

Fakultät Agrarwissenschaften
Institut für Kulturpflanzenwissenschaften
Fachgebiet für Biostatistik



UNIVERSITÄT
HOHENHEIM

Masterarbeit zum Thema:

**Bedeutung der Variabilität von N-Dynamik und N-Flüssen für die Güte lokaler
Stickstoff-Bilanzen in der Landwirtschaft – Prozessbetrachtung und statistische
Modellierung anhand des Vergleiches einer trockenen mit einer feuchten Region**

Erstgutachter: Prof. Dr. Hans-Peter Piepho
Zweitgutachter: Dr. Wolf-Anno Bischoff

von Katrin Bort

Matrikelnummer: 641139
E-Mail: katrin.bort@bort.com

Waiblingen, 15.10.2021

Zusammenfassung

Der Eingriff des Menschen in den natürlichen Stickstoff (N)-Kreislauf hat dazu geführt, dass sich die Menge des reaktiven N, der sowohl für die Ökosysteme als auch für die menschliche Gesundheit eine Gefahr darstellen kann, in den letzten 100 Jahren nahezu verdoppelt hat. Insbesondere der Einsatz mineralischer N-Dünger in der Landwirtschaft hat diese Entwicklung beschleunigt, da die Kulturpflanzen den eingebrachten N oftmals nicht vollständig verwerten können. Als Reaktion darauf steigt die Anzahl lokaler und regionaler Forschungsprojekte, die sich beispielsweise mit der Nitratauswaschung ins Grundwasser befassen. Ein Beispiel dafür ist das seit 2000 laufende Projekt NitroGäu im Schweizer Kanton Solothurn. In seinem Rahmen werden neben der Nitratauswaschung mit dem Sickerwasser auch Ernteparameter im Gemüsebau erfasst, um N-Effizienz-Indikatoren zu berechnen. Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Variabilität der N-Dynamiken im Boden, die sowohl zwischen als auch innerhalb eines Projektgebietes existiert. Da die N-Effizienz-Indikatoren als Grundlage zur Ableitung praktischer Handlungsanweisungen an die Landwirte genutzt werden, ist es notwendig, die Unsicherheit in den Mittelwertschätzungen zu quantifizieren. Das Gebiet des NitroGäu-Projekts war bis zur Mitte des 19. Jahrhundert durch Auendynamiken geprägt, sodass sich auch heute noch überdurchschnittlich hohe Gehalte an organischer Substanz im Boden finden. Daher bestand ein Ziel der Arbeit darin, das jährliche N-Nachlieferungspotenzial der Projektflächen abzuschätzen, wofür die erhobenen Daten der Ernteparameter sowie der Nitratauswaschung verwendet wurden. Darüber hinaus wurden die Unsicherheiten innerhalb der im Projekt erfassten Parameter Marktfähigkeit, Frischmasse, Kopfgewicht, Trockensubstanz- und N-Gehalt der Kulturen sowie der N-Effizienz-Indikatoren über die Berechnung von Varianzen und Variationskoeffizienten (CV) quantifiziert. In einem weiteren Schritt wurden die Hauptunsicherheitsquellen herausgearbeitet sowie Maßnahmen zur Verringerung der Unsicherheiten in der Datenerhebung geprüft. Zu diesem Zwecke wurden zum einen mittels Fehlerfortpflanzungsberechnungen nach der Delta-Methode abhängige und unabhängige Probennahmen verglichen, und der Einfluss der einzelnen erhobenen Parameter auf die Gesamtvarianz der N-Effizienz-Indikatoren untersucht. Abschließend wurde im Kontext der zwischenprojektlichen Variabilität die niederschlagsreiche Region des NitroGäu-Projekts der trockenen Region Main-Tauber gegenübergestellt. Letztere zeichnet sich durch einen hohen Anteil an Nullwerten in den Messungen der Nitratauswaschung aus. Diese können bei Nichtberücksichtigung in der statistischen Auswertung zu Überdispersion und damit verzerrten Varianzschätzungen führen. Um diesem Problem vorzubeugen, wurden die beiden Zero-Inflation-Modelle Two-Part und Tweedie gegenübergestellt und auf ihre Eignung zur Auswertung von Nitratauswaschungsdaten geprüft. Die Berechnungen zeigen, dass die N-Mineralisation auf den

Flächen des NitroGäu Werte bis zu 300 kg N/ha und damit teilweise das 6-fache der eingesetzten Düngermenge beträgt. Allerdings müssen diese Werte immer vor dem Hintergrund des dynamischen Gleichgewichtes der organischen Substanz betrachtet werden, sodass mit erheblichen jährlichen Schwankungen der N-Mineralisation zu rechnen ist. Für verlässlichere Mittelwerte sollte die N-Mineralisation auch in den folgenden Projektjahren dokumentiert und langjährige Mittelwerte berechnet werden. Bei Betrachtung der Fehler in den Mittelwertschätzungen der erhobenen Parameter ergeben sich größtenteils Werte im einstelligen Prozentbereich. Allerdings finden sich auch Fehler von über 30 %, die auf die natürliche Variabilität der landwirtschaftlichen Erzeugnisse zurückgeführt werden kann. Höhere Unsicherheiten finden sich jedoch in den Schätzungen der N-Effizienz-Indikatoren. Teilweise nehmen die CV dort Werte von über 0.5 bis sogar 1.1 an, was praktisch gesehen einen Fehler von 50 bis 100 % bedeutet, der erhebliche Fehleinschätzungen nach sich ziehen kann. Die Untersuchung der Hauptunsicherheitsquellen konnte zeigen, dass die Unsicherheit in der Marktfähigkeit den größten Einfluss auf die Gesamtvarianz der N-Effizienz-Indikatoren besitzt. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass neben pflanzenphysiologischen Merkmalen auch menschliche Einschätzungen bei deren Bestimmung eine Rolle spielen. Bei der Beurteilung möglicher Maßnahmen zur Reduktion der Unsicherheit hat sich gezeigt, dass unabhängige Probennahmen nur zu einer Verringerung des Fehlers um 0.5 kg N/ha führen und damit keine Relevanz in der Praxis besitzen. Im Rahmen des Vergleichs der beiden Zero-Inflation-Modelle wird deutlich, dass die statistische Auswertung bei komplexen Modellen mit vielen Einflussvariablen und Interaktionstermen an ihre Grenzen stößt. Jedoch hat sich vor diesem Hintergrund das Tweedie-Modell durch seine hohe Flexibilität und einfache Implementierung verschiedener Einflussparameter als geeigneter präsentiert. Als Fazit lässt sich festhalten, dass Unsicherheiten einen unabdingbaren Bestandteil wissenschaftlicher Datenerhebung darstellen und daher auch in den Stickstoffbilanzen sowie abgeleiteten Handlungsempfehlungen für die Praxis berücksichtigt werden müssen.

Danksagung

Insbesondere danke ich meinen Betreuern Herrn Prof. Dr. Hans-Peter Piepho und Herrn Dr. Wolf-Anno Bischof für die Unterstützung während der gesamten Anfertigung dieser Masterarbeit. Hervorheben möchte ich Herrn Prof. Dr. Hans-Peter Piepho für das Teilen seines umfangreichen statistischen Wissens mit mir und für sein offenes Ohr für meine Fragen. Mit seiner Hilfe konnte ich meine konzeptionellen statistischen Kenntnisse erweitern und meine Fähigkeiten im Umgang mit SAS verbessern.

Herr Dr. Wolf-Anno Bischof bot mir einen spannenden Einblick in das NitroGäu Projekt und gleichzeitig die Möglichkeit, eine interessante und vielseitige Masterarbeit darüber verfassen zu können. Zusätzlich danke ich ihm für die anregenden Diskussionen, Denkanstöße und Tipps im Rahmen der Arbeit.

Mein Dank gilt weiterhin dem gesamten TerrAquat-Team, das mich während der letzten Monate unterstützt und meine Arbeit durch eine großartige Arbeitsatmosphäre erleichtert hat. Insbesondere möchte ich mich in diesem Zuge bei Andreas Schwarz und David Williams für die anregenden Gespräche während der Ernteerhebungen und den damit verbundenen langen Autofahrten bedanken.

Darüber hinaus gilt mein Dank allen weiteren Beteiligten des NitroGäu-Projekts, ohne die meine Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung.....	i
Danksagung.....	iii
Abbildungsverzeichnis	vii
Tabellenverzeichnis	ix
SAS Codes	xi
Abkürzungsverzeichnis	xii
1. Einführung.....	1
1.1. Projekt NitroGäu	1
1.2. Statistische Auswertung	3
1.2.1. Umgang mit Nullwerten in der Nitratmessung.....	3
1.2.2. N-Bilanzen.....	3
1.3. Humusdynamik und Stickstoffnachlieferung in Böden	4
1.3.1. SOM und C-Dynamiken.....	5
1.3.2. N-Dynamiken und N-Flüsse.....	11
1.3.3. Einfluss der Gegebenheiten des NitroGäu-Projekts auf C- und N-Kreisläufe.....	16
1.4. Generalisierte Lineare Modelle (GLM).....	20
1.4.1. Generalisierte Lineare Gemischte Modelle (GLMM)	20
1.4.2. Zero-Inflation-Modelle.....	21
1.5. Aufstellung der N-Effizienz-Indikatoren (nach Bischoff et al. 2021).....	32
1.6. Relevanz von Fehlerfortpflanzungen.....	33
1.7. Fragestellungen und Ziele der Arbeit.....	34
2. Material und Methoden	36
2.1. NitroGäu-Projekt.....	36
2.1.1. Geographie (nach Bischof et al. 2021).....	36
2.1.2. Versuchsansatz (nach Bischoff et al. 2021).....	37
2.1.3. Messmethoden	38

2.1.4.	Bodenuntersuchungen.....	42
2.2.	Main-Tauber-Projekt	42
2.2.1.	Geographie (Nach Bischoff 2007)	42
2.2.2.	Versuchsansatz (Nach Bischoff 2007)	43
2.2.3.	Beschreibung des Datensatzes	44
2.3.	Zero-Inflation Modelle.....	45
2.3.1.	Auswahl eines geeigneten Modells	45
2.3.2.	Anpassung der GLM.....	49
2.3.3.	Anpassung der GLMM.....	53
2.4.	Modelle zur Unsicherheit in den N-Effizienz-Indikatoren.....	55
2.5.	Fehlerfortpflanzung	56
2.5.1.	Delta-Methode	56
2.5.2.	Berechnungen.....	57
3.	Ergebnisse.....	60
3.1.	N-Mineralisation NitroGäu	60
3.2.	Zero-Inflation-Modelle.....	61
3.2.1.	Variablenselektion.....	61
3.2.2.	Vergleich der GLM und GLMM.....	62
3.2.3.	Umsetzung der finalen Zero-Inflation Modelle	64
3.3.	Güte der N-Effizienz-Indikatoren.....	68
3.4.	Fehlerfortpflanzung	71
4.	Diskussion	74
4.1.	Stickstoffnachlieferungspotential im NitroGäu-Projekt.....	74
4.1.1.	Verlauf des SOC-Gehaltes.....	74
4.1.2.	Einstellung eines dynamischen Gleichgewichts	76
4.1.3.	N-Mineralisationsverlauf.....	78
4.1.4.	Abschätzung N-Mineralisation	80

4.2.	Zero-Inflation-Modelle	83
4.2.1.	Two-Part-Modell: Probleme und Lösungsversuche	84
4.2.2.	Tweedie-Modell: Probleme und Lösungsversuche	85
4.2.3.	Zusammenfassende Diskussion beider Modelle	87
4.3.	Unsicherheiten in den Einzelparametern sowie in den N-Effizienz-Indikatoren	88
4.3.1.	Einzelparameter	88
4.3.2.	N-Effizienz-Indikatoren	89
4.4.	Fehlerfortpflanzung	90
4.5.	Zusammenfassende Diskussion	92
5.	Schlussfolgerung	95
6.	Ausblick	96
	Literaturverzeichnis	98
	Anhang	115
I.	SAS Code des finalen ‚TP3 – GLMM‘ Modells	115
II.	SAS Code des finalen ‚TP3 - GLM + LK‘ Modells	117
III.	SAS Code des finalen ‚TP3 – GLMM‘ Modells	118
	Erklärung	121

Abbildungsverzeichnis

ABBILDUNG 1 A) HISTORISCHE SICHT: REKALZITRANZ DER SOM BASIERT AUF DER DE-NOVO BILDUNG KOMPLEXER HUMOSER POLYMERE, DIE DURCH CHEMISCHE ANALYSETECHNIKEN BEOBACHTET WURDEN B) NEUE SICHT: DURCH NICHT DESTRUKTIVE, SPEKTROSKOPISCHE METHODEN KONNTE GEZEIGT WERDEN, DASS HUMOSE SUBSTANZEN AUS EINFACHEREN BIOMOLEKÜLEN ZUSAMMENGESETZT SIND (SCHMIDT ET AL. 2011).....	7
ABBILDUNG 2 FLUSSDIAGRAMM DES KOHLENSTOFFES IM BODEN MIT EINER UNTERSCHIEDUNG DER IN DEN PFLANZENRESTEN VORLIEGENDEN C-FORMEN SOWIE DEREN BEITRAG ZU DEN DREI AUFGEFÜHRTEN C-POOLS. DIE ZAHLEN BEZIFFERN DIE UMSATZZEITEN DER C-FORMEN UND DER C-POOLS (NACH PARTON ET AL. 1987).....	9
ABBILDUNG 3 SCHEMATISCHE DARSTELLUNG DER HAUPTKOMPONENTEN DES TERRESTRISCHEN N-KREISLAUFES. FETT GEDRUCKTE PROZESSE WERDEN DURCH MIKROORGANISMEN VERMITTELT. GASFÖRMIGE N-FORMEN SIND IN KLAMMERN GESETZT (ROBERTSON UND GROFFMAN 2007)	13
ABBILDUNG 4 WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTEFUNKTION DER STANDARDNORMALVERTEILUNG MIT MITTELWERT 0 UND VARIANZ	26
ABBILDUNG 5 WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTEFUNKTIONEN DER INVERSEN NORMALVERTEILUNG MIT FIXIERTEM MITTELWERT UND VARIABLEM SKALENPARAMETER λ	27
ABBILDUNG 6 WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTEFUNKTIONEN DER LOGNORMALVERTEILUNG BEI FIXIERTEM MITTELWERT UND VARIABLER STANDARDABWEICHUNG (GUTHRIE 2003)	28
ABBILDUNG 7 WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTEFUNKTIONEN DER GAMMAVERTEILUNG BEI FIXIERTEM LAGEPARAMETER ($b=1$) UND VARIABLEM SKALENPARAMETER c (ENTSPRICHT GAMMA IN DER ABBILDUNG) (GUTHRIE 2003).....	29
ABBILDUNG 8 WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTEFUNKTIONEN DER BINOMIALVERTEILUNG MIT VARIABLEM n UND p (GUTHRIE 2003)	30
ABBILDUNG 9 WAHRSCHEINLICHKEITSDICHTEFUNKTIONEN DER POISSONVERTEILUNG FÜR VERSCHIEDENE WERTE VON λ (GUTHRIE 2003)	31
ABBILDUNG 10 PERIMETER DES NITROGÄU-PROJEKTS IM DÜNNERTAL ZWISCHEN WANGEN BEI OLTEN UND NIEDERBIPP (BISCHOFF ET AL. 2021).....	37
ABBILDUNG 11 UNTERSUCHUNGSGEBIET DES MAIN-TAUBER-PROJEKTES IN DER GEMEINDE GROBRINDERFELD. DIE GELBEN RECHTECKE UND ZAHLEN MARKIEREN DABEI DIE UNGEFÄHREN STANDORTE DER PROJEKTFLÄCHEN (BISCHOFF 2007)	43
ABBILDUNG 12 VERTEILUNG DER NITRATAUSWASCHUNG IM MAIN-TAUBER-PROJEKT	46

ABBILDUNG 13 VERTEILUNG DER NITRATAUSWASCHUNGSWERTE IM MAIN-TAUBER-PROJEKT GETRENNT FÜR DIE 4 MESSJAHRE 2003 BIS 2006.....	47
ABBILDUNG 14 KONZEPTDARSTELLUNG ZUM ZEITLICHEN VERLAUF DES SOM GEHALTES IN DEN BÖDEN DES NITROGÄU-PROJEKTGEBIETES. DIE UNTERSCHIEDLICHEN FARBEN REPRÄSENTIEREN ZEITRÄUME MIT UNTERSCHIEDLICHEN NUTZUNGSARTEN DER FLÄCHEN. DIE BUCHSTABEN (A-F) SYMBOLISIEREN VERSCHIEDENE EREIGNISSE, DIE ZU EINER ÄNDERUNG DES SOM GEHALTES FÜHRTE ODER NOCH FÜHREN.	76
ABBILDUNG 15 KONZEPTDARSTELLUNG DES DYNAMISCHEN GLEICHGEWICHES, DAS SICH IM ZUGE EINES JAHRZEHNTE BIS JAHRHUNDERTE ANDAUERNDEN ANBAUS VON GEMÜSE AUF DEN FLÄCHEN DES NITROGÄU PROJEKTES EINSTELLEN WÜRD. ZU ERKENNEN SIND DIE (JÄHRLICHEN) FLUKTUATIONEN, DIE IM MITTEL ZU EINEM KONSTANTEN NIVEAU DES SOM GEHALTES FÜHREN.....	78
ABBILDUNG 16 KONZEPTDARSTELLUNG ZUR N-MINERALISATION AUF DEN FLÄCHEN DES NITROGÄU-PROJEKTS. EINE UNTERSCHIEDUNG ERFOLGT DABEI IN DIE MINERALISATION AUS DEM AUENHUMUS SOWIE AUS DER BIOMASSE DER ANGEBAUTEN GEMÜSEKULTUREN.	79
ABBILDUNG 17 ZUSAMMENFASSENDE ABBILDUNG DER MITTELWERTE UND STANDARDABWEICHUNGEN DER EINZELNEN BILANZGLIEDER DER N-MINERALISATION. DIE BEIDEN NMIN-WERTE SOWIE DIE DÜNGUNG SIND IN KG N/HA DARGESTELLT, WÄHREND AUSWASCHUNG, AUFWUCHS UND MINERALISATION DIE EINHEIT KG N/HA BESITZEN.	92
ABBILDUNG 18 ZUSAMMENFASSENDE ABBILDUNG DER UNSICHERHEITEN IN N1 SOWIE DER DAZUGEHÖRIGEN EINZELPARAMETER. DIE BLAUEN BALKEN REPRÄSENTIEREN DIE CV IN %. DER DUNKELORANGENE BALKEN VON N1 BILDET DIE AUF 100 % NORMIERTE GESAMTVARIANZ AB, WÄHREND DIE HELLORANGENEN BALKEN DER EINZELPARAMETER DIE SENKUNG DER GESAMTVARIANZ BEI EINER NULLSETZUNG DER VARIANZEN UND KOVARIANZEN DER EINZELPARAMETER DARSTELLEN.	94

Tabellenverzeichnis

TABELLE 1 HAUPTFORMEN DES IM BODEN VORKOMMENDEN STICKSTOFFS MIT SUMMENFORMEL UND OXIDATIONSSTATUS. (G) KENNZEICHNET GASFÖRMIGE FORMEN, DIE SOWOHL IN DER FREIEN BODENLUFT ALS AUCH GELÖST IM BODENWASSER VORKOMMEN. (ROBERTSON UND GROFFMAN 2007)	12
TABELLE 2 ANZAHL DER WIEDERHOLUNGEN PRO ERHOBENEM PARAMETER IN DEN JAHREN 2018 UND 2019	41
TABELLE 3 ERGEBNISSE DER GRUNDUNTERSUCHUNG AN 5 EXEMPLARISCHEN FELDERN DES NITROGÄU-PROJEKTS IM JAHRE 2020 (BISCHOFF ET AL. 2021)	42
TABELLE 4 NAME UND STUFEN DER ABHÄNGIGEN VARIABLEN DES MAIN-TAUBER-PROJEKTS	45
TABELLE 5 N-MINERALISATION IN KG N/HA*JAHR VON DREI VERSUCHSFLÄCHEN DES NITROGÄU-PROJEKTS INKLUSIVE DER EINZELNEN BILANZGLIEDER.	60
TABELLE 6 ERGEBNIS DER VARIABLENSELEKTION MIT HPGENSELECT FÜR DIE BEIDEN PHASEN DES TWO-PART-MODELLS UND DES TWEEDIE-MODELLS OHNE BERÜCKSICHTIGUNG VON 3-FACH-INTERAKTIONEN	61
TABELLE 7 ERGEBNIS DER VARIABLENSELEKTION MIT HPGENSELECT FÜR DIE BEIDEN PHASEN DES TWO-PART- UND DES TWEEDIE-MODELLS UNTER DER BERÜCKSICHTIGUNG DER 3-FACH-INTERAKTION FELD*SAISON*JAHR	62
TABELLE 8 AIC-WERTE UND VARIANZSCHÄTZUNGEN DER ZUFÄLLIGEN EFFEKTE FÜR DIE VERSCHIEDENEN MODELLTYPEN OHNE 3-FACH-INTERAKTION. UNTER DEM GLMM-ANSATZ WERDEN DIE JEWEILS GENUTZTEN ZUFÄLLIGEN EFFEKTE GENANT	63
TABELLE 9 AIC-WERTE UND VARIANZSCHÄTZUNGEN DER ZUFÄLLIGEN EFFEKTE FÜR DIE VERSCHIEDENEN MODELLTYPEN MIT 3-FACH-INTERAKTION. UNTER DEM GLMM-ANSATZ WERDEN DIE JEWEILS GENUTZTEN ZUFÄLLIGEN EFFEKTE GENANT	64
TABELLE 10 ERGEBNISSE DER SUKZESSIONEN ANPASSUNG DER VERSCHIEDENEN MODELLTYPEN DES TWO-PART-MODELLS. ✓ STEHEN FÜR GELUNGENE MODELLKONVERGENZEN, O FÜR NICHT GETESTETE MODELLE UND X FÜR FEHLGESCHLAGENE MODELLKONVERGENZEN..	66
TABELLE 11 ERGEBNISSE DER ANPASSUNGEN DER VERSCHIEDENEN MODELLTYPEN DES TWEEDIE-MODELLS. ✓ STEHT DABEI FÜR EINE ERFOLGREICHE MODELLKONVERGENZ UND X FÜR FEHLGESCHLAGENE MODELLKONVERGENZEN.....	67
TABELLE 12 VARIANZSCHÄTZUNGEN DER ZUFÄLLIGEN EFFEKTE SOWIE DES _RESIDUAL_-EFFEKTS FÜR DAS T2-MODELL	68
TABELLE 13 GEMITTELTE VARIATIONSKOEFFIZIENTEN DER IN DIE N-EFFIZIENZ-INDIKATOREN EINFLIEßENDEN PARAMETER FÜR DAS JAHR 2018. DA AUSSCHLIEßLICH KONTROLLPLOTS	

VORHANDEN WAREN, ERFOLGT NUR EINE UNTERSCHIEDUNG IN ERNTEGUT UND ERNTERESTE.	70
TABELLE 14 GEMITTELTE VARIATIONSKOEFFIZIENTEN DER IN DIE N-EFFIZIENZ-INDIKATOREN EINFLIEßENDEN PARAMETER FÜR DAS JAHR 2019. DIE UNTERSCHIEDUNG ERFOLGT NEBEN ERNTEGUT UND ERNTERESTEN AUCH IN MAßNAHMEN- UND KONTROLLPLOTS	70
TABELLE 15 GEMITTELTE VARIATIONSKOEFFIZIENTEN DER IN DIE N-EFFIZIENZ-INDIKATOREN EINFLIEßENDEN PARAMETER FÜR ALLE SALATKULTUREN AUßER ENDIVIE, GEMITTELT ÜBER DIE MITTELWERTE DER BEIDEN JAHRE 2018 UND 2019. BERÜCKSICHTIGT WURDEN NUR DIE WERTE DER KONTROLLPLOTS BEIDER JAHRE.....	70
TABELLE 16 MITTELWERTE UND GEMITTELTE VARIATIONSKOEFFIZIENTEN DER VIER N-EFFIZIENZ-INDIKATOREN FÜR 2018, 2019 SOWIE DIE SALATKULTUREN OHNE ENDIVIE AUS BEIDEN JAHREN. FÜR DAS JAHR 2019 ERFOLGT WEITERHIN EINE UNTERSCHIEDUNG IN MAßNAHMEN- (M) UND KONTROLLPLOTS (K).....	71
TABELLE 17 VERGLEICH DER MITTLEREN GESAMTVARIANZ SOWIE DER STANDARDABWEICHUNG (SD) FÜR N1 ($\mu=39.5$ KG N/HA) IM JAHR 2019. BERECHNUNGEN ERFOLGTEN UNTER DER ANNAHME UNABHÄNGIGER (KOVARIANZEN 0 GESETZT) UND ABHÄNGIGER (EINBEZIEHUNG DER KOVARIANZEN) STICHPROBEN NACH DER DELTA-METHODE. ZUSÄTZLICH SIND DIE ERMITTELTEN WERTE OHNE BERÜCKSICHTIGUNG DER FEHLERFORTPFLANZUNG DARGESTELLT.....	72
TABELLE 18 MITTLERE REDUKTION DER GESAMTVARIANZ UND STANDARDABWEICHUNG (SD) IN % FÜR N1 IM JAHR 2019, WENN FÜR EINEN BESTIMMTEN PARAMETER VARIANZ SOWIE DAZUGEHÖRIGE KOVARIANZEN AUF 0 GESETZT WERDEN.....	72
TABELLE 19 DURCHSCHNITTliche GESAMTVARIANZEN VON N1 ($\mu_p=39.5$ KG N/HA; $\mu_F=41$ KG N/HA) IM JAHR 2019 FÜR DIE DREI VERSCHIEDENEN ARTEN DER PFLANZDICHTe: BERECHNET + NUTZUNG DER VARIANZEN (P+V), BERECHNET + NULLSETZUNG DER VARIANZEN (P+V0) UND VORGEGEBEN + NULLSETZUNG DER VARIANZEN (F+V0).....	73
TABELLE 20 DARSTELLUNG DER ABSOLUTEN N-MINERALISATION FÜR DAS JAHR 2018, SOWIE DER ERHOBENEN N-VORRÄTE IM JAHR 2020 DER DREI AUSGEWÄHLTEN FLÄCHEN DICHT UNTEN, RICKENBACH 1 UND 2. SPALTE 4 UND 5 ZEIGEN DIE RELATIVE MINERALISATION IM VERGLEICH ZUM N-VORRAT, SOWIE DAS VERHÄLTNIß VON MINERALISATION ZU AUFGEBRACHTER DÜNGEMENGE.....	80

