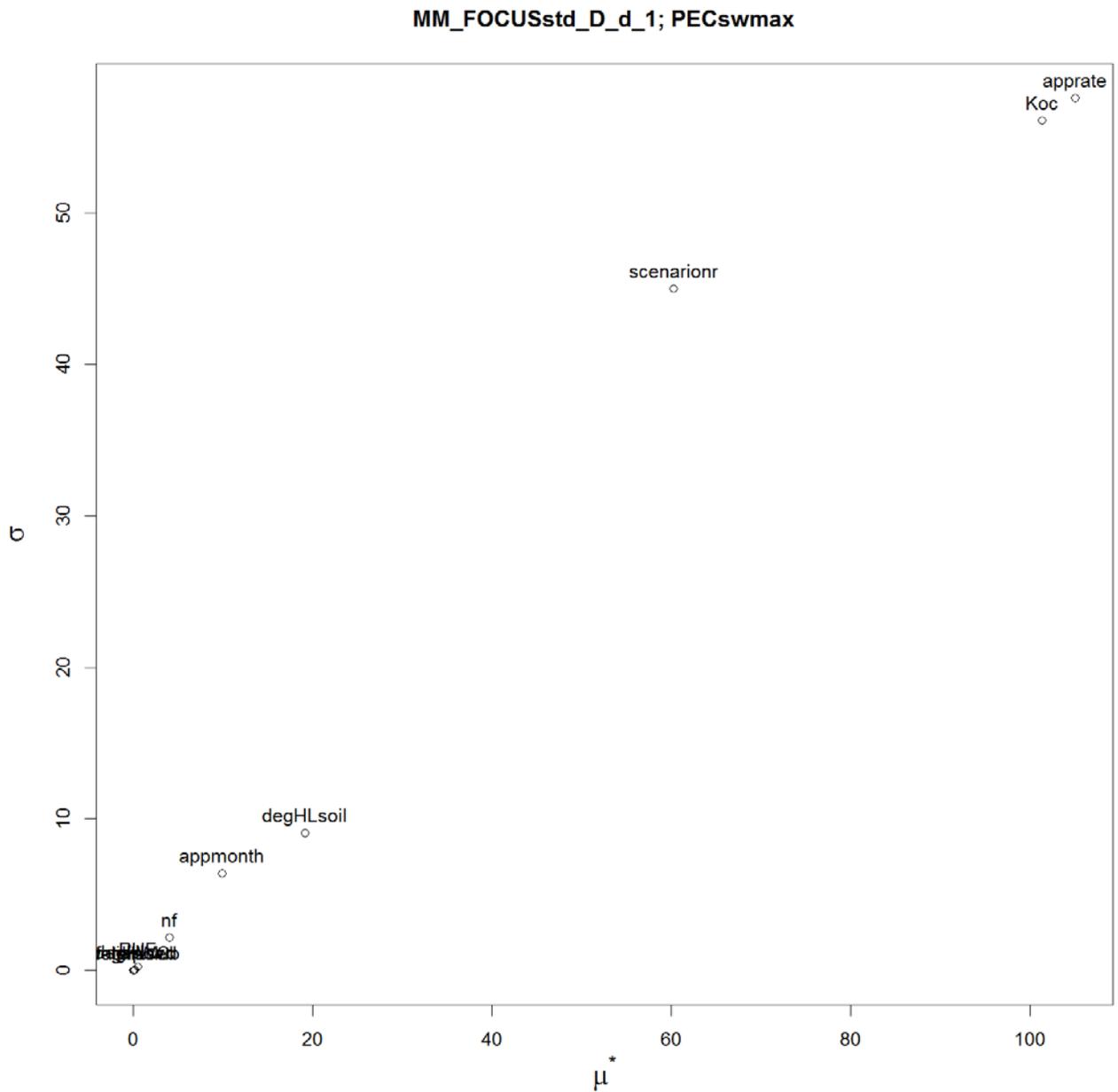


Abb. A9-3: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Ditch. Outputvariable PECsw,max($\mu\text{g/L}$).

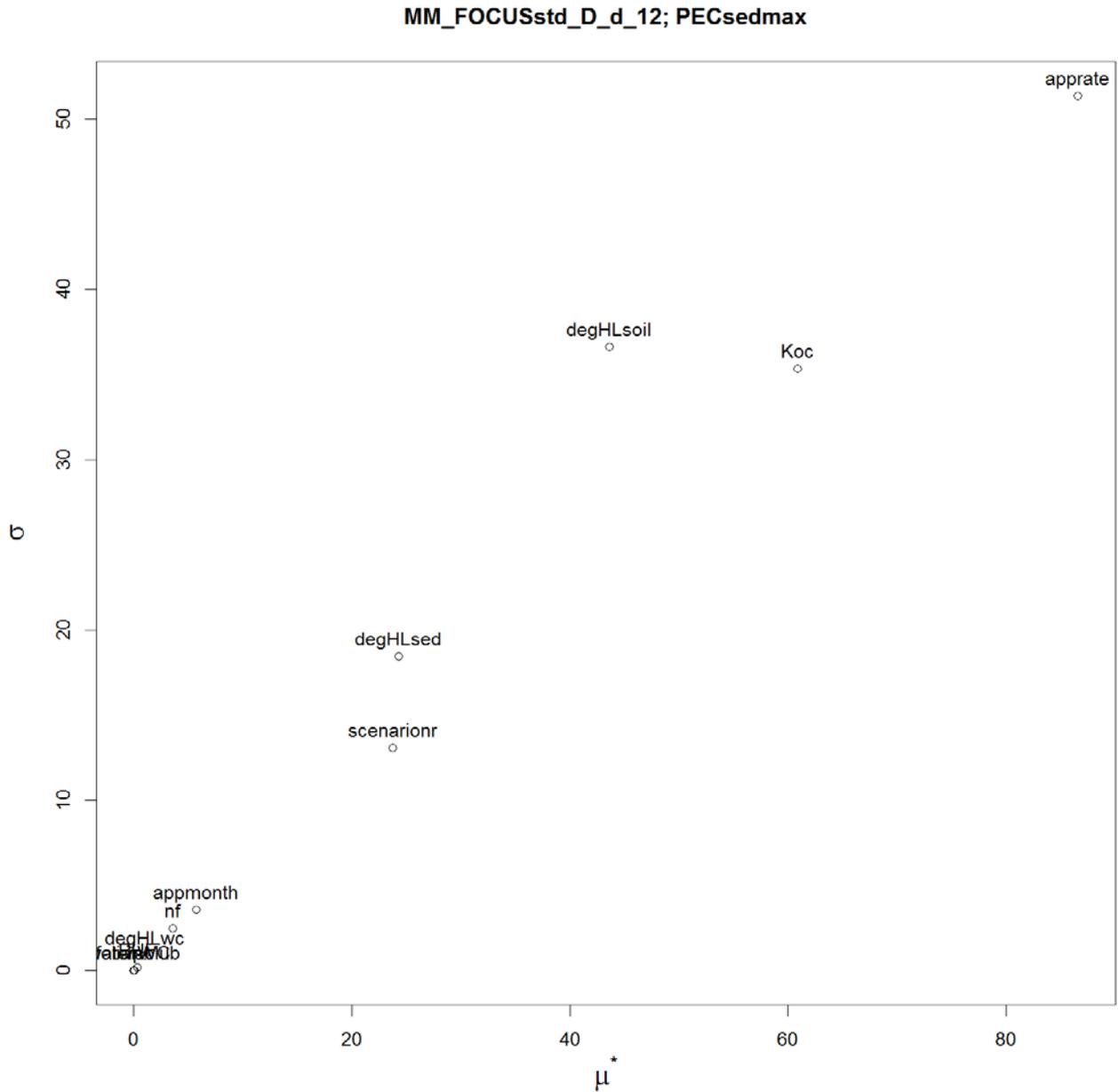


Abb. A9-4: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Ditch. Outputvariable PECsed,max($\mu\text{g}/\text{kg}$ Trockenmasse).

FOCUSstd Drainage Stream

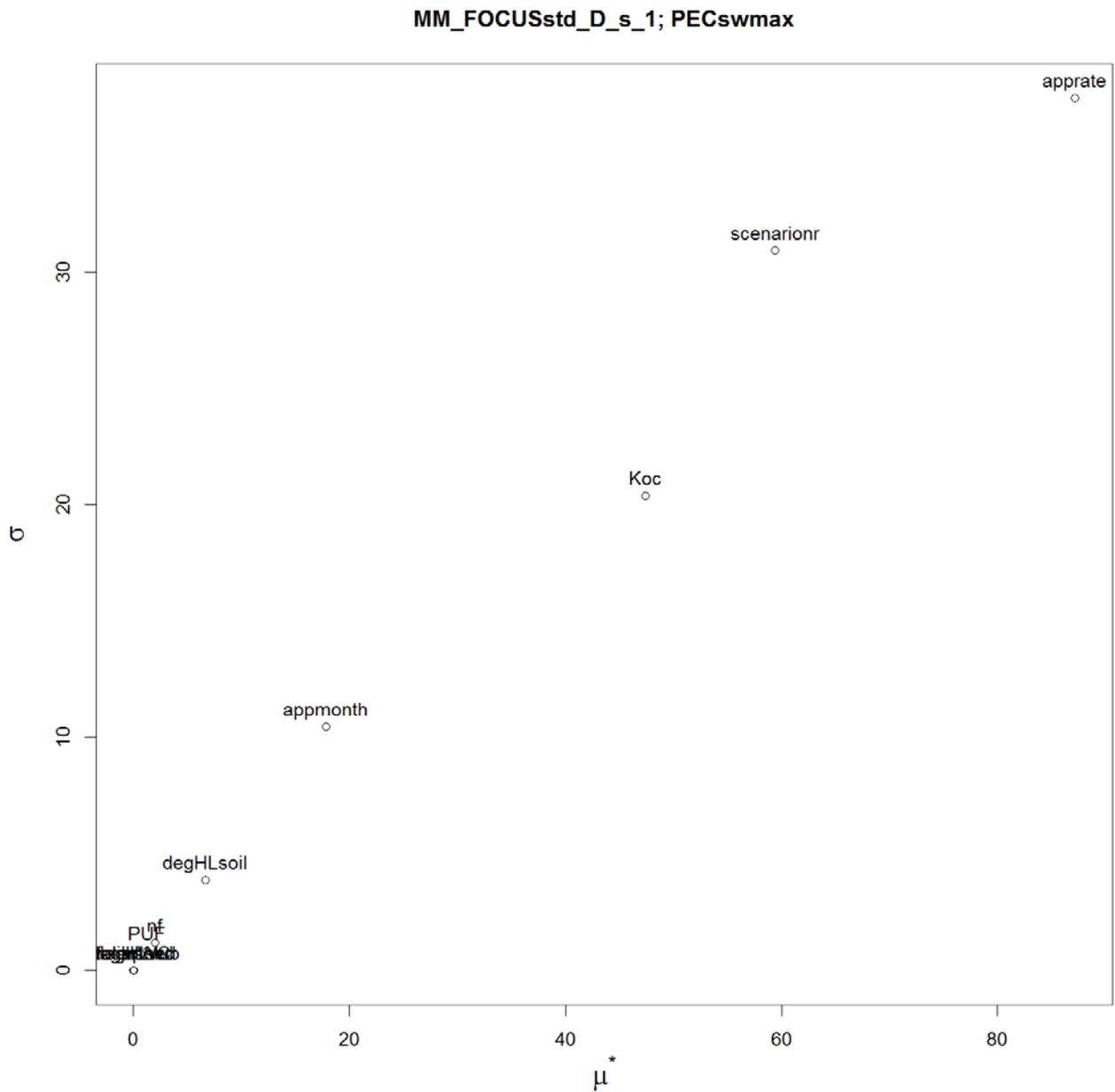


Abb. A9-5: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Stream. Outputvariable PECsw,max ($\mu\text{g/L}$).

FOCUSstd Drainage Pond

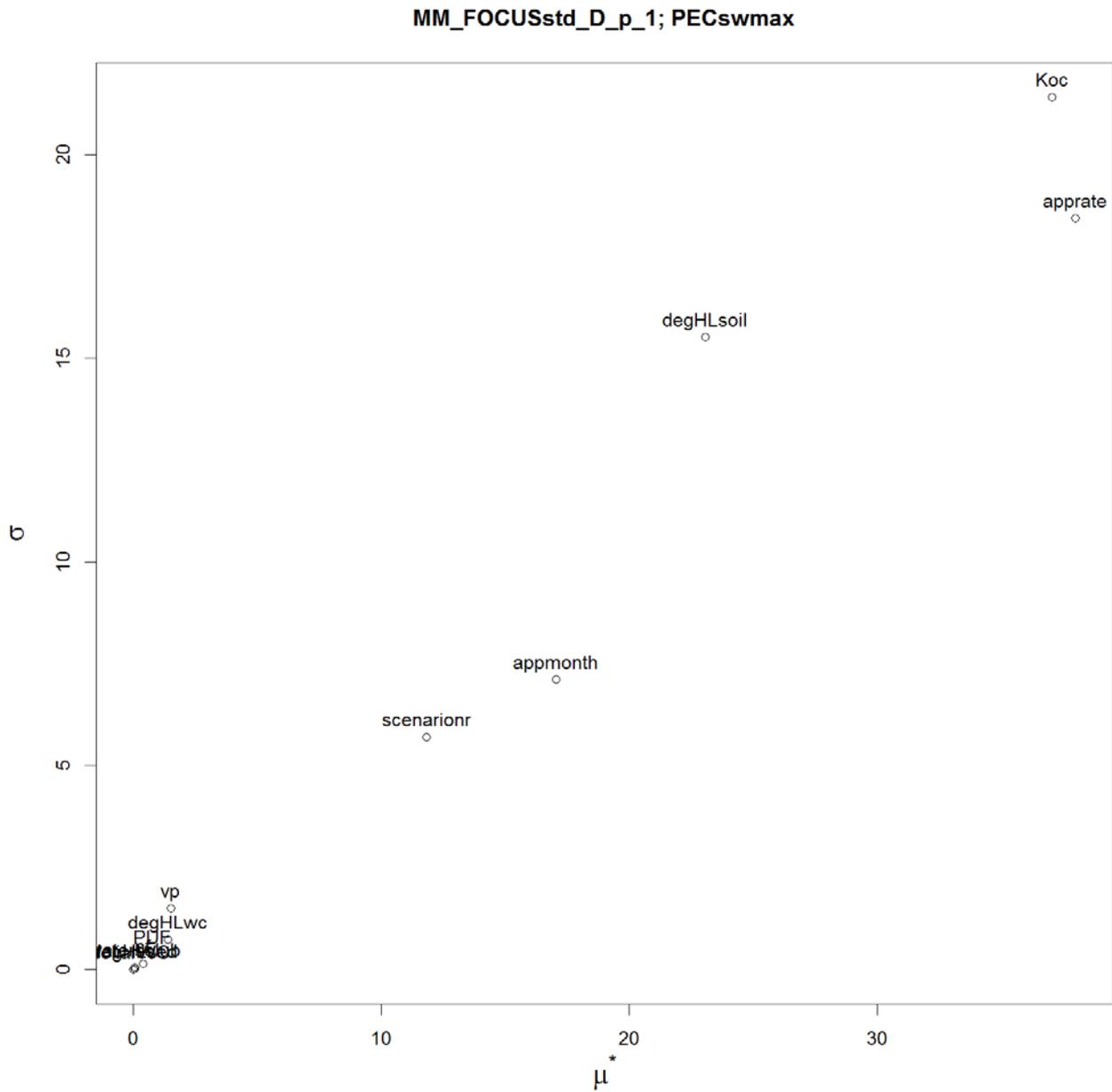


Abb. A9-7: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Pond. Outputvariable PECsw,max ($\mu\text{g/L}$).

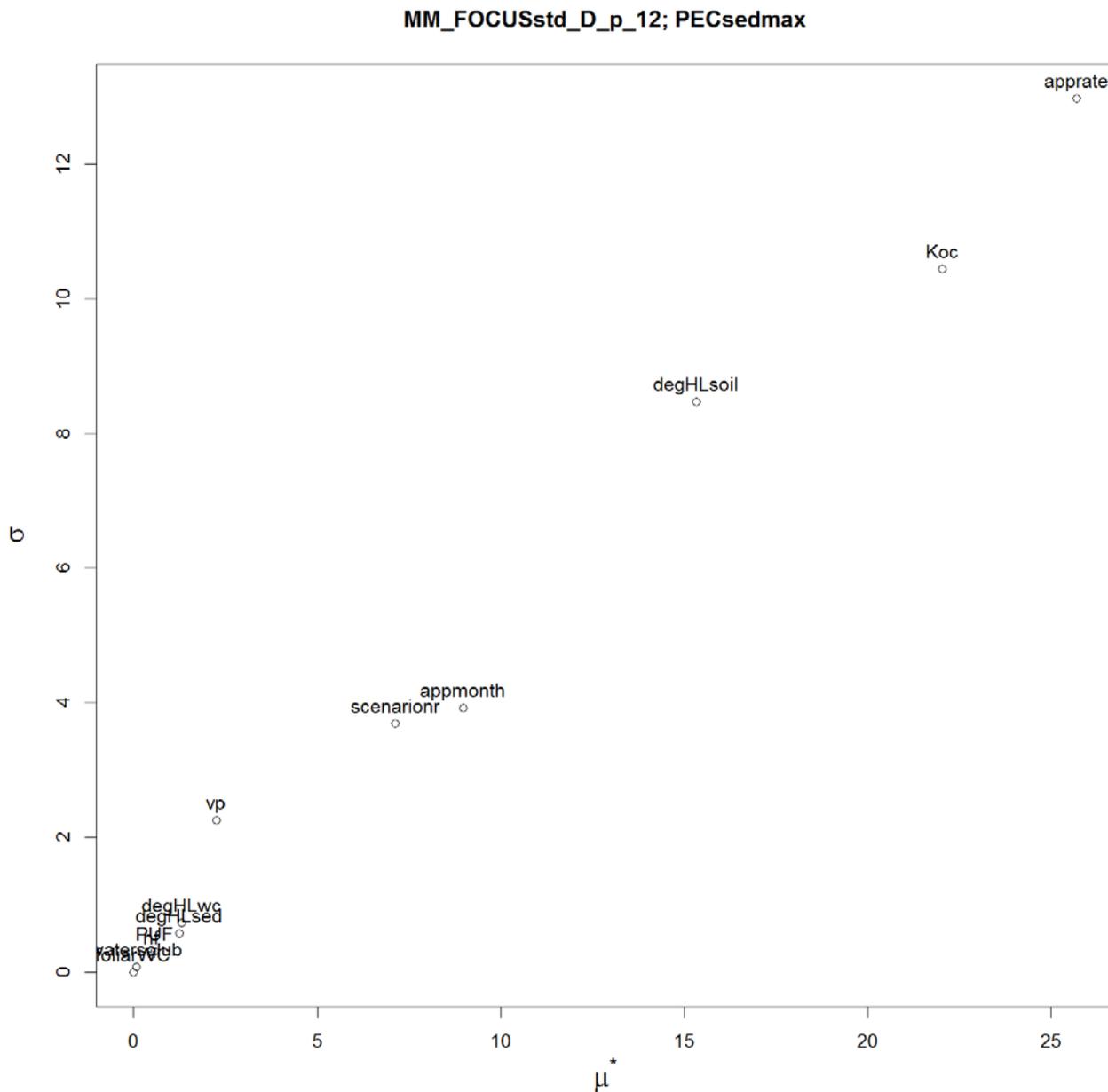


Abb. A9-8: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard Drainage Pond. Outputvariable PECsed,max ($\mu\text{g}/\text{kg}$ Trockenmasse).

FOCUSstd R+E Stream

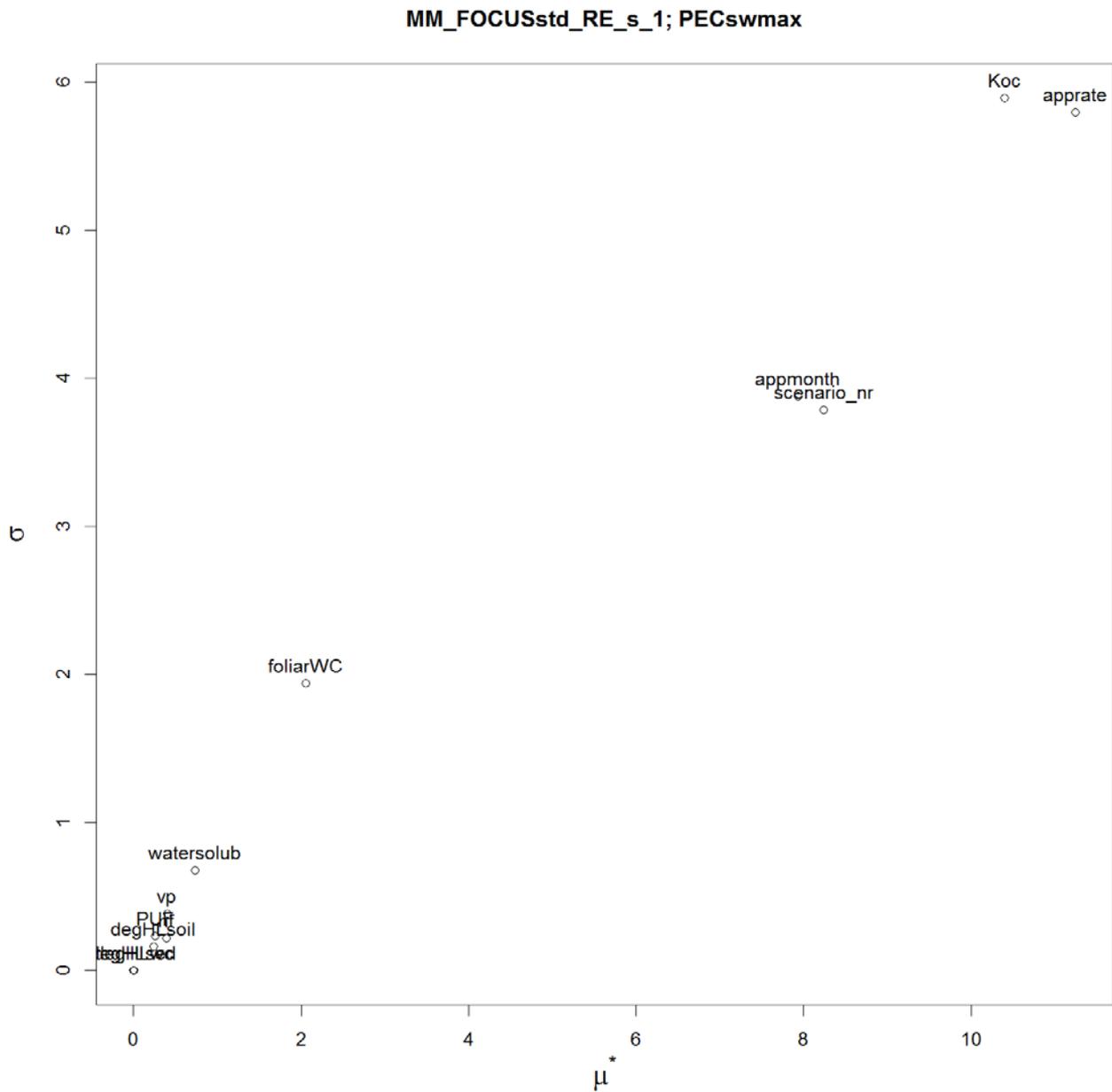


Abb. A9-9: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard R+E Stream. Outputvariable PECsw,max ($\mu\text{g/L}$).

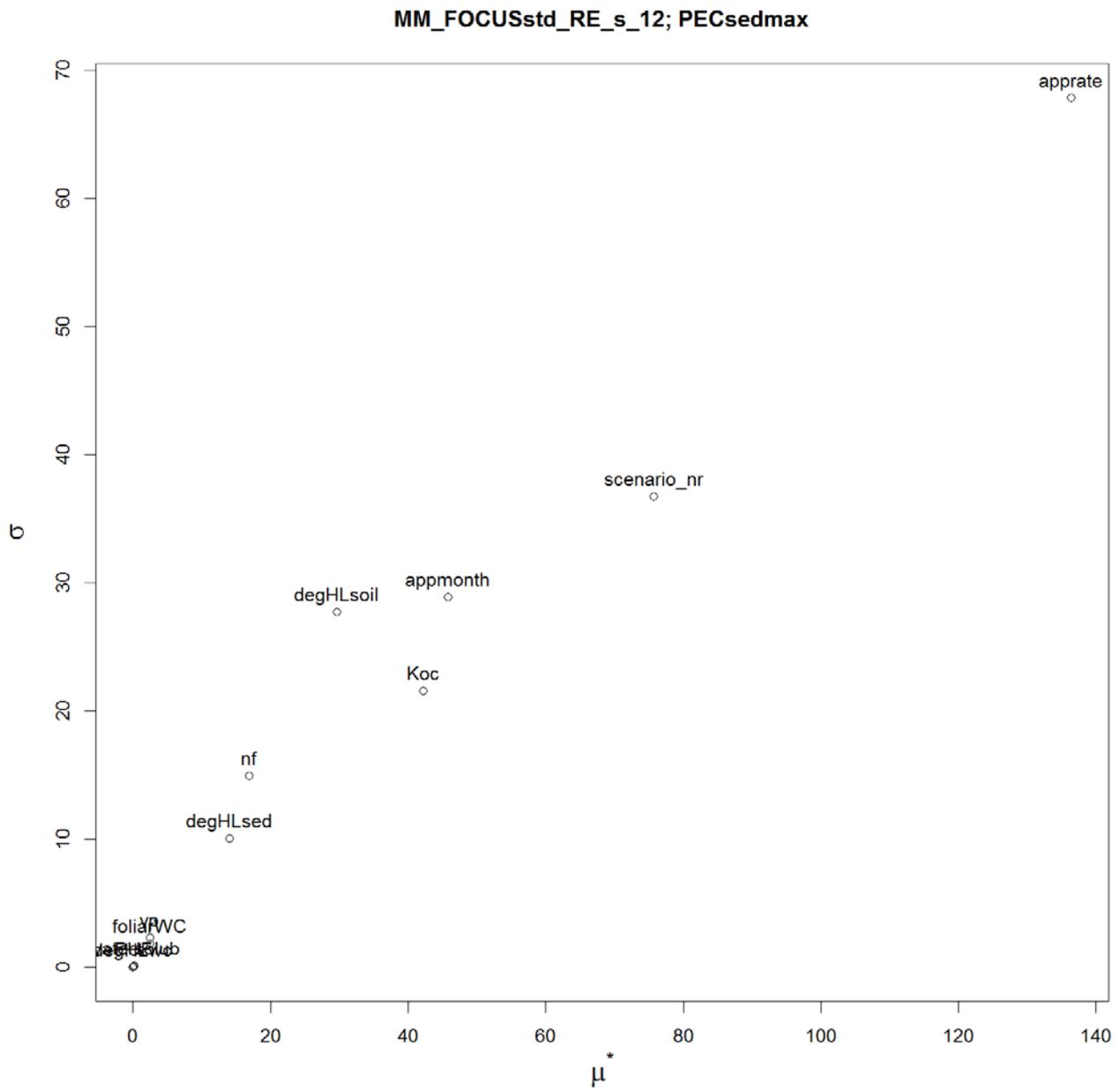


Abb. A9-10: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard R+E Stream. Outputvariable PECsed,max ($\mu\text{g}/\text{kg}$ Trockenmasse).

FOCUSstd R+E Pond

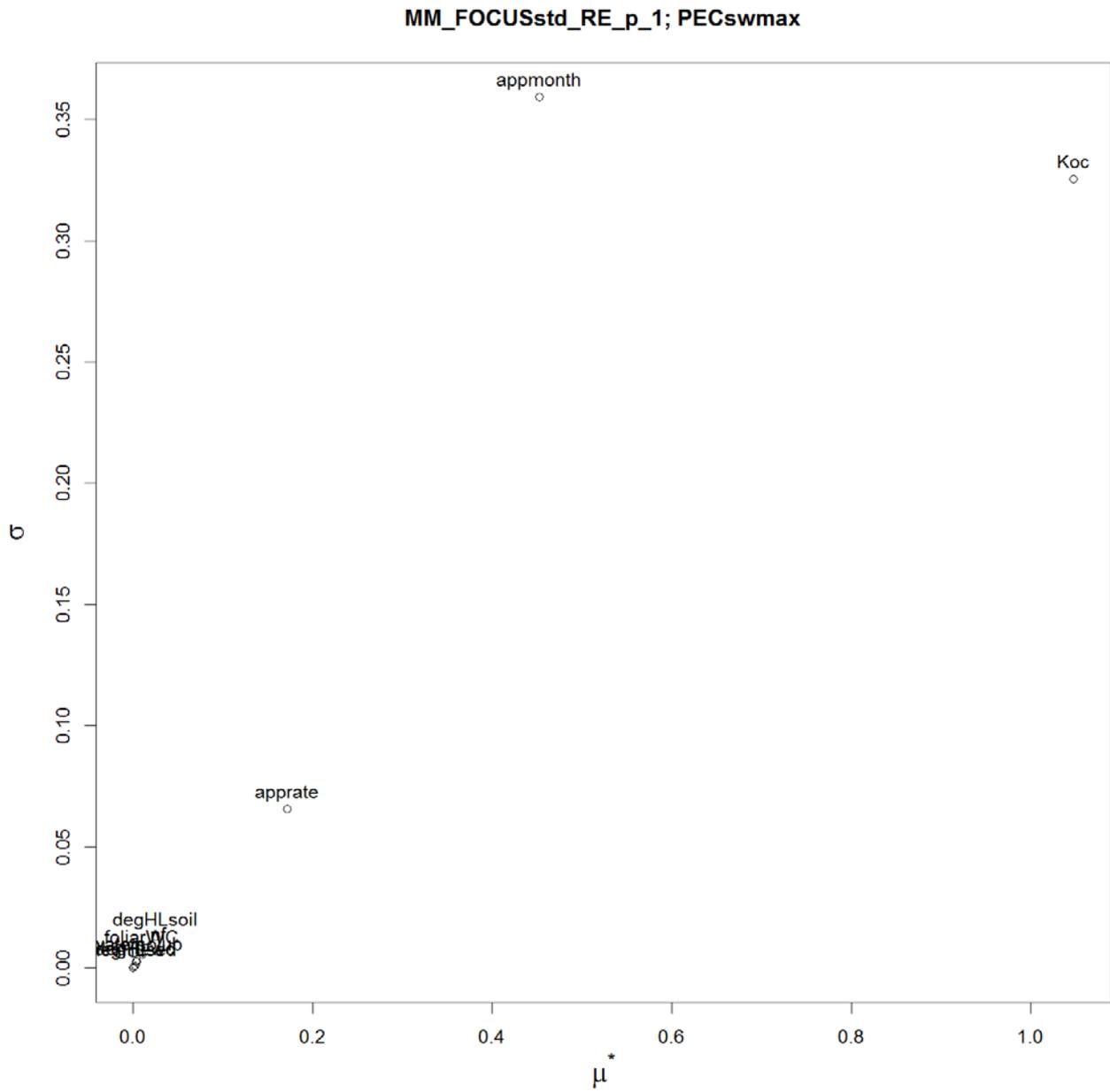


Abb. A9-11: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard R+E Pond. Outputvariable PECsw,max ($\mu\text{g/L}$).