SAS Codes

SAS CODE 1 ANPASSUNG DES TWEEDIE-MODELLS MIT AUSSCHLIEßLICH FIXEN EFFEKTEN	66
SAS CODE 2 ANPASSUNG DES TWEEDIE-GLMM MIT 2 ZUFÄLLIGEN EFFEKTEN UND DEM _RESIDUAL_ EFFEKT	67
SAS CODE 3 CODE ZUR MODELLIERUNG DER GÜTEMAßE FÜR DIE EINZELPARAMETER IM JAHR 2018.	68
SAS CODE 4 CODE ZUR MODELLIERUNG DER GÜTEMAßE FÜR DIE 4 N-EFFIZIENZ-INDIKATOREN IM JAHR 2019. IM GEGENSATZ ZUM JAHR 2018 WIRD AUCH DIE VARIABLE ‚MASSNAHME‘ IN DAS MODELL AUFGENOMMEN.....	69
SAS CODE 5 MULTIVARIATES MODELL ZUR ERMITTLUNG DER VARIANZ-KOVARIANZ-MATRIX DER ZU N1 GEHÖRIGEN PARAMETER	71

Abkürzungsverzeichnis

AIC	Akaike information criterion
BIC	Bayesian information criterion
CULTAN	Controlled Uptake of Long Term Ammonium Nutrition
dt/ha	Frischmasse des Erntegutes oder der Erntereste in kg pro Hektar
EDM	Exponentielles Dispersionsmodell
FM	Frischmasse
GLM	Generalisiertes lineares Modell
GLMM	Generalisiertes lineares gemischtes Modell
KAS	Kalkammonsalpeter
Kg	Kopfgewicht bzw. Menge Erntereste pro Kopf
LK	Linearkombination
LL	logarithmierte Likelihood
MBC	Mikrobieller Kohlenstoff
ML	Maximum Likelihood
MF	Marktfähigkeit
MPL	Maximum Pseudo-Likelihood
N _{min}	mineralischer Stickstoff im Boden in Form von Nitrat und Ammonium
N/ha	Menge an N im Erntegut oder in den Ernteresten in kg pro Hektar
Pd	Pflanzdichte
SD	Standardabweichung
SOM	Soil Organic Matter
SOC	Soil Organic Carbon

1. Einführung

2009 führten Rockström et al. mit den ‚Planetary Boundaries‘ ein neues Konzept zur globalen Nachhaltigkeit ein, das auf 9 ökologischen Belastungsgrenzen der Erde basiert. Eine Einhaltung dieser Grenzen garantiert, nach Meinung der Autoren, einen sicheren Handlungsspielraum für die Aktivitäten der Menschheit. Allerdings wird in ihrem Paper deutlich, dass 3 Grenzen bereits überschritten wurden: Drastische Ausmaße und damit auch Auswirkungen auf die planetaren Ökosysteme, hat ihrer Meinung nach der Verlust an Biodiversität. Auch das Fortschreiten des Klimawandels hat ihrer Ansicht nach die atmosphärische CO₂-Konzentration bereits über ein tolerierbares Maß hinaus erhöht. Noch vor dem Klimawandel findet sich allerdings die Störung des Stickstoff (N)-Kreislaufs durch anthropogenen Entzug von elementarem N₂ aus der Atmosphäre, wodurch vermehrt reaktive Stickstoffformen wie Nitrat (NO₃⁻) in die Umwelt gelangen. Außerhalb von Agrarökosystemen, dem Ziel des anthropogenen N-Eintrags, führt eine Veränderung der freien N-Konzentration zu graduellen oder auch nicht-linearen gravierenden Veränderungen der terrestrischen, aquatischen oder marinen Systeme. Algenblüten wie im türkischen Marmarameer im Juni diesen Jahres führen zu Massensterben von Meereslebewesen, da Korallen ihre Filterfunktion nicht mehr ausführen können oder Nahrungsketten durch fehlendes Zooplankton zusammenbrechen (ARD aktuell 2021). Auch die terrestrische Biodiversität reagiert auf den Einfluss eines veränderten Nährstoffangebotes, vor allem mit der Verdrängung schwachwüchsiger, an niedrige Nährstoffangebote angepasster Spezies (Dise 2011). Als problematisch erachten die Autoren zudem die Tatsache, dass der N-Überschuss im Boden akkumuliert und sich die Ökosysteme auch bei sinkenden anthropogenen Einträgen nur langsam erholen werden. Rockström et al. (2009) kritisieren insbesondere, dass Bestrebungen zur Limitierung der Stickstoffverschmutzung aktuell primär auf lokaler und regionaler Ebene stattfinden, anstatt globale Reduktionsansätze zu forcieren.

1.1. Projekt NitroGäu

Beispiel für ein regionales Bestreben zur Reduktion der Stickstoffeinträge in das Grundwasser ist das seit 2000 laufende Nitratprojekt Gäu-Olten im Schweizer Kanton Solothurn. In diesem schweizweit flächenmäßig größten Projekt (Bünemann et al. 2020) kooperieren der Kanton, die Wasserversorger sowie 83 Landwirte. Letztere verpflichten sich im Rahmen des Projektes zu einer nitratarmen Bewirtschaftung der Felder, mittels Maßnahmen im Bereich der Bodenbearbeitung

und Aussaat sowie des Einsatzes von Winterbegrünung und geeigneter Fruchtfolgen. (Sperisen 2018)

Grundlage der nächsten Phase des Projektes ab 2021 bildet die Übertragung des Critical Load Konzeptes, ursprünglich angewandt zur Erfassung von atmosphärischen Schwefel, Stickstoff und volatilen kohlenstoffhaltigen Komponenten-Emissionen (UNECE 1999), auf den Eintrag von Nitrat in das Grundwasser. Berechnungen unter der Annahme gleichbleibender Niederschläge sowie Versickerungsraten ergeben für das Gebiet Niederbipp-Gäu-Olten eine maximale Stickstofffracht von 30 kg N/ha und Jahr, um das Critical Limit von 25 mg Nitrat/l im Grundwasser nicht zu überschreiten (Bischoff und Liebisch 2021). Zur Überprüfung der Wirksamkeit der vergangenen Periode des Projektes wurde im Jahr 2017 das 4-jährige Forschungsprojekt NitroGäu gestartet, in dem zur Aufstellung von N-Effizienz-Indikatoren Nitratmessungen direkt im Feld erfolgten, sowie weitere Maßnahmen im Bereich der Düngung implementiert und untersucht wurden.

Mit dem Abschluss der ersten Phase des Projektes vergangenen März 2021 konnten bereits erste Ergebnisse gewonnen werden. Diese zeigen, dass bei Düngung nach üblicher landwirtschaftlicher Praxis insbesondere auf den gemüsebaulich genutzten Flächen hohe Ammonium- und Nitratfrachten im Sickerwasser aus dem Wurzelraum erfolgen, die durchschnittlich 3-mal größer sind als auf untersuchten ackerbaulichen Flächen. In der Konsequenz führt das zu einer Überschreitung des Critical Limits um den Faktor 10. (Bischoff et al. 2021) Außerdem konnte durch das Projekt aufgezeigt werden, dass ein Großteil des Nitrates im Grundwasser auf die hohen Anteile an organischer Substanz in den Böden zurückzuführen ist, die zu einer verstärkten Mineralisation und damit einer Freisetzung von Stickstoff führen. Verstärkt wird dieser Effekt durch den Umstand, dass im Gemüsebau oftmals größere Mengen an Ernteresten auf dem Feld verbleiben, die nicht nur hohe Mengen an N enthalten, sondern auch leicht abzubauen organische Substanz darstellen. Dies führt dazu, dass selbst Maßnahmen mit Einsatz geringerer Düngermengen und unter Anrechnung des im Boden verfügbaren Stickstoffs ($N_{\min}$) weiterhin zu erheblichen Nitratauswaschungen führen. Entscheidend ist nun, dass durch die reduzierten Düngergaben zwar Reduktionen in der Nitratauswaschung von über 50 kg N/ha erzielt wurden, aber kein signifikant negativer Einfluss auf die Qualität des Erntegutes festgestellt werden konnte. (Bischoff et al. 2021)

Diese positiven Projektergebnisse führten zur Genehmigung eines Folgeprojektes bis 2026. Ziel in den folgenden 5 Jahren soll es sein, die N-Effizienz im Gemüsebau zu steigern, was mit einer Reduktion der vermeidbaren N-Überschüsse gleichzusetzen ist. Mittels des konsequenten

Einsatzes von $N_{\min}$ -Messungen und deren Anrechnung auf die gegebenen Düngermengen sollen N-Überschüsse bis 2026 von maximal 100 kg N/ha erreicht werden. (Bischoff und Liebisch 2021)

1.2. Statistische Auswertung

1.2.1. Umgang mit Nullwerten in der Nitratmessung

In situ-Messungen von Nitratauswaschung zeigen hohe Standorts- und Witterungsabhängigkeiten (Bischoff 2007). So waren im NitroGäu-Projekt Unterschiede von mehreren 100 kg N/ha sowohl zwischen als auch innerhalb verschiedener Felder keine Seltenheit. Eine weitere Besonderheit von Nitratmessungen liegt darin, dass in bestimmten Fällen auch keine Auswaschung stattfinden kann und diese Nullwerte teilweise hohe Anteile an den gesamten Daten aufweisen. So etwa im Falle eines anderen Nitratprojektes im Main-Tauber Kreis im Nordosten Baden-Württembergs. Dort traten im Laufe der 4-jährigen Messperiode bei 289 von insgesamt 1255 Messungen Nullwerte auf, was einem Anteil von 23 % entspricht. In diesem Fall lässt sich das sowohl auf die örtlichen Begebenheiten als auch auf das Klima und Witterungsereignisse zurückführen: Standorte, die von schluffigem Ausgangslöss dominiert sind, weisen hohe Wasserrückhaltevermögen und nutzbare Feldkapazitäten auf. In Kombination mit nur geringen jährlichen Niederschlägen führt dies zu der Situation, dass kein Wasserüberschuss und damit auch keine Versickerung und Nitratauswaschung bis ins Grundwasser stattfinden kann. (Bischoff 2007) Interessant sind unter diesen Bedingungen jene Standorte, die zum größten Teil aus Nullwerten bestehen, jedoch auch einzelne höhere Nitratauswaschungswerte zeigen. Diese lassen sich sehr wahrscheinlich auf das Phänomen des präferentiellen Flusses (Lawes et al. 1882) entlang von Regenwurmrohren oder alter Wurzelgänge zurückführen.

Lambert (1992) fasst Datensätze mit erhöhten Nullwerten unter dem Begriff „Zero Inflation“ zusammen, der einen Spezialfall der Überdispersion darstellt. Durch Überdispersion werden implizierte Annahmen der Normalverteilung verletzt, was zu einer Unterschätzung des Standardfehlers, zu eng begrenzter Vertrauensintervalle sowie zu kleinen p-Werten in der statistischen Analyse führen kann (Martin et al. 2005; Lambert 1992).

1.2.2. N-Bilanzen

In Deutschland fungiert die N-Gesamtbilanz als Indikator für eine nachhaltige Entwicklung. Sie berechnet den Stickstoffüberschuss aus Zufuhrgrößen wie Dünger, Deposition, biologische Fixierung und Futtermitteln, sowie Abfuhrgrößen, zu denen pflanzliche und tierische Marktprodukte gehören. (DLG e.V. 2016) Im Rahmen des NitroGäu-Projekts dienen die N-

Bilanzen hauptsächlich zur Beurteilung der angewandten Düngemaßnahmen, weswegen mehrere schlagbezogene N-Effizienz-Indikatoren erstellt wurden (Bischoff et al. 2021):

- N1 Düngung – Abfuhr
- N2 Düngung – Aufwuchs
- N3 N-Effizienz [%]: Quotient Ernte / Düngung
- N4 Rest-N_{min}-Gehalt + N-Verbleib nach Ernte

Die aktuellen Berechnungen basieren dabei auf Mittelwerten der einzelnen Bilanzglieder. Dies kann durchaus kritisch gesehen werden, da on-farm Experimente oftmals großen umweltbedingten Schwankungen unterliegen und die Messergebnisse mit großen Unsicherheiten behaftet sein können. Durch die Quantifizierung des auftretenden Fehlers kann abgeschätzt werden, ob sich die N-Effizienz-Indikatoren als Grundlage zur Ableitung praktischer Handlungsanweisungen an die Landwirte nutzen lassen. Hohe Unsicherheiten werden in erster Linie im weiteren Verlauf des Projektes problematisch, wenn sich die N-Überschüsse den maximalen Stickstofffrachten zum Erreichen des Critical Limits nähern.

Können zu hohe Unsicherheiten in den Messungen der N-Effizienz-Indikatoren festgestellt werden, so wird in einem nächsten Schritt die Ermittlung potentieller Fehlerquellen relevant. Da die einzelnen N-Effizienz-Indikatoren als Funktion mehrerer unabhängiger Variablen gesehen werden können, ist es möglich, deren Unsicherheit mittels der Anwendung von Fehlerfortpflanzungen zu berechnen. Neben den Varianzen der unabhängigen Variablen ist in diesem Kontext auch die Betrachtung der Kovarianzen von entscheidender Bedeutung, da diese durch Maßnahmen wie abhängiges oder unabhängiges Messen modifiziert werden können.

1.3. Humusdynamik und Stickstoffnachlieferung in Böden

Wie bereits erwähnt, lassen sich hohe Nitratauswaschungen unter landwirtschaftlich genutzten Flächen oftmals nicht alleinig auf eine nicht angepasste Düngung zurückführen. Zusätzlich können mitunter hohe Anteile organischen Stickstoffes aus der organischen Bodensubstanz (SOM, engl. Soil Organic Matter) mineralisiert werden (Di und Cameron 2002). Im Gegensatz zu eingesetzten Düngern stellt dies eine schwer bis nicht kontrollierbare Quelle dar, da dieser Prozess auf mikrobielle Aktivitäten zurückzuführen ist (Robertson und Groffman 2007). Zur Reduktion der Nitratauswaschung ist es daher essenziell, Prozesse, die zum Aufbau sowie Abbau organischer Substanz und damit zur Sequestrierung und Freisetzung von N im Boden führen, zu verstehen. Im Kontext des NitroGäu-Projektes sollen zudem auftretende Ungleichgewichte durch Änderungen von Standortfaktoren beleuchtet werden. Dazu gehören insbesondere die Drainierung von

feuchten Flächen, sowie langfristige Wechsel in der Landnutzung, wie beispielsweise von Wiese zu Acker oder Getreide- zu Gemüseanbau. Ist eine quantitative und zeitliche Vorhersage oder Abschätzung der N-Mineralisation auf einem landwirtschaftlich genutzten Feld möglich, so kann eine Anpassung der Düngung erfolgen.

1.3.1. SOM und C-Dynamiken

Akkumulation von organischer Substanz im Boden findet dann statt, wenn der Eintrag von Kohlenstoff (C) in den Boden den Austrag an C übersteigt (Eijsackers und Zehnder 1990; Weil und Magdoff 2004). In den meisten ackerbaulich genutzten Oberböden finden sich 10 bis 40 g/kg an organischer Substanz, die zu mehr als der Hälfte aus Kohlenstoff (SOC, engl. Soil Organic Carbon) besteht. (Weil und Magdoff 2004) Die Einträge des Kohlenstoffes sind überwiegend pflanzlicher Natur und können weiterhin in partikuläre Formen wie senescente oder abgestorbene Blätter, Stiele oder Wurzeln (Hoffland et al. 2020) und in gelöste Bestandteile von Blättern, Nadeln, Wurzelausscheidungen oder Rhizodeposition unterschieden werden (Sokol et al. 2019).

Mit der Einbringung von frischen Pflanzenresten, auch Streu genannt, in den Boden unterliegen diese dem Einfluss mikrobieller Aktivität. Da Mikroorganismen im Boden überwiegend einen chemoheterotrophen Stoffwechsel aufweisen (Fuller 2005), nutzen sie Pflanzenreste als Kohlenstoff- und Energiequelle für Wachstum und Aufrechterhaltung der Zellfunktionen. Neben der Entstehung von Wasser (H_2O) und Kohlenstoffdioxid (CO_2) werden die im Pflanzenmaterial enthaltenen Mineralstoffe entweder von den Mikroorganismen aufgenommen oder, bei einem vorliegenden Überschuss, an die Bodenlösung abgegeben (Amelung et al. 2018). Während die Masse aller Pflanzenreste im Boden folglich kontinuierlich abnimmt, gibt es große Unterschiede bei den Abbaugeschwindigkeiten der verschiedenen Streu-Komponenten (Eijsackers und Zehnder 1990). Minderman 1968) stellte fest, dass Mono- und Polysaccharide wie Hemicellulose und Cellulose schneller aus dem Bodenpool verschwinden als Lignine, Wachse und Phenole. Gründe dafür finden sich in der Struktur der einzelnen Komponenten. So können Zucker entweder direkt oder durch wenige Umwandlungsschritte metabolisiert werden, während Lignin durch hydrophobe Eigenschaften und unspezifische Strukturen nur mittels erhöhten Aufwands von den Mikroorganismen zerlegt werden kann. Die Zusammensetzung wird gemeinhin als Qualität der Streu definiert und ist neben klimatischen Parametern wie Temperatur und Feuchte ein Haupteinflussfaktor der Abbaurate. Zwar spielt auch die mikrobielle Aktivität eine bedeutende Rolle, diese kann jedoch als Indikator der ersten beiden Bedingungen gesehen werden. (Lavelle et al. 1993) Quantitative Studien zeigen, dass in gemäßigten Klimaten rund 70 % des in den Pflanzenresten enthaltenen Kohlenstoffes innerhalb des ersten Jahres als CO_2 freigesetzt werden

(Haider 1992). Haider (1992) beschreibt weiterhin, dass nach dem anfänglich schnellen Verlust an SOC die verbliebenen Bestandteile langsamer abgebaut und kontinuierlich in eine gegen Abbau resistenter SOM, den Humus, integriert werden. Im Gegensatz zur Ausgangsstreu finden sich im Humus nur geringe Konzentrationen an Kohlenhydraten wie Cellulose und Hemicellulose. Es wird angenommen, dass die Limitierung für den Abbau des Humus nicht in der N-, sondern in der Verfügbarkeit von leicht löslichen und damit schnell metabolisierbaren kohlenstoffhaltigen Substraten liegt (Flanagan und van Cleve 1983).

Bei der Frage nach einem umfassenden Abbaumodell weist Prescott (2005) darauf hin, dass die frühere Annahme eines exponentiellen Abbaumodells von Olson (1963) heute nicht mehr unterstützt wird. Stattdessen wird angenommen, dass sich der Masseverlust der Streu einer Asymptote nähert und daher eine Grenze besitzt, an der die Abbaurate unmessbar langsam wird (Howard und Howard 1974; Berg und Ekbohm 1991). Bestimmt wird das maximale Abbaulimit durch die Qualität der Streu (Prescott 2005).

Doch was genau unterscheidet den Humus von der Ausgangsstreu, die in den Boden gelangt? Eijsackers und Zehnder (1990) beschreiben Humus als strukturlose Fraktion der organischen Bodensubstanz, die durch den mikrobiellen Abbau pflanzlicher Bestandteile einschließlich der Synthese neuer Produkte entsteht. Haider (1992) konkretisiert diese Sicht und gibt an, dass der Abbau von Pflanzenresten durch Mikroorganismen zur Entstehung von mikrobiellen Produkten führt, welche als Substrat für die Humusbildung dienen. Lange Zeit wurde die Humusfraktion im Boden durch die Extraktion der SOM mittels einer Base und die anschließende Unterteilung in verschiedene Fraktionen aufgrund der Wasserlöslichkeit charakterisiert. Die gebräuchlichste Einteilung erfolgte dabei in die Makromoleküle Humine, Humin- und Fulvosäuren (Waksman 1925). Mit der Erfindung nicht-destruktiver spektroskopischer Messmethoden stellten selbst Verfechter der Basen-Extraktion wie zum Beispiel Waksman im Laufe der Zeit fest, dass dieses Verfahren strikt operativ ist und kein wahres Bild des Humus liefern kann (Waksman 1936; Baveye und Wander 2019). Aus diesem Grund revidierte Waksman 1936 seine Sicht dahingehend, dass der Humus im Boden aus Komponenten des ursprünglichen Pflanzenmaterials zusammengesetzt ist, die gegen weiteren Abbau widerstandsfähig sind. Humuskomplexe entstehen dabei als Ergebnis von Abbauvorgängen wie Hydrolyse, Oxidation und Reduktion, sowie durch die Interaktion mit den bereits erwähnten mikrobiellen Abbauprodukten.

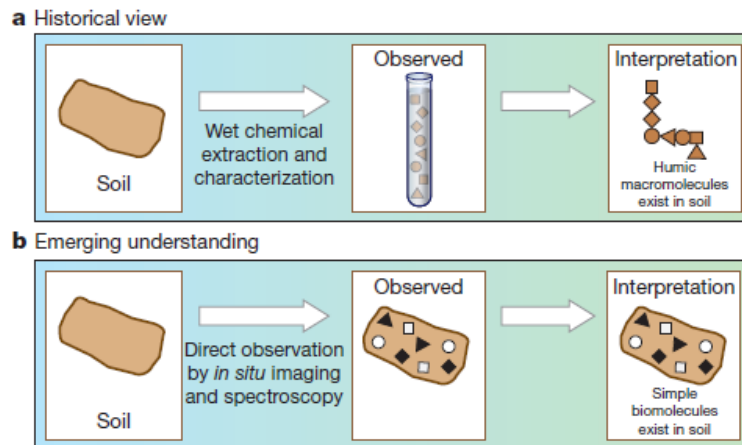


Abbildung 1 a) Historische Sicht: Rekalzitranz der SOM basiert auf der de-novo Bildung komplexer humoser Polymere, die durch chemische Analysetechniken beobachtet wurden **b)** Neue Sicht: Durch nicht destruktive, spektroskopische Methoden konnte gezeigt werden, dass humose Substanzen aus einfacheren Biomolekülen zusammengesetzt sind (Schmidt et al. 2011)

Während die alte Sicht demnach noch auf der de-novo Bildung von Makromolekülen basierte, geht die neue Sicht von relativ gesehen simpleren Biomolekülen als Fundament des Humus aus (vgl. Abbildung 1). Allerdings ist auch der Humus nicht vollständig gegen Abbau geschützt, sondern seine einzelnen Komponenten werden weiterhin innerhalb von Jahrzehnten oder Jahrhunderten zersetzt (Bell und Lawrence 2009). Neue Definitionen deklarieren den Humus als “collections of diverse, relatively low molecular mass components forming dynamic associations stabilized by hydrophobic interactions and hydrogen bonds.” (Sutton und Sposito 2005) oder als “supramolecular associations of self-assembling heterogeneous and relatively small molecules deriving from the degradation and decomposition of dead biological material.” (Piccolo 2016). Während Sutton und Sposito damit hauptsächlich die chemischen Eigenschaften des Humus hervorheben, geht Piccolo auch auf die biologischen Bildungsprozesse ein.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Bezeichnung Humus immer dann verwendet, wenn die Zersetzung bereits fortgeschritten und das Ausgangsmaterial nicht mehr erkennbar ist. Organische Substanz (SOM) bezeichnet sowohl Humus als auch die Streu auf und im Boden, wobei der Übergang zwischen diesen Begriffen fließend ist. Der Begriff SOC bezieht sich dagegen nur auf den Anteil des Kohlenstoffs in der SOM.

C-Pools im Boden

Analog zur eingebrachten Pflanzenmasse, spielt auch beim Kohlenstoff im Boden nicht nur die Gesamtmasse eine Rolle, sondern ebenfalls die Form, in der er vorliegt – die sogenannten C-Pools. Allerdings findet sich in der Literatur keine konsistente Einteilung der C-Pools. Häufig findet sich die Unterscheidung in aktiv - labil und passiv - stabil (Jha et al. 2012; Sahoo et al. 2019), wobei teilweise noch ein intermediärer Pool integriert wird (Wiesmeier et al. 2014). Awale et al. (2017) nehmen eine andere Einteilung vor und differenzieren zwischen physikalischen, chemischen und mikrobiellen Pools, während Natali et al. (2020) zwischen thermisch labilem, residual oxidierbarem und gesamt organischem C unterscheiden.

Bereits 1987 präsentierten Parton et al. ein Modell für den Kohlenstofffluss im Boden, in dem sie neben den bereits erwähnten aktiven und passiven Fraktionen auch einen langsamen C-Pool integrieren (Abbildung 2). Exemplarisch sollen die Charakteristiken der verschiedenen C-Pools anhand des Modells von Parton et al. erläutert werden, da diese entscheidenden Einfluss auf die Freisetzung von bodengebundener N besitzen. Wie zu erkennen ist, unterteilen Parton et al. die anfallenden Pflanzenreste zunächst in strukturellen und metabolischen Kohlenstoff, die sich in ihrem Lignin/N-Verhältnis unterscheiden. Die rasche Umsatzgeschwindigkeit des metabolischen C von 0.1 bis 1 Jahr und Einbindung in den aktiven C-Pool lässt sich durch ein niedriges Lignin/N-Verhältnis erklären. Demgegenüber besitzt der strukturelle C in der Streu ein höheres Lignin/N-Verhältnis, damit auch eine längere Umsatzzeit von 1 bis 5 Jahren und trägt auch zum langsamen C-Pool bei. Der aktive Pool seinerseits setzt sich größtenteils aus mikrobiellem und labilem C zusammen und besitzt eine relativ kurze Umsatzzeit von 1.5 Jahren. Ersteres bezieht sich auf den Kohlenstoff, der direkt in den Mikroorganismen im Boden gespeichert ist, wohingegen sich der labile C auf mikrobielle Ausscheidungsprodukte, einfache Zucker sowie organische Säuren bezieht (Jha et al. 2012; Buyanovsky et al. 1994). Um das Niveau des Pools konstant zu halten, muss ständig frisches Material zugeführt werden, um die dynamische Population der Mikroorganismen zu versorgen. Dies ist nötig, da nur ein geringer Anteil vom passiven in den aktiven Teil übergeht. (Newbould 1982; van Dijk 1982) Dieses biologische Fundament des aktiven Pools ist nach Haynes (2005) die Erklärung dafür, dass er sehr sensitiv auf sich ändernde Umweltbedingungen reagiert und sich daher auch als Zeiger für Veränderungen im Landnutzungsmanagement nutzen lässt (Vieira et al. 2007). Die ligninhaltigen Bestandteile, die größtenteils im strukturellen Kohlenstoff vorkommen, fließen fast ausschließlich in den langsamen Pool, sodass sich nur wenig Lignin-C in der mikrobiellen Biomasse wiederfindet (Stott et al. 1983). Letztlich werden Teile des aktiven und langsamen Pools mit der Zeit in den passiven Pool integriert, der eine Umsatzzeit zwischen 200 und 1500 Jahren besitzt. (Parton et al. 1987) Auf Grund der langen Umsatzzeiten nimmt der passive

Pool nicht am saisonalen Nährstoffkreislauf teil (Hsieh 1992). Wiesmeier et al. (2014) stellten fest, dass sich in Grasland und Ackerböden bis zu 90 % des SOC im langsamen und passiven Pool befinden. Im Gegensatz dazu, findet sich in Wäldern ein höherer Anteil an labilem SOC. Dies lässt sich damit begründen, dass die Bäume eine kontinuierliche Quelle frischer, theoretisch leicht zersetzbarer Streu liefern. Praktisch gesehen verhindern die teilweise mächtigen Humusaufgaben im Wald aber einen raschen Abbau, da die Mikroorganismen räumlich vom leicht zersetzbaren Substrat getrennt sind. Diese verminderte Reaktivität führt zu einer Akkumulation des C im labilen Pool. Im Gegensatz dazu werden die Erntereste im Ackerbau durch ihre Einarbeitung in den Boden direkt zu den Mikroorganismen gebracht und der labile SOC wird schnell umgesetzt.

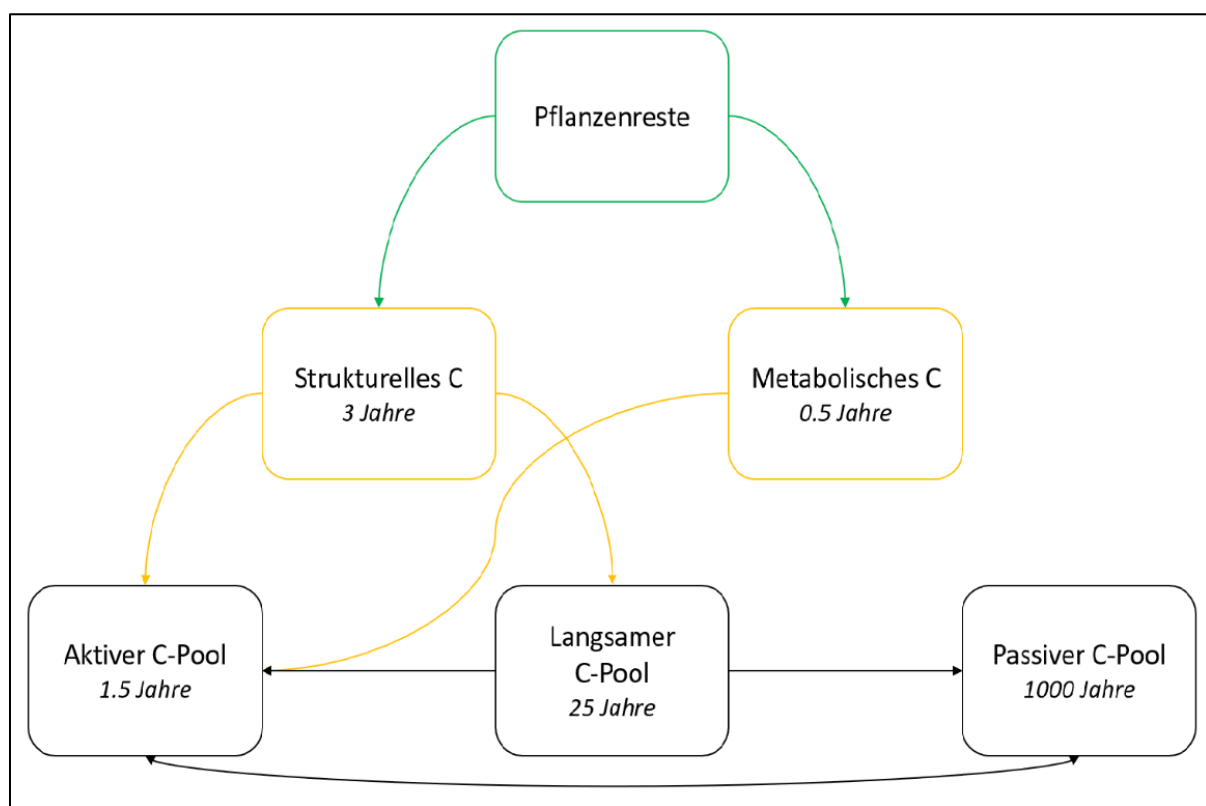


Abbildung 2 Flussdiagramm des Kohlenstoffes im Boden mit einer Unterscheidung der in den Pflanzenresten vorliegenden C-Formen sowie deren Beitrag zu den drei aufgeführten C-Pools. Die Zahlen beziffern die Umsatzzeiten der C-Formen und der C-Pools (nach Parton et al. 1987)

Wie bereits erwähnt sind Mikroorganismen im Boden das zentrale Glied im Prozess der Umsetzung der organischen Substanz. Viele Autoren beschreiben die enge Korrelation des mikrobiellen Kohlenstoffes (MBC) mit dem aktiven C-Pool (Rovira et al. 2010; Alvarez und Alvarez 2016). Im Vergleich zur Gesamtheit der organischen Substanz (Bulk SOM) ist der MBC durch höhere Labilität gekennzeichnet (Parton et al. 1987). Er besitzt nicht nur eine geringere Umsatzzeit, sondern reagiert auch unmittelbarer auf die Einbringung frischer organischer Substanz. (Powlson

et al. 1987; Hassink 1995). Moore et al. (2000) beschreiben in einem ackerbaulichen Versuch mit und ohne Fruchtfolge zudem einen signifikanten Zusammenhang zwischen MBC und SOC. Eine Erklärung dafür liefern Liddle et al. (2020), die einen höheren SOC-Gehalt im Boden mit einem erhöhten Nahrungsangebot für Mikroorganismen gleichsetzen, sodass sich deren Population vergrößert. Mehr Mikroorganismen führen ihrerseits zu einem erhöhten Abbau, einer höheren Nährstofffreisetzung und -Verfügbarkeit, sowie einer besseren Bodenstruktur. Der Anteil des MBC am SOC variiert dabei laut Haider (1992) zwischen 1 bis 3 %. McGonigle und Turner (2017) differenzieren in ihrem Paper noch genauer und nennen anteilig 1.1 % unter ackerbaulich genutzten Flächen und 2.7 % unter Grasland.

Stabilisierungsmechanismen des C im Boden

Nach der Betrachtung der verschiedenen C-Pools stellt sich nun die Frage, wie die unterschiedlichen Umsatzzeiten erklärt werden können. In den Anfängen der Humusforschung lag das Augenmerk auf der Existenz rekalcitranter Strukturen. Es wurde davon ausgegangen, dass ein Großteil der organischen Verbindungen auf Grund ihrer strukturellen Stabilität vor Abbau geschützt ist (Amelung et al. 2018). Allerdings konnte diese Sichtweise durch die bereits erwähnten nicht-destruktiven spektroskopischen Methoden widerlegt werden und intrinsischen oder molekularen Eigenschaften von Humusverbindungen wird nur noch ein geringer Einfluss auf Stabilisierungsprozesse zugesprochen (Haider 1992; Marschner et al. 2008). Stattdessen werden folgende Mechanismen als Hauptgründe für die Verlangsamung der Abbauraten angeführt (Amelung et al. 2018):

- Räumliche Heterogenität / Trennung von Substrat und Zersetzer
- Wechselwirkungen mit der Mineralphase

Die räumliche Trennung entsteht dadurch, dass die Mikroorganismen nur ungefähr 1 % des Bodenvolumens besiedeln und zudem heterogen auf kleinräumige Habitate verteilt sind (Ekschmitt et al. 2008). Darüber hinaus können Substanzen auch physikalisch geschützt werden, indem sie im Inneren von Aggregaten oder Ausscheidungen von Bodentieren okkludiert sind. Dies trifft hauptsächlich auf Lignin angereicherte, bereits zum Teil zersetzte Reste zu. (Amelung et al. 2018)

Bereits 1987 stellte Tate die Hypothese auf, dass der Hauptstabilisierungsmechanismus in einer Assoziation der organischen Substanz mit der Mineralphase liegt. Amelung et al. (2018) führen dies weiter aus und unterscheiden zwischen:

- Schwachen Wasserstoffbrückenbindungen oder Van-der-Waals-Wechselwirkungen zwischen unpolaren Gruppen der organischen Substanz und ungeladenen Mineraloberflächen
- Ionenbindungen mit außersphärischen Komplexen bei Schichtsilikaten mit permanenter Ladung
- Ausbildung innersphärischer Komplexe durch Ligandenaustausch bei der Interaktion mit variablen Ladungen von (Hydr-) Oxidoberflächen
- Bildung von Ton-Humus-Assoziaten durch Wechselwirkungen mit Tonmineralen oder Eisenoxiden

Die Stärke der Bindungen ist dabei teilweise so hoch, dass keine vollständige Trennung der organischen Substanz von der Mineralphase möglich ist. Ein weiteres Indiz für die Bedeutung dieses Stabilisierungsmechanismus ist, dass alte SOM-Fraktionen mit langen Umsatzzeiten hauptsächlich in Assoziation mit Bodenmineralen gefunden werden (Marschner et al. 2008). Schmidt et al. (2011) fassen diese neue Sicht der Stabilisierung von SOM zusammen und klassifizieren die Persistenz als Eigenschaft des gesamten Ökosystems. Es sind sowohl biologische als auch physikochemische Einflüsse, die die Wahrscheinlichkeit des Abbaus der SOM reduzieren.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass Akkumulation und Verteilung der SOM dynamischen Stabilisierungs- und Destabilisierungsprozessen unterliegt (Jackson et al. 2017). Biotische Faktoren wie Eintrag der organischen Substanz, abiotische Faktoren wie Temperatur und Feuchtigkeit sowie anthropogene Störungen des Gleichgewichts durch zum Beispiel Bodenbearbeitung sorgen dafür, dass die SOM zwar konzeptionell in Fraktionen unterteilt werden kann, Vorhersagen zu deren Größe oder Abbauverhalten aber nur in gewissen Grenzen getroffen werden können (Amelung et al. 2018).

1.3.2. N-Dynamiken und N-Flüsse

Mit dem Wissen zum Umsatz der SOM und den C-Dynamiken im Boden, kann nun eine genauere Betrachtung der Stickstoffflüsse im Boden erfolgen. Dabei wird der Fokus vor allem auf Freisetzung von mineralischen N-Verbindungen im Prozess der Umsetzung der SOM gelegt.

Bingham und Cotrufo (2016) charakterisieren den Boden als größten Pool von sowohl fixiertem-, als auch biologisch verfügbarem Stickstoff. Hinzu kommt, dass kein anderes Element im Boden so viele verschiedene Formen annehmen kann (**Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden.**) (Robertson und Groffman 2007). Die ersten 8 Formen der Tabelle repräsentieren die

mineralische oder auch anorganische Fraktion des Stickstoffs im Boden. Beispiele für deren Eintrag in landwirtschaftliche Böden sind:

- Biologische Fixierung von molekularem N_2 mittels Rhizobien, auch als Symbiose mit Leguminosen (Bottomley und Myrold 2007)
- Atmosphärische N-Deposition von Stickoxiden wie NO und NO_2 durch die anthropogene Nutzung fossiler Brennstoffe (Galloway et al. 2008)
- Freisetzung von NH_4^+ und NH_3 aus N-haltigen Düngern oder der Tierhaltung in der Landwirtschaft (Cameron et al. 2013)

Tabelle 1 Hauptformen des im Boden vorkommenden Stickstoffs mit Summenformel und Oxidationsstatus. (g) kennzeichnet gasförmige Formen, die sowohl in der freien Bodenluft als auch gelöst im Bodenwasser vorkommen. (Robertson und Groffman 2007)

Name	chemische Summenformel	Oxidationszahl
Nitrat	NO_3^-	+5
Stickstoffdioxid (g)	NO_2	+4
Nitrit	NO_2^-	+3
Stickstoffmonoxid (g)	NO	+2
Lachgas (g)	N_2O	+1
Stickstoff (g)	N_2	0
Ammoniak (g)	NH_3	-3
Ammonium (g)	NH_4^+	-3
organischer N	R- NH_2	-3

Wie auch beim C-Kreislauf nehmen die Mikroorganismen entscheidenden Einfluss auf die Umwandlung und Bildung der mineralischen N-Formen im Boden (Abbildung 3.). Von ökologischer Relevanz ist zum einen die Denitrifikation, also die Reduktion von Nitrat zu gasförmigem Distickstoffmonooxid (N_2O) sowie zu elementarem Stickstoff (N_2). Die Denitrifikation ist der Hauptprozess, der zu einer Rückführung von fixiertem N in die Atmosphäre führt. Allerdings ist diese nur dann relevant, wenn Sauerstoff im Boden limitierend wird, was ab einem wassergefüllten Porenraum von etwa 60 % zu erwarten ist. (Robertson und Groffman 2007). Im Kontext der Nitratauswaschung spielt vor allem die Nitrifikation eine entscheidende Rolle, da dieser Prozess der Haupteintragspfad von Nitrat in die Ökosysteme darstellt. Sie beschreibt die

mikrobielle Oxidation von Ammonium (NH_4^+) über Nitrit (NO_2^-) zu Nitrat. Im Gegensatz zum positiv geladenen Ammonium, wird das negativ geladene Nitrat von den ebenfalls überwiegend negativ geladenen SOM-, Ton- und Mineraloberflächen im geringeren Umfang sorbiert und kann bei hohen Niederschlagsmengen leicht ins Grundwasser ausgewaschen werden. (Robertson und Groffman 2007). Wie Abbildung 3 entnommen werden kann, stellt neben dem mineralischen auch der organische N im Boden ein elementares Glied im Prozess des N-Kreislaufes dar

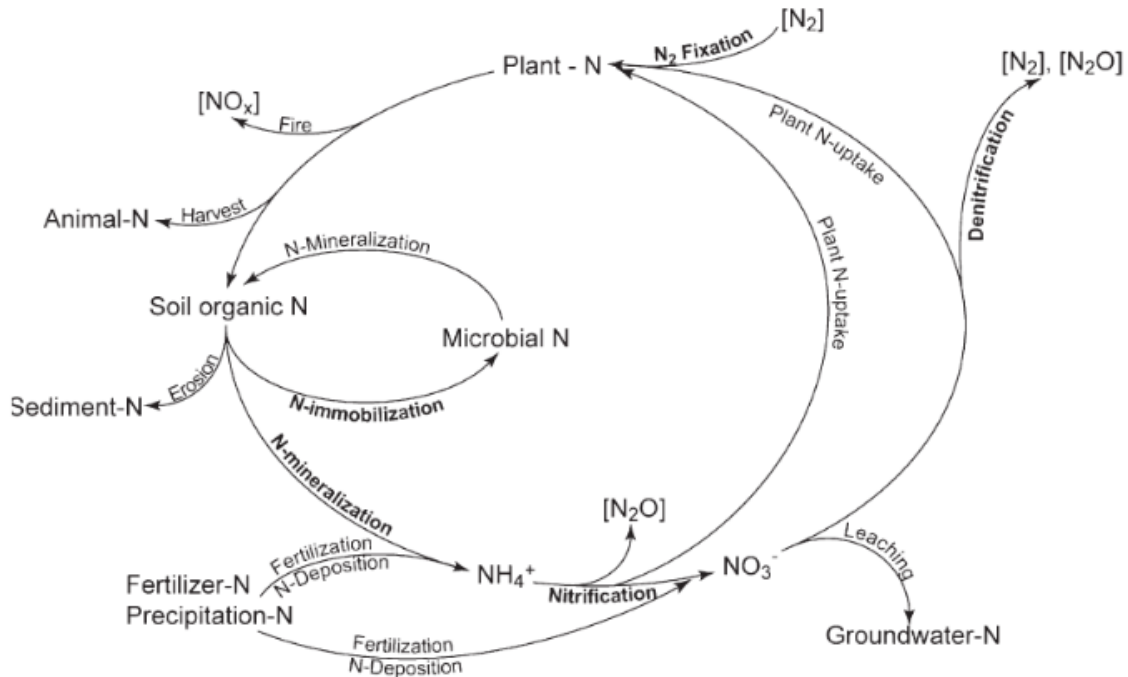


Abbildung 3 Schematische Darstellung der Hauptkomponenten des terrestrischen N-Kreislaufes. Fett gedruckte Prozesse werden durch Mikroorganismen vermittelt. Gasförmige N-Formen sind in Klammern gesetzt (Robertson und Groffman 2007)

Blickt man nun zurück auf die organischen Substanz, so setzt sich diese im Wesentlichen aus 50-55 % C, 33 % Sauerstoff (O), 5 % Wasserstoff (H), 4,5 % N und 1 % Schwefel (S) und P zusammen (Horwath 2007). Smith und Elliott (1990) führen allerdings an, dass 95 % des Stickstoffes, 90 % des Schwefels und 40 % des Phosphors mit der SOM im Boden assoziiert sind und deren Ab- und Umbau daher als wichtigste Quelle für Makronährstoffe einzuordnen ist. Vor allem in humosen Oberböden liegt dieser Stickstoff überwiegend in organischen Verbindungen aus Rückständen der Vegetation, in Bodenorganismen sowie deren Ausscheidungen vor. Dieser biotischen Immobilisation von N im Boden kann die abiotische Festlegung von NH_4^+ in Tonpartikeln oder an SOM gegenüber gestellt werden, die in den gemäßigten Klimaten allerdings nur eine untergeordnete Rolle spielt (Stevenson 1994). Quantitativ betrachtet finden sich in den Pflughorizonten von Mineralböden gemäßigt-humider Klimate 0.7 bis 2 g N/kg Boden, was 3 bis 9 t N/ha entspricht (Amelung et al. 2018). In Anlehnung an die C-Pools, kann auch der Stickstoff

im Boden Fraktionen zugeordnet werden (Parton et al. 1987). Stabile Bindungsformen wie Amide und Peptide können dabei Jahrtausende vor mikrobiellem Abbau geschützt sein, während Proteine, Aminosäuren und Aminosucker aus pflanzlichen oder mikrobiellen Rückständen labile N-Verbindungen repräsentieren (Amelung et al. 2018).

N-Mineralisation und -Immobilisation

Die Nachlieferung von mineralischem N und anderen Pflanzennährelementen aus dem organischen Bodenvorrat, auch Mineralisation genannt (vgl. Abbildung 3), erfolgt durch den mikrobiellen Abbau der SOM zu anorganischen Stoffen (Amelung et al. 2018). Um ein Verständnis für Mineralisations- und Immobilisationsvorgänge zu erhalten, ist es laut Robertson und Groffman (2007) unerlässlich „[to] think like a microbe“. Sie führen an, dass alle heterotrophen Bodenorganismen SOM als Kohlenstoff und Energiequelle konsumieren. Polymerische Bestandteile werden dabei durch Exoenzyme aufgebrochen, in kleinere lösliche Moleküle umgewandelt und von den Mikroorganismen aufgenommen. Als Nebenprodukt wird dabei der Stickstoff in der mikrobiellen Biomasse metabolisiert oder als anorganisches Endprodukt ausgeschieden. (Eijsackers und Zehnder 1990) Ob eine Mineralisation oder Immobilisation der Nährstoffe eintritt, wird maßgeblich durch die Qualität der Ausgangstreu bestimmt (Melillo et al. 1989; Prescott 2005; Murphy et al. 2007). Neben einer positiven Korrelation zwischen N-Freisetzung und N-Konzentration in Pflanzenresten (Seneviratne 2000), spielt vor allem das C/N-Verhältnis eine entscheidende Rolle. Mikroorganismen benötigen 16 Teile C zur Energiegewinnung sowie 8 bis 10 Teile C für die Aufrechterhaltung ihrer Körperfunktionen (Dahmer o. D.). Als Faustregel gilt daher, dass der N in den Mikroorganismen immobilisiert wird, sobald das C/N-Verhältnis der Pflanzenreste einen Wert von 25:1 übersteigt. Umgekehrt finden die Mikroorganismen einen N-Überschuss vor, wenn das Verhältnis kleiner als 25:1 ist, sodass der N dann in mineralischer Form an den Bodenpool abgegeben wird. (Bartholomew 1965) Interessant ist in diesem Zusammenhang eine Erkenntnis von Swift et al. (1979), die beobachteten, dass N und P zunächst langsamer aus Pflanzenresten freigesetzt werden als C und die anderen Nährelemente. N wird demnach in der teilzersetzten Streu zurückgehalten, wodurch sich das C/N-Verhältnis während des Abbaus verengt. Haynes (1986) leiten aus den C- und N-Gehalten der Streu landwirtschaftlicher Reste ein kritisches Verhältnis zum Zeitpunkt der Nährstofffreisetzung ab. Fällt das C/N-Verhältnis unter einen Wert von 25 bis 30 oder steigt der N-Gehalt über 1.4 bis 1.8 %, so wird die Schwelle der Mineralisation erreicht. Dies deckt sich mit den bereits erwähnten Verhältnis von 25:1 von Bartholomew (1965), sowie Ergebnissen von Seneviratne (2000), die eine Mineralisation bei C/N-Verhältnissen kleiner 27 oder N-Gehalten größer 2 % feststellen konnte.

Abgesehen vom Zeitpunkt ist für die Versorgung der Pflanzen und die Nitratauswaschung vor allem die Menge der N-Mineralisation relevant. Amelung et al. (2018) geben für die mineralisierten Mengen zu Vegetationsbeginn eine Spanne von 10 bis 220 kg N/ha*Jahr an, wobei im Ackerbau häufig Mengen von 20 bis 80 kg N/ha*Jahr nachgeliefert werden. Neben jährlichen und standörtlichen Unterschieden verursachen variierende Temperatur, Feuchtigkeit sowie der Eintrag von organischer Substanz große Schwankungen innerhalb eines Jahres.

Auch die Betrachtung relativer Freisetzungsraten in Abhängigkeit vom gesamten organischen N-Gehalt ergeben kein konsistentes Bild: Guiot und Grevy (1990) messen in den obersten 100 cm eine Nettomineralisation von 170 kg N/ha*Jahr in einer Rüben-Weizen-Kürbis-Rotation, was bei einem Gesamtgehalt von 3.000 kg N/ha einer mineralisierbaren Fraktion von 6 % entspricht. Eine weitere Studie auf einem nicht landwirtschaftlichen genutzten, fein sedimentierten Oberboden einer Aue im Südwesten Frankreichs von Brunet et al. (2008) beobachtete mit 21.9 bis 26.2 % drei bis vier Mal höhere Mineralisationswerte. Allerdings ist zu beachten, dass sich diese Werte auf den Bruttoumsatz des N im Boden beziehen und nicht auf die Nettomineralisation. Unter Berücksichtigung auftretender Immobilisationsprozesse dürften die relative Mineralisation daher deutlich geringere Werte annehmen. Im Gegensatz dazu geben Amelung et al. (2018) für ackerbaulich genutzte Böden Mitteleuropas durchschnittliche Raten von 0.2 bis 2 % an, mit ausdrücklicher Betonung, dass „höhere Raten eher die Ausnahme“ sind. Es ist demnach davon auszugehen, dass Prognosen über N-Nachlieferungen mit beträchtlichen Unsicherheiten behaftet sind (Amelung et al. 2018).

N_{min}

Während bis jetzt hauptsächlich der organische Stickstoff im Boden thematisiert wurde, soll nun genauer auf das Produkt der Mineralisation eingegangen werden, der mineralische Stickstoff (N_{min}). Unter N_{min} werden die löslichen mineralischen N-Verbindungen Nitrat (NO₃⁻) und Ammonium (NH₄⁺) zusammengefasst, die direkt pflanzenverfügbare N-Quellen darstellen (Amelung et al. 2018). Vor allem unter ackerbaulich genutzten Böden liegt der N_{min} überwiegend als Nitrat aus Mineralisations- und Nitrifikationsprozessen vor (Wehrmann und Scharpf 1986). In den 1970er Jahren entwickelten Prof. Jürgen Wehrmann und Hans-Christoph Scharpf die N_{min}-Methode. Dabei wird die optimale Düngemenge als Differenz zwischen optimaler N Versorgung der Pflanze und gemessenem N_{min} Gehalt im Boden ermittelt (Wehrmann und Scharpf 1979). In Versuchen konnten sie zeigen, dass durch den Einsatz von N_{min} Messungen die Düngung um bis zu 50 % verringert werden konnte, ohne dass nennenswerte Ertragseinbußen auftraten (Wehrmann und Scharpf 1986). Mittels der N_{min}-Methode kann dem bereits zuvor erläuterten Umstand Rechnung

getragen werden, dass die Verfügbarkeit von mineralischem N im Boden je nach Standort und Witterung stark variiert und so eine Einheitsdüngung ineffektiv wäre. Allerdings muss dabei beachtet werden, dass die Bodenart sowie der Zeitpunkt der Probennahme eine entscheidende Rolle spielen. So wird etwa auf tonarmen Sand- (Amelung et al. 2018) oder auch Lössböden (Wehrmann und Scharpf 1986) ein Großteil des Nitrates in niederschlagsreichen Wintern ausgewaschen, sodass bei Messungen im Frühjahr nur geringe $N_{\min}$ -Werte auftreten. Untersucht man nun Böden mit hohem Wasserspeichervermögen, so kann teilweise ein Anstieg der $N_{\min}$ -Werte beobachtet werden, da infolge fehlender Versickerung auch kein Nitrat ausgewaschen wird (Amelung et al. 2018).

1.3.3. Einfluss der Gegebenheiten des NitroGäu-Projekts auf C- und N-Kreisläufe

Nachdem nun die allgemeinen Charakteristiken der C- und N-Dynamiken behandelt wurden, soll im Folgenden eine genauere Betrachtung der Situation im Untersuchungsgebiet des NitroGäu - Projekts erfolgen. Es werden die Besonderheiten in Geologie, Pedologie sowie der landwirtschaftlichen Bewirtschaftungsmaßnahmen thematisiert, sowie deren Auswirkungen auf den Umsatz der SOM und damit auf die N-Freisetzung.

Einfluss der Geografie

Die Flächen des NitroGäu-Projekts liegen im Talbereich der Dünnern, einem etwa 40 km langen Nebenfluss der Aare. Im Jahre 1932 führte eine Volksabstimmung zu einem 10-jährigen Projekt mit dem Ziel der Begradigung der Dünnern. Dadurch sollte neben einer Reduktion des Hochwasserrisikos auch die Urbarmachung von neuen Ackerflächen gewährleistet werden. (Stooss 2013) Vor den Korrekturmaßnahmen waren die Böden von alluvialem Einfluss geprägt. Die periodischen Überschwemmungen führten zu regelmäßig auftretenden Sedimentationsprozessen mit gleichzeitig stattfindender in situ-Bodenbildung zwischen den Überflutungsereignissen. Infolge dessen kennzeichnen sich solche Böden durch eine hohe Variabilität in Raum und Zeit (Bullinger-Weber et al. 2014).