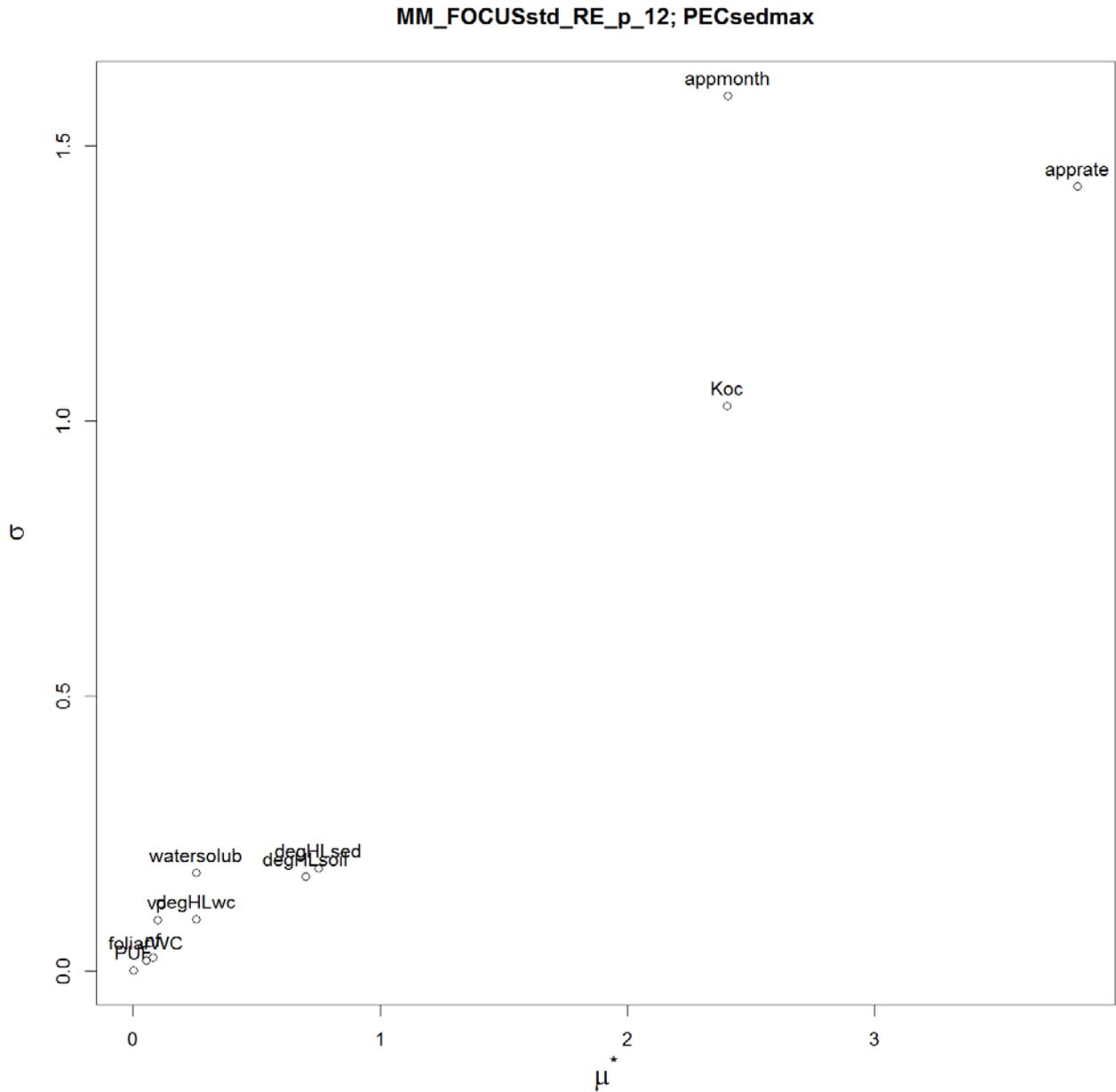


Abb. A9-12: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS standard R+E Pond. Outputvariable PECsed,max ($\mu\text{g}/\text{kg}$ Trockenmasse).

FOCUSmod Drainage Ditch

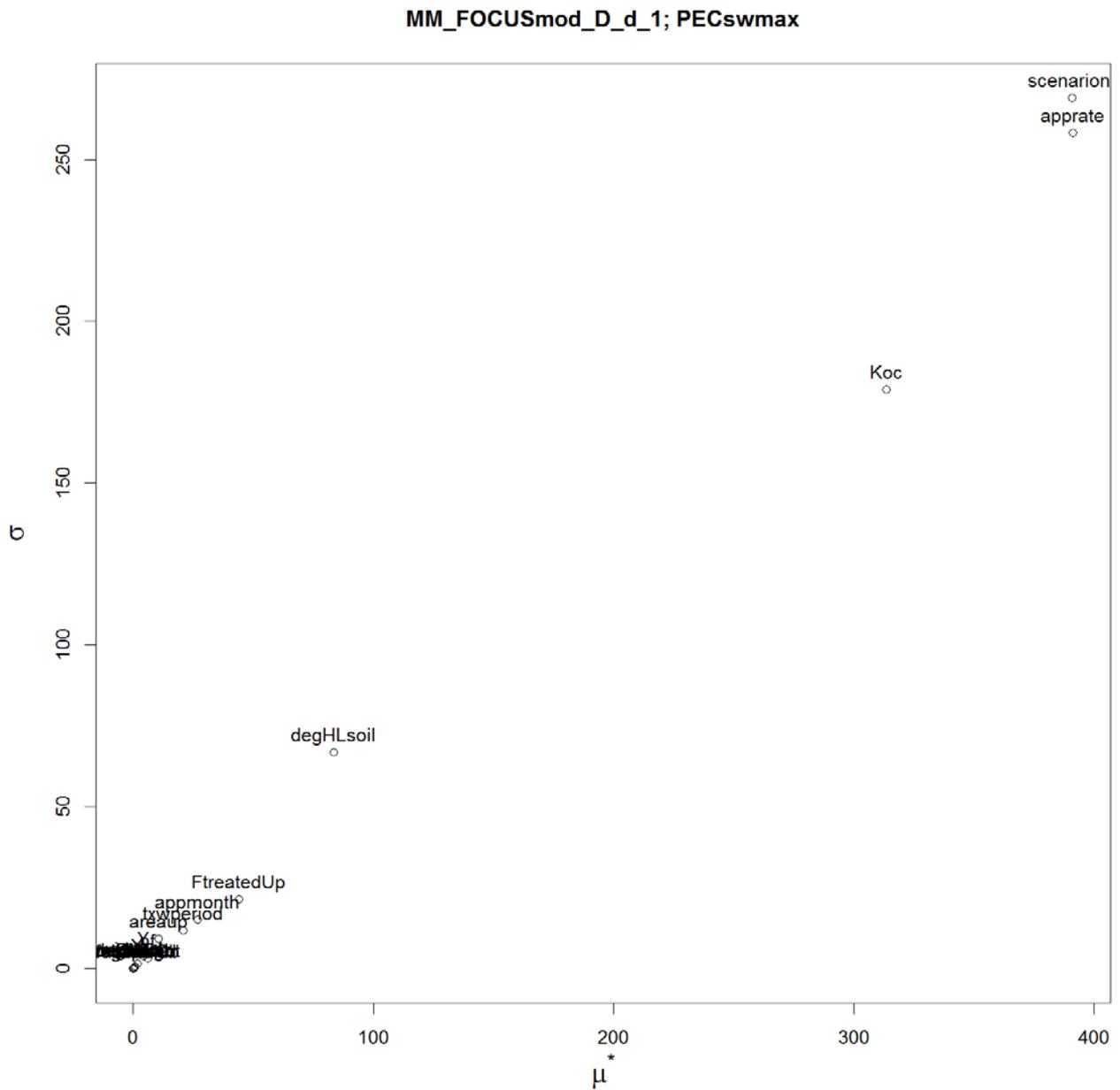


Abb. A9-13: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Ditch. Outputvariable PECsw,max ($\mu\text{g/L}$).

FOCUSmod Drainage Stream

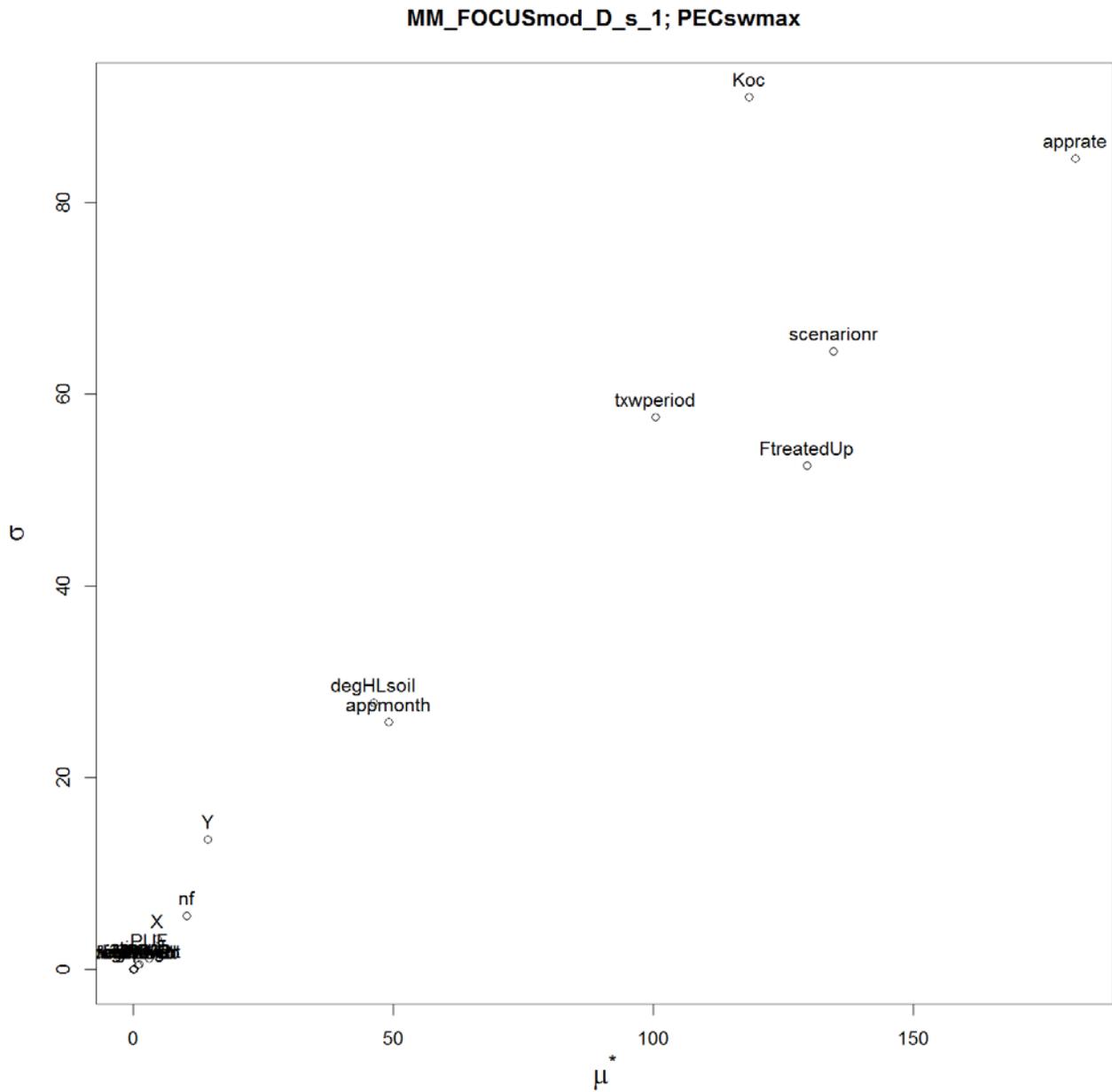


Abb. A9-15: Morris-Maß μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Stream. Outputvariable PECsw,max ($\mu\text{g/L}$).

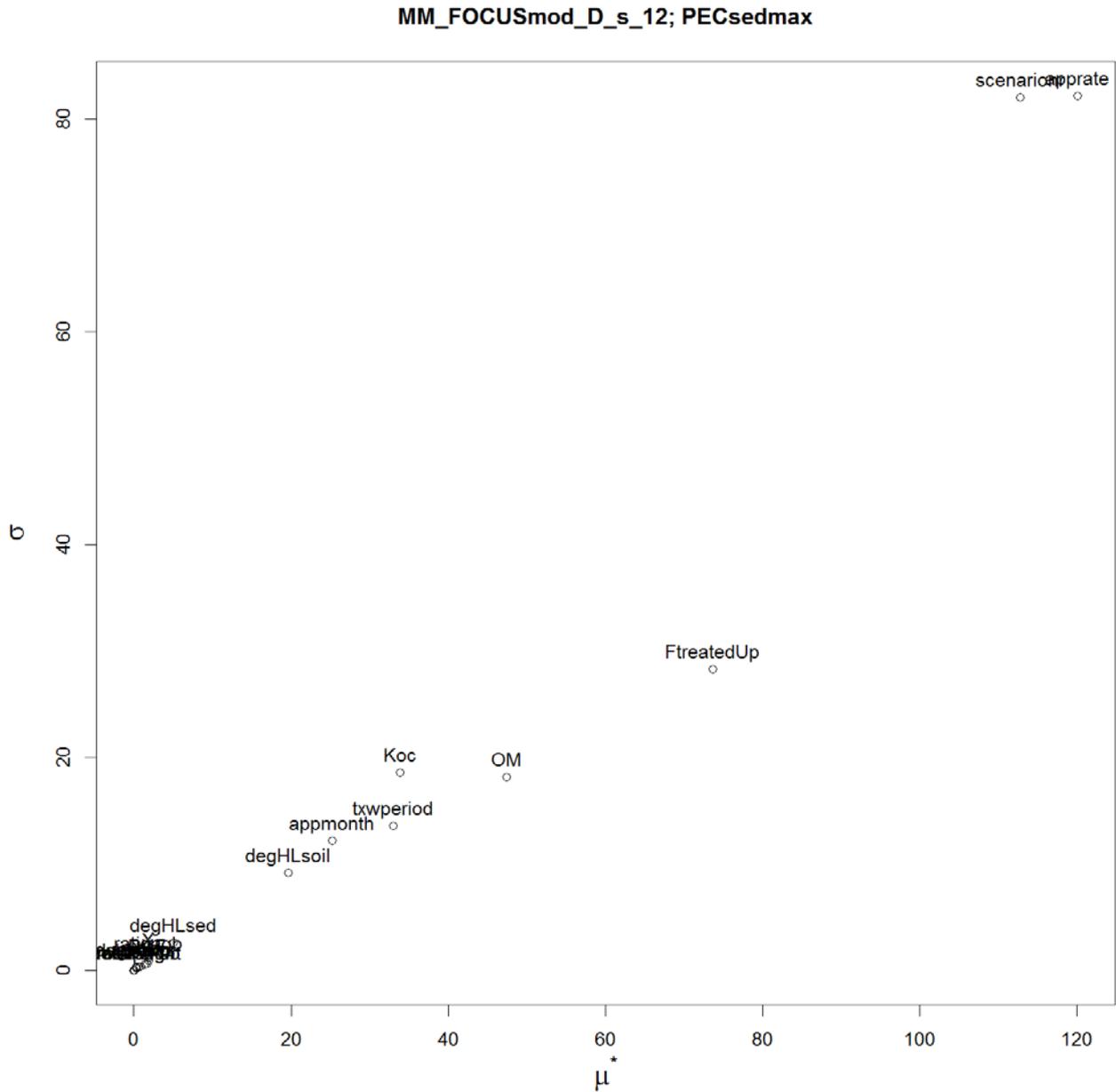


Abb. A9-16: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Stream. Outputvariable PECsed,max($\mu\text{g}/\text{kg}$ Trockenmasse).