Die Bedeutung von Auenböden für den C-Kreislauf verdeutlichen Sutfin et al. (2016), die in ihrem Review Artikel anführen, dass Überflutungsflächen zwar nur 0.5 bis 1 % der globalen Landfläche umfassen, jedoch bis zu 8 % der globalen organischen Kohlenstoffvorräte beinhalten. Bechtold und Naiman (2009) beschreiben die Dynamik fluvialer SOM als Erbe von Abtrag humusreicher Schichten im Zuge von Erosion, Ablagerung dieser Schichten im Sedimentationsgebiet und anschließender Verschüttung mit neuen Sedimenten. Zusätzlich tragen auch Phasen limitierenden Sauerstoffangebots im Boden dazu bei, dass die SOM von den aeroben Mikroorganismen nicht

abgebaut werden kann und im Boden akkumuliert (Hemond 1983). Die Menge des organischen C in Auenböden ist dabei abhängig vom Klima, der Frequenz der Überflutungen und der Art der eingebrachten Streu. Der Humusgehalt kann selbst innerhalb des Oberbodens schwanken und tritt häufig geschichtet auf (Amelung et al. 2018). So stellten Bernal und Mitsch (2008) anhand einer Studie mit zwei temperaten und drei tropischen Feuchtgebieten in Costa Rica fest, dass der C-Gehalt in häufiger überfluteten Gebieten, sowie in den temperaten Klimaten höhere Werte annimmt. Als zusätzlichen Faktor nennen Blazejewski et al. (2009) die Größe des Wassereinzugsgebietes als wichtigsten Indikator für Quantität, Breite und Tiefe des angeschwemmten Materiales und damit auch für oberflächennahes C im Boden. Im Gegensatz dazu vertreten Battle und Golladay (2001) die Meinung, dass nicht das Wasserregime sondern vielmehr die Nettoproduktivität entscheidend für die Akkumulation und den Abbau der SOM im Boden ist. Abgesehen von den Einflussfaktoren ist der Fakt überdurchschnittlich hoher C-Gehalte in Auenböden jedoch unumstritten, die oftmals selbst in drei Metern Tiefe noch beobachtet werden können (D'Elia et al. 2017).

Die N-Akkumulation in Auengebieten ist nicht alleinig an die SOM gebunden, denn N kann auch durch Sedimente oder im Fluss gelöste Stoffe in die Böden eingetragen werden (Bechtold und Naiman 2009). Wie auch bei der SOM variieren die Mengen des N-Eintrages stark innerhalb der Überflutungsflächen (Middelkoop und Asselman 1998). Während der N wie in nicht alluvial geprägten Böden auch biologisch in der Pflanzen- oder mikrobiellen Biomasse immobilisiert werden kann, spielt in Auenböden die Denitrifikation als potentielle Verlustquelle eine bedeutendere Rolle (Shrestha et al. 2012). Dieser anaerobe Prozess dominiert bei höheren Wasserständen und trägt dazu bei, Nitrat aus dem Kreislauf zu entfernen. Umgekehrt übernimmt die Nitrifikation bei sinkenden Wasserständen die Oberhand und kann im Vergleich zu Nicht-Überflutungsflächen höhere Raten erreichen. (Hefting et al. 2004)

Durch den Einfluss menschlicher Aktivität wurden und werden vielerorts die natürlichen Überflutungsdynamiken und Vegetationen verändert. So sind in Europa und Nordamerika bereits 90 % der Überflutungsflächen von Flüssen kanalisiert und in Ackerland umgewandelt worden (Tockner und Stanford 2002). In diesen eingedämmten Gebieten sind die Mengen, Stabilität und Heterogenität des C-Gehaltes im Vergleich zu natürlichen oder renaturierten Flussläufen deutlich verringert, was sich auch in einer geringeren Diversität an Bodentypen widerspiegelt (Bullinger-Weber et al. 2014). In Bezug auf eine Gefährdung des Grundwassers durch Nitratauswaschung ist vor allem bedeutsam, dass durch eine Kanalisierung anaerobe Phasen minimiert und damit Gebiete mit hohem Abbaupotential der SOM, inklusive der Mineralisation von N, gefördert werden

(Langhans et al. 2006). Durch diese Form der Drainage verwandeln sich Ökosysteme von ehemals netto Senken zu C- und N-Quellen (Frank et al. 2014).

Einfluss der landwirtschaftlichen Nutzung

Neben den geologischen Besonderheiten des Gebietes spielt für die Nitratauswaschung auch die landwirtschaftliche Bodennutzung eine entscheidende Rolle. Von insgesamt ca. 2000 ha landwirtschaftlicher Fläche werden mit 80 ha nur in etwa 4 % gemüsebaulich genutzt. Allerdings tragen diese Flächen mit einer durchschnittlichen Nitratauswaschung von 240 kg N/ha*Jahr zur Grundwasserbelastung bei, während es bei den ackerbaulich genutzten Flächen nur 40 kg N/ha*Jahr sind.

Im Vergleich zum Ackerbau führt der Anbau von Gemüse zu erhöhten SOC-Gehalten im Boden. Liu et al. (2019) beobachteten einen Anstieg von bis zu 60 %. Neben einer erhöhten Rückführung an organischen Substanzen in den Boden durch Erntereste ist auch der häufig intensivere Einsatz landwirtschaftlicher Betriebsmittel als Ursache zu sehen. Allerdings stellten die Autoren hauptsächlich eine Erhöhung des aktiven C-Pools fest, was sich mit den Ergebnissen von Basak et al. (2021) deckt. In einem Vergleich von Reis- und Gemüseanbau fanden auch sie höhere Anteile des SOC im labilen und aktiven C-Pool wieder. Diese Ergebnisse bieten eine Erklärung für die Beobachtung von Cao et al. (2018), dass unter Gemüseflächen im Vergleich zu natürlichen Ökosystemen wie Wald oder Grasland ein beschleunigter Abbau von Kohlenstoff auftritt. Gemüsekulturen besitzen mit bis zu 75 % hohe Gehalte an einfach umsetzbaren Substanzen wie Zucker und Hemizellulosen, während der Anteil an Lignin im Durchschnitt nur 5 % beträgt (Bouallagui et al. 2005). Bei der Betrachtung des C/N-Verhältnisses nennen Neve und Hofman (1998) Spannen zwischen 17 für Blätter von Kopfsalat bis 97 für die unteren Stängelteile von Weißkohl. Im Durchschnitt werden aber niedrige Werte im Bereich von 10 bis 17 angegeben (Bending und Turner 1999; Shah et al. 2014).

Erfolgt nun die Einarbeitung frischer Gemüsereste in den Boden finden die Mikroorganismen ideales Substrat zum Abbau vor. Hohe N-Gehalte in Kombination mit niedrigen C/N-Verhältnissen sorgen vor allem in frühen Phasen des Abbaus zu erhöhten Abbaugeschwindigkeiten und damit auch der Freisetzung von mineralischem N (Xie et al. 2017; Sun et al. 2016). Studien konnten zudem zeigen, dass durch die häufige Zugabe von einfacheren, leicht umsetzbaren Substraten auch die Umsatzrate der bodenständigen SOM erhöht werden kann (Knicker 2011). Dieser als Priming bekannte Effekt wird auch in der Rhizosphäre beobachtet, in der Wurzeldepositionen die Aktivität von Mikroorganismen verändern (Sørensen 1974; Keith et al.

1986). Im Vergleich zur gesamten SOM im Boden fällt der Priming-Effekt nur gering aus und ist zudem ein kurzzeitiges Phänomen (Goh und Haynes 1986; Scott et al. 1996).

Nichtsdestotrotz können im Gemüsebau im Vergleich zu Acker- oder Grünland bis zu 50 % höhere N_{min} -Gehalte im Boden festgestellt werden (Amelung et al. 2018), die vor allem im Winterhalbjahr zu einer hohen potentiellen Nitratauswaschung führen können. Haupteinflussfaktoren sind nach Bischoff et al. (2020):

- Hohe Düngegaben von bis zu 400 kg N/ha und Jahr durch den Anbau mehrerer Sätze
- Hohe Qualitätsanforderungen, die zu viel nicht-vermarktbarer Ware führen, die dann im Regelfall auf dem Feld verbleibt
- Erntereste besitzen selbst bei qualitativ einwandfreier Ware oftmals einen Anteil von über 50 %

Wehrmann und Scharpf (1986) führen zur Problematik der häufig die optimale N-Menge übersteigenden Düngung an, dass dies auf geringe Düngerkosten, ausbleibende Toxizitätssymptome bei den Pflanzen sowie auf Absicherungsgründe zur Erzielung der Qualitätsanforderungen zurückzuführen ist. Zusätzlich beobachtete Bielek (1998) einen Priming-Effekt bei der Zugabe von N-Düngern, der vor allem auf fruchtbaren Böden starke Ausprägungen zeigt. Allerdings finden sich in der Literatur auch gegensätzliche Meinungen. So stellt Prescott (2005) fest, dass ein exogener N-Zusatz nur geringen Einfluss auf die Nährstofffreisetzung aus der SOM besitzt.

Auch die häufig intensive Bodenbearbeitung im Gemüsebau verändert das Steady-State-Gleichgewicht der SOM, das sich unter ungestörten Bedingungen einstellen würde (Doran und Smith 1995). Parton et al. (1988) beschreiben in ihrem Artikel einen erhöhten Abbau in Monaten mit Bodenbearbeitung, wobei der Anstieg im aktiven C-Pool 25 % und im langsamen und passiven C-Pool bis zu 50 % beträgt. Sie stellen außerdem fest, dass nach der Neukultivierung eines Bodens 150 bis 200 Jahre nötig sind, um ein neues Gleichgewicht zu erreichen. Eine weitere Besonderheit des Gemüsebaus ist der häufige Einsatz von Bewässerungssystemen. Laut Newbould (1982) können regelmäßige Befeuchtungs- und Trocknungsvorgänge im Boden zu drastischen Steigerungen der C- und N-Mineralisation führen. Jenkinson und Powlson (1976) begründen dies damit, dass Trocknung zu einer teilweise Sterilisierung von mikrobieller Biomasse, sowie zu einer Freisetzung von zusätzlicher Nicht-Biomasse-SOM führt. Dieses Material steht nach der Wiederbefeuchtung den verbleibenden Mikroorganismen zur Verfügung und führt zu einem erneuten Priming-Effekt.

1.4. Generalisierte Lineare Modelle (GLM)

Klassische lineare Modelle finden in der statistischen Analyse breiten Einsatz. Allerdings haben diese den Nachteil, dass sie auf der Normalverteilung beruhen und Varianzhomogenität annehmen. Um diese Restriktionen zu umgehen, bietet sich dem Anwender heute die Möglichkeit auf ein „Generalisiertes Lineares Modell“ (GLM) zurückzugreifen, das auf Nelder und Wedderburn (1972) und McCullagh und Nelder (1989) zurückgeht.

Die Generalisierung der GLM besteht zum einen darin, dass diese alle Verteilungen der sogenannten Exponentiellen Dispersionsfamilie beinhalten. Diese zeichnet sich dadurch aus, dass die Varianz als spezifische Funktion des Mittelwertes berechnet werden kann. Daraus lässt sich im Umkehrschluss ableiten, dass im Vergleich zum linearen Modell keine Varianzhomogenität gegeben sein muss.

Eine weitere Besonderheit der GLM ist die sogenannte Link-Funktion, die einen Zusammenhang zwischen dem Mittelwert einer Beobachtung und dem linearen Prädiktor (LP), also Verknüpfung von erklärenden Variablen und unbekannten Parametern, herstellt. Die Link-Funktion kann dabei als eine Transformation betrachtet werden, die dazu führt, dass eine Additivität der Effekte erreicht wird. Es muss daher beachtet werden, dass die lineare Beziehung nicht zwischen dem LP und dem Erwartungswert besteht, sondern vielmehr zwischen dem LP und der Link-Funktion des Erwartungswertes. Beispiele für die Link-Funktion wären der Log bei der Binomial- sowie der Logit bei der Poissonverteilung.

Weiterführende Informationen zu den GLM finden sich neben Nelder und Wedderburn (1972) und McCullagh und Nelder (1989) auch im Buch „Applying generalized linear models“ von Lindsey (2000).

1.4.1. Generalisierte Lineare Gemischte Modelle (GLMM)

Eine Erweiterung des GLM ist das Generalisierte Lineare Gemischte Modell (GLMM), bei dem der lineare Prädiktor um einen oder mehrere zufällige Effekte erweitert wird (Breslow und Clayton 1993). Ein gemischtes Modell besitzt demnach neben des Restfehlers mindestens eine weitere zufällige Streuungsursache. Im Gegensatz zu den fixen Effekten im GLM werden bei den zufälligen Effekten im GLMM die Varianzkomponenten geschätzt. Aus diesem Grund können für zufällige Effekte eigene Varianz-Kovarianz-Strukturen angepasst werden. Dies ist beispielsweise zur Erfassung von Korrelationen bei Messwiederholungen von Bedeutung. (Piepho et al. 2003)

Piepho et al. (2003) nennen mehrere Regeln, anhand derer zufällige Effekte ausgemacht werden können: Zum einen, wenn Stufen eines Faktors zufällig aus einer Grundgesamtheit gewählt

werden. Ein Beispiel dafür wäre die zufällige Auswahl von Feldern in einem Versuch, die repräsentativ für die ganze Region stehen. In diesem Zusammenhang lassen sich auch Versuche nennen, die neben mehrerer Orte auch mehrere Jahre umfassen und so zufällige Umwelteffekte beinhalten. Weiterhin werden alle Randomisationseinheiten als zufällige Effekte im Modell implementiert. Des Weiteren muss beachtet werden, dass auch alle Interaktionen mit einem zufälligen Effekt wiederum einem zufälligen Effekt darstellen.

Abgesehen von diesen Besonderheiten weisen die GLMM jedoch die gleichen Grundeigenschaften wie die GLM auf.

1.4.2. Zero-Inflation-Modelle

Im Allgemeinen finden sich Daten mit einem größeren Anteil an Nullwerten häufig in medizinischen Studien im Gesundheitswesen (Neelon et al. 2016) und in ökologischen Studien, die sich mit der Zählung von Lebewesen befassen (Martin et al. 2005). Wie bereits erwähnt, können einige gängige Modelle nicht auf diese Datensätze angewandt werden, da diese oftmals eine Normalverteilung der Daten annehmen. So konnte He (2016) in einer vergleichenden statistischen Analyse von Mutterkornbefall im Roggen zeigen, dass eine klassische Varianzanalyse deutlich schlechter abschneidet als andere Modelle, die Nullwerte explizit berücksichtigen. Min und Agresti (2002) fassen in ihrer Erhebung einige Modelle zusammen, die speziell für die Auswertung von nicht-negativen Zero-Inflation-Daten entwickelt wurden. Im Folgenden sollen drei ausgewählte Modelle genauer vorgestellt werden, um die Vielfältigkeit der Modelltypen und damit auch die Auswertungsmöglichkeiten für verschiedene Anwendungen deutlich zu machen.

Tobit-Modell

Bereits 1958 erkannte Tobin die Problematik von Nullwerten für die statistische Auswertung bei der Untersuchung von Haushaltsausgaben für langlebige Gebrauchsgüter. Sein Vorschlag basiert auf einem zensierten Regressionsmodell, bei dem der Geltungsbereich der abhängigen Variable begrenzt ist. Nach seiner Definition wird eine normalverteilte Zufallsvariable y durch einen zufälligen Mechanismus so zensiert, dass keine Werte kleiner als Null auftreten können (vgl. Formel 1.1). Neelon et al. (2016) führen an, dass die Nullen auch als Schätzer für Werte gesehen werden können, die unterhalb einer bestimmten (Detektions-)Schwelle liegen.

$$y_i = \begin{cases} y_i^*, & \text{if } y_i^* > 0 \\ 0, & \text{if } y_i^* \leq 0 \end{cases} \quad (1.1)$$

In Anlehnung an die Ähnlichkeit zu den Probit-Modellen, gab Tobin seinem Modell den Namen Tobit. Charakteristisch für Tobit-Modelle ist, dass der gleiche stochastische Prozess und damit die gleichen Parameter entscheiden, ob ein Nullwert auftritt und wenn nicht, wie hoch der Wert des positiven Ergebnisses ist (Min und Agresti 2002). Diesen Umstand kann man zugleich als große Einschränkung des Modells sehen, da Frequenz (Null oder Nicht-Null) und Ausmaß (Höhe des positiven Wertes) eines Ergebnisses oftmals nicht von den gleichen Parametern beeinflusst werden (Cragg 1971). Im Laufe der Jahre entstanden daher viele Modifikationen und Anpassungen des Tobit-Modells für verschiedenste Anwendungen. So führten Moulton und Halsey (1995) ein sogenanntes Zero-Inflated Tobit (ZIT) Modell ein, das zwischen zensierten und wahren Nullwerten unterscheidet. Neben der Annahme zensierter Nullwerte liegt ein erheblicher Nachteil des Modells in der Annahme normalverteilter Daten. Dieses Problem lösten Ballenberger et al. (2012) mit der Einführung einer Tobit „regression on ranks“ für Zytokin- und Genexpressionsdaten. Dieser neuartige Ansatz erlaubt zudem die Anpassung von Kovariablen, sodass gleichzeitig die Effekte mehrerer Variablen auf das Ergebnis beurteilt werden können. Allerdings wird bei dieser Methode weiterhin eine Normalverteilung der Fehler angenommen.

Two-part-Modell

Während der Ansatz von Tobin ein gemeinsames Modell für Null- und positive Werte nutzt, bieten Duan et al. (1983) die Möglichkeit zur Nutzung eines zweistufigen Modells bei der Auswertung von Zero Inflation-Daten. Ihr Ansatz basiert auf der Teilung des Modells in zwei verschiedene Phasen: zunächst wird die Wahrscheinlichkeit ermittelt, dass ein 0-Wert oder respektive ein positiver Wert auftritt. Man arbeitet demnach mit einer dichotomen Variable, die ihrerseits durch verschiedene Modelle wie zum Beispiel ein logistisches Regressions- (Min und Agresti 2002) oder Probit-Modell (Duan et al. 1983) beschrieben werden kann. Im zweiten Schritt wird anschließend das Level der positiven Werte modelliert. Dafür kann nun jegliche Verteilung der kontinuierlichen positiven Werte angenommen werden und der Anwender ist im Gegensatz zum Tobit-Modell nicht länger an die Normalverteilung gebunden. Duan et al. (1983) legen dabei die Annahme zugrunde, dass beide Phasen bedingt unabhängig sind und daher kein Zusammenhang zwischen den Verteilungen der Fehler vorliegt. Die finale Berechnung erfolgt durch die separate Maximierung der jeweiligen Maximum Likelihoods (ML) beider Phasen (Min und Agresti 2002). Weitere Unterschiede zum Tobit-Modell liegen in der Behandlung der Nullwerte als wahre, im Experiment beobachtete Werte (Min und Agresti 2002). Es wird demnach keine Zensierung der Daten angenommen. Zudem können durch die Aufteilung in beiden Phasen auch verschiedene Prozesse und damit unterschiedliche Einflussparameter zu Grunde gelegt werden (Min und Agresti 2002). Laut Min und Agresti liegen die größten Vorteile des Modells von Duan et al. zum einen in

der einfachen Anpassung und Interpretation, sowie in der Möglichkeit, die Daten in ihrer Originalform verarbeiten zu können. Wie auch beim Tobit-Modell entwickelten sich im Laufe der Jahre Erweiterungen des Modells. Besonders bedeutsam ist in diesem Zusammenhang die Einführung eines zufälligen Effektes durch Olsen und Schafer (2001), wodurch mögliche Korrelationen miteinbezogen werden können. Sie verknüpfen die Modellteile durch die Anpassung einer Korrelationsstruktur für beide zufälligen Effekte, da diese nach ihren Erkenntnissen oftmals hoch korreliert sind.

Tweedie-Modell

Eine weitere Möglichkeit zur Auswertung von Datensätzen mit hohen Anteilen an Nullwerten bietet das Tweedie-Modell. Es beruht auf der sogenannten Tweedie-Verteilung, eingeführt 1984 von ihrem Namensgeber M. C. K. Tweedie. Diese Verteilung unterstützt ausschließlich nichtnegative Werte, kann aber auch eine diskrete Masse um Null besitzen, sowie eine kontinuierliche, rechtsschiefe Datenverteilung im positiven Bereich (Tweedie 1947; Tweedie 1984). Dadurch bietet sie optimale Voraussetzungen zur Modellierung von semikontinuierlichen Daten mit häufig auftretenden, wahren Nullwerten (Zhang 2013). Übergeordnet betrachtet, gehören die Tweedie-Modelle zu den exponentiellen Dispersionsmodelle (EDM) und damit zur Familie der generalisierten linearen Modelle (GLM) (Nelder und Wedderburn 1972). Die EDM ihrerseits wurden detailliert von Jørgensen (1987, 1997) untersucht und beschrieben. Charakteristisch für EDM ist, dass diese durch folgende Varianzfunktion beschrieben werden:

$$Var(Y) = \varphi * V(\mu) \quad (1.2)$$

Dabei ist Y die Variable, die einer EDM Verteilung folgt, μ der Mittelwert der Variable, φ ein Dispersionsparameter und $V()$ der Zusammenhang zwischen Mittelwert und Varianz, unter der Prämisse einer konstant gehaltenen Dispersion. (Dunn und Smyth 2005) Im Falle der Tweedie Verteilung nimmt die Varianzfunktion folgende spezielle Form an:

$$V(\mu) = \mu^p \quad (1.3)$$

p repräsentiert dabei den sogenannten Power-Parameter, der für alle Werte außerhalb des Intervalls (0,1) existiert. (Jørgensen 1987) Je nach Wert des Parameters p , deckt die Tweedie-Verteilung verschiedene Verteilungen der Daten ab:

- $p = 0$: Normalverteilung
- $p = 1$: Poissonverteilung
- $p = 2$: Gammaverteilung
- $p = 3$: Inverse Normalverteilung

In Bezug auf Datenauswertungen mit Nullwerten ist insbesondere der Bereich $1 < p < 2$ von Interesse. Daten mit entsprechenden p -Werten weisen eine endliche Wahrscheinlichkeit auf den Wert 0 anzunehmen, sodass Nullwerte direkt in das Modell integriert werden können. (SAS Institute Inc. 2018). In der Literatur werden diese Verteilungen als „compound poisson“ (Feller 1986; Bar-Lev und Stramer 1987; Smyth und Jørgensen 2002), „compound gamma“ (Johnson und Kotz 1995) oder als „poisson-gamma“ (Dunn und Smyth 2005) bezeichnet. Der Power-Parameter p wird dabei entweder vor den eigentlichen Berechnungen willkürlich bei einem plausiblen Wert fixiert oder numerisch bestimmt. Für letzteres können nach Peel et al. (2013) zum Beispiel die Mittelwert-Varianz-Plots der Residuen betrachtet werden. Einsatz finden Tweedie-Modelle häufig im Versicherungs- und Gesundheitswesen. So modellierten Smyth und Jørgensen (2002) Daten von Versicherungsansprüchen mittels eines „compound poisson“ Modells. Dabei folgten die Forderungen an einen Versicherungsanspruch (ja oder nein) einer Poisson-Verteilung und die letztendliche Höhe der Forderung einer Gammaverteilung.

Wie beim zweistufigen Modell können demnach auch beim Tweedie-Modell verschiedene Verteilungen genutzt werden. Im Endeffekt beinhaltet es aber nur einen einstufigen Entscheidungsprozess, was eine Ähnlichkeit zum Tobit-Modell darstellt. Zusammengefasst liegen die großen Vorteile des Tweedie-Modells in seiner Flexibilität gegenüber verschiedener Verteilungen der Daten (Huang 2015), in der verminderten Komplexität der Analyse im Vergleich zu zweistufigen Modellen (Pennington 1986; Minami et al. 2007; Parveen et al. 2016), sowie in der Gegebenheit, dass keine ad hoc-Korrekturen nötig sind. Dazu gehört beispielsweise das Hinzufügen von Konstanten zu Nullwerten beim Einsatz des Logarithmus. (Peel et al. 2013) Allerdings stellt die strikte Annahme der Verteilung der Zielvariable eine nicht zu vernachlässigende Einschränkung dar (Huang 2015). Problematisch kann sich ebenfalls die Analyse der Likelihood gestalten, da Tweedie-Modelle mit nicht ganzzahligen Werten für p keine Dichtefunktionen mit explizierter analytischer Form besitzen. Eine Beurteilung erfordert daher den Einsatz von numerischen Lösungen wie beispielsweise Reihenentwicklungen. (Dunn und Smyth 2005)

Doch wie lässt sich bestimmen, welches der vorhandenen Modelle sich am besten für die vorliegenden Daten eignet? Als Entscheidungshilfe nennt Mills (2013) vier Fragen, die zur Findung eines geeigneten Zero-Inflation-Modells beantwortet werden sollten:

1. Welche Art von Nullwerten ist in den Daten vorhanden?

Unterschieden wird dabei zwischen strukturellen, zwangsläufig entstehenden Nullwerten und zufälligen Nullwerten. Während erstere durch reale Effekte im Experiment hervorgerufen werden, sind zufällige Nullwerte durch Detektionsschwellen der Messmethodik bedingt. (Martin et al. 2005)

2. Zu welchem Datentyp gehört die gemessene abhängige Variable?

Viele Reviews zur Modellierung von Datensätzen mit überproportional vielen Nullwerten unterscheiden zwischen Zähl- und halbstetigen Daten (Min und Agresti 2002; Neelon et al. 2016). Letztere weisen im Unterschied zu kontinuierlichen Daten eine erhöhte Wahrscheinlichkeit im Bereich der Nullwerte auf, während die restlichen Daten einer meist positiv kontinuierlichen Verteilung folgen (Min und Agresti 2002).

3. Welcher statistischen Verteilung folgen die positiven Daten?

Leemis (1986) stellt in seinem Paper die Zusammenhänge von 9 diskreten sowie 19 kontinuierlichen Verteilungen dar. Charakterisiert werden die Verteilungen zum einen durch den Geltungsbereich bzw. die Werte, die die Zielvariable annehmen kann und zum anderen über die Parameter der Verteilung. Diese beiden Merkmale führen auch zur Definition der charakteristischen Wahrscheinlichkeits- und Dichtefunktionen der einzelnen Verteilungen. Im Folgenden sollen einige allgemein bekannte Verteilungen, sowie jene, die bei Zero-inflation Modellen häufiger Anwendung finden, kurz vorgestellt werden. Die Informationen dafür stammen, wenn nicht anders vermerkt, aus Forbes und Evans (2010).

Normalverteilung

Die Normalverteilung, auch Gauß-Verteilung genannt, ist die am häufigsten genutzte kontinuierliche Verteilung der Statistik und wurde bereits 1733 vom französischen Mathematiker Abraham de Moivre beschrieben. Ihr Geltungsbereich für die abhängige Variable x definiert sich wie folgt: $-\infty < x < +\infty$

Beschrieben wird sie durch (Leemis 1986) :

- Den Mittelwert μ (Lageparameter)
- Die Standardabweichung σ (Skalierungsparameter)

Mittels einer Standardisierung kann die Normalverteilung in eine Standardnormalverteilung mit dem Mittelwert $\mu=0$ und der Standardabweichung $\sigma=1$ überführt werden (vgl. Abbildung 4):

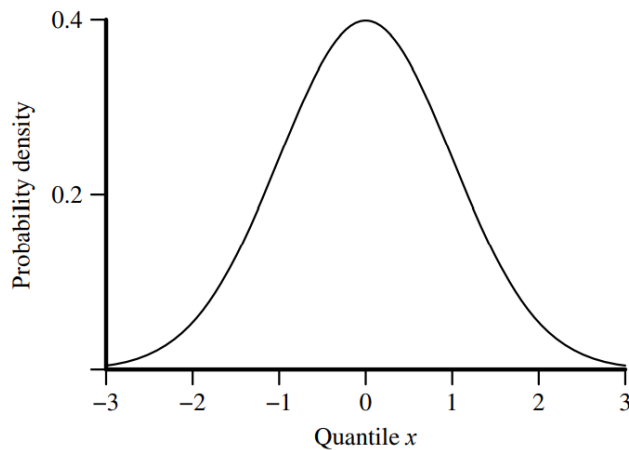


Abbildung 4 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der Standardnormalverteilung mit Mittelwert 0 und Varianz

Inverse Normalverteilung (Wald-Verteilung)

Auch die Inverse Normalverteilung oder Wald-Verteilung repräsentiert eine kontinuierliche Verteilung, deren Geltungsbereich aber nur für $x > 0$ definiert ist. Beschrieben wird sie durch:

- Den Mittelwert μ (Lageparameter), wobei gilt: $\mu > 0$
- λ (Skalierungsparameter), wobei gilt: $\lambda > 0$

λ bestimmt dabei die Rechtsschiefe der Wahrscheinlichkeitsverteilung (vgl. Abbildung 5).

Einsatzbereiche der Inversen Normalverteilung liegen in der Studie von Diffusionsprozessen sowie der Modellierung von Lebensdauern.

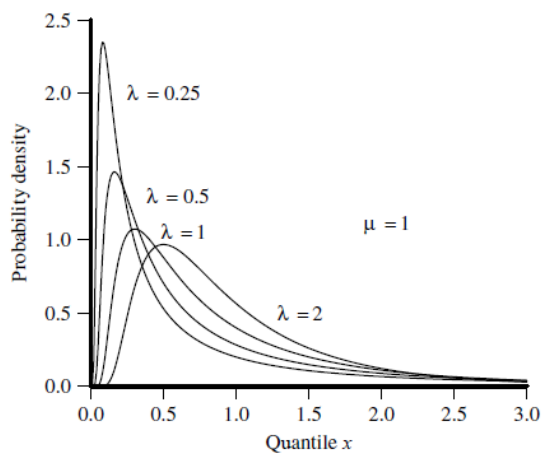


Abbildung 5

Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Inversen Normalverteilung mit fixiertem Mittelwert und variablem Skalenparameter λ

Lognormalverteilung

Im Unterschied zur Normalverteilung ist bei der Lognormalverteilung der Logarithmus der abhängigen Variable normalverteilt. Da kein negativer Logarithmus definiert ist, gilt: $x > 0$

Die beschreibenden Parameter sind:

- der Mittelwert a , wobei gilt: $a > 0$
- die Standardabweichung σ der logarithmierten Variable x , wobei gilt: $\sigma > 0$

Einsatz findet die Verteilung bei Zufallsvariablen, die durch 0 begrenzt werden und nur einzelne höhere Werte aufweisen. Beispiele dafür sind das Gewicht eines Menschen, die Verteilung des Wohlstandes in einer Gesellschaft oder die Ausfallzeit einer technischen Maschine.

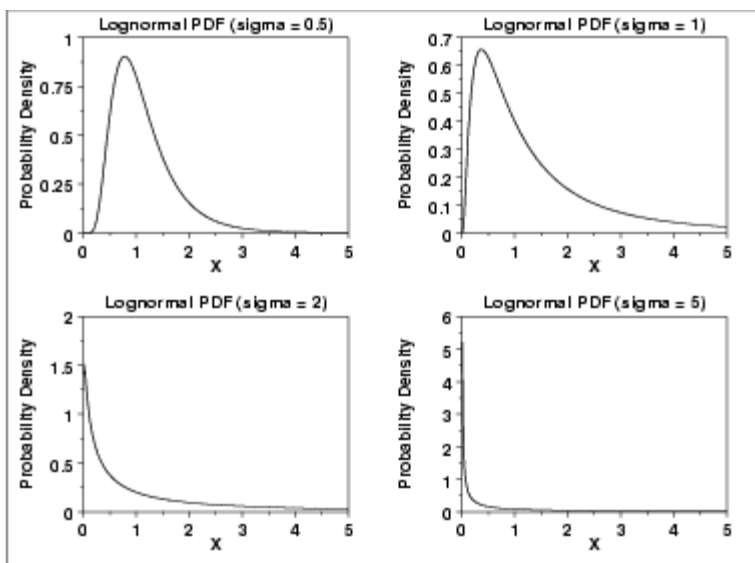


Abbildung 6 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Lognormalverteilung bei fixiertem Mittelwert und variabler Standardabweichung (Guthrie 2003)

Gammaverteilung

Auch die Gammaverteilung repräsentiert eine bedeutende kontinuierliche Verteilung. Als Spezialfälle sind in ihr die Chi-Quadrat, Erlang und Exponential-Verteilung enthalten.

Die abhängige Variable x ist wie folgt definiert: $0 \leq x < \infty$

Die beschreibenden Parameter sind

- der Lageparameter b , wobei gilt: $b > 0$
- der Skalenparameter c , wobei gilt: $c > 0$

Wie in Abbildung 7 erkennbar, zeichnet sich die Form Gammaverteilung durch eine hohe Flexibilität aus und kann daher an eine große Auswahl von Datensätzen angepasst werden.

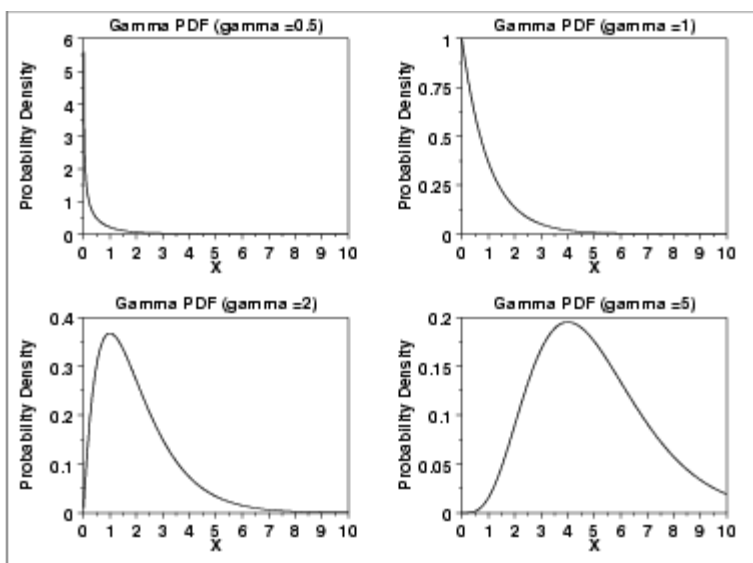


Abbildung 7 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Gammaverteilung bei fixiertem Lageparameter ($b=1$) und variablem Skalenparameter c (entspricht Gamma in der Abbildung) (Guthrie 2003)

Binomialverteilung

Die letzten beiden Verteilungen gehören zur Gruppe der diskreten Verteilungen.

Bei einer Binomialverteilung beschreibt die Zufallsvariable X die Summe von Erfolgen in n unabhängigen Bernoulliexperimenten, also Experimenten mit zwei möglichen Ausgängen.

Der Geltungsbereich für X liegt in den Grenzen: $0 \leq X < n$, wobei X nur ganzzahlige Werte annehmen kann.

Beschrieben wird die Binomialverteilung durch die Parameter:

- n als Anzahl der unabhängigen Bernoulli Experimente
- p als Wahrscheinlichkeit für einen Erfolg, wobei gilt: $0 < p < 1$

Einsatz findet die Binomialverteilung in der Abschätzung von Wahrscheinlichkeiten binärer Ereignisse oder bei der Wahrscheinlichkeitsbestimmung von einem spezifischen Merkmal unter mehreren Merkmalen.

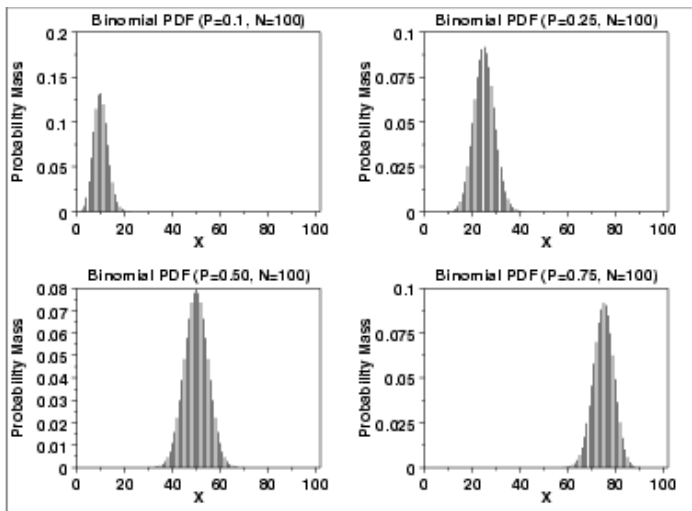


Abbildung 8 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Binomialverteilung mit variablem n und p (Guthrie 2003)

Poissonverteilung

Im Unterschied zur Binomialverteilung besitzt die Poissonverteilung keine Begrenzung der Anzahl möglicher Ausgänge. Während bei der Binomialverteilung X höchstens gleich n werden kann, gilt für die Poissonverteilung: $0 \leq X < \infty$, wobei X erneut ausschließlich ganzzahlige Werte annehmen kann.

Die Verteilung wird nur durch den Parameter λ beschrieben, der sowohl den Mittelwert als auch die Varianz repräsentiert. λ bestimmt sowohl die Breite als auch die Lage der Wahrscheinlichkeitskurve und es gilt: $\lambda > 0$

Einsatz findet die Poissonverteilung bei Zähldaten mit seltenen, aber theoretisch unendlichen Anzahlen wie zum Beispiel die Anzahl von Anrufen in einem Callcenter in einer bestimmten Zeiteinheit oder die Anzahl von gewachsenen Bakterien in einer Petrischale.

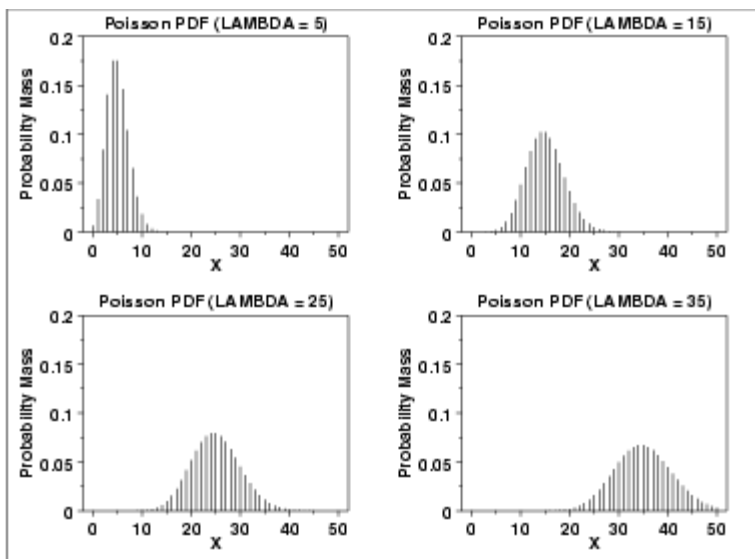


Abbildung 9 Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Poissonverteilung für verschiedene Werte von λ (Guthrie 2003)

Weiterführende Informationen finden sich neben Forbes und Evans (2010) in Krishnamoorthy's (2006) Handbuch zu statistischen Verteilungen, sowie im Paper von Leemis (1986), der sich eingehend mit den Zusammenhängen der einzelnen Verteilungen beschäftigt hat.

4. Welche Frage oder Hypothese soll mit dem Modell beantwortet werden?

Letztendlich muss geklärt werden, welchen Zweck das Modell erfüllen soll. Im trivialsten Fall geht es darum, ein optimal passendes Modell für den gesamten Datensatz zu finden, also eine optimale Verknüpfung der Null- und der restlichen positiven Werte. Auch bei dem Vergleich von Behandlungen kann es entscheidend sein, die Wahrscheinlichkeit für mögliche Nullerte zu berücksichtigen, da ansonsten Verzerrungen der bedingten Mittelwerte für einzelne Behandlungsstufen auftreten können. Andererseits kann die Fragestellung auch darin bestehen, ob es Unterschiede in den Einflussvariablen für Null- und nicht Nullerte gibt. Dabei würde demnach eine Zweiteilung des Datensatzes und separate Auswertung erfolgen.

1.5. Aufstellung der N-Effizienz-Indikatoren (nach Bischoff et al. 2021)

Mit der Implementierung der Düngemaßnahmen im NitroGäu-Projekt 2019, wurden vier schlag- und satzbezogene N-Effizienz-Indikatoren erhoben. Damit können N-Überschüsse und die N-Auswaschung quantifiziert und die einzelnen Maßnahmen bewertet werden.

N1 Düngung – Abfuhr

N1 dient zur Berechnung des N-Überschusses und setzt sich aus der Differenz zwischen N-Düngung und N-Abfuhr mit dem Erntegut zusammen. Der N-Überschuss kann zum einen in Form von Ernteresten, $N_{\min}$ oder Humus auf dem Feld verbleiben oder als Nitrat mit dem Sickerwasser ausgewaschen, sowie gasförmig in die Atmosphäre abgegeben werden. Dieser Indikator zeigt demnach den strukturellen N-Überschuss einer Kultur und dient zur Bewertung der Gesamteffizienz des Systems

N2 Düngung – Aufwuchs

Im Unterschied zu N1 wird in N2 neben dem Stickstoffgehaltes des Erntegutes auch jener der Erntereste berücksichtigt und beinhaltet die gesamte N-Aufnahme der Pflanze. Während positive Werte einen Düngeüberschuss implizieren, deuten negative Werte auf eine Düngung nach guter fachlicher Praxis hin. Andere N-Quellen wie der $N_{\min}$ -Gehalt des Bodens oder N-Mineralisation werden nicht berücksichtigt.

N3 Quotient Ernte/Düngung

Die Berechnung von N3 erfolgt anhand der Bildung des Quotienten des N-Gehaltes im Erntegut und der N-Düngung. Die Darstellung des Ergebnisses erfolgt in % der Düngemenge und ist daher

ein Maß für die N-Effizienz der Kultur. Je niedriger der Wert, desto weniger Dünger-N wurde von den Pflanzen verwendet.

N4 Rest-N_{min}-Gehalt + N-Reste

N4 stellt den labilen N-Pool des Bodens dar und setzt sich aus dem N_{min}-Gehalt in 0 bis 60 cm Tiefe, sowie dem N-Gehalt der Erntereste, die auf dem Feld verbleiben, zusammen. Mittels dieses Indikators kann quantifiziert werden, wie viel direkt verwertbarer N für die Folgekultur oder auch die Auswaschung im Boden zur Verfügung steht.

Aktuell basiert die Berechnung der N-Effizienz-Indikatoren auf den Mittelwerten der einzelnen Bilanzglieder. Zwar erfolgte in der Beschreibung der Projektergebnisse auch die Darstellung der Standardfehler, jedoch waren diese kein Bestandteil der folgenden Diskussion. Im Rahmen dieser Arbeit soll die Unsicherheit der erhobenen Parameter und N-Effizienz-Indikatoren genauer untersucht und eine Quantifizierung vorgenommen werden. Damit kann anschließend eine Einschätzung erfolgen, wie genau eine Ableitung konkreter Handlungsmaßnahmen für die Landwirtschaft auf Basis der Mittelwerte ist.

1.6. Relevanz von Fehlerfortpflanzungen

Unsicherheiten sind ein fester Bestandteil von wissenschaftlichen Messungen. Mit Hilfe einer Verbesserung der Messmethoden oder der Erhöhung der Wiederholungszahl kann versucht werden, diese Unsicherheit auf ein Minimum zu reduzieren. (Bevington und Robinson 2003) Speziell in On-Farm-Experimenten, wie im Falle des NitroGäu-Projektes, sind Messergebnisse mit hohen Unsicherheiten behaftet, da innerhalb eines Versuchsgebietes häufig ein hoher Grad an Heterogenität vorliegt (Wuest et al. 1999). Oftmals wird der zu bestimmende Parameter einer Untersuchung (abhängige Variable) nicht direkt gemessen, sondern leitet sich aus mehreren zuvor gemessenen Einzelparametern ab (unabhängige Variablen). Jede dieser einzelnen Messungen ist dabei mit einer eigenen Unsicherheit behaftet, sodass die Unsicherheit der abhängigen Variable aus diesen errechnet werden kann. Diese Methodik wird als Fehlerfortpflanzung bezeichnet. (Singh und Chaturvedi 2021)

Im Zuge der Fehlerfortpflanzung können sich die Unsicherheiten der unabhängigen Variablen zum einen aufaddieren oder auch gegenseitig abschwächen. Die Gesamtunsicherheit der abhängigen Variable kann also größer oder kleiner als die der Einzelparameter sein. Eine gängige Praxis in landwirtschaftlichen Versuchen mit großen Datensätzen liegt in der Annahme kompensativer Fehler (Bischoff 2021a), also dass die einzelnen Unsicherheiten im Rahmen des Gesamtfehlers der abgeleiteten Variablen annähernd enthalten sind. Es stellt sich nun die Frage, ob im Rahmen des

NitroGäu-Projekts ein Außerachtlassen der Fehlerfortpflanzung gerechtfertigt ist. So konnte beispielsweise bei der Hochrechnung von der Anzahl an Salatköpfen pro Untersuchungsplot auf die Pflanzdichte des gesamten Feldes, Abweichungen von bis zu 200 % von den Erwartungswerten der Landwirte registriert werden. Weiterhin kann durch die Anwendung von Fehlerfortpflanzungsberechnungen auch eine Optimierung der durchgeführten Datenerfassung vorgenommen werden. Mittels der Einbeziehung von Kovarianzen kann überprüft werden, ob die Erfassung der Einzelparameter an abhängigen oder unabhängigen Stichproben erfolgen sollte. Des Weiteren ist es möglich, den Beitrag der Einzelparameter zur Gesamtunsicherheit der abhängigen Variable zu quantifizieren und so Hauptfehlerquellen ausfindig zu machen.

1.7. Fragestellungen und Ziele der Arbeit

Das angewandte Ziel der Arbeit besteht darin, die Bestrebungen des NitroGäu-Projekts zur Reduktion und Stabilisierung der N-Auswaschungen unterhalb des Critical Loads zu unterstützen. Dazu gehört zunächst eine Verbesserung des Prozessverständnisses zu Stickstoffnachlieferungen aus dem Boden. Anschließend soll das erworbene Wissen auf die Situation im Gäu angewandt und eine Quantifizierung der Stickstoffnachlieferung vorgenommen werden. Im Kontext der statistischen Analyse von Nitratauswaschungen und N-Effizienz-Indikatoren steht die Quantifizierung der Unsicherheit an erster Stelle, um so Möglichkeiten und Limitationen der Messmethoden besser einschätzen zu können. Dabei liegt der Fokus zunächst auf der Variabilität der Nitratauswaschung zwischen verschiedenen Projekten, wobei insbesondere die statistisch korrekte Einbeziehung von Nullwerten im Vordergrund steht. Denn nur mittels der bestmöglichen Mittelwert- und Varianzschätzungen, können politisch belastbare Zahlen generiert werden. In einem nächsten Schritt soll die Variabilität innerhalb eines Projektes anhand der N-Effizienz-Indikatoren überprüft, sowie die Implementierung praktikable Maßnahmen zur Reduktion der Unsicherheit diskutiert werden.

Zum Erreichen dieser Ziele sollen folgende Fragestellungen im Rahmen der Arbeit beantwortet werden:

1. Wie hoch ist im Gebiet Niederbipp-Gäu-Olten das Stickstoff-Nachlieferungspotential aus dem Boden?
2. Gibt es ein statistisches Modell, das standörtliche und klimatische Variabilität der Nitratauswaschung regionenübergreifend abbilden kann?
3. Wie groß ist die Unsicherheit a) in den lokalen N-Effizienz-Indikatoren und b) in den einzelnen erfassten Parametern im Projekt NitroGäu?
4. Wo liegen die Hauptquellen der Unsicherheiten in den N-Effizienz-Indikatorenmessungen und mit welchen Maßnahmen kann diese Unsicherheit reduziert werden?

2. Material und Methoden

Im Folgenden werden zunächst die beiden Projektgebiete Main-Tauber und NitroGäu genauer beschrieben, sowie deren Versuchsansätze erläutert. Für das NitroGäu-Projekt wird dabei zusätzlich genauer auf die angewandten Messmethoden eingegangen. Zur Beantwortung der Frage nach der N-Nachlieferung der Flächen des Gemüsebaus wird mit Hilfe bereits erhobener Daten vergangener Jahre eine Abschätzung der N-Mineralisation vorgenommen. Die statistischen Analysen der Zero-Inflation-Modelle sowie der Unsicherheiten in den Messdaten wurden mit SAS (Version 9.4) und Excel durchgeführt.

2.1. NitroGäu-Projekt

2.1.1. Geographie (nach Bischof et al. 2021)

Abbildung 10 zeigt das Untersuchungsgebiet rund um das Pumpkraftwerk Neuendorf, das sich im Talbereich der Dünnern befindet. Begrenzt wird das Gebiet im Osten und Westen durch die Städte Olten und Niederbipp, während sich im Norden der Kalkstein der Weissensteinkette erhebt und die südliche Grenze durch die Mittelhühügel und die Born-Antiklinale gebildet wird. Vor ihrer Begradigung zwischen 1933 und 1934 mäandrierte die Dünnern im gesamten Tal. So bildeten sich auch die Böden der Dünnernebene während der periodischen Überschwemmungen vor der Begradigung und unter den oben anliegenden feinkörnigen Sedimenten finden sich mächtige Schotterablagerungen. Die hohen Gehalte an organischer Substanz von oftmals mehr als 3.5 % ergeben sich aufgrund der beschriebenen Verhältnisse bei der Bodengenese. Bei den Bodentypen dominieren im Nordwesten, an den Unterhängen der ersten Jurakette, flachgründige Rendzinen. Im weiteren Verlauf nach Südosten werden diese zunächst von tiefgründigeren Braunerden abgelöst und gehen dann in Kalk-Braunerden, sowie Braunerden, Pseudogleye und Fluvisole über. Klimatisch kennzeichnet sich das Gebiet Gäu-Olten durch eine langjährige Jahresmitteltemperatur von 9.0 °C und durchschnittlich 1129 mm Niederschlag pro Jahr, wobei die mittlere Grundwasserneubildung 400 mm/Jahr beträgt.

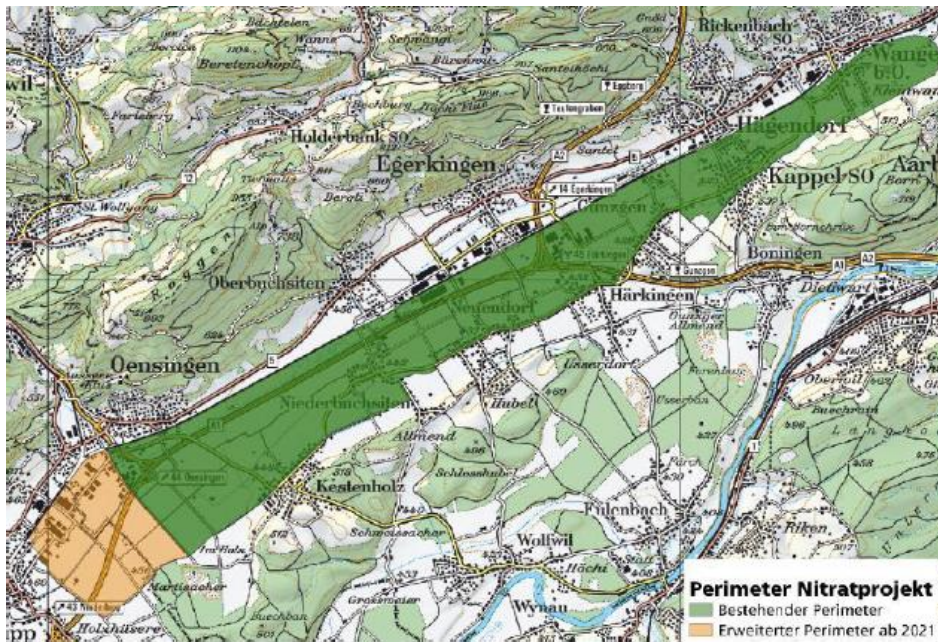


Abbildung 10 Perimeter des NitroGäu-Projekts im Dünnerntal zwischen Wangen bei Olten und Niederbipp (Bischoff et al. 2021)

2.1.2. Versuchsansatz (nach Bischoff et al. 2021)

Neben einem reinen Monitoring der Nitratauswaschung und der N-Effizienz-Indikatoren im Jahr 2018, wurden ab 2019 auch konkrete Maßnahmen zur Reduktion der N-Überschüsse angewandt. Die Basis bildet dabei eine Verbesserung der N-Bedarfsermittlung durch die Anrechnung von $N_{\min}$ (Zemek et al. 2020). In allen Maßnahmen wurde demnach, im Vergleich zur Kontrolle, die betriebsübliche Düngemenge um den bereits vorhandenen mineralischen Stickstoff im Boden reduziert. Weitere Unterscheidungen der Maßnahmen lagen in der Ausbringung der reduzierten Düngermenge, sowie in der Behandlung der Erntereste.

- **M1 breit:** Praxisübliche breitwürfige Applikation
- **M2 platziert:** zusätzliche Steigerung der Düngereffizienz durch gezielte Ausbringung direkt an der Pflanze (Everaarts et al. 1996)
- **M3 Fertigation:** Ausbringung des Düngers im Bewässerungswasser über nah an der Pflanzreihe verlegte Bewässerungsschläuche
- **M4 Abfuhr Erntereste:** Abfuhr der Erntereste, aber betriebsübliche Düngung ohne Anrechnung von $N_{\min}$

2018 standen für das Monitoring 5 Flächen zur Verfügung, während 2019 auf insgesamt 8 Flächen Messungen durchgeführt wurden. Allerdings waren davon 4 erneut reine Monitoringflächen, M1 und M2 wurden auf allen restlichen 4 Flächen umgesetzt und M3 und M4 auf nur jeweils 1 Fläche.