FOCUSmod Drainage Pond

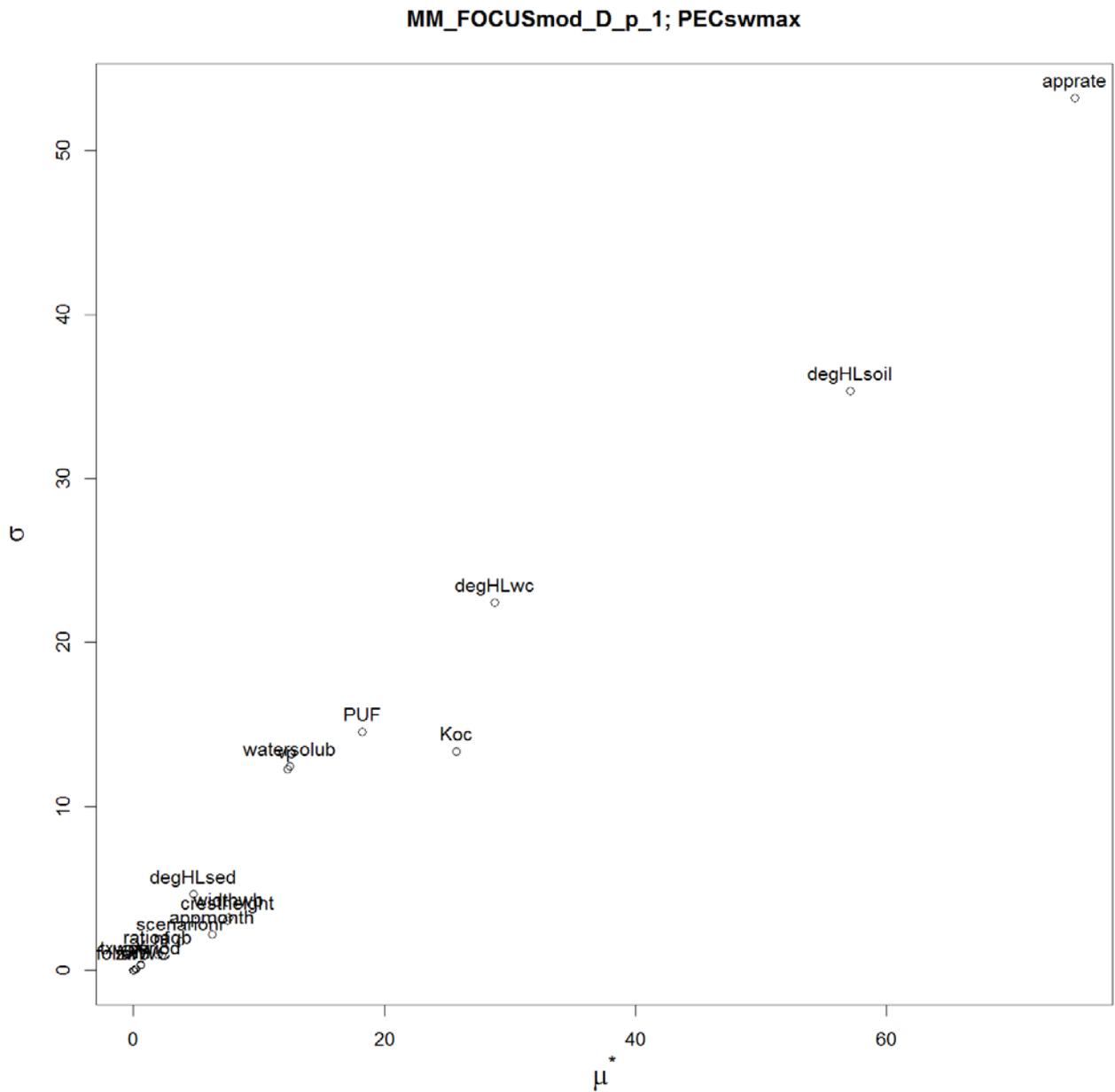


Abb. A9-17: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Pond. Outputvariable PECsw,max ($\mu\text{g/L}$).

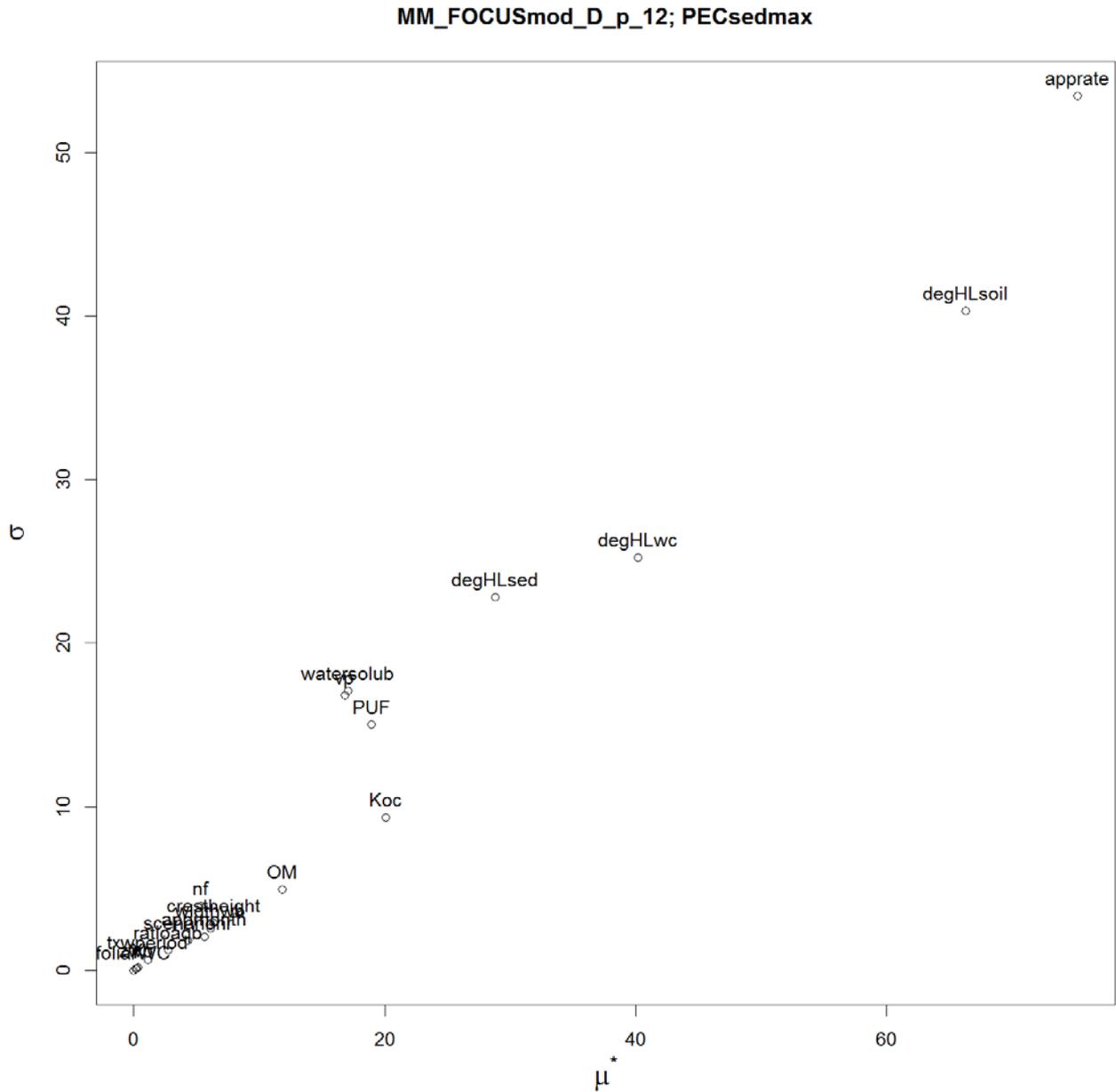


Abb. A9-18: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified Drainage Pond. Outputvariable PECsed,max ($\mu\text{g}/\text{kg}$ Trockenmasse).

FOCUSmod R+E Pond

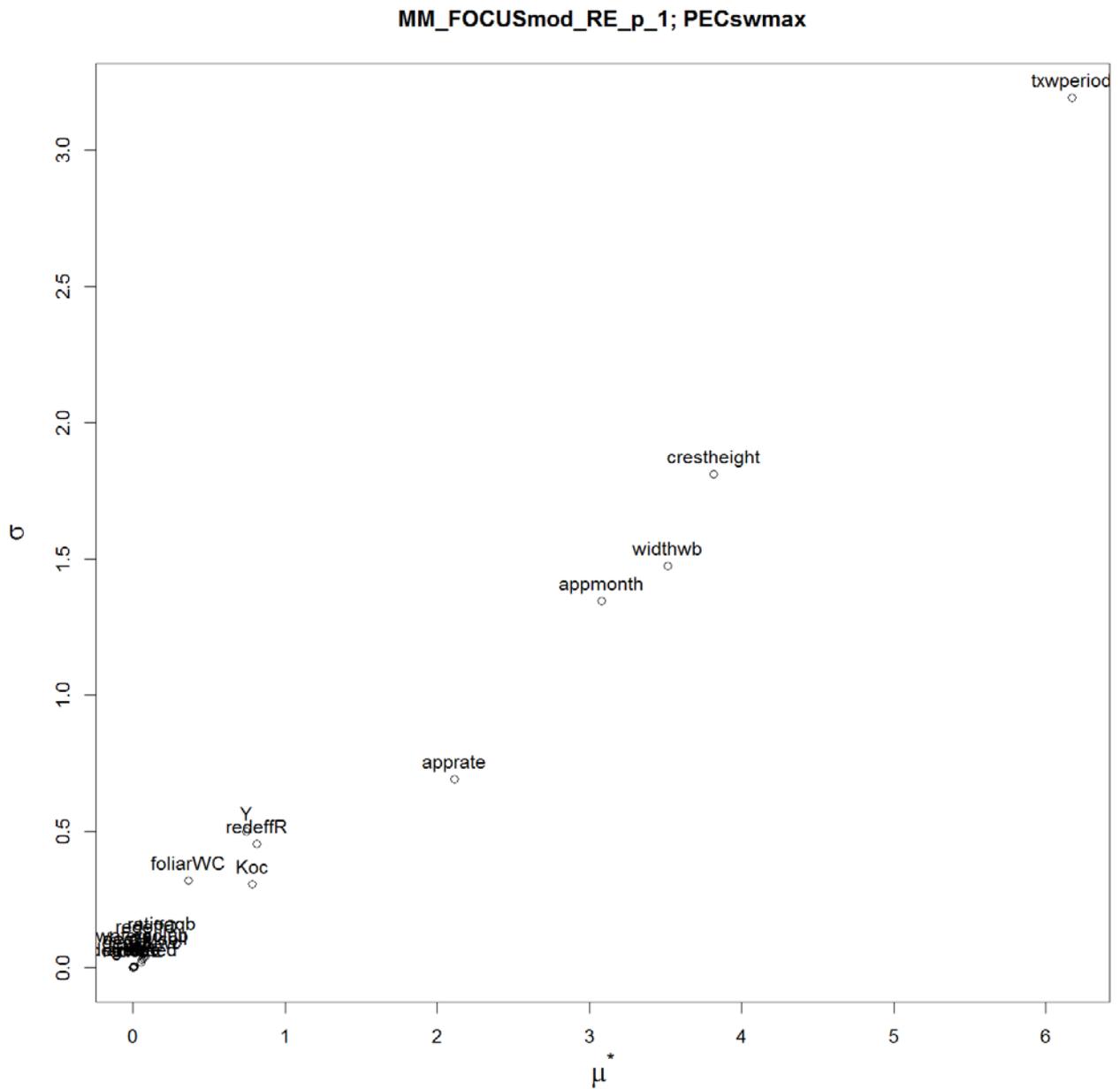


Abb. A9-19: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified R+E Pond. Outputvariable PECsw,max ($\mu\text{g/L}$).

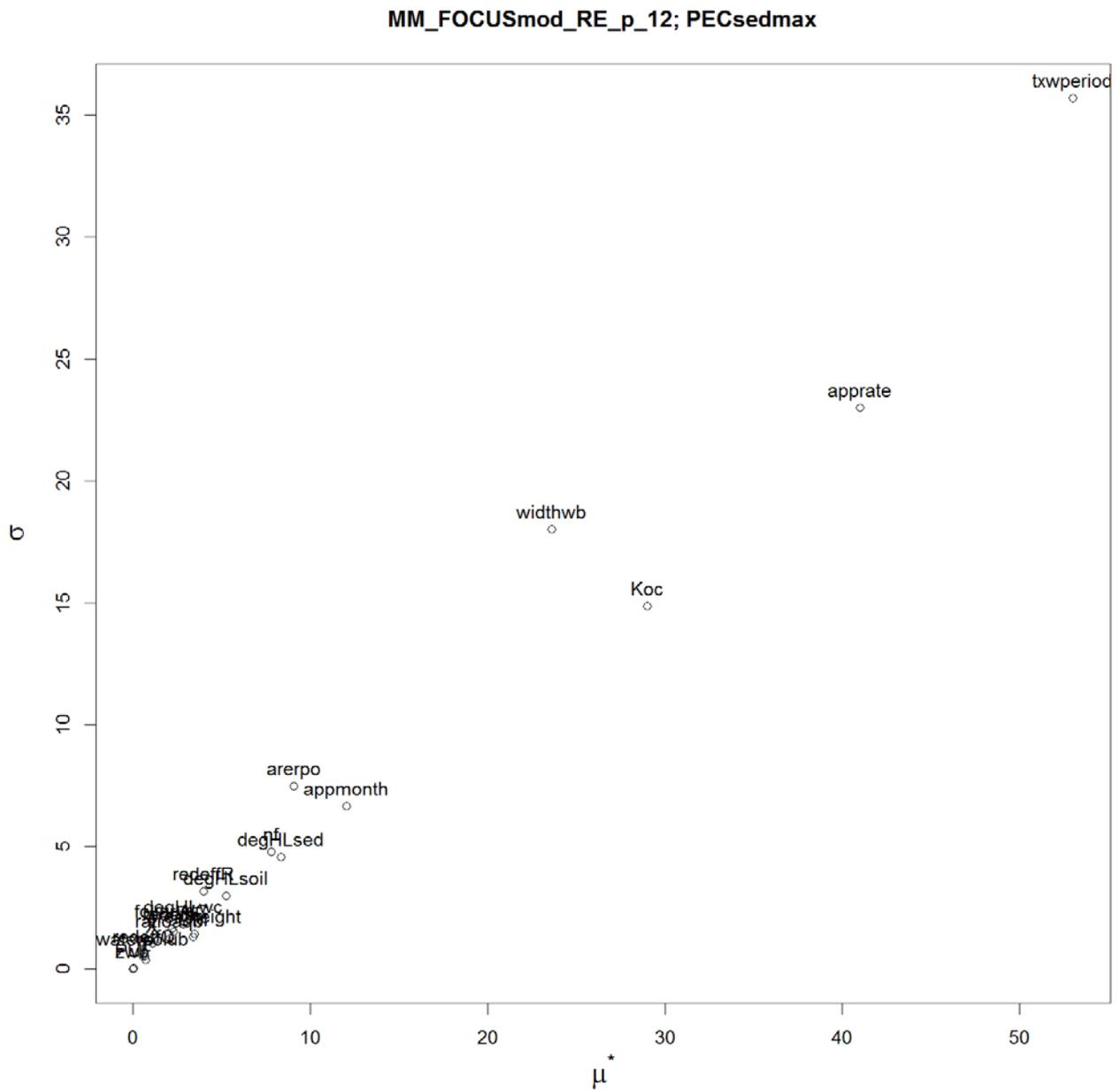


Abb. A9-20: Morris-Maße μ^* vs. sigma für die Analyse FOCUS modified R+E Pond. Outputvariable PECsed,max ($\mu\text{g}/\text{kg}$ Trockenmasse).