Da zu Beginn des Projekts noch nicht absehbar war, ob die reduzierte Düngung negative Auswirkungen auf die landwirtschaftlichen Erzeugnisse hat, wurden die Maßnahmen nur auf Parzellen mit einer Fläche von 22.2 m² implementiert. Auf Grund der geringen Größe ergab sich zudem die Notwendigkeit der händischen Düngung der Parzellen.

2.1.3. Messmethoden

Im Folgenden werden die Messmethoden der erhobenen Parameter des NitroGäu-Projekts genauer vorgestellt, da deren Durchführung, insbesondere die Anzahl an Wiederholungen (vgl. Tabelle 2), für die Güte der Mittelwertschätzungen entscheidend ist. Für die Auswertung des Versuchsgebietes Main-Tauber ist ausschließlich die Nitratauswaschung relevant. Unterschiede in den Messungen zwischen NitroGäu und Main-Tauber werden im entsprechenden Unterkapitel kurz dargestellt.

N_{min}

Zur Bestimmung der N_{min} Gehalte wurden pro Feld und Maßnahme repräsentative Mischproben aus acht bis neun Einstichen genommen und anschließend zur Analyse an das Labor des „Instituts für Agrar- und Umweltanalytik“ in Freyburg (Deutschland) geschickt. Dabei ist es entscheidend, die Proben durchgängig gekühlt zu halten, um Mineralisierungsprozesse so weit wie möglich zu verlangsamen. Während die Proben 2018 noch in den standardisierten Tiefen 0 bis 30 cm und 30 bis 60 cm genommen wurden, hat man sich 2019 dazu entschlossen, das erste Intervall nochmals in die beiden Tiefen 0 bis 15 cm und 15 bis 30 cm zu unterteilen. Damit soll der geringen Durchwurzelungstiefe vieler junger Gemüsekulturen Rechnung getragen werden. Die Zeitpunkte der N_{min}-Probennahmen lassen sich in folgende Kategorien gruppieren:

- Vor jeder Pflanzung einer Kultur
- Vor jeder weiteren Düngung
- Nach Ende der Vegetationsperiode

Letztere dient dabei zur Erfassung des Herbst-Rest-N_{min} Gehaltes im Boden, der häufig als Richtwert für eine N-Auswaschung während des Winters genommen wird. So erhalten zum Beispiel in Wasserschutzgebieten wirtschaftende Landwirte in Baden-Württemberg ihre Ausgleichszahlungen in Abhängigkeit vom Herbst-N_{min}-Wert (SchALVO 2001). Allerdings konnte in Versuchen gezeigt werden, dass eine Eins-zu-Eins-Ableitung der Nitratauswaschung aus dem Herbst-N_{min}-Wert nur sehr eingeschränkt möglich ist. Faktoren wie Bodentyp, Bodenstruktur und Klima besitzen großen Einfluss auf die Nitratauswaschung, sodass der Herbst-N_{min}-Wert allenfalls zur ungefähren Abschätzung herangezogen werden kann. (Schwarz et al. 2013; Schwarz und

Bischoff 2017) Zur finalen Berechnung wurden die Steingehalte in jedem Feld exemplarisch anhand eines geöffneten Profils geschätzt. Eine Nichtberücksichtigung des Steingehaltes kann zu starken Überschätzungen des $N_{\min}$ im Boden führen.

Nitratauswaschung

Die flächenbezogene Nitrat- und Ammoniumauswaschung wurde mittels SIA (Selbst-Integrierender Akkumulatoren, Bischoff 2008) erfasst. Die Installation erfolgte von einer Grube aus seitlich in den ungestörten Boden. Nach dem Verfüllen der Grube entstehen keinerlei Einschränkungen für die Bewirtschaftung der Felder. Fließt nun Sickerwasser durch die SIA, entziehen diese mittels eines geeigneten Absorbers dem Wasser sowohl Nitrat als auch Ammonium, welches nach dem Ausbau wieder rückgetauscht werden kann. Als Ergebnis erhält man die flächenbezogene N-Auswaschung als Gesamtfracht in kg N/ha. 2018 wurden die SIA vor der ersten Kultur installiert und nach jeder einzelnen Kultur getauscht. Dies wurde 2019 dahingehend geändert, dass die SIA gleichermaßen vor der ersten Kultur im Februar oder März eingebaut, aber erst nach der letzten Kultur im Herbst erneut getauscht wurden. So wurde die N-Auswaschung während der Vegetationsperiode, sowie während der Vegetationsruhe im Winter erfasst. Im NitroGäu Projekt wurden pro Maßnahme und Feld 10 bis 12 SIA verteilt auf 2 bis 3 Profile in 60 cm eingebaut.

Im Gegensatz dazu, liegen beim Main-Tauber Projekt 20 Messpunkte in 6 Profilen pro Fläche und Maßnahme vor. Zudem betrug die Installationstiefe dort 100 cm.

Ernteerhebungen

Folgende Parameter und Werte werden im Rahmen der Ernteerhebungen erfasst:

- Aberntungsgrad
- Marktfähigkeit
- Pflanzdichte
- Frischmasse von Erntegut und -resten
- Trockensubstanz von Erntegut und -resten
- C- und N-Gehalt in der Trockensubstanz

Beispielhaft soll deren Erfassung an der Kultur Salat erklärt werden.

Der Aberntungsgrad gibt an, welcher Anteil der auf dem Feld stehenden Salatköpfe in einem Erntedurchgang geerntet wird. Ist ein Großteil der Köpfe beim 1. Erntedurchgang noch zu klein, so werden diese stehen gelassen und zu einem späteren Zeitpunkt in einem 2. oder auch 3. Erntedurchgang geerntet. Im Gegensatz dazu bezieht sich die Marktfähigkeit nur auf den Teil der

geernteten Köpfe. Nicht marktfähige Ware wie zum Beispiel zu kleine oder verfaulte Köpfe verbleiben auf dem Feld.

Die restlichen Parameter werden anhand definierter Plots geschätzt. Dafür wird ein Bereich von ungefähr 3 m x 3.20 m so abgesteckt, dass dieser 2 Beete umfasst. Im Hinblick auf die statistische Auswertung gibt es pro Maßnahme und Feld (praxisüblich und unter Anrechnung von $N_{\min}$) je 3 dieser Plots, die getrennt voneinander gemessen und ausgewertet werden. Zur Ermittlung der Pflanzdichte werden alle Pflanzstellen innerhalb eines Plots gezählt und mit Hilfe der Plotmaße kann die Anzahl an Salatköpfen auf einen Hektar bzw. die Größe des Feldes hochgerechnet werden.

Innerhalb eines Plots wird anschließend jedes der zwei Beete separat beerntet. Typischerweise befinden sich innerhalb der abgesteckten 3 m x 3.20 m 72 Köpfe, also 36 pro Beet. Von diesen 36 Köpfen werden nun 18 zufällig ausgewählt, abgeerntet und Erntegut und Erntereste in zwei verschiedene schwarze Wannen gelegt. Nicht marktfähige Köpfe werden dabei wie Erntereste behandelt. Für die Frischmasse werden beide Wannen gewogen und das Gewicht sowie das Tara der Wanne notiert.

Für Trockensubstanz (TS) sowie C- und N-Gehalte erfolgt die Bestimmung im Labor, sodass Aliquotproben der Frischware benötigt werden. Im Falle des Erntegutes werden dafür 4 Köpfe zufällig aus der Wanne entnommen. Von jedem dieser 4 Köpfe wird nun 1 Viertel ausgeschnitten und in ein separates Gefäß gelegt. Diese 4 Viertel werden mit dem Messer klein geschnitten, gut durchmischt und letztendlich ca. 150 g davon in eine Plastiktüte verpackt. Bei den Ernteresten wird der gesamte Inhalt der Wanne zerkleinert und erneut ca. 150 g abgepackt. Die gleiche Prozedur wiederholt sich nun für das zweite Beet des Plots, wobei die 150 g in den Beutel des ersten Beets verpackt werden. Letztendlich liegen pro Plot jeweils 300 g Aliquot-Mischproben für Erntegut und für Erntereste vor. Diese werden bis zur Trocknung im Labor gekühlt, um ein Voranschreiten der Abbauvorgänge zu verlangsamen.

Tabelle 2 Anzahl der Wiederholungen pro erhobenem Parameter in den Jahren 2018 und 2019

Variable	Einheit	Wiederholungen 2018	Wiederholungen 2019
$N_{\min}$ [0 bis 60 cm]	Kg N/ha	1	3 bis 5
Steingehalt (StG)	%	1	1
Düngung (Dg)	Kg N/ha	1	1
Marktfähigkeit (Mf)	%	5 bis 12	3
Pflanzdichte (Pd)	Pflanzen/ha	5 bis 12	3
FM Ernte oder Ernterest pro Plot	kg	5 bis 12	3
Kopfgewicht (Kg)	kg	5 bis 12	3
Trockensubstanz Erntegut (TS_E)	%	2 bis 12	3
Stickstoff in % TS Erntegut (N_E)	%	2 bis 4	3
Trockensubstanz Ernterest (TS_R)	%	2 bis 12	3
Stickstoff in % TS Ernterest (N_R)	%	2 bis 4	3

Bemerkung: $N_{\min}$ pro Feld und Jahr; restliche Parameter satzweise

Aus den in Tabelle 2 erfassten Parametern wurden zur Berechnung der N-Effizienz-Indikatoren sowie der Unsicherheiten weitere Parameter abgeleitet:

- dt/ha FM von Erntegut und Erntereste [dt/ha]
- N/ha im Erntegut und in den Ernteresten [kg N/ha]

2.1.4. Bodenuntersuchungen

Im NitroGäu Projekt wurde 2020 exemplarisch auf 5 Feldern eine Bodengrunduntersuchung durchgeführt. Die erhobenen Parameter sind in Tabelle 3 aufgeführt.

In Hinblick auf die C- und N-Dynamiken sind zunächst die mit 3.9 bis 4.3 % sehr hohen Humusgehalte im Oberboden, sowie mit 2.1 bis 2.6 % ebenfalls überdurchschnittlich hohen Gehalte im Unterboden zu nennen. Gleiches gilt für die Gesamtvorräte an N in 0 bis 60 cm Tiefe, die mit 18.2 bis 20.1 t/ha ebenfalls im hohen bis sehr hohen Bereich eingeordnet werden können. Die C/N-Verhältnisse liegen mit 7.5 bis 8.5 relativ eng und damit in einem guten Bereich für den Ackerbau. Die anderen Nährstoffe Phosphor (P), Kalium (K) und Magnesium (Mg) weisen überwiegend die Gehaltsklasse C auf und liegen damit im optimalen Bereich. Von Bedeutung sind zudem auch die unterschiedlichen Bodenarten: Während die Felder 6 bis 8 als lehmig zu klassifizieren sind, weisen die Felder 9 und 13 einen höheren Sandanteil auf. Letztere besitzen zudem einen Steinanteil von bis zu 60 %, wodurch auch die N-Vorräte in 0 bis 60 cm nur in etwa halb so hoch sind wie bei den Feldern 6 bis 8.

Tabelle 3 Ergebnisse der Grunduntersuchung an 5 exemplarischen Feldern des NitroGäu-Projekts im Jahre 2020 (Bischoff et al. 2021)

Feld	Tiefe [cm]	Bodenart	Lagerungsdichte [g/cm ³] ¹	Steingehalt [%] ¹	pH-Wert	Humusgehalt [%]	N-Gehalt [%]	C-Gehalt [%]	C/N-Verhältnis	C-Vorrat je Horizont [t/ha]	C-Vorrat 0 – 60 cm [t/ha]	N-Vorrat je Horizont [t/ha]	N-Vorrat 0 – 60 cm [t/ha]	P ₂ O ₅ [mg/100 g]	K ₂ O [mg/100 g]	Mg [mg/100 g]
Feld 6	0-30	tL	1,3	0	7,4	4,0	0,30	2,3	7,9	90,7	145,6	11,5	18,9	16 ^{C*}	13 ^C	7 ^C
	30-60	lU	1,5	0	7,5	2,1	0,16	1,2	7,5	54,9		7,4		6 ^B	17 ^C	8 ^C
Feld 7	0-30	tL	1,3	0	7,2	4,3	0,30	2,5	8,5	97,5	165,5	11,6	20,1	17 ^C	16 ^C	9 ^C
	30-60	sL	1,5	0	7,2	2,6	0,19	1,5	7,9	68,0		8,5		6 ^B	7 ^B	6 ^C
Feld 8	0-30	sL	1,3	0	7,4	3,9	0,28	2,3	8,2	88,4	151,2	10,8	18,5	19 ^C	25 ^C	11 ^C
	30-60	sL	1,5	0	7,3	2,4	0,17	1,4	8,1	62,8		7,7		8 ^B	11 ^B	9 ^C
Feld 9	0-30	lS	1,3	60	6,9	4,3	0,26	2,5	9,7	39,0	68,3	4,0	7,3	29 ^D	37 ^E	10 ^C
	30-60	lS	1,5	60	6,9	2,8	0,18	1,6	8,8	29,3		3,3		17 ^C	34 ^E	9 ^C
Feld 13	0-30	lS	1,3	20	6,8	3,0	0,20	1,8	8,8	55,2	79,5	6,3	9,5	14 ^C	9 ^B	6 ^C
	30-60	lS	1,5	30	6,6	1,3	0,10	0,8	7,6	24,3		3,2		2 ^A	5 ^A	6 ^C

¹: Lagerungsdichte und Steingehalt wurden im Profil geschätzt;

*: Gehaltsklassen: A sehr niedrig; B niedrig; C mittel (=anzustreben); D hoch; E sehr hoch

2.2. Main-Tauber-Projekt

2.2.1. Geographie (Nach Bischoff 2007)

Das Untersuchungsgebiet befindet sich in der Gemeinde Großrinderfeld im Main-Tauber-Kreis (Abbildung 11). Geologisch betrachtet befinden sich die Flächen im Oberen Muschelkalk, wobei sich teilweise noch eine Überdeckung aus Unterkeuper findet. Durch das nur schwach ausgeprägte Relief der Landschaft finden sich in der Fläche und an flacheren Hängen im Mittel 60 cm mächtige

Löss- oder Lösslehmagen, die Keuper- und Muschelkalkmaterialien überdecken. Diese Lössablagerungen gepaart mit geringen Hangneigungen und größtenteils waldfreien Flächen sind typisch für süddeutsche Gäulandschaften. Die teils mächtigen Lössablagerungen sind auch ein Hauptfaktor dafür, dass in höheren Anteilen Nullwerte bei den Nitratmessungen auftreten. Im Bereich der Unterkeuperflächen haben sich vor allem pseudovergleyte Parabraunerden und Pararendzinen gebildet. Auf dem Oberen Muschelkalk finden sich dagegen Braunerde-Rendzinen, Braunerde-Pelosole und Braunerde-Terrae fuscae. Mit einer langjährigen Jahresmitteltemperatur von 8.5 °C und einem durchschnittlichen Niederschlag von 630 mm/Jahr kann das Klima als trocken-warm charakterisiert werden.

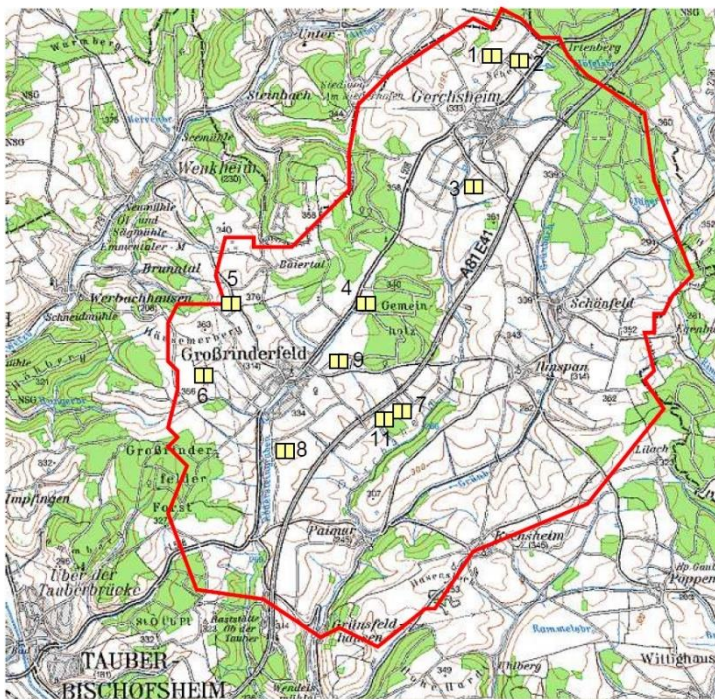


Abbildung 11 Untersuchungsgebiet des Main-Tauber-Projektes in der Gemeinde Großrinderfeld. Die gelben Rechtecke und Zahlen markieren dabei die ungefähren Standorte der Projektflächen (Bischoff 2007)

2.2.2. Versuchsansatz (Nach Bischoff 2007)

Wie auch im Falle des NitroGäu-Projekts lag das Ziel des Versuches im Main-Tauber-Kreis in der Reduktion des Nitratgehaltes im Grundwasser durch veränderte Düngungsmaßnahmen. In diesem Projekt wurde die handelsübliche breitwürfige Kalkammonsalpeter (KAS)-Düngung einer CULTAN-Düngung gegenübergestellt. Die Abkürzung CULTAN steht dabei für „Controlled Uptake Long Term Ammonium Nutrition“ und wurde im Main-Tauber Projekt über

bändchenförmige, platzierte Ausbringung von Ammoniumharnstofflösungen als Düngedepots im Boden realisiert. Um die Wirksamkeit der Maßnahme zu testen, wurden 9 Standorte im Versuchsgebiet ausgewählt und zwischen 2003 und 2006 über 4 Jahre hinweg eine Rotation aus Winterraps, Winterweizen und Zwischenfrucht + Sommergerste implementiert. An jedem Standort wurden beide Düngemaßnahmen auf je einer Teilfläche durchgeführt. Neben der Nitratauswaschung wurden wie im NitroGäu-Projekt auch $N_{\min}$ -Gehalt sowie Ertrag und Qualität der Kulturen erfasst.

2.2.3. Beschreibung des Datensatzes

Wie im Versuchsansatz bereits erläutert, wurden zur Messung der Nitratauswaschung Profile (P) ausgehoben und mehrere SIA in Seitenstollen eingebaut. Für jedes der neun Felder (F) und jede der zwei Maßnahmen (M) waren drei Profile mit 2 x 3 und 1 x 4 SIA vorhanden, was in Summe zehn SIA pro Maßnahme bedeutet. Unter Beachtung der vier Messjahre (J) und den Messungen in den beiden Saisons (S) Sommer und Winter, ergibt dies einen theoretischen Gesamtwert von 1600 Auswaschungsmessungen im Rahmen des Projektes. Allerdings mussten im Laufe des Projektzeitraums eine Fläche verlegt, sowie eine weitere komplett aufgegeben und durch eine neue zehnte Fläche ersetzt werden. Weitere Messausfälle entstanden durch Stau- oder Hangzugswasser, wodurch die SIA auch lateral fließendes Wasser messen, was zu Überschätzungen der Nitratauswaschung führen kann (Bischoff 2007). In Kombination führen diese Umstände zu 1255 tatsächlichen Messwerten. Nullwerte traten in 289 Fällen auf, was einem Anteil von 23 % entspricht. Weitere Einflussvariablen sind:

- Kultur (K) mit fünf Stufen (Winterraps, Winterweizen, Sommergerste, Brache, Zwischenfrucht)
- Textur (I) mit vier Stufen (Ut2, Ut3, Ut4, Tu3)
- Niederschlag

Beim Niederschlag ist jedoch zu beachten, dass dieser zwar täglich gemessen wurde, durch die zeitlich begrenzte Auflösung der SIA auf die saisongebundenen Messperioden auch die Niederschläge innerhalb einer Saison kumuliert wurden. Eine Übersicht aller Variablen findet sich in Tabelle 4.

Tabelle 4 Name und Stufen der abhängigen Variablen des Main-Tauber-Projekts

Variable	Stufen	Werte
Feld (F)	10	1 2 3 4 5 6 7 8 9 11
Profil (P)	3	1 2 3
SIA	3 bis 4	1 2 3 4
Jahr (J)	4	2003 2004 2005 2006
Saison (S)	2	Sommer Winter
Maßnahme (M)	2	Cultan KAS
Kultur (K)	5	Winterraps Winterweizen Sommergerste Zwischenfrucht Brache
Textur (T)	4	Ut2 Ut3 Ut4 Tu3
Niederschlag		

2.3. Zero-Inflation Modelle

2.3.1. Auswahl eines geeigneten Modells

Zur Auswahl und Aufstellung eines geeigneten Zero-Inflation-Modells sollen die bereits erwähnten 4 Fragen von Mills (2013) für die Daten der Nitratauswaschung im Main-Tauber-Projekt beantwortet werden:

Wahre oder zensierte Nullwerte

Zunächst muss die Entscheidung getroffen werden, ob die auftretenden Nullwerte die Realität von nicht auftretender Nitratauswaschung abbilden, oder ob diese durch Zensierung entstehen. Aus Erfahrungswerten ist bekannt, dass die Detektionsschwelle bei der Analyse der SIA im Labor bei ungefähr 0.7 bis 0.8 kg N liegt. Aufgrund der gehäuft auftretenden Nullwerte ist allerdings davon auszugehen, dass diese nicht alleinig durch die Messlimitierung zurückzuführen sind. Durch die geringen Niederschläge im Gebiet der Versuchsflächen sowie infolge der teils mächtigen Lössschichten ist es plausibel, dass die Wasserhaltefähigkeit der Böden die Sickermengen vollständig speichern kann. Es findet demnach kein Wasserfluss durch die SIA statt, sodass auch kein Nitrat oder Ammonium absorbiert werden kann. Die auftretenden Nullwerte werden folglich im weiteren Verlauf der Arbeit als wahre Nullwerte behandelt. Dies führt auch bereits zur ersten Eingrenzung der Kandidatenmodelle, da das Tobit-Modell zwar mittels einiger Modifikationen auch auf wahre Nullwerte angewandt werden kann, aber im Allgemeinen für zensierte Nullwerte genutzt wird.

Datentyp

Bei der Festlegung des Datentyps können Zähldaten ausgeschlossen werden, da die Nitratauswaschung theoretisch jede positive rationale Zahl annehmen kann. Anhand Abbildung 12 lässt sich erkennen, dass die Nitratwerte sehr gut zu der bereits zuvor erwähnten Beschreibung halbstetiger Daten von Min und Agresti (2002) passen: Sie besitzen eine erhöhte Wahrscheinlichkeit für Nullwerte und weiterhin eine kontinuierliche Verteilung der Nitratwerte im positiven Bereich.

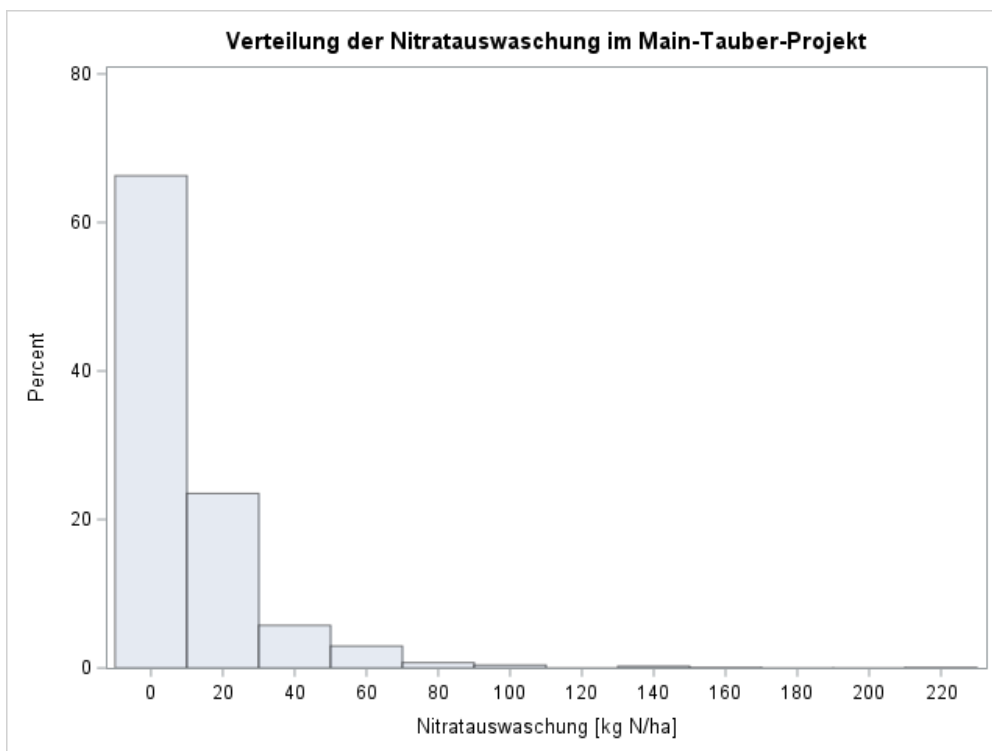


Abbildung 12 Verteilung der Nitratauswaschung im Main-Tauber-Projekt

Datenverteilung

Bei der Anpassung einer geeigneten Verteilung empfiehlt es sich zunächst nach dem Ausschlussprinzip zu verfahren. Bei Betrachtung der in Kapitel 1 vorgestellten Verteilungen können die diskreten Verteilungen Binomial und Poisson ausgeschlossen werden, da diese nur auf Zähldaten anwendbar sind. Da auch nach Anwendung gängiger Datentransformationen (Logarithmus, Wurzel, Quadratwurzel, Inverse) keine gute Annäherung an die Normalverteilung erzielt werden konnte, wurde auch diese verworfen. Dabei muss allerdings berücksichtigt werden, dass eine Transformation mittels Logarithmus oder Inverse nicht auf Nullwerte angewandt werden kann, wodurch die Lognormal- und Inverse Normalverteilung auch keine Option mehr darstellen. Des Weiteren zeigt auch die Transformation der ausschließlich positiven Auswaschungswerte keine

akzeptable Annäherung an die Normalverteilung, sodass diese ausgeschlossen wird. Eine detailliertere Betrachtung der Nitratauswaschung (Abbildung 13) lässt erkennen, dass die Rechtsschiefe der Nitratauswaschungsverteilung in den einzelnen Untersuchungsjahren

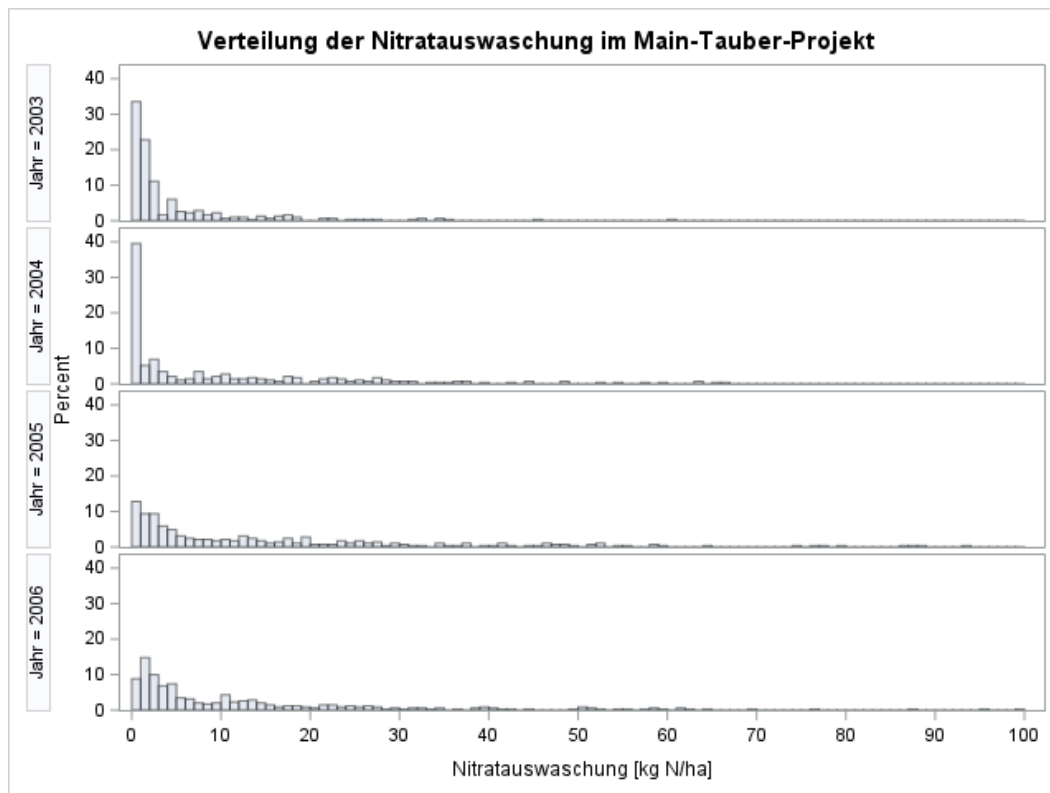


Abbildung 13 Verteilung der Nitratauswaschungswerte im Main-Tauber-Projekt getrennt für die 4 Messjahre 2003 bis 2006.

unterschiedlich stark ausgeprägt ist. Während im Jahr 2003 und 2004 die Nullwerte überwiegen, finden sich in den Jahren 2005 und 2006 vermehrt Werte im einstelligen Auswaschungsbereich. Diese hohe potenzielle Variabilität, sowohl innerhalb eines Standortes in verschiedenen Jahren, sowie zwischen Standorten unterschiedlicher Projekte, führen zu einer Eingrenzung der Verteilungen auf die Gamma- und Tweedie-Verteilung. Beide zeichnen sich durch hohe Flexibilität aus und können an verschiedenste Datenverteilungen angepasst werden.