A10 Parametrisierung des Gewässers in STEPS-3

Reichenberger und Pires (2013) führten eine umfassende vergleichende Simulationsstudie mit STEPS-3 und TOXSWA durch (insgesamt 14000 STEPS-3- und 560 TOXSWA-Simulationen). Motivation der Studie war die Tatsache, dass STEPS-3 aus Erfahrung fast identische PEC_{sw} und TWAC_{sw} wie TOXSWA liefert, die von STEPS-3 berechneten Werte für PEC_{sed} und TWAC_{sed} jedoch mehr oder weniger stark von denen von TOXSWA abweichen (Es ist anzumerken, dass es keineswegs a priori garantiert ist, dass TOXSWA richtigere Ergebnisse für PEC_{sed} liefert als STEPS-3).

In der Studie wurde weiterhin ein Kalibrierungsversuch unternommen. Die folgenden drei Sedimentparameter von STEPS-3 wurden variiert mit dem Ziel, die von STEPS-3 berechneten PEC_{sed} und TWAC_{sed} gegen die von TOXSWA berechneten zu kalibrieren:

- Dicke der unteren Sedimentschicht (DEPTH_SED_DEEP)
- Diffusionsweglänge für die Grenzfläche Wassersäule – oberes Sediment (DIFF_L)
- Diffusionsweglänge für die Grenzfläche oberes Sediment – unteres Sediment (DIFF_L_sed).

Um die Anzahl der STEPS-3-Simulationen überschaubar zu halten, wurden DIFF_L und DIFF_L_sed nur gemeinsam variiert (d.h. sie hatten jeweils den gleichen Wert).

Die wichtigsten Schlussfolgerungen der Studie von Reichenberger und Pires (2013) waren:

- Für PEC_{sw} ergab sich immer eine gute Übereinstimmung zwischen STEPS-3 und TOXSWA, außer manchmal für eine extreme Parameterkombination.
- In Bezug auf PEC_{sed} gibt es keine einzelne Parameterkombination von DIFF_L und depth_sed_deep, die einen guten Fit für alle Kombinationen von Szenario (R oder D), Wasserkörpertyp (Ditch, Stream oder Pond) und Koc liefert.
- Die bisherige in der Standardversion von STEPS-1-2-3-4 verwendete Parametrisierung (DIFF_L = 0,005 m; depth_sed_deep = 0,45 m) stellt einen akzeptablen Kompromiss zwischen einer guten Abbildung des Zeitverlaufs von PEC_{sed} und einer guten Schätzung der PEC_{sed}-Peaks in verschiedenen Gewässertypen dar („gut“ im Vergleich zu TOXSWA). Zumindest liefert diese STEPS-3-Parametrisierung „konservative“ und dabei nicht komplett abweichende Werte von PEC_{sed} im Vergleich zu TOXSWA. Es wird daher empfohlen, diese Parametrisierung beizubehalten.

Um zukünftig gegebenenfalls eine bessere Anpassung der von STEPS-3 berechneten PEC_{sed} gegen die von TOXSWA berechneten zu erzielen, wäre die erfolgversprechendste Option, in STEPS-3 eine dritte Sedimentschicht einzuführen. Natürlich müssten nach einer solchen Modifikation eine Sensitivitätsanalyse und eine neue Kalibrierung durchgeführt werden.

A11 E-Mail-Korrespondenz mit dem VFSMOD-Entwickler

Correspondence with Rafael Muñoz-Carpena (RMC) on water table depth

Original question SR, 07/01/2014:

The parameter WTD denotes the groundwater table depth at the beginning of the simulation, right? That is, during the Runoff event the groundwater table (i.e. the highest = shallowest saturated layer with no unsaturated layer below it) in the VFS can rise, right? In an extreme case, the water table could rise to the surface so that the whole profile of the VFS is saturated, verdad?

Is WTD also identical to the depth of the lower boundary? That means, the water table can never get deeper than WTD?

Reply by Rafael Muñoz-Carpena, 07/01/2014:

Hola Stefan,

I am attaching a PDF that might help answer your question. WTD refers to the lower boundary condition created by the water table depth. This in fact it could be parametrized as the average water table depth for the event (from the beginning to the end of the event). For simplicity (because it is difficult to know without specific measurements or dynamics modeling), we use $WTD = \text{seasonal water table}$. This is considered fixed for the calculations and the wetting (saturation) of the profile from above (infiltration) is considered (Fig (a) attached) until the wetting front reaches WTD (or its capillary fringe), thus effectively saturating the profile from there on when we apply the Boussinesq simplification (Fig (b) attached). In answer to your question, yes, the water table could rise if the adjacent water course (stream, canal, river) significantly raises during the event, or if the soil is of very high conductivity in lowlands/flatlands which have normally high water table. Typically, though, although the water table rises during wet periods it will take longer than the few hours that the Runoff event on the filter is calculated for. Using the average WTD during the event alleviates some the possible dynamics at the sites, but we are focusing on seasonally high water tables (which is more predictable and easier to parametrize in the pesticide framework) rather than short term dynamics (which would be almost impossible to handle in a simplified way and would require full dynamic models).

Let me know if this answers your question or we can continue the discussion. Remember that modeling is based the "art" of abstraction, so it is intrinsically a simplification of an infinitely simple reality. The key is that the processes abstracted in the model control most (or a good part) of the system variance or dynamics!

Cheers, Rafa

Reply by SR, 07/01/2014:

Hola Rafael,

Gracias! Creo que entendí como funciona: In VFSSMOD the profile doesn't saturate from below and above, but only from above.

And the lower boundary condition (1, 2 or 3) only determines how fast water percolates through the lower boundary.

The term "seasonal water table" is a very good hint how to parameterize WTD.

"The key is that the processes abstracted in the model control most (or a good part) of the system variance or dynamics!" Sure. I fully agree!

Cheers, Stefan

Reply by Rafael Muñoz-Carpena, 07/01/2014:

Great. Only one minor point for clarification. The BC 1, 2, or 3 controls the behavior ONLY AFTER $t > t_w$ (after the wetting front reaches the WT). Before that ($t < t_w$), the boundary condition is the WTD in the infiltration algorithms and the modification to the initial moisture content distribution with depth (Fig. (a) in what I sent). Cheers, Rafa

Correspondence with RMC on VFSSMOD lower boundary condition for FSTs with impermeable rock layers

Original question SR, 18/01/2014

Hi Rafael,

In case of BC1: Given that the water below WTD is immobile, am I right that one could also use WTD to simulate an impermeable rock layer?

Cheers, Stefan

Reply RMC, 18/01/2014

Hi Stefan,

No, remember the water table is controlling the soil moisture distribution in the profile above by capillarity. The rock layer will not supply capillary water and control the soil moisture profile. You can however model the rock layer with the standard Green-Ampt and check for the depth of the wetting front (reported in .ohy file) so when it reaches the rock layer it switches to the BCs we have for the WTD case.

Rafa

Reply SR, 18/01/2014

Hi Rafael,

Thanks! You mean I should do two VFSSMOD runs for the same event? And in the second I could manually change the BC at the time point I read out from the .ohy of the first run?

Of course this would work out, but from a practical point of view this is not ideal if one wants to do a lot of simulations.

I suppose one could calculate the thickness of the capillary fringe (X) beforehand and then simulate the profile with $WTD = (\text{depth of impermeable rock layer}) + X$? I think an approximate solution would do here.

Cheers, Stefan

Reply RMC, 18/01/2014

Hi Stefan, the procedure could be programmed in VFSSMOD as a special case but... what would be the general interest of running the program with an underlying impermeable rock subsurface? Do you have a particular application of this? Do you think it will be widely used by others? Please help me understand if it is worth modifying the code for this. If it has wider interest I will take a look into it.

Cheers, Rafa

Reply SR, 18/01/2014

It's for the parameterization of edge-of-field buffer strips for our various FOOTPRINT soil types (there are 269 parameterised FSTs, and 102 of them are modelled in the UBA project GERDA).

Find attached some material about the concept of FOOTPRINT Soil Types. The first letter of the FST code is the FOOTPRINT hydrologic group, which describes the site hydrology.

I figure that in case of an edge-of-field buffer (not adjacent to a water body) the site hydrology of the VFS should match with the site hydrology of the field. So for project UBA, we have to parameterise 102 different VFS, one for each modelled FST.

This has already been done for all other parameters than lower boundary condition and WTD. Some FHGs (R, S, T, U, V) have an impermeable rock horizon. In case one of these soils is picked from the scenario selection procedure in the GERDA software and if a VFS is to be modelled, the VFS will also need to have this impermeable lower boundary.

In the case of buffers directly adjacent to a water body, some FOOTPRINT hydrologic groups (e.g. those with an impermeable rock horizon) are not realistic. I think if we decide to parameterise also these kind of buffers, they will be parameterised as O, P, or Q soils (and will not necessarily match with the soil type of the field).

Cheers, Stefan

Correspondence with Rafael Muñoz-Carpena on lateral subsurface flow from the VFS to the water body

(SR in black, RMC in blue)

SR: This is also an important point:

"If the position of the infiltration elementary volume is close to a draining stream, the above equation (i.e. equal to lateral flow) may underestimate the infiltration rate and a drainage (2 dimensional) approach should be used (Ritzema, 1994; van Schilfgaarde, 1957), for example the Hooghoudt (1940) equation."

RMC: Again, this depends on the gradient (difference in elevation between the filter surface and the stream. If they are about the same level (no energy to push the water), there is little flow entering the stream from the subsurface, but as we know the overland flow will increase (with respect to the infiltration component) if there is flow from the field (and rainfall). So, in general if the shallow surface is caused by an adjacent stream, with little gradient between both WTD and stream, little lateral flow might be expected on the upper part of the soil after saturation (below it might be significant but below the buffer retention volume).

SR: In addition, if the elementary volume is adjacent to a draining stream, the lateral subsurface flow leaving this volume (and the dissolved pesticide load that it carries) should end up in the stream...

RMC: Perhaps only a small fraction, pls. remember a couple things... This will depend on the re-partition between the solid and liquid phase within the soil, and also on the "new water vs. old water" fractions in the porewater. See the soil moisture wedge above WTD in Fig. 1a to realize that depending on the soil type and WTD the new water might be more or less. This is, the water draining will be only the mobile fraction of the total porewater, after sorption and degradation processes. In the end, this will represent a mixture of the water going in and the one already there, the re-partitioning of the pesticide between the liquid and solid phases, and the mobility of the water in the different pore fractions (more mobile in the larger pores that require less energy to move, less in the smaller fractions that can become immobile). I believe that, all considered, the dominant pollution process in the presence of a WTD is still the surface pathway, and relatively speaking only a small fraction of the contaminant will make it laterally into the stream (much smaller compared to the increased resurface Runoff pathway). Also, notice that if instead of a stream it was a pond (static water level, not draining), the subsurface fraction might be even less significant.

As a final comment, VFS are intended/proposed primarily as a surface Runoff pollution control measure, understanding that this is the most dynamic (fast) pollution pathway and as a first step the most critical to reduce before it enters the stream. I believe this is also the reason why the focus of the pesticide regulatory framework are the surface pathways. The subsurface pathways analysis would require 2D/3D approaches that are beyond the scope of the surface pesticide regulatory framework.

SR: Yes, I agree that pesticide inputs via lateral subsurface flow from the buffer strip are probably insignificant compared with pesticide inputs via surface Runoff. The potential underestimation of infiltration and thus pesticide load reduction at the lower end of the VFS (i.e. slight overestimation of surface Runoff volume and pesticide load entering the stream) will also cancel out to some degree with not taking into account lateral subsurface flow and associated pesticide input into the stream.

-> I think it's sufficient if I mention these aspects in the report for UBA. No need for further complicating the modelling approach here.

Correspondence with RMC on the regression equation for deltaP used in VFSSMOD

Original question SR, 08/01/2014

Hi Rafael,

I'm coming back to the subject of the calculation of deltaP.

I know you were not involved in the establishment of the multiple linear regression equation of Sabbagh et al. (2009), but I would like to have your personal opinion.

The attached example .owq states that Outputs for Water Quality

20.621 m³ = Runoff inflow
21.599 Kg = Sediment inflow
63.649 = Phase distribution, Fph
36.207 % = Infiltration (dQ)
99.997 % = Sediment reduction (dE)
-7.103 % = Runoff inflow reduction
71.121 % = Pesticide reduction (dP)

The fraction of total pesticide that is in the dissolved phase is given by $\text{frac_dissolved} = \text{FpH} / (1 + \text{FpH})$. With $\text{FpH} = 63.649$ (I've recalculated FpH from Kd , Ei and Qi , and it's correct), frac_dissolved is 0.9845.

So almost everything is in the dissolved phase. Nevertheless, while dQ is only 36 % and dR is even negative, deltaP is computed as 71 %.

I did a small hypothetical calculation varying only Koc (see attached xls).

When Koc approaches zero, deltaP goes towards negative infinity (due to the \ln in the formula).

When Koc approaches infinity, deltaP approaches asymptotically the value

$$\text{deltaP} = 24.79 + 0.54 * \text{deltaQ} + 0.52 * \text{deltaE} - 0.89(\%C)$$

However, this mathematical behaviour is not intuitive:

- 1) Once frac_dissolved is close to 1 (let's say for $\text{Koc} < 100$), the sole governing retention mechanism should be infiltration (okay, one could also think of adsorption to the grass in the VFS). In any case, deltaE shouldn't matter. I guess, if only infiltration matters, deltaP should be something like infiltration / Runoff inflow.
- 2) Once frac_dissolved is close to zero (let's say for $\text{Koc} > 1.0E+06$), the sole governing retention mechanism should be sedimentation, and deltaP should be equal to deltaE .

I personally think the regression equation of Sabbagh et al. shows strange behaviour for high and low Koc values, which inspires little confidence in the results for intermediate Koc values...

There is a statement in Sabbagh et al. (2009): "The natural logarithm term includes the term $\text{FpH}+1$ to ensure that in cases where there is no ΔQ the equation predicts no pesticide trapping." → From what I see in Excel, this is not true, since both terms are independent.

I think the mathematical structure of the regression equation is unfortunate because the phase distribution factor is decoupled from ΔQ and ΔE . Possibly one wouldn't even have needed a multiple linear regression, and a simple relationship like $\Delta P = \frac{\text{frac_dissolved}}{(\text{infiltration}/\text{Runoff_inflow} * 100) + \text{frac_adsorbed} * \Delta E}$ would have done?

The VFSMOD User Manual v6 states that you're working on a physically-based solute transport submodel. Is there already an estimate when this submodel will be available?

Best wishes, Stefan

Reply RMC, 15.01.2014:

Hi Stefan,

Here is a brief summary from today's discussion with Garey and George, the original developers of the ΔP equation.

Notice that for reasonable values of ΔQ and ΔE , the ΔP equation doesn't go negative in your scenarios unless $K_d < 1E-2$. Those K_d values do not seem very realistic (?) and they are definitely outside the range of values for which the equation was developed. The equation was developed for K_{oc} as small as 9 as a bromide tracer...so $K_d = 9 * \%OC$, so to get $K_d = 1E-2$ requires $\%OC$ of 0.001 or 0.1 %, which might be perhaps be typical of a groundwater aquifer but not a surface soil. Your scenarios use $\%OC = 3$ %. For cases where you have no ΔQ and ΔE then the equation goes negative for $K_d < 15$. Anyway, for that case, and if you get no ΔQ and ΔE there is no need for ΔP trapping equation as $\Delta P = 0$ (there are no removal mechanisms).