Einsatzbereich des Modells

Bei der Beantwortung der Frage nach dem Anwendungsbereich für das Modell, steht zunächst die Aufstellung eines Modells im Vordergrund, das Mittelwerte und Varianz der Nitratauswaschung möglichst genau schätzen kann. Um Handlungspraktiken für die Landwirte ableiten zu können, ist es allerdings wichtig, zusätzlich unverzerzte Behandlungsmittelwertschätzer für zum Beispiel verschiedene Düngemaßnahmen zu erhalten. Obwohl die Untersuchung der Nullwerte nicht im Vordergrund steht, kann eine Information über deren Einflussparameter hilfreich sein, um im

Vorfeld abschätzen zu können, ob an einem neuen Versuchsstandort mit hoher Wahrscheinlichkeit Nullwerte auftreten werden oder nicht. Zusammengefasst sollte das Modell grundsätzlich so flexibel sein, dass möglichst viele wissenschaftliche Fragen beantwortet werden können.

Vergleich des Two-Part- und des Tweedie-Modells

Da das Tobit-Modell bereits ausgeschlossen wurde, bleiben noch das Two-Part und das Tweedie-Modell in den Überlegungen enthalten. Während beide gleichermaßen gut für halbstetige, semikontinuierliche Daten geeignet sind, unterscheiden sie sich in ihren Anpassungsmöglichkeiten an die Datenverteilung. Durch den Power-Parameter p kann die Tweedie-Verteilung an eine hohe Vielzahl von Datensätzen angepasst werden, auch wenn keine oder wenig Nullwerte vorhanden sein sollten. Dies ist besonders vorteilhaft im Hinblick auf die Auswertung anderer Nitratauswaschungsprojekte, da zum Beispiel im Falle des NitroGäu-Projekts kein Nullwert gemessen wurde.

Bei der Anwendung des Two-Part-Modells würden die Daten zweigeteilt und damit auch zwei unterschiedliche Verteilungen angepasst werden:

1. Binomialverteilung mit den Ergebnissen 0 bei keiner Nitratauswaschung und 1 für positive Werte der Nitratauswaschung
2. Gammaverteilung für alle Nitratwerte größer 0

Tritt nun der Fall ein, dass keine Nullwerte vorhanden sind, würde das zweistufige zu einem einstufigen Modell konvertieren, da die Binomialverteilung nicht benötigt wird. In SAS wurden beide Verteilungen auf Basis der Vorlage nach SAS Institute (2021) durch Betrachtung des Mittelwert-Varianz-Zusammenhangs getestet. Zunächst werden mittels der Prozedur GENMOD beide Modelle separat an die positiven Daten angepasst, um die verteilungstypischen Parameter zu erhalten. Für die Gammaverteilung ist das der Skalenparameter, während für die Tweedie-Verteilung neben dem Power-Parameter zusätzlich ein Dispersionsparameter geschätzt werden muss. Im nächsten Schritt werden die geschätzten Parameter in einer ‚Data‘-Anweisung genutzt, um den Zusammenhang zwischen Mittelwert und Varianz herzustellen. Zuletzt werden in der Prozedur SGPLOT die Mittelwert-Varianz-Kurven der Gamma- und Tweedie-Verteilungen mit jener der realen Daten verglichen. Die Ergebnisse zeigen, dass beide Verteilungen die Daten gut treffen, obwohl die Tweedie-Verteilung leicht besser zu sein scheint. Auch in Bezug auf die Einsatzmöglichkeiten der Modelle lässt sich kein eindeutiger Vorteil zugunsten eines der Modelle finden. So ist das Tweedie-Modell zwar nicht offensichtlich in zwei Teile getrennt, es gibt jedoch gleichwohl die Möglichkeit für die Nullwerte und die positiven Werte verschiedene Power-Parameter und Einflussvariablen anzupassen (Smyth und Jørgensen 2002).

2.3.2. Anpassung der GLM

Aus diesem Grund wurden zu Beginn beide Modelle in Erwägung gezogen und erste Modellierungsversuche in SAS gestartet. Dabei wurden vorerst alle Effekte als fix angenommen, also ein GLM angepasst. Während für das Tweedie Modell der Ausgangsdatensatz verwendet werden konnte, mussten für das Two-Part Modell vorab einige Änderungen vorgenommen werden. Für die Modellierung der ersten Phase wurde eine neue Variable ‚ispositive‘ geschaffen. Diese nimmt den Wert 0 für alle Nitratwerte = 0 und den Wert 1 für alle Nitratwerte > 0 an. Da in der zweiten Phase mit Hilfe der Gammaverteilung ausschließlich die positiven Nitratwerte dargestellt werden sollten, wurden in einem zweiten Schritt alle Nullwerte des Datensatzes gelöscht

Variablenselektion

Vor der Aufstellung der Modelle wurde eine Variablenselektion vorgenommen, um die Haupteffekte sowie deren Interaktionen auf Signifikanzen zu prüfen. Dafür wurde die Prozedur HPGENSELECT genutzt, da diese neben der Binomial- und Gamma- auch die Tweedie-Verteilung an die Daten anpassen kann. Dabei wurden die Haupteffekte für Feld und Maßnahme fixiert, sodass diese immer ins Modell aufgenommen werden. Dies hat den praktischen Grund, dass bei diesen Variablen die Mittelwertvergleiche in den meisten Projekten von größtem Interesse sind.

Zunächst wurden aus Gründen der Vereinfachung ausschließlich die Haupteffekte, sowie 2-fach Interaktionen in die Variablenselektion miteinbezogen. Da unterschiedliche Selektionsmethoden in HPGENSELECT verfügbar sind, wurden folgende vier Methoden verglichen:

- Forward
- Backward
- Stepwise
- Lasso

Als Kriterium wurden sowohl der BIC (Bayesian information criterion) als auch der AIC (Akaike information criterion) innerhalb eines Selektionsprozesses gewählt. Beide Kriterien besitzen einen Term, der Modelle mit mehr Parametern bestraft, wobei diese Bestrafung beim BIC höher ausfällt (Maydeu-Olivares und García-Forero 2010). Sowohl beim AIC als auch beim BIC steht ein niedrigerer Wert für eine bessere Modellanpassung.

Bei eingehender Betrachtung der Variable ‚Feld‘ muss beachtet werden, dass diese neben einer physischen 3-fach Schachtelung mit Profil und SIA auch einen Zeiteffekt besitzt. Vor diesem

Hintergrund wurde eine weitere Variablenselektion inklusive der 3-fach Interaktion $\text{Feld} \times \text{Saison} \times \text{Jahr}$ durchgeführt.

Im weiteren Verlauf der Arbeit werden zur besseren Übersicht folgende Abkürzungen für die einzelnen Modellkombinationen verwendet:

- T2-Modell: Anpassung eines Tweedie-Modells ohne 3-fach Interaktion
- TP2-Modell: Anpassung eines Two-Part-Modells ohne 3-fach Interaktion
- T3-Modell: Anpassung eines Tweedie-Modells mit 3-fach Interaktion
- TP3-Modell: Anpassung eines Two-Part-Modells mit 3-fach Interaktion

Two-Part-Modell

Die für das Two-Part-Modell notwendige Anpassung und anschließende Zusammenführung zweier verschiedener Phasen mit potenziell unterschiedlichen Verteilungen und Einflussvariablen ist nur in der SAS Prozedur NLMIXED umsetzbar. Im Unterschied zu anderen Prozeduren für generalisierte lineare Modelle wie beispielsweise GLIMMIX oder GENMOD, weist NLMIXED eine sehr hohe Flexibilität in der Programmierung auf (High 2016). Dadurch stellt sie allerdings auch höhere Anforderungen an den Modellierer, da keine oder nur sehr wenige in SAS implementierte Befehle genutzt werden können. Im Folgenden sollen die verschiedenen Bestandteile des Two-Part-Modells in SAS erläutert werden.

Nach der Definition der zu verwendenden Prozedur und des Datensatzes folgt die ‚PARMS‘ Anweisung, in dem die Parameter der selektierten Variablen definiert und ihre Startwerte angegeben werden. Werden keine Startwerte angegeben, so nimmt SAS standardmäßig einen initialen Wert von 1 an (High 2016). Die Angabe von Startwerten wird als sinnvoll erachtet, da ansonsten Konvergenz- oder Iterationsprobleme auftreten können, wenn der standardmäßige Wert von 1 zu weit entfernt von der optimalen Lösung ist (Kiernan et al. 2012). In dieser Arbeit wurde zum Auffinden geeigneter Startwerte für die mittels HPGENSELECT selektierten Variablen das Modell zunächst in GLIMMIX angepasst und die damit erhaltenen Parameterschätzer in ‚PARMS‘ übertragen. Dabei wird von SAS automatisch der jeweils letzte Parameter auf 0 gesetzt, da aufgrund linearer Abhängigkeiten die Designmatrix nicht von vollem Rang wäre. Praktisch gesehen bedeutet dies, dass innerhalb einer Variablen die Parameterschätzungen immer relativ zu dem auf 0 gesetzten Parameter betrachtet werden müssen. Der nächste Schritt beinhaltet die Aufstellung des linearen Prädiktors, also die Linearkombination aus den in der ‚PARMS‘ Anweisung definierten Parameter und den dazugehörigen Variablen.

Dabei fallen jene Parameter und Variablen weg, bei denen die 0er-Restriktion in GLIMMIX getroffen wurde. Eine Besonderheit von NLMIXED besteht darin, dass es im Gegensatz zu anderen Prozeduren keine ‚CLASS‘ Anweisung besitzt und daher eine Dummy-Codierung für alle kategorialen Variablen vorgenommen werden muss (High 2016). Im Main-Tauber Projekt betrifft dies alle Variablen bis auf den Niederschlag.

Nach dem linearen Prädiktor bietet sich in NLMIXED nun die Möglichkeit, die Likelihood bzw. die logarithmierte Likelihood (LL) der benötigten Verteilung zu codieren. Dies befähigt die Prozedur dazu, ein Two-Part-Modell aufstellen und analysieren zu können. Es ist möglich, getrennt für jede der beiden Phasen individuelle Startwerte zu definieren, sowie die linearen Prädiktoren und die LL aufzustellen. Die Zusammenführung beider Phasen geschieht abschließend in einer ‚MODEL‘-Anweisung, in der zunächst die abhängige Variable (Nitrat) und anschließend die bedingte Verteilung definiert werden. Dabei können folgende in SAS implementierte Verteilungen gewählt werden (SAS Institute Inc. 2020):

- **Normal (μ, σ^2)** bestimmt eine Normalverteilung mit Mittelwert μ und Varianz σ^2
- **Gamma (a, b)** bestimmt eine Gammaverteilung mit Formparameter a und Skalenparameter b
- **Binary (p)** bestimmt eine binäre (Bernoulli) Verteilung mit der Erfolgswahrscheinlichkeit p
- **Binomial (n, p)** bestimmt eine Binomialverteilung mit n Anzahl an Versuchen und der Erfolgswahrscheinlichkeit p
- **Negbin (n, p)** bestimmt eine negative Binomialverteilung mit n Anzahl an Versuchen und der Erfolgswahrscheinlichkeit p
- **Poisson (λ)** bestimmt eine Poissonverteilung mit dem Mittelwert und der Varianz λ
- **General (LL)** bestimmt eine generelle LL-Funktion, die der Anwender in einer SAS Programmieranweisung codieren kann

Letzteres muss gewählt werden, wenn eine individuelle, oder wie in diesem Fall mehrere Verteilungen angepasst werden sollen.

Wie bereits erwähnt, wurde für die erste Phase eine Binomial- und für die zweite Phase eine Gammaverteilung gewählt. Die LL der Binomialverteilung wird in NLMIXED wie folgt codiert:

$$LLb(n, p; y) = y * \log(p) + (n - y) * \log(1 - p) + \log \Gamma(n + 1) - \log \Gamma(y + 1) - \log \Gamma(n - y + 1) \quad (2.1)$$

Dabei ist y die neu geschaffene Variable ‚ispositive‘ und p die Wahrscheinlichkeit, einen Nullwert zu messen. Die Anzahl an Versuchen n nimmt in diesem Fall den Wert 1 an, da bei jeder Nitratauswaschungsmessung einzeln entschieden wird, ob ein Nullwert vorliegt oder nicht. Γ ist die in SAS implementierte Gammafunktion. Für die Gammaverteilung der zweiten Phase lautet der Code der LL:

$$LLa(a, b; x) = -b * \log(a) - \log(\Gamma(b)) + (b - 1) * \log(x) - \frac{x}{a} \quad (2.2)$$

x steht dabei für die ausschließlich positiven Nitratwerte, a und b für den Form- und Skalenparameter der Gammaverteilung und Γ für die Gammafunktion. Standardmäßig wird die Maximum Likelihood (ML) mit der Gauss-Hermite-Quadratur geschätzt. Weitere Optionen sind verfügbar und können in SAS Institute Inc. (2020) nachgelesen werden. Ein entscheidender Schritt für die zweite Phase besteht nun darin, dass zur LL der Gammaverteilung die LL der Binomialverteilung hinzuaddiert werden muss:

$$LL2 = LLa + LLb \quad (2.3)$$

Dies begründet sich darin, dass man für die Modellierung der ausschließlich positiven Nitratwerte die bedingte Dichte für x , gegeben, dass ispositive=1 ist, benötigt. (Piepho 2021) Da es für die Berechnungen von Vorteil ist, auch für die Parameter der Verteilungen Startwerte anzugeben, wurden diese händisch mittels der Mittelwert-Varianz-Formeln und unter Einbeziehung der Originaldaten geschätzt, sowie die nötigen Verknüpfungen zum linearen Prädiktor codiert.

Um mögliche Fehlermeldungen in SAS gezielter zu beheben, erfolgte ein sukzessiver Aufbau des Modells: in einem ersten Schritt wurden für beide Phasen die Variablen ‚Massnahme‘ und ‚Feld‘ angepasst und folgend jeweils eine weitere Variable hinzugefügt. Mit jeder neuen Variable wurden auch die Startwerte der Parameter neu angepasst.

Um eine Vereinfachung des Modells und eine Reduktion der benötigten Rechenkapazität zu erreichen, wurde zudem die Option getestet, die 2. Phase des Modells als Linearkombination der 1. Phase darzustellen. Um dies zu erreichen, wurde die Formel des linearen Prädiktors in folgende Form gebracht:

$$Linp = e + f * eta \quad (2.4)$$

Dabei repräsentieren $linp$ und eta die linearen Prädiktoren der 2. und 1. Phase, während e und f die Parameter der Linearkombination verkörpern. Beiden Parametern wurden mehrere Startwerte

zugewiesen, was zwar die Rechenzeit, aber auch die Chance auf eine erfolgreiche Konvergenz des Modells erhöht.

Tweedie-Modell

Die Aufstellung eines Tweedie-Modells mit ausschließlich fixen Effekten kann mittels der Prozedur GENMOD durchgeführt werden. Dort können in der ‚Model‘-Anweisung die abhängige Variable Nitrat, die mittels ‚HPGENSELECT‘ selektierten unabhängigen Variablen, sowie die Tweedie-Verteilung spezifiziert werden. Zuvor werden in einer ‚Class‘-Anweisung alle kategorialen unabhängigen Variablen definiert.

2.3.3. Anpassung der GLMM

Um die Varianz zwischen den verschiedenen Profilen eines Feldes und damit die Heterogenität des Feldes darstellen zu können, wurde die Interaktion Feld*Profil bei beiden Modellen als zufälliger Effekt hinzugefügt. Aus programmierungstechnischen Gründen wurde zu diesem Zweck die neue Variable ‚Profil‘ geschaffen. Diese weist jeder Kombination aus Feld- und Profilstufe eine eindeutige Codierung zu. Feld 1 und Profil 3 werden beispielsweise zu Profil 13. Da innerhalb eines Profils mehrere SIA vorhanden sind, sollte auch die Interaktion Feld*Profil*SIA bzw. Profil*SIA ins Modell aufgenommen werden. Der Restfehler, welcher automatisch angepasst wird, beinhaltet dann die zeitliche Komponente, da jedes SIA pro Jahr theoretisch 2 Messwerte aufweist. Mit Hilfe der Prozedur GLIMMIX wurden für beide Modelltypen zunächst ein und anschließend beide zufälligen Effekte angepasst und deren AIC sowie BIC Werte mit denen der GLM verglichen.

Two-Part-Modell

Um das Two-Part-Modell um den zufälligen Effekt Feld*Profil zu erweitern, muss in der NLMIXED Prozedur dem linearen Prädiktor ein weiterer Parameter (v), sowie eine ‚Random‘-Anweisung hinzugefügt werden. Darin wird definiert, dass der zufällige Parameter (v) einer Normalverteilung mit dem Mittelwert 0 und der Varianz sb1 folgt. Mittels der ‚Subject‘-Anweisung wird die entsprechende zufällige Variable des Datensatzes definiert. Die Schätzung der Varianz sb1 entspricht dabei dem Schätzer des zufälligen Effektes in GLIMMIX und wird in der ‚Parms‘-Anweisung ergänzt.

Die eben beschriebene Umsetzung entspricht dem Fall, dass für beide Phasen des Modells derselbe Schätzer für den zufälligen Effekt angenommen wird. Da es jedoch wahrscheinlich ist, dass sich die Werte unterscheiden, wird ein weiterer Parameter (u) und eine zweite Varianz sb2 benötigt. Zusätzlich ist bei mehr als einem zufälligen Effekt auch die Anpassung einer Kovarianz sb12

erforderlich. Da diese in GLIMMIX nicht geschätzt werden kann, wird ein Startwert von 0 angenommen. Zudem ist es in der HPGENSELECT Prozedur nicht möglich, einen zufälligen Effekt anzupassen, sodass keine neue Variablenselektion vorgenommen wurde.

Tweedie Modell

Im Gegensatz zur Binomial- und Gammaverteilung, ist die Tweedie-Verteilung nicht in GLIMMIX implementiert. Allerdings bietet GLIMMIX dem Nutzer die Möglichkeit, eine eigene Varianzfunktion zu definieren. Da GLIMMIX im Gegensatz zu GENMOD keine ML, sondern eine Maximum Pseudo-Likelihood (MPL) anpasst, wird neben der Varianz- keine weitere Deviance-Funktion benötigt. (Klinker 2011) Wie bereits beschrieben nimmt die Varianzfunktion der Tweedie-Verteilung folgende Form an:

$$V(\mu) = \mu^p \quad ()$$

Als Schätzer für den Power-Parameter p wurde behelfsmäßig der Wert aus der Analyse des GLM in GENMOD gewählt. Entscheidend ist nun, dass neben dem zufälligen Effekt bzw. beiden zufälligen Effekten ein `_RESIDUAL_` zufälliger Effekt eingeführt werden muss. Dies begründet sich darin, dass GLIMMIX bei einer benutzerdefinierten Varianzfunktion keinen Dispersionsparameter anpassen, sondern diesen standardmäßig auf 1 setzen würde. Mittels des zufälligen `_RESIDUAL_`-Effektes wird die Anpassung eines Skalenparameters in GLIMMIX forciert. (Klinker 2011)

2.4. Modelle zur Unsicherheit in den N-Effizienz-Indikatoren

Zur Überprüfung der Messgüte wurden zunächst die Mittelwerte μ , Standardfehler σ , Varianzen σ^2 sowie die Variationskoeffizienten (CV, engl. Coefficient of Variance) folgender erhobener und berechneter Einzelparameter bestimmt:

- Marktfähigkeit (MF)
- Masse des Erntegutes bzw. der Erntereste (FM)
- Kopfgewicht bzw. Reste pro Kopf (Kg)
- Pflanzdichte (Pd)
- dt/ha Ernte bzw. Erntereste (dt/ha)
- TS-Gehalt des Erntegutes bzw. der Erntereste (TS)
- N-Gehalt des Erntegutes bzw. der Erntereste (N)
- N/ha im Erntegut bzw. in den Ernteresten (N/ha)

Die Umsetzung in SAS mittels der Prozedur GLM erfolgte separat für die Jahre 2018 und 2019. Dazu wurde eine neue Variable ‚Satz‘ kreiert, die eine Kombination der beiden Variablen ‚Feld‘ und ‚Kultur‘ repräsentiert. So wird beispielsweise die erste Kultur auf Feld 1 zu Satz 11. Im Jahr 2018 wurden die Einzelparameter anhand folgender Variablen modelliert:

- Satz (9 Stufen: 11 12 21 31 32 33 41 42 51)
- Ernte (2 Stufen: Ernte Rest)

Für jeden Einzelparameter liegen demnach 9×2 bzw. 18 Werte für μ , σ , σ^2 und CV vor. Dabei variiert der für die Berechnungen genutzte Stichprobenumfang (N) der Kombinationen aus Satz*Ernte zwischen 2 und 4 für TS-, N-Gehalt und N/ha, sowie zwischen 5 und 12 für die restlichen Einzelparameter. Im Jahr 2019 wurde das Modell um die Variable ‚Massnahme‘ erweitert, sodass folgende Variablen in das Modell einfließen:

- Satz (6 Stufen: 11 12 21 22 31 41)
- Ernte (2 Stufen: Ernte Rest)
- Massnahme (2 Stufen: M K)

M steht dabei für Erhebungen auf den Maßnahmenplots und K für Kontrollplots. Auf Grund geringer Datenmengen für M2 bis M4 wurde nur M1 berücksichtigt. Für jeden Einzelparameter liegen demnach $6 \times 2 \times 2$ bzw. 24 Werte für die einzelnen Gütemaße vor. Im Gegensatz zu 2018 liegt der N 2019 immer bei 3. Zur Generierung einer größeren Stichprobe wurde zusätzlich eine Berechnung mit allen Salatkulturen beider Jahre (außer Endivie) durchgeführt, in der ausschließlich

die Variable ‚Ernte‘ mit 7 Stufen (11 41 21 42 111 121) in der ‚Model‘ Anweisung genutzt wurde. Für jedes Gütemaß liegen daher nur 2 Werte vor, während N den Wert 21 für TS-, N-Gehalt und N/ha und den Wert 53 für die restlichen Einzelparameter annimmt.

Anhand der Einzelparameter wurden in Excel die N-Effizienz-Indikatoren der beiden Messjahre 2018 und 2019 mittels folgender Gleichungen berechnet:

$$N1 = \text{Düngung} - (\text{Kg}_E * \text{Pd} * \text{Mf} * \text{TS}_E * N_E) \quad (2.5)$$

$$N2 = \text{Düngung} - (\text{Kg}_E * \text{Pd} * \text{Mf} * \text{TS}_E * N_E) + (\text{Kg}_R * \text{Pd} * \text{Mf} * \text{TS}_R * N_R) \quad (2.6)$$

$$N3 = (\text{Kg}_E * \text{Pd} * \text{Mf} * \text{TS}_E * N_E) / \text{Düngung} \quad (2.7)$$

$$N4 = N_{\min} + (\text{Kg}_R * \text{Pd} * \text{Mf} * \text{TS}_R * N_R) \quad (2.8)$$

Die tiefgestellten Buchstaben E und R stehen dabei für Erntegut und Erntereste. Limitierend für die Anzahl an Berechnungen pro Bilanz und Satz ist die kleinste Anzahl an Wiederholungen eines Einzelparameters. Für 2018 sowie die Salatkulturen ergeben sich so Werte für N von 2 bis 4, während N 2019 konstant den Wert 3 annimmt. Anschließend wurden für jede der vier N-Effizienz-Indikatoren in SAS und Excel ebenfalls Mittelwerte, Standardfehler, Varianzen und CV berechnet.

2.5. Fehlerfortpflanzung

2.5.1. Delta-Methode

Zur Berechnung der Fehlerfortpflanzung wurde im Rahmen dieser Arbeit die Delta-Methode gewählt, die laut Ver Hoef (2012) auf Dorfman (1938) zurückzuführen ist. Mit Hilfe der Delta-Methode kann die Varianz einer Funktion einer zufälligen Variable approximiert werden, wofür eine Taylor-Entwicklung 1. Ordnung genutzt wird.