The code has already a check that if noRunoff comes off the filter $\rightarrow \Delta P = 100$ %, but I need to check the other side ($\Delta Q, \Delta E = 0 \rightarrow \Delta P = 0$, no reduction!).

We may also want to include a warning that the use of the equation is outside the bounds of the original development of the equation. That warning could be given to the user when outside the range of K_{oc} , % clay, %OC, etc. I am looking into it.

Regarding your second question, for a small F_{ph} so that the fraction dissolved is small (most is sorbed), you are correct that the dominant (not the only) removal mechanism is ΔE . Note that we have been saying this in all our publications for a while, i.e. that the processes are linked!! ΔQ and ΔE are not independent of each other. For example, if you look at Tables 1 and 5 in our J.oHyd paper (see attachment), you will see that for high K_{oc} compounds such that F_{ph} is small, ΔP does not equal ΔE . In fact, in most cases, the range in ΔP is much smaller than the range in ΔE . Indeed, that was the benefit of including both terms in the regression equation on a statistical basis!

On your final comment, I strongly disagree your assessment of Sabbagh's ΔP equation! Not only the initial equation development and testing papers showed that it produces rather good results against a very wide range (representative) of measured data, but the papers we have published since with the VFSMOD coupling support that it behaves according to established conceptual understanding of the complex system it represents. While its response needs to be bracketed within the initial development range for K_d and F_{ph} , there is limited basis for your mistrust of the rest of the range, isn't it? As I said, the existing peer-review literature supports the opposite, that it is a good compromise for its intended use. Oscar Perez-Ovilla (now at Bayer) for his PhD developed a research component with the numerical solution of the flow and transport equation (for full details please download his doctoral dissertation here "A flexible numerical component to simulate biogeochemical transport processes through

vegetative filter strips” (download: http://abe.ufl.edu/carpenna/files/pdf/research/reports/PerezOvilla_O.pdf). However, we decided to maintain this in the research domain and not the wider model distribution since, like all research models, the parameterization is very demanding and often not practical for wider application like in the regulatory environment. I believe it is a great benchmark but it would be impractical to use it in the regulatory context. If you are interested we can give you the code. Please let me know if this answers your questions.

Cheers, Rafa

Reply SR, 16/01/2014

Hi Rafael,

Many thanks for your reply! This is most useful and will allow me to prepare a synthesis. I think it will be difficult in practice to force VFSSMOD to produce $\Delta E = 0$ and $\Delta Q = 0$ (maybe if we simulate a tarmac ;-)). However, I would be interested to know how the code reacts in this case (i.e. whether ΔP is then fixed to zero or still calculated according to the regression equation).

Thanks for the link to the thesis of Oscar Perez Ovilla! I will check it out for personal interest (we had some nightmarish experiences last year with debugging the CDE solution of our new nitrogen model, but now it's working properly).

Cheers, Stefan

A12 Details zu den Vergleichsrechnungen mit EVA 2.1 und Exposit 3.0 beta

Substance FOCUS_1

EVA

Keine Einträge durch Drift und Evaporation, da Einarbeitung in den Boden.

Exposit

Keine Einträge über Runoff berücksichtigt, da Einarbeitung in den Boden.

Allgemeine Daten						Anwendung	
ZA-Nr.	Focus TC 1					Einfachapplikation	
PSM	Focus TC 1					AWM a.i. (g/ha)	3000
Wirkstoff	anderer Wirkstoff					Interzeption (%)	0
	Focus TC 1						
Stoffdaten		Grundwassergefährdung möglich:				Ökotoxikologische Daten	
KOC _{Runoff} (L/kg)	15	>>500	<500	<<500	<100	Spezies	Fisch
KOC _{Gefährdungsgruppe} (L/kg)	15	>100	>21	<21>	<<21	Wert	µg/L 115
DT50 (d)	6	<1	<100	>>100	>>100	TER	100
L _{H2O} (mg/L)	6000	1	2	3	4		
Gefährdungsgruppe	3					Szenario	
≈ Eliminationsrate (%)	90					Niederschlag nach (d)	3
						Austrag in (%) der AWM über Runoff	0.110
						Austrag in (%) der AWM über Erosion	0.000
Runoff und Erosion							
Randstreifen (m)		0	5	10	20		
Reduktion Runoffaustrag (%)		0	40	60	80		
Reduktion Erosionsaustrag (%)		0	40	85	95		
Austrag Wasser (m ³)		100	60	40	20		
Grabenwasser (m ³)		130	90	70	50		
VerdünnungGraben (m ³)		260	180	140	100		
Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha)	2121.32					Drainage	
Runoff (mg)	2333.45	1400.07	933.38	466.69		Frühjahr/ Sommer (01. April- 31. Oktober)	Herbst/ Winter (01. Nov.- 31. März)
Erosion (mg)	0.00	0.00	0.00	0.00		6.63	20.40
Grundwasser	PEC initial Graben (µg/l)	8.97	7.78	6.67	4.67	0.53	1.63
	PEC initial Fließgewässer (µg/l)	0.72	0.62	0.53	0.37	0.053	0.163
	PEC initial Uferfiltrat (µg/l)	0.072	0.062	0.053	0.037	ok	> 0.1 µg/l Achtung! Grundwasser
		ok	ok	ok	ok		
Aquatische Biozönose	PEC initial Graben (µg/l)	8.97	7.78	6.67	4.67	6.63	20.40
	TER Graben	12.81	14.78	17.25	24.64	17.35	5.64
		<100	<100	<100	<100	<100	<100 Achtung! TER
	PEC ohne sorptive Festlegung Graben (µg/l)	8.97	7.78	6.67	4.67		
	TER Graben	12.81	14.78	17.25	24.64		

Substance FOCUS_2

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use	field
-------------	-------

registration no.	0	ppp	FOCUS 2	a. i.	x
		crop	maize	AR [g a.i./ha]	1000.00

number of applications	1	application interval [d]	
------------------------	---	--------------------------	--

VP [Pa]	3.80E-05	Volatilisation is relevant - only from plant surfaces ! VP < 0.0001 Pa	drift	yes
w s [µg/l]	3.00E+04		scenario	agriculture
DT50 H ₂ O [d]	26.00		F int %	0
			F soil %	100

Volatilization:	calculated data
-----------------	-----------------

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	333.33	333.33
1	0.00	0.00	0.00	2.77	9.23	9.23
3	0.00	0.00	0.00	-		
5	0.00	0.00	0.00	0.57	1.90	1.90
10	0.00	0.00	0.00	0.29	0.97	0.97
15	0.00	0.00	0.00	0.20	0.67	0.67
20	0.00	0.00	0.00	0.15	0.50	0.50

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 90

Exposit

Allgemeine Daten						Anwendung	
ZA-Nr.	Focus TC 2					Einfachapplikation	
PSM	Focus TC 2					AWM a.i. (g/ha)	1000
Wirkstoff	anderer Wirkstoff					Interzeption (%)	0
	Focus TC 2						
Stoffdaten		Grundwassergefährdung gegeben				Ökotoxikologische Daten	
KOC _{Runoff} (L/kg)	91	>>500	<500	<<500	<100	Spezies	Fish
KOC _{Gefährdungsgruppe} (L/kg)	91	>100	>21	<21>	<<21	Wert	µg/L
DT50 (d)	43	<1	<100	>>100	>>100	TER	100
L _{H2O} (mg/L)	30	1	2	3	4		
Gefährdungsgruppe	2					Szenario	
≈ Eliminationsrate (%)	75					Niederschlag nach (d)	3
						Austrag in (%) der AWM über Runoff	0.197
						Austrag in (%) der AWM über Erosion	0.000
Runoff und Erosion							
Randstreifen (m)	0	5	10	20			
Reduktion Runoffaustrag (%)	0	40	60	80			
Reduktion Erosionsaustrag (%)	0	40	85	95			
Austrag Wasser (m ³)	100	60	40	20			
Grabenwasser (m ³)	130	90	70	50			
VerdünnungGraben (m ³)	260	180	140	100			
Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha)							
	952.79						
Runoff (mg)	1877.00	1126.20	750.80	375.40			
Erosion (mg)	0.00	0.00	0.00	0.00			
Grundwasser						Drainage	
PEC initial Graben (µg/l)	7.22	6.26	5.36	3.75	Frühjahr/ Sommer (01. April- 31. Oktober)	Herbst/ Winter (01. Nov.- 31. März)	
PEC initial Fließgewässer (µg/l)	0.58	0.50	0.43	0.30	2.98	9.16	
PEC initial Uferfiltrat (µg/l)	0.144	0.125	0.107	0.075	0.24	0.73	
	> 0.1 µg/l	> 0.1 µg/l	> 0.1 µg/l	ok	0.060	0.183	
					ok	> 0.1 µg/l	
						Achtung! Grundwasser	
Aquatische Biozönose							
PEC initial Graben (µg/l)	7.22	6.26	5.36	3.75	2.98	9.16	
TER Graben	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	
	<100	<100	<100	<100	<100	<100	
						Achtung! TER	
PEC ohne sorptive Festlegung Graben (µg/l)							
	7.22	6.26	5.36	3.75			
TER Graben	0.00	0.00	0.00	0.00			

Substance FOCUS_3

EVA

Dampfdruck < 10⁻⁵ Pa, d.h. nur Spraydrift ist relevant.

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use	field
-------------	-------

registration no.	0	ppp	FOCUS 3	a. i.	x
		crop	winter wheat	AR [g a.i./ha]	1000.00

number of applications	1	application interval [d]	
------------------------	---	--------------------------	--

VP [Pa]	0.00E+00	Volatilisation is not relevant ! No assessment necessary. VP < 0.00001 Pa	drift	yes
ws [µg/l]	6.20E+05		scenario	agriculture
DT50 H ₂ O [d]	1.50		F int %	70
			F soil %	30

Volatilization:	
-----------------	--

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	333.33	333.33
1				2.77	9.23	9.23
3				-		
5				0.57	1.90	1.90
10				0.29	0.97	0.97
15				0.20	0.67	0.67
20				0.15	0.50	0.50

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 90

Substance FOCUS_4

EVA

Dampfdruck < 10⁻⁵ Pa, daher ist nur Spraydrift relevant.

Die DT50(Wasser) ist deutlich kleiner als der zeitliche Abstand der Anwendungen. Daher wird anstelle einer dreimaligen Anwendung mit dem 77. Perzentil der Abdrifteckwerte hier mit einer einmaligen Anwendung mit dem 90. Perzentil der Abdrifteckwerte gerechnet. Die Applikationsereignisse werden als unabhängig voneinander angesehen.

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use	field				
registration no.	0	ppp	FOCUS 4	a. i.	x
		crop	apple	AR [g a.i./ha]	12.50
number of applications	1	application interval [d]			
VP [Pa]	1.24E-08	Volatilisation is not relevant ! No assessment necessary. VP < 0.00001 Pa		drift	yes
ws [µg/l]	2.00E-01			scenario	orcharding early
DT50 H ₂ O [d]	0.70			F int %	50
				F soil %	50
Volatilization:					

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	4.17	4.17
1				-		
3				29.20	1.22	1.22
5				19.89	0.83	0.83
10				11.81	0.49	0.49
15				5.55	0.23	0.23
20				2.77	0.12	0.12

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 90

Exposit

Allgemeine Daten ZA-Nr.: Focus TC 4 PSM: Focus TC 4 Wirkstoff: anderer Wirkstoff Stoffdaten: KOC _{ads} (L/kg): 102,4000 KOC _{eff} (L/kg): 102,4000 DT50 (d): 26 L ₁₀₀ (mg/L): 0,0002 Gefährdungsgruppe: 1 Eliminationsrate (%): 100		Anwendung Mehrfachapplication Anzahl Anwendung pro Jahr (max. 10): 3 Intervall (d): 14 DT50 (d): 26 Maximal auftretender Rückstand (g/ha): 12.7 Anwendung: 1 2 3 AWM a.l. (g/ha): 13 13 13 Interzeption (%): 25 50 70	
Ökotoxikologische Daten Spezies: <input type="text" value="µg/L"/> Wert: 0.0041 TER: 10		Invertebrate Invertebrate: 3 Invertebrate: 0.0041 Invertebrate: 10	
Grundwassergefährdungspotential gering >>500 <<500 <<21 <<21 >100 >21 <100 >>100 <1 <100 >>100 >>100		Szenario Niederschlag nach (d): 3 Austrag in (%) der AWM über Runoff: 0.001 Austrag in (%) der AWM über Erosion: 0.451	
Runoff und Erosion Randstreifen (m): 0 5 10 20 Reduktion Runoff (Ausstrag) (%): 0 40 60 80 Reduktion Erosionsausstrag (%): 0 40 85 95 Ausstrag Wasser (m³): 100 60 40 20 Grabenwasser (m³): 130 90 70 50 Verdünnung Graben (m³): 260 180 140 100		Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha): 11.73 Runoff (mg): 0.12 0.07 0.05 0.02 Erosion (mg): 52.89 31.74 7.93 2.64	
Grundwasser PEC initial Graben (µg/l): 0.00 PEC initial Fließgewässer (µg/l): 0.00 PEC initial Uferfiltrat (µg/l): 0.000		ok ok ok ok ok ok ok ok	
Aquatische Biozönose PEC initial Graben (µg/l): 0.00 TER Graben: 9.09		ok ok ok ok ok ok ok ok	
PEC ohne sorptive Festlegung Graben (µg/l): 0.20 TER Graben: 0.02		ok ok ok ok ok ok ok ok	

Achtung, bei Tests mit Sediment PEC ohne sorptive Festlegung verwenden!

Achtung! TER unterschritten!

Substance FOCUS_5

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use **field**

registration no. **0**

ppp	FOCUS 5	a. i.	x
crop	vine	AR [g a.i./ha]	75.00

number of applications **5**

application interval [d] **10**

VP [Pa]	6.40E-09	Volatilisation is not relevant ! No assessment necessary. VP < 0.00001 Pa
w s [µg/l]	1.15E+03	
DT50 H ₂ O [d]	6.00	

drift	yes
scenario	vine
F int %	0
F soil %	100

Volatilization:

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)			
1 application for V considere		V	D		V + D
distance [m]	% V	g/ha	%	µg/l water	µg/l water
0			100.00	36.38	36.38
1			-		
3			6.59	2.40	2.40
5			2.93	1.07	1.07
10			0.98	0.36	0.36
15			0.51	0.19	0.19
20			0.33	0.12	0.12

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 72

Exposit

Allgemeine Daten ZA-Nr. Focus TC 5 PSM Focus TC 5 Wirkstoff anderer Wirkstoff Focus TC 4		Anwendung Mehrfachapplikation																															
Stoffdaten KOC _{adsorbierung} (L/kg) 860 KOC _{geplanteinlagerung} (L/kg) 860 DT50 (d) 250 L ₁₀₀ (mg/L) 1.15 Gefährdungsgruppe 1 = Eliminationsrate (%) 100		Anzahl Anwendung pro Jahr (max.10) 5 Intervall (d) 10 DT50 (d) 250 Maximal auftretender Rückstand (g/ha) 955.0 Invektion berücksichtigt																															
Grundwassergefährdungspotential gering <table border="1"> <tr><td>>>500</td><td><500</td><td><<500</td><td><100</td></tr> <tr><td>>100</td><td>>21</td><td><21></td><td><<21</td></tr> <tr><td><1</td><td><100</td><td>>>100</td><td>>>100</td></tr> <tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr> </table>		>>500	<500	<<500	<100	>100	>21	<21>	<<21	<1	<100	>>100	>>100	1	2	3	4	Ökotoxikologische Daten Spezies Wert vgl. TER 14 10															
>>500	<500	<<500	<100																														
>100	>21	<21>	<<21																														
<1	<100	>>100	>>100																														
1	2	3	4																														
Runoff und Erosion <table border="1"> <tr><td>Randstreifen (m)</td><td>0</td><td>5</td><td>10</td><td>20</td></tr> <tr><td>Reduktion Runoff/Austrag (%)</td><td>0</td><td>40</td><td>60</td><td>80</td></tr> <tr><td>Reduktion Erosionsaustrag (%)</td><td>0</td><td>40</td><td>85</td><td>95</td></tr> <tr><td>Austrag Wasser (m³)</td><td>100</td><td>60</td><td>40</td><td>20</td></tr> <tr><td>Grabenwasser (m³)</td><td>100</td><td>90</td><td>70</td><td>50</td></tr> <tr><td>VerdichtungGraben (m²)</td><td>260</td><td>160</td><td>140</td><td>100</td></tr> </table>		Randstreifen (m)	0	5	10	20	Reduktion Runoff/Austrag (%)	0	40	60	80	Reduktion Erosionsaustrag (%)	0	40	85	95	Austrag Wasser (m ³)	100	60	40	20	Grabenwasser (m ³)	100	90	70	50	VerdichtungGraben (m ²)	260	160	140	100	Szenario Niederschlag nach (d) 3 Austrag in (%) der AWM über Runoff 0.184 Austrag in (%) der AWM über Erosion 0.020	
Randstreifen (m)	0	5	10	20																													
Reduktion Runoff/Austrag (%)	0	40	60	80																													
Reduktion Erosionsaustrag (%)	0	40	85	95																													
Austrag Wasser (m ³)	100	60	40	20																													
Grabenwasser (m ³)	100	90	70	50																													
VerdichtungGraben (m ²)	260	160	140	100																													
Grundwasser Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha) Runoff (mg) 352.10 Erosion (mg) 647.87 388.72 259.15 129.57 70.42 42.25 10.56 3.52		Drainage Frühjahr/ Sommer (01. April-31. Oktober) Herbst/ Winter (01. Nov.-31. März) <table border="1"> <tr><td>PEC initial Graben (µg/l)</td><td>2.49</td><td>2.16</td><td>1.85</td><td>1.30</td></tr> <tr><td>PEC initial Fließgewässer (µg/l)</td><td>0.20</td><td>0.17</td><td>0.15</td><td>0.10</td></tr> <tr><td>PEC initial Uferfiltrat (µg/l)</td><td>0.000</td><td>0.000</td><td>0.000</td><td>0.000</td></tr> <tr><td>TER Graben</td><td>2.49</td><td>2.16</td><td>1.85</td><td>1.30</td></tr> <tr><td>PEC ohne sorptive Festigung Graben (µg/l)</td><td><10</td><td><10</td><td><10</td><td>ok</td></tr> <tr><td>TER Graben</td><td>5.07</td><td>5.85</td><td>6.82</td><td>9.75</td></tr> </table>		PEC initial Graben (µg/l)	2.49	2.16	1.85	1.30	PEC initial Fließgewässer (µg/l)	0.20	0.17	0.15	0.10	PEC initial Uferfiltrat (µg/l)	0.000	0.000	0.000	0.000	TER Graben	2.49	2.16	1.85	1.30	PEC ohne sorptive Festigung Graben (µg/l)	<10	<10	<10	ok	TER Graben	5.07	5.85	6.82	9.75
PEC initial Graben (µg/l)	2.49	2.16	1.85	1.30																													
PEC initial Fließgewässer (µg/l)	0.20	0.17	0.15	0.10																													
PEC initial Uferfiltrat (µg/l)	0.000	0.000	0.000	0.000																													
TER Graben	2.49	2.16	1.85	1.30																													
PEC ohne sorptive Festigung Graben (µg/l)	<10	<10	<10	ok																													
TER Graben	5.07	5.85	6.82	9.75																													
Aquatische Biozönose PEC initial Graben (µg/l) TER Graben PEC ohne sorptive Festigung Graben (µg/l) TER Graben		Achtung: TER unterschritten!																															

Substance FOCUS_6

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use **field**

registration no. 0

ppp	FOCUS 6	a. i.	x
crop	cereals	AR [g a.i./ha]	400.00

number of applications 1

application interval [d]

VP [Pa]	3.78E-09	Volatilisation is not relevant ! No assessment necessary. VP < 0.00001 Pa
w s [µg/l]	9.10E+04	
DT50 H ₂ O [d]	24.00	

drift	yes
scenario	agriculture
F int %	0
F soil %	100

Volatilization:

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	133.33	133.33
1				2.77	3.69	3.69
3				-		
5				0.57	0.76	0.76
10				0.29	0.39	0.39
15				0.20	0.27	0.27
20				0.15	0.20	0.20

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 90

FOCUS 6 - Metabolite

Exposit

Allgemeine Daten ZA-Nr. 11% Bildung im Boden PSM FOCUS 6M Wirkstoff anderer Wirkstoff		Anwendung Einfachapplikation AWM a.i. (g/ha) 34 Interzeption (%) 0																	
Stoffdaten KoC _{Runoff} (L/kg) 580 KoC _{Gefährdungsgruppe} (L/kg) 580 DT ₅₀ (d) 58 L _{w20} (mg/L) Gefährdungsgruppe 2 ≈ Eliminationsrate (%) 75		Grundwassergefährdung gegeben <table border="1"> <tr> <td>>>500</td> <td><500</td> <td><<500</td> <td><100</td> </tr> <tr> <td>>100</td> <td>>21</td> <td><21></td> <td><<21</td> </tr> <tr> <td><1</td> <td><100</td> <td>>>100</td> <td>>>100</td> </tr> <tr> <td>1</td> <td>2</td> <td>3</td> <td>4</td> </tr> </table>		>>500	<500	<<500	<100	>100	>21	<21>	<<21	<1	<100	>>100	>>100	1	2	3	4
>>500	<500	<<500	<100																
>100	>21	<21>	<<21																
<1	<100	>>100	>>100																
1	2	3	4																
		Ökotoxikologische Daten Spezies Wert µg/L (Runoff) TER																	
		Szenario Niederschlag nach (d) 0 <i>Achtung! Entspricht nicht Standardeinstellung!</i> Austrag in (%) der AWM über Runoff 0.184 Austrag in (%) der AWM über Erosion 0.020																	
Runoff und Erosion																			
Randstreifen (m)	0	5	10	20															
Reduktion Runoffaustrag (%)	0	40	60	80															
Reduktion Erosionsaustrag (%)	0	40	85	95															
Austrag Wasser (m ³)	100	60	40	20															
Grabenwasser (m ³)	130	90	70	50															
Verdünnung Graben (m ³)	260	180	140	100															
Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses Runoff (mg) 62.56 37.54 25.02 12.51 Erosion (mg) 6.80 4.08 1.02 0.34																			
Drainage																			
		Frühjahr - Sommer (April - Oktober)	Herbst - Winter (November - März)																
Grundwasser	PEC ini _{Runoff} (µg/L)	0.24	0.21	0.18	0.13														
	PEC ini _{Fließgewässer} (µg/L)	0.02	0.02	0.01	0.01														
	PEC ini _{Uferfiltrat} (µg/L)	0.005	0.004	0.004	0.003														
		ok	ok	ok	ok														
Aquatische Biozönose	PEC ini _{Runoff} (µg/L)	0.24	0.21	0.18	0.13														
	TER Graben	0.00	0.00	0.00	0.00														
			ok	ok	ok	ok													
		0.11	0.33	0.01	0.03														
		0.002	0.007	ok	ok														
		0.11	0.33	0.00	0.00														
		ok	ok	ok	ok														
		0.27	0.23	0.19	0.13														
		0.00	0.00	0.00	0.00														

Substance FOCUS_7

Da keine Angaben zur Interzeption gemacht wurden, wurde eine worst case-Interzeption für V/D eingesetzt (85 %).

Für Exposit ist eine geringere Interzeption von 50 % worst case wurde angenommen.

DT_{50, wasser} = 2,5 ist sehr viel kleiner als das Intervall von 14 Tagen. Daher wurde Einfachapplikation mit 90. Perzentil der Driftwerte anstelle einer viermaligen Anwendung mit 72. Perzentil angenommen.

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use	field
--------------------	--------------

registration no.	0	ppp	FOCUS 7	a. i.	x
		crop	vine	AR [g a.i./ha]	750.00

number of applications	1	application interval [d]	
------------------------	---	--------------------------	--

VP [Pa]	1.30E-04	Volatilisation is relevant - from plant and soil surfaces !	drift	yes
ws [µg/l]	2.60E+03		scenario	vine
DT50 H ₂ O [d]	2.50		F int %	85
			F soil %	15

Volatilization:	calculated data
-----------------	-----------------

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	250.00	250.00
1	0.39	2.88	0.96	-		
3	0.35	2.59	0.86	8.02	20.05	20.91
5	0.31	2.32	0.77	3.62	9.05	9.82
10	0.24	1.77	0.59	1.23	3.08	3.66
15	0.18	1.35	0.45	0.65	1.63	2.07
20	0.14	1.02	0.34	0.42	1.05	1.39

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 90

Exposit

Allgemeine Daten

Za-Nr. Focus TC 7
 PSM Focus TC 7
 Wirkstoff Focus TC 7
 anderer Insektizid

Stoffdaten

K_{oc} (L/kg) 500
 K_{oc} (L/kg) 500
 DT50 (d) 50
 L₅₀ (mg/L) 2.6
 Gefährdungsgruppe 2
 Eliminationsrate (%) 75

Anwendung

Mehrfachapplikation

Anzahl Anwendung pro Jahr (max. 10) 4
 Intervall (d) 14
 DT50 (d) 50
 Maximal auftretender Rückstand (g/ha) 533.2

Achtung: bei Texten mit **blauem** Hintergrund
 PEC ohne sorptions-Feuchtlage verwenden!

Ökotoxikologische Daten

Spezies: Invertebrata
 Wert: 100
 TER: 10

Szenario

Niederschlag nach (d) 3
 Austrag in (%) der AWM über Runoff 0.224
 Austrag in (%) der AWM über Erosion 0.004

Grundwassergefährdung gegeben

>500	<500	<<500	<100
>100	>21	<21>	<<21
<1	<100	>>100	>>100
1	2	3	4

Runoff und Erosion

Randstreifen (m)	0	5	10	20
Reduktion Runoffausweg (%)	0	40	60	80
Reduktion Erosionsausweg (%)	0	40	85	95
Austrag Wasser (m ³)	100	60	40	20
Gabenwasser (m ³)	130	50	70	50
Verdünnung/Gaben (m ³)	260	80	140	100

Grundwasser

Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha)	511.49		
Runoff (mg)	1145.73	687.44	458.29
Erosion (mg)	20.46	12.28	3.07
PEC Initial Graben (µg/l)	4.41	3.82	3.27
PEC initial Fließgewässer (µg/l)	0.35	0.31	0.26
PEC initial Uferfiltrat (µg/l)	0.088	0.076	0.065
	ok	ok	ok
PEC Initial Graben (µg/l)	4.41	3.82	3.27
TER Graben	22.69	16.18	30.55
	ok	ok	ok
PEC ohne sorptions-Feuchtlage Graben (µg/l)	4.49	3.89	3.33
TER Graben	22.29	15.72	30.01
	ok	ok	ok

Aquatische Biozidose

Drainage	Frühjahr/ Sommer (01. Apr. - 31. Okt.)	Herbst/ Winter (01. Nov. - 31. März)
	1.60	4.92
	0.13	0.39
	0.032	0.098
	ok	ok
	1.60	4.92
	62.56	20.33
	ok	ok

Anwendung

Anwendung	1	2	3	4
AWM a.L. (g/ha)	125	125	500	500
Interzeption (%)	50	50	50	50

Substance UBA_1

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use	field
-------------	-------

registration no.	0	ppp	UBA 1	a. i.	x
		crop	spring cerela	AR [g a.i./ha]	1500.00

number of applications	1	application interval [d]	
------------------------	---	--------------------------	--

VP [Pa]	2.80E-06	Volatilisation is not relevant ! No assessment necessary. VP < 0.00001 Pa	drift	yes
w s [µg/l]	7.02E+04		scenario	agriculture
DT50 H ₂ O [d]	129.30		F int %	0
			F soil %	100

Volatilization:	
-----------------	--

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	500.00	500.00
1				2.77	13.85	13.85
3				-		
5				0.57	2.85	2.85
10				0.29	1.45	1.45
15				0.20	1.00	1.00
20				0.15	0.75	0.75

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 90

Exposit

Allgemeine Daten						Anwendung	
ZA-Nr.	UBA B1					Einfachapplikation	
PSM	UBA B1					AWM a.i. (g/ha)	1500
Wirkstoff	anderer Wirkstoff					Interzeption (%)	0
	UBA B1						
Stoffdaten		Grundwassergefährdung gegeben				Ökotoxikologische Daten	
KOC _{Runoff} (L/kg)	81	>>500	<500	<<500	<100	Spezies	Algae
KOC _{Gefährdungsgruppe} (L/kg)	81	>100	>21	<21>	<<21	Wert	µg/L
DT50 (d)	32.4	<1	<100	>>100	>>100	TER	10
L _{H2O} (mg/L)	70.2	1	2	3	4	Szenario	
Gefährdungsgruppe	2					Niederschlag nach (d)	3
≈ Eliminationsrate (%)	75					Austrag in (%) der AWM über Runoff	0.197
						Austrag in (%) der AWM über Erosion	0.000
Runoff und Erosion							
Randstreifen (m)	0	5	10	20			
Reduktion Runoffaustrag (%)	0	40	60	80			
Reduktion Erosionsaustrag (%)	0	40	85	95			
Austrag Wasser (m ³)	100	60	40	20			
Grabenwasser (m ³)	130	90	70	50			
VerdünnungGraben (m ³)	260	180	140	100			
Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha)							
Niederschlagsereignisses (g/ha)	1406.75						
Runoff (mg)	2771.31	1662.78	1108.52	554.26			
Erosion (mg)	0.00	0.00	0.00	0.00			
Grundwasser						Drainage	
PEC initial Graben (µg/l)	10.66	9.24	7.92	5.54	Frühjahr/ Sommer (01. April- 31. Oktober)	Herbst/ Winter (01. Nov. - 31. März)	
PEC initial Fließgewässer (µg/l)	0.85	0.74	0.63	0.44	4.40	13.53	
PEC initial Uferfiltrat (µg/l)	0.213	0.185	0.158	0.111	0.35	1.08	
	> 0.1 µg/l	> 0.1 µg/l	> 0.1 µg/l	> 0.1 µg/l	0.088	0.271	
					ok	> 0.1 µg/l	
Aquatische Biozönose							
PEC initial Graben (µg/l)	10.66	9.24	7.92	5.54	4.40	13.53	
TER Graben	2.44	2.81	3.28	4.69	5.91	1.92	
	<10	<10	<10	<10	<10	<10	
PEC ohne sorptive Festlegung Graben (µg/l)							
PEC ohne sorptive Festlegung Graben (µg/l)	10.66	9.24	7.92	5.54			
TER Graben	2.44	2.81	3.28	4.69			

Substance UBA_2

Interception wurde für EVA auf 70 % und für Exposit auf 50 % eingestellt.

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use	field
-------------	-------

registration no.	0	ppp	UBA 2	a. i.	x
		crop	Winter cereal	AR [g a.i./ha]	750.00

number of applications	2	application interval [d]	21
------------------------	---	--------------------------	----

VP [Pa]	8.80E-02	Volatilisation is relevant - from plant and soil surfaces !	drift	yes
ws [µg/l]	5.30E+05		scenario	agriculture
DT50 H ₂ O [d]	999.00		F int %	70
			F soil %	30

Volatilization:	calculated data
-----------------	-----------------

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	496.38	496.38
1	1.24	9.31	3.10	2.38	11.81	14.92
3	1.12	8.35	2.78	-		
5	1.00	7.48	2.49	0.47	2.33	4.83
10	0.76	5.70	1.90	0.24	1.19	3.09
15	0.58	4.34	1.45	0.16	0.79	2.24
20	0.44	3.31	1.10	0.12	0.60	1.70

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 82

Exposit

Anwendung

Anzahl Anwendung pro Jahr (max.10) **2**

Intervall (d) **21**

DTSO (d) **116**

Maximal auftretender Rückstand (g/ha) **705.8**

Anwendung: **1 2**

AWM a.l. (g/ha) **750 750**

Interzeption (%): **50 50**

Interzeption berücksichtig

Ökotoxikologische Daten

Spezies: **Mesokosmos**

Wert: **µg/L**

TER: **10**

**Warnung, bei Tests mit Lebewesen
PEC ohne strikte Festlegung verwenden!**

Grundwassergefährdungspotential

>>500	<500	<<500	<100
>100	>21	<21>	<<21
<1	<100	>>100	>>100
1	2	3	4

Anwendung

Mehrfachapplikation

andere Inkrustoff

UBA B2

UBA B2

UBA B2

Stoffdaten

KOC_{soil/water} (L/kg) **3808**

KOC_{org/water} (L/kg) **3808**

DTSO (d) **116**

L₅₀ (mg/L) **530**

Gefährdungsgruppe **1**

Eliminationsrate (%) **100**

Scenario

Niederschlag nach (d) **3**

Austrag in (%) der AWM über Runoff **0.084**

Austrag in (%) der AWM über Erosion **0.091**

Runoff und Erosion

Randstreifen (m)	0	5	10	20
Reduktion Runoff/Austrag (%)	0	40	60	80
Reduktion Erosionsaustrag (%)	0	40	65	95
Austrag Masse (t/a)	100	60	40	20
Grabenwasser (m ³)	100	90	70	50
Verdichtung/Graben (m ³)	260	380	340	300

Grundwasser

Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha)	693.24	349.39	232.93	116.46
Runoff (mg)	630.85	378.51	94.63	31.54
Erosion (mg)	2.24	1.94	1.66	1.16
PEC initial Graben (µg/l)	0.18	0.16	0.13	0.09
PEC initial Fließgewässer (µg/l)	0.000	0.000	0.000	0.000
PEC initial Uferfiltrat (µg/l)	ok	ok	ok	ok

Aquatische Biozönose

PEC initial Graben (µg/l)	2.24	1.94	1.66	1.16
TER Graben	0.13	0.15	0.18	0.26
PEC ohne strikte Festlegung Graben (µg/l)	<10	<10	<10	<10
TER Graben	4.67	4.04	3.47	2.43
PEC ohne strikte Festlegung Graben (µg/l)	0.06	0.07	0.09	0.12
TER Graben				

**Warnung, bei Tests mit Lebewesen
PEC ohne strikte Festlegung verwenden!**

Substance UBA_3

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use **field**

registration no. **0**

ppp	UBA 3	a. i.	x
crop	Spring cereal	AR [g a.i./ha]	125.00

number of applications **2**

application interval [d] **21**

VP [Pa]	1.00E-05	Volatilisation is relevant - only from plant surfaces ! VP < 0.0001 Pa
w s [$\mu\text{g/l}$]	7.05E+03	
DT50 H ₂ O [d]	59.80	

drift	yes
scenario	agriculture
F int %	0
F soil %	100

Volatilization: **calculated data**

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	$\mu\text{g/l water}$	%	$\mu\text{g/l water}$	$\mu\text{g/l water}$
0				100.00	74.33	74.33
1	0.00	0.00	0.00	2.38	1.77	1.77
3	0.00	0.00	0.00	-		
5	0.00	0.00	0.00	0.47	0.35	0.35
10	0.00	0.00	0.00	0.24	0.18	0.18
15	0.00	0.00	0.00	0.16	0.12	0.12
20	0.00	0.00	0.00	0.12	0.09	0.09

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 82

Substance UBA_4, Getreide

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use **field**

registration no. **0**

ppp	UBA 4	a. i.	x
crop	Winter cereal	AR [g a.i./ha]	250.00

number of applications **2**

application interval [d] **21**

VP [Pa]	1.30E-06	Volatilisation is not relevant ! No assessment necessary. VP < 0.00001 Pa
w s [$\mu\text{g/l}$]	3.60E+04	
DT50 H ₂ O [d]	365.00	

drift	yes
scenario	agriculture
F int %	70
F soil %	30

Volatilization:

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	D	D	V + D	
distance [m]	% V	g/ha	$\mu\text{g/l water}$	%	$\mu\text{g/l water}$	$\mu\text{g/l water}$
0				100.00	163.41	163.41
1				2.38	3.89	3.89
3				-		
5				0.47	0.77	0.77
10				0.24	0.39	0.39
15				0.16	0.26	0.26
20				0.12	0.20	0.20

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 82

Exposit

Allgemeine Daten

ZA-Nr. UBA 4
 PSM UBA.4
 Wirkstoff anderer Wirkstoff UBA.4

Stoffdaten

KOC_{soil}Eintrag (L/kg) 769
 KOC_{GW}Eintragsgruppe (L/kg) 769
 DTS50 (d) 91.6
 L₁₀₀ (mg/L) 36
 Gefährdungsgruppe 1
 Eliminationsrate (%) 100

Anwendung

Mehrfachapplikation

Anzahl Anwendung pro Jahr (max.10) 2
 Intervall (d) 21
 DTS50 (d) 91.6
 Maximal auftretender Rückstand (g/ha) 139.0

Anwendung AWM a.i. (g/ha) 250
 Interzeption (%) 70

Interzeption berücksichtigt

Spezies Wert µg/L Invertebrate 0.01
 TER 10

Ökotoxikologische Daten

Szenario Niederschlag nach (d) 3
 Austrag in (%) der AWM über Runoff 0.184
 Austrag in (%) der AWM über Erosion 0.020

Achtung, bei Tests mit Sediment
 PEC ohne sorptive Festlegung verwenden!

Grundwassergefährdungspotential

>>500	<500	<<500	<100	<<100
>100	>21	<21>	<<21	<<21
<1	<100	>>100	>>100	>>100
1	2	3	4	4

Runoff und Erosion

Randstreifen (m)	0	5	10	20
Reduktion Runoffaustrag (%)	0	40	60	80
Reduktion Erosionsaustrag (%)	0	40	85	95
Austrag Wasser (m ³)	100	60	40	20
Grabenwasser (m ³)	130	90	70	50
Verdünnungsgraben (m ³)	260	180	140	100

Grundwasser

Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha)

Runoff (mg)	135.86	249.98	149.99	99.99	50.00
Erosion (mg)	27.17	16.30	4.08	1.36	
PEC Initial Graben (µg/l)	0.96	0.83	0.71	0.50	0.50
PEC Initial Fließgewässer (µg/l)	0.08	0.07	0.06	0.04	0.04
PEC Initial Uferfiltrat (µg/l)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
TER Graben	ok	ok	ok	ok	ok

Aquatische Biozönose

PEC Initial Graben (µg/l)	0.96	0.83	0.71	0.50	0.50
TER Graben	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02
PEC ohne sorptive Festlegung Graben (µg/l)	<10	<10	<10	<10	<10
TER Graben	1.07	0.92	0.79	0.55	0.55
TER Graben	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02

Achtung! TER unterschritten!

Substance UBA_4, Wein

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use **field**

registration no.	0	ppp	UBA 4	a. i.	x
		crop	Vine	AR [g a.i./ha]	100.00

number of applications **3** application interval [d] **14**

VP [Pa]	1.30E-06	Volatilisation is not relevant ! No assessment necessary. VP < 0.00001 Pa	drift	yes
w s [$\mu\text{g/l}$]	3.60E+04		scenario	vine
DT50 H ₂ O [d]	365.00		F int %	70
			F soil %	30

Volatilization: _____

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	$\mu\text{g/l water}$	%	$\mu\text{g/l water}$	$\mu\text{g/l water}$
0				100.00	97.40	97.40
1				-		
3				6.90	6.72	6.72
5				3.07	2.99	2.99
10				1.02	0.99	0.99
15				0.54	0.53	0.53
20				0.34	0.33	0.33

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 77

Exposit

Allgemeine Daten

ZA-Nr. UBA 4
 PSM UBA 3
 Wirkstoff: anderer Wirkstoff
 UBA 4

Stoffdaten

KOC_{soil/water} (L/kg) 769
 KOC_{soil/groundwater} (L/kg) 769
 DT50 (d) 91.6
 L₅₀ (mg/L) 36
 Gefährdungsgruppe 1
 Eliminationsrate (%) 100

Anwendung

Hierfächaplanation

Anzahl Anwendung pro Jahr (max.10) 3
 Intervall (d) 14
 DT50 (d) 91.6
 Maximal auftretender Rückstand (g/ha) 81.3

AWM a.L. (g/ha) 100
 Interzeption (%) 70

Interzeption berücksichtigt

Ökotoxikologische Daten

Species: Wert: 0.01
 Wert: 10
 TER

Scenario

Niederschlag nach (d) 3
 Austrag in (%) der AWM über Runoff 0.184
 Austrag in (%) der AWM über Erosion 0.020

Grundwassergefährdungspotential gering

>>500	<500	<<500	<100
>100	>21	<21>	<<21
<1	<100	>>100	>>100
1	2	3	4

Runoff und Erosion

Randstreifen (m)	0	5	10	20
Reduktion Runoffaustrag (%)	0	40	60	80
Reduktion Erosionsaustrag (%)	0	40	85	95
Austrag Wasser (m³)	100	60	40	20
Grabenwasser (m³)	180	90	70	50
Verdunstungsgraben (m³)	360	180	140	100

Rückstand zum Zeitpunkt des Niederschlagsereignisses (g/ha)

Runoff (mg)	79.43	146.16	87.69	58.46	29.23
Erosion (mg)	15.89	9.53	2.38	0.79	

Grundwasser

PEC initial Graben (µg/l)	0.56	0.49	0.42	0.29
PEC initial Fließgewässer (µg/l)	0.04	0.04	0.03	0.02
PEC initial Uferfiltrat (µg/l)	0.000	0.000	0.000	0.000
	ok	ok	ok	ok

Aquatische Biozönose

PEC initial Graben (µg/l)	0.56	0.49	0.42	0.29
TER Graben	0.02	0.02	0.02	0.03
PEC ohne aktive Festigung Graben (µg/l)	<10	<10	<10	<10
TER Graben	0.62	0.54	0.46	0.32
PEC ohne aktive Festigung Graben (µg/l)	0.02	0.02	0.02	0.03

Drainage

Fruhjahr/ Sommer (01. April - 31. Oktober)	0.01	0.04
Herbst/ Winter (01. Nov. - 31. März)	0.00	0.00
	0.000	0.000
	ok	ok

PEC initial Graben (µg/l) 0.01, 0.04
 TER Graben 0.81, 0.26
 PEC ohne aktive Festigung Graben (µg/l) <10, <10
 TER Graben <10, <10

Achtung! TER unzureichend!

Substance UBA_5

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use **field**

registration no. 0

ppp	UBA 5	a. i.	x
crop	Winter cereal	AR [g a.i./ha]	7.50

number of applications 2

application interval [d] 10

VP [Pa]	2.00E-07	Volatilisation is not relevant ! No assessment necessary. VP < 0.00001 Pa
w s [µg/l]	5.00E+00	
DT50 H ₂ O [d]	15.10	

drift	yes
scenario	agriculture
F int %	10
F soil %	90

Volatilization:

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	4.08	4.08
1				2.38	0.10	0.10
3				-		
5				0.47	0.02	0.02
10				0.24	0.01	0.01
15				0.16	0.01	0.01
20				0.12	0.00	0.00

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 82

Substance UBA_6

DissT50 = 0,1 d. Wegen der kurzen DT50 wurde in EVA mit Einfachapplikation und 90. Perzentil der Abdrifteckwerte gerechnet.

Die Interzeption kann zwischen 70 % (BBCH 60) und 85 % (BBCH 75) liegen. Als worst case wurde 85 % in EVA und 70 % in Exposit eingestellt.

EVA

EXPOSURE VIA AIR

EVA 2.1

Revision of February 2011

Results: PEC actual

area of use **field**

registration no. **0**

ppp	UBA 6	a. i.	x
crop	Vine	AR [g a.i./ha]	1500.00

number of applications **1**

application interval [d]

VP [Pa]	2.10E-05	Volatilisation is relevant - only from plant surfaces ! VP < 0.0001 Pa
w s [µg/l]	5.00E+02	
DT50 H ₂ O [d]	0.10	

drift	yes
scenario	vine
F int %	85
F soil %	15

Volatilization: **calculated data**

Deposition: PEC (via Volatilisation)		PEC sw (via Volatilisation and Drift)				
1 application for V considere		V	V	D	D	V + D
distance [m]	% V	g/ha	µg/l water	%	µg/l water	µg/l water
0				100.00	500.00	500.00
1	0.15	2.26	0.75	-		
3	0.14	2.02	0.67	8.02	40.10	40.77
5	0.12	1.81	0.60	3.62	18.10	18.70
10	0.09	1.38	0.46	1.23	6.15	6.61
15	0.07	1.05	0.35	0.65	3.25	3.60
20	0.05	0.80	0.27	0.42	2.10	2.37

The calculation of drift is based on the x. percentile. x = 90

Exposit

Allgemeine Daten

ZA-Nr. Foljet
 PSM Foljet
 Wirkstoff Foljet

Stoffdaten

Konz. max. (µg/l) 304
 KOC max. (L/kg) 304
 DT50 (d) 13.6
 L₅₀ (mg/L) 0.5
 Gefährdungsgruppe 1
 Eliminationsrate (%) 100

Anwendung

Wirkstofftyp: Invertebraten

Anzahl Anwendung pro Jahr (max. 20) 2
 Intervall (d) 30
 DT50 (d) 13.6
 Maximal auftretender Rückstand [g/ha] 8437.4

AWM a.l. (g/ha) 1500
 Insektizid

Ökotoxikologische Daten

Spezies Invertebraten
 Wert: unkl.
 TER 30

Scenarier

Niederschlag nach (d) 3
 Ausstrag in (%) der AWM über Runoff 0.224
 Ausstrag in (%) der AWM über Erosion 0.004

Grundwassererfordernisse

<500	<500	<100
>500	>21	<21
>100	>100	>100
<1	1	2
1	2	3
2	3	4

Runoff und Erosion

Bandbreite (m)	0	5	10	20
Reduktion Runoff (%)	0	40	60	80
Reduktion Erosion (%)	0	40	60	80
Runoff (mm)	300	80	40	20
Spektrale (µm ²)	100	80	70	60
Verdunstungsrate (µm ²)	200	180	140	100

Rückstand zum Zeitpunkt des Runoff (mg) 1250.72
 2801.62
 50.03

Niederschlagsereignisse (g/ha) 1120.65
 560.32
 2.50

Erosion (mg) 10.78
 9.34
 8.00
 5.60

PEC initial Graben (µg/l) 0.86
 0.75
 0.64
 0.45

PEC initial Fließwasser (µg/l) 0.000
 0.000
 0.000
 0.000

PEC initial Uferfiltrat (µg/l) ok
 ok
 ok
 ok

PEC initial Graben (µg/l) 10.78
 9.34
 8.00
 5.60

PEC initial Graben (µg/l) 0.19
 0.21
 0.25
 0.16

PEC initial Fließwasser Graben (µg/l) <10
 <10
 <10
 <10

PEC initial Uferfiltrat Graben (µg/l) 10.97
 9.51
 8.15
 5.70

TER Graben 0.18
 0.21
 0.25
 0.35

Drainage

Frühjahr/ Sommer (01. Apr. - 31. Oktober)	Herbst/ Winter (01. Nov. - 31. März)
0.20	0.60
0.02	0.05
0.000	0.000
ok	ok
0.20	0.60
10.23	3.33
ok	<10

Achtung: TER unterschritten