Sei Y nun eine normalverteilte abhängige Zufallsvariable mit Mittelwert μ und Varianz σ^2 , die als Funktion der unabhängigen Zufallsvariablen $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n$ berechnet werden kann. Dann kann als Schätzer für die Varianz der Zufallsvariable Y näherungsweise folgendes Fehlerfortpflanzungsgesetz angenommen werden:

$$\widehat{var}(\hat{Y}) \approx \hat{D} \hat{\Sigma} \hat{D}^T \approx \left[\frac{\partial(\hat{Y})}{\partial(\hat{\theta})} \right] * \hat{\Sigma} * \left[\frac{\partial(\hat{Y})}{\partial(\hat{\theta})} \right]^T \quad (2.5)$$

$\hat{\Sigma}$ entspricht dabei der geschätzten Varianz-Kovarianz-Matrix der Parameter-Schätzungen $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n$, während $\hat{D}$ und $\hat{D}^T$ der Matrix bzw. transponierten Matrix der ersten Ableitung der abhängigen Variable Y nach den Schätzern der Parameter $\hat{\theta}$ entsprechen. (Cooch und White 2002) Weiterführende Informationen zur Taylor-Entwicklung sowie der Delta-Methode finden sich beispielsweise in Cooch und White (2002), Raykov und Marcoulides (2004) oder Ver Hoef (2012). Im Folgenden wird die mittels der Fehlerfortpflanzung geschätzte Varianz der N-Effizienz-Indikatoren als Gesamtvarianz bezeichnet, um sie von den Varianzen der Einzelparameter zu unterscheiden.

2.5.2. Berechnungen

Für die N-Effizienz-Indikatoren im NitroGäu-Projekt sollen mittels der Fehlerfortpflanzung folgende Fragen beantwortet werden:

1. Sollten die Parameter der N-Bilanzen an abhängigen oder an unabhängigen Stichproben erfasst werden?
2. Welche Parameter leisten den größten Beitrag zur Gesamtunsicherheit der N-Effizienz-Indikatoren?

Exemplarisch wurden beide Fragen anhand des Datensatzes für 2019, sowie ausschließlich für N1 (Düngung – Ernte) beantwortet. Zur Berechnung von N1 wurde folgende Gleichung angenommen:

$$N1 = \text{Düngung} - (\text{Kopfgewicht} * \text{Pflanzdichte} * \text{Marktfähigkeit} * \text{Trockensubstanz} * \text{Stickstoff}) \quad (2.6)$$

Aktuell erfolgt die Erfassung von Kopfgewicht, Marktfähigkeit, Trockensubstanz- und Stickstoffgehalt auf dem Feld anhand derselben Pflanzenstichprobe innerhalb eines Plots, während Düngung und Pflanzdichte unabhängig von diesen bestimmt werden. Da die abhängige Variable N1 aus den oben genannten unabhängigen Variablen abgeleitet wird, ist zur Berechnung der Kovarianzen in SAS eine multivariate Auswertung nötig. Diese erfolgte auf Basis des Papers von Piepho und Möhring (2011), die eine schrittweise Anleitung zur Aufstellung eines gemischten multivariaten Modells mit der MIXED Prozedur in SAS formulieren. Zu diesem Zweck wurden die neuen Variablen ‚Merkmal‘, ‚Wert‘ und ‚Wiederholung‘ geschaffen.

Die Variable ‚Merkmal‘ umfasst dabei folgende Stufen:

- Düngung (D)
- Kopfgewicht (Kg)
- Pflanzdichte (Pd)
- Marktfähigkeit (Mf)
- Trockensubstanzgehalt (TS)
- Stickstoffgehalt (N)

Die Variable ‚Wert‘ enthält dabei die Zahlenwerte der entsprechenden ‚Merkmal‘ Stufe, während ‚Wiederholung‘ die Stufen 1, 2 und 3 annimmt und die 3 Wiederholungszahlen der Merkmale codiert.

Nach der Festlegung des zu verwendenden Datensatzes in einer ‚Data‘-Anweisung, erfolgt die Definition der ‚Class‘-Anweisung sowie die Aufstellung des Modells in einer ‚Model‘-Anweisung. Da für die Düngung nur ein Wert pro Feld*Massnahme vorliegt, kann für diesen Parameter keine Varianz angegeben werden und folglich können auch keine Kovarianzen berechnet werden. Auch für die Pflanzdichte musste eine Varianz von 0 angenommen werden, da sich diese aus der Plotgröße und der Anzahl Pflanzen pro Plot berechnet. Aufgrund der häufig auftretenden gleichen Anzahl Pflanzen pro Plot liegen für manche Kombinationen aus Feld*Massnahme keine Varianzen vor, sodass bei der Berechnung der Gesamtvarianz der Pflanzdichte Konvergenzprobleme in SAS auftreten. Die Variable ‚Merkmal‘ hat daher folgende Ausprägungen:

- Marktfähigkeit
- Kopfgewicht
- Trockensubstanzgehalt
- Stickstoffgehalt

Dabei sind für N1 ausschließlich die Werte des Ernteguts relevant, sodass im Vergleich zu den Berechnungen in 3.3. die Variable ‚Ernte‘ entfällt. Allerdings erfolgt weiterhin die Unterteilung in Maßnahmen und Kontrolle in der Variable ‚Massnahme‘. Des Weiteren wurden die Merkmale Trockensubstanzgehalt und Stickstoffgehalt mit dem Faktor 100 multipliziert, um Skalierungsprobleme zu beheben. Diese Skalierung wurde in den unten folgenden Ergebnissen wieder bereinigt. Bei der Aufstellung eines multivariaten Modells ist die Einführung einer ‚Repeated‘-Anweisung erforderlich, um den Restfehler zu modellieren (Piepho und Möhring 2011). Dafür wurde die neue Variable ‚Wiederholung‘ (Stufen: 1 2 3) eingeführt, sodass jeder Kombination aus Merkmal*Massnahme*Satz eine eindeutige Codierung zugewiesen werden kann. Der letzte

Schritt beinhaltet die Formulierung der ‚LSMeans‘-Anweisung mit dem Zusatz ‚COV‘ zur Generierung der Varianz-Kovarianz-Matrix für alle Kombinationen von Merkmal*Massnahme*Satz. Mit den berechneten Kovarianzen wurden in einem nächsten Schritt für jede Kombination aus Satz*Massnahme mittels der Delta-Methode die Varianz sowie der Standardfehler berechnet.

Die finalen Berechnungen der Fehlerfortpflanzung auf Basis der Formel 2.5 von Cooch und White (2002) erfolgten in Excel. Für die erste Frage wurde die geschätzte Gesamtvarianz getrennt nach Sätzen sowie Maßnahmen- und Kontrollplots berechnet, wobei eine Berechnung mit den ermittelten Kovarianzen durchgeführt wurde, während für die zweite Berechnung alle Kovarianzen auf 0 gesetzt wurden. Durch einen Vergleich der beiden ermittelten Gesamtvarianzen kann eine Aussage darüber getroffen werden, ob die Parameter besser an abhängigen oder unabhängigen Stichproben erfasst werden sollten. Zur Beantwortung der Frage, welche Parameterbestimmungen die größte Unsicherheit aufweisen, wurde jeweils die Varianz eines Einzelparameters sowie seine dazugehörigen Kovarianzen auf 0 gesetzt und anschließend evaluiert, inwiefern sich die geschätzte Gesamtvarianz dadurch verändert.

3. Ergebnisse

3.1. N-Mineralisation NitroGäu

Mithilfe der im Rahmen des NitroGäu-Projekts erhobenen Daten wurde die jährliche N-Mineralisation exemplarisch für drei Standorte anhand folgender Bilanz berechnet:

$$\text{Düngung} + \text{Nettomineralisation} = \text{Auswaschung} + \text{Aufwuchs} + \Delta N_{\min} \quad (3.1)$$

Dabei spiegelt die linke Seite der Bilanz N-Quellen für den Boden wider, während die rechte Seite den N-Entzug sowie die Änderung des mineralischen N-Bodenpools darstellt. Nach einer Umformung ergibt sich:

$$\text{Nettomineralisation} = (\text{Auswaschung} + \text{Aufwuchs} + \Delta N_{\min}) - \text{Düngung} \quad (3.2)$$

Dabei beschreibt $\Delta N_{\min}$ die Differenz im gemessenen $N_{\min}$ -Wert in 0 bis 90 cm zweier gewählter Zeitpunkte.

Tabelle 5 zeigt die N-Mineralisationen von drei Standorten, sowie die Werte der Bilanzglieder.

Tabelle 5 N-Mineralisation in kg N/ha*Jahr von drei Versuchsflächen des NitroGäu-Projekts inklusive der einzelnen Bilanzglieder.

Standort	$N_{\min 1}$	$N_{\min 2}$	Düngung	Auswaschung	Aufwuchs	Mineralisation
Dich unten	212	196	105	206	132	217
Rickenbach 1	216	155	189	80	303	133
Rickenbach 2	216	183	54	52	353	318

$N_{\min 1}$ ist der gemessene N-Wert in kg N/ha vor der Pflanzung der ersten Kultur im Jahr 2018, während für $N_{\min 2}$ der zeitlich ideale Wert aus 2019 verwendet wurde. $N_{\min 1}$ und $N_{\min 2}$ wurden auf allen drei Standorten im April 2018 und April 2019 gemessen. Dementsprechend wurden auch die anderen Bilanzglieder Düngung [kg N/ha], Auswaschung [kg N/ha*Jahr] und N-Gehalt im Aufwuchs [kg N/ha*Jahr] über diesen Zeitraum aufaddiert. Die berechnete jährliche N-Mineralisation reicht von 133 kg N/ha*Jahr für Rickenbach 1 bis 318 kg N/ha*Jahr für Rickenbach 2 und variiert damit um knapp 200 kg N/ha*Jahr.

3.2. Zero-Inflation-Modelle

Die Aufstellung der Zero-Inflation-Modelle in SAS beinhaltete folgende Arbeitsschritte:

1. Variablenselektion mit HPGENSELECT
2. Separate Anpassung des Tweedie Modells, sowie beider Phasen des Two-Part-Modells in GENMOD und GLIMMIX zum Vergleich der AIC-Werte sowie Erhalt der Startwerte für folgende Modelltypen:
 - a. Mit und ohne 3-fach Interaktion
 - b. GLM und GLMM mit 1 zufälligen oder 2 zufälligen Effekten
3. Anpassung der finalen Zero-Inflation Modelle in GLIMMIX für Tweedie, sowie in NLMIXED für das Two-Part Modell

3.2.1. Variablenselektion

Da bis auf die 1. Phase des Two-Part-Modells jeweils die „Stepwise“-Selektion in HPGENSELECT die kleinsten Werte aufweist, wurde deren Variablenselektion für alle Modellteile verwendet. Die selektierten Variablen für die beiden Phasen des Two-Part- sowie für das Tweedie-Modell sind in Tabelle 6 dargestellt.

Tabelle 6 Ergebnis der Variablenselektion mit HPGENSELECT für die beiden Phasen des Two-Part-Modells und des Tweedie-Modells ohne Berücksichtigung von 3-fach-Interaktionen

Two-Part-Modell		Tweedie-Modell
1. Phase	2. Phase	gesamte Daten
Massnahme	Massnahme	Massnahme
Feld	Feld	Feld
	Saison	
	Massnahme*Feld	Massnahme*Feld
Saison*Jahr	Saison*Jahr	Saison*Jahr
Feld*Kultur	Feld*Kultur	Feld*Kultur
	Jahr*Kultur	Jahr*Kultur
Niederschlag*Textur	Niederschlag*Textur	Niederschlag*Textur
Niederschlag*Kultur	Niederschlag*Kultur	
	Niederschlag*Massnahme	

Auch in der Analyse inklusive der 3-fach Interaktion Feld*Saison*Jahr wurden die Variablen der „Stepwise“-Selektion gewählt (Tabelle 7).

Tabelle 7 Ergebnis der Variablenselektion mit HPGENSELECT für die beiden Phasen des Two-Part- und des Tweedie-Modells unter der Berücksichtigung der 3-fach-Interaktion Feld*Saison*Jahr

Two-Part-Modell		Tweedie-Modell
1. Phase	2. Phase	gesamte Daten
Massnahme	Massnahme	Massnahme
Feld	Feld	Feld
	Massnahme*Feld	Massnahme*Feld
Massnahme*Textur		
	Niederschlag*Massnahme	Niederschlag*Massnahme
Feld*Saison*Jahr	Feld*Saison*Jahr	Feld*Saison*Jahr

3.2.2. Vergleich der GLM und GLMM

Tabelle 8 und Tabelle 9 zeigen die AIC-Werte der GLM sowie GLMM der beiden Phasen des Two-Part-Modells und des Tweedie-Modells. Ein Vergleich des AIC zwischen dem Two-Part- und dem Tweedie-Modell ist nicht möglich, da sie nicht dieselbe Datenbasis besitzen. So fließt in die Tweedie-Modelle immer der gesamte Datensatz ein, während die 1. Phase mit der Dummy-Variable ‚ispositive‘ und die 2. Phase des Two-Part-Modells mit den ausschließlich positiven Nitratwerten arbeitet. Da die Tweedie-Verteilung der GLMM in GLIMMIX mittels der PML angepasst wird, können dort keine AIC-Werte als Selektionskriterium genutzt werden.

Two-part Modell

Bei Betrachtung der AIC-Werte für die TP-Modelle in Tabelle 8 und Tabelle 9 wird deutlich, dass diese durch die Einführung eines zufälligen Effektes sowohl in der ersten als auch zweiten Phase sinken. Beim Vergleich der Modelle mit einem und zwei zufälligen Effekten, ist entweder ein leichter Anstieg von 700 auf 701 (Tabelle 8) oder keine Veränderung des AIC zu erkennen (Tabelle 9). Weiterhin zeigen die AIC-Werte, dass durch die Einführung der 3-fach-Interaktion Feld*Saison*Jahr der AIC gesenkt werden kann. In der ersten Phase ist eine Reduktion von 724 beim GLM bzw. 700 beim GLMM auf 701 bzw. 678 zu verzeichnen. In der zweiten Phase reduziert sich der AIC von 6183 bzw. 6162 auf 6079 bzw. 6023.

Tabelle 8 und Tabelle 9 zeigen zusätzlich die Varianzschätzungen der zufälligen Effekte. Der Residual-Effekt entspricht dabei der Schätzung des Skalenparameters der Gammaverteilung und wird daher nur für die 2. Phase angepasst. Die Varianz des Feld*Profil-Effekts der 1. Phase liegt für das TP2-Modell mit 0.8235 niedriger als die des TP3-Modells mit 0.9352. Sowohl für die 1. Phase des TP2- als auch des TP3-Modells nimmt der Feld*Profil*SIA-Effekt den Wert 0 an und SAS gibt folgende Warnung aus:

Estimated G matrix is not positive definite

Auch in der 2. Phase gibt das TP2-Modell beim Feld*Profil-Effekt mit 0.06358 eine niedrigere Varianzschätzung als 0.0760 für TP3 aus. Mit der Hinzunahme des zweiten zufälligen Effekts steigt die Schätzung des Feld*Profil-Effekts für TP2 auf 0.06444 und die Schätzung für Feld*Profil*SIA nimmt den Wert 0.02011 an. Im Falle des TP3-Modells mit beiden zufälligen Effekten liegen die Schätzungen für Feld*Profil und Feld*Profil*SIA bei 0.07063 und 0.01993.

Tweedie Modell

Wie bereits erwähnt, können im Falle des Tweedie-Modells keine AIC-Werte der zufälligen Effekte verglichen werden. Für das GLM liegt der AIC-Wert des T2-Modells mit 7214 höher als der des T3-Modells mit 6930.

Tabelle 8 AIC-Werte und Varianzschätzungen der zufälligen Effekte für die verschiedenen Modelltypen ohne 3-fach-Interaktion. Unter dem GLMM-Ansatz werden die jeweils genutzten zufälligen Effekte genannt

	TP2		T2
	<i>1. Phase</i>	<i>2. Phase</i>	<i>gesamte Daten</i>
AIC-GLM	724	6183	7214
AIC-GLMM1	700	6162	
<i>Feld*Profil</i>	<i>0.8235</i>	<i>0.06358</i>	
<i>Residual</i>	-	<i>0.5301</i>	
AIC-GLMM2	701	6164	
<i>Feld*Profil</i>	<i>0.7398</i>	<i>0.06444</i>	
<i>Feld*Profil*SIA</i>	<i>0</i>	<i>0.02011</i>	
<i>Residual</i>	-	<i>0.5156</i>	

Tabelle 9 AIC-Werte und Varianzschätzungen der zufälligen Effekte für die verschiedenen Modelltypen mit 3-fach-Interaktion. Unter dem GLMM-Ansatz werden die jeweils genutzten zufälligen Effekte genannt

	TP3		T3
	1. Phase	2. Phase	gesamte Daten
AIC-GLM	701	6079	6930
AIC-GLMM1	678	6023	
<i>Feld*Profil</i>	0.9352	0.0760	
<i>Residual</i>	-	0.4672	
AIC-GLMM2	678	6023	
<i>Feld*Profil</i>	0.9236	0.07063	
<i>Feld*Profil*SLA</i>	0	0.01993	
<i>Residual</i>	-	0.4549	

3.2.3. Umsetzung der finalen Zero-Inflation Modelle

Two-Part-Modell

Für die Anpassung des Two-Part-Modells in NLMIXED wurden aus zeittechnischen Gründen nur das TP3-Modell verwendet, da dieses weniger Variablen enthält und zudem in beiden Phasen einen geringeren AIC-Wert aufweist. Da die AIC-Werte durch die Hinzunahme des Feld*Profil*SIA-Effekts keine deutlich Veränderung zeigten (vgl. Tabelle 8) und die Modellierung zweier zufälliger Effekte aufwendig und komplex wäre, wurde nur der zufällige Effekt Feld*Profil implementiert. Beispiele der verwendeten SAS Codes finden sich in Anhang I., Anhang II. und Anhang III.

Tabelle 10 bietet eine Übersicht über die in SAS codierten Modellausprägungen des TP3-Modells. Dabei repräsentiert der ✓ eine erfolgreiche Konvergenz des Programmes, o eine Nichtuntersuchung der Ausprägung und x ein Fehlschlagen der Konvergenz oder das Auftreten einer Fehlermeldung, die nicht behoben werden konnte. Die einzelnen Spalten repräsentieren den sukzessiven Aufbau des Modells. 2:2 bedeutet, dass sowohl für die 1. Phase als auch 2. Phase die ersten beiden Variablen (vgl. Tabelle 7) angepasst wurden. Da die 2. Phase eine Variable mehr besitzt, wurde in Spalte 3 nur für diese Phase eine neue Variable angepasst, während die 1. Phase unverändert blieb. Im finalen Modell wurden beide Phasen um die 3-fach-Interaktion

Feld*Saison*Jahr ergänzt. Die untersuchten Modellausprägungen werden durch die Zeilen der Tabelle repräsentiert:

- **Fix:** Anpassung des GLM
- **Fix + LK:** Anpassung des GLM inklusive Codierung des linearen Prädiktors der 2. Phase als Linearkombination der 1. Phase
- **1 zufällig:** Anpassung eines GLMM mit dem zufälligen Effekt Feld*Profil, wobei für Phase 1 und 2 dieselbe Effektvarianz angenommen wurde
- **1 zufällig + LK:** Anpassung eines GLMM mit dem zufälligen Effekt Feld*Profil, wobei für Phase 1 und 2 dieselbe Effektvarianz angenommen wurde, inklusive Codierung des linearen Prädiktors der 2. Phase als Linearkombination der 1. Phase
- **2 zufällig:** Anpassung eines GLMM mit dem zufälligen Effekt Feld*Profil, wobei für Phase 1 und 2 verschiedene Effektvarianzen angenommen wurden
- **2 zufällig + LK:** Anpassung eines GLMM mit dem zufälligen Effekt Feld*Profil, wobei für Phase 1 und 2 verschiedene Effektvarianzen angenommen wurden, inklusive Codierung des linearen Prädiktors der 2. Phase als Linearkombination der 1. Phase

Die ersten beiden Stufen des Modells mit je 2 bzw. 3 Variablen in den beiden Phasen resultierten in erfolgreichen Modellkonvergenzen für das GLM, sowie für das GLMM mit einem gemeinsamen zufälligen Effekt. Bei der Anpassung von unterschiedlichen zufälligen Effekten in beiden Phasen, traten mit und ohne Anwendung der LK folgende Fehlermeldung auf:

QUANEW cannot be completed

Gleiches gilt für die Codierung von 3:4, wobei dort die LK nicht getestet wurden. Die Einführung einer neuen Variable ausschließlich für Phase 2 ist nicht möglich, da die 2. Phase als LK der 1. Phase dargestellt werden soll. Mit der Einführung der 3-fach-Interaktion in jeder der beiden Modellphasen zur Aufstellung des finalen Modells konnte keine Modellkonvergenz erreicht werden. Dabei wurden von SAS folgende Fehlermeldungen ausgegeben:

QUANEW cannot be completed

Sowie nach Einführung der beiden zufälligen Effekte:

The final Hessian matrix is not positive definite, and therefore the estimated covariance matrix is not full rank and may be unreliable. The variance of some parameter estimates is zero or some parameters are linearly related to other parameters

Tabelle 10 Ergebnisse der sukzessiven Anpassung der verschiedenen Modelltypen des Two-Part-Modells. ✓ stehen für gelungene Modellkonvergenzen, o für nicht getestete Modelle und x für fehlgeschlagene Modellkonvergenzen.

TP3 Modell				
	2:2	3:3	3:4	<i>final</i>
fix	✓	✓	✓	x
fix + LK	✓	✓	o	x
1 zufällig	✓	✓	✓	x
1 zufällig + LK	✓	✓	o	x
2 zufällig	x	x	x	x
2 zufällig + LK	x	x	o	x

Tweedie-Modell

Da die Codierung des Tweedie-Modells weniger komplex ausfällt, wurden sowohl das T2- als auch das T3-Modell untersucht. SAS Code 1 zeigt den Code für das T2-GLM, während SAS Code 2 beispielhaft den in SAS angewandten Code für das T2-GLMM mit zwei zufälligen Effekten für Feld*Profil und Feld*Profil*SIA, sowie den zufälligen _Residual_-Effekt abbildet.

```
Proc Genmod data=MT_t;
  Class Massnahme Feld Saison Jahr Textur Kultur;
  Model Nitrat = Massnahme Feld
               Massnahme*Feld Saison*Jahr Feld*Kultur Jahr*Kultur Niederschlag*Textur
               / dist=Tweedie;
Run;
```

SAS Code 1 Anpassung des Tweedie-Modells mit ausschließlich fixen Effekten

```

Proc Glimmix data=MT_t Maxopt=200 PCONV=.000015;
  _Variance_=_mu_**1.43;
  Class Massnahme Feld Saison Jahr Textur Kultur ProfilK SIA;
  Model nitrat = Massnahme Feld Massnahme*Feld Saison*Jahr Feld*Kultur Jahr*Kultur Niederschlag*Textur
                / link=log s;
  Random Intercept SIA / subject=profilK;
  Random _Residual_;
Run;

```

SAS Code 2 Anpassung des Tweedie-GLMM mit 2 zufälligen Effekten und dem `_Residual_` Effekt

Der Ausgang aller untersuchten GLM und GLMM für das Tweedie-Modell ist in Tabelle 11 abgebildet. Die Abkürzungen der ersten Spalte stehen für:

- **Fix:** Anpassung des GLM
- **1 zufällig:** Anpassung eines GLMM mit dem zufälligen Effekt Feld*Profil
- **2 zufällig:** Anpassung eines GLMM mit den zwei zufälligen Effekten Feld*Profil und Feld*Profil*SIA

Im Falle des T2-Modells konnte sowohl im GLM als auch für das erste GLMM ein Modellkonvergenz ohne Fehlermeldung erreicht werden. Die Schätzungen der zufälligen Effekte sowie des `_RESIDUAL_`-Effekts sind in Tabelle 12 aufgeführt. Bei der Ausführung des Modells mit beiden zufälligen Effekten erfolgte eine Schätzung aller Effekte, allerdings war das Resultat für den Schätzer des zweiten zufälligen Effekts Feld*Profil*SIA 0 und folgende Meldung wurde von SAS ausgegeben:

Estimated G matrix is not positive definite

Die Anpassung des T3-Modells führte nur für das GLM zu einem Ergebnis. Mit der Anpassung eines oder mehrerer zufälligen Effekte konnte keine Konvergenz erzielt werden.

Tabelle 11 Ergebnisse der Anpassungen der verschiedenen Modelltypen des Tweedie-Modells. ✓ steht dabei für eine erfolgreiche Modellkonvergenz und x für fehlgeschlagene Modellkonvergenzen.

	T2	T3
fix	✓	✓
1 zufällig	✓	x
2 zufällig	✓	x

Tabelle 12 Varianzschätzungen der zufälligen Effekte sowie des _RESIDUAL_-Effekts für das T2-Modell

	1 zufälliger Effekt	2 zufällige Effekte
Feld*Profil	0.1669	0.1566
Feld*Profil*SIA	-	0
Residual	3.0540	3.3360

3.3. Güte der N-Effizienz-Indikatoren

Die in SAS verwendeten Codes zur Berechnung der Mittelwerte, Varianzen, Standardabweichungen und CV der Einzelparameter und der vier N-Effizienz-Indikatoren sind in SAS Code 3 und 4 dargestellt

```

Data NG_einzel;
  Input Standort$ Kultur$ Ernte$ Satz Marktf FM Kopfgew Pflha dtha TS N Nha ;
  Datalines;
  Dichoben Frisee Ernte 11 100 2.55 0.32 60952 194.29 6.40 2.96 39.41
  Dichoben Frisee Ernte 11 100 3.50 0.44 60952 266.67 5.72 3.35 39.92
  Dichoben Frisee Ernte 11 86 2.15 0.36 53333 163.81 10.17 2.38 24.14
  .
  .
  .
;
Proc GLM data=NG_einzel;
  Class Satz Ernte;
  Model Marktf FM Kopfgew pflha dtha TS N Nha = Satz*Ernte;
  Means Satz*Ernte;
Run;

```

SAS Code 3 Code zur Modellierung der Gütemaße für die Einzelparameter im Jahr 2018.

```

Data NG_NB;
  Input Satz Massnahme$ N1 N2 N3 N4;
  Datalines;
11 M 12 -38 0.79 400
11 M 16 -32 0.73 398
11 M 35 -9 0.38 394
11 K 87 49 0.42 924
11 K 96 40 0.36 941
11 K 85 38 0.43 932
.
.
.
;

Proc glm data=NG_NB;
  Class Satz Massnahme;
  Model N1 N2 N3 N4 = Satz*Massnahme;
  Means Satz*Massnahme;
  Run;

```

SAS Code 4 Code zur Modellierung der Gütemaße für die 4 N-Effizienz-Indikatoren im Jahr 2019. Im Gegensatz zum Jahr 2018 wird auch die Variable ‚Massnahme‘ in das Modell aufgenommen.

Tabelle 13 und Tabelle 14 zeigen die über alle Sätze gemittelten Variationskoeffizienten (CV) der in die N-Effizienz-Indikatoren einfließenden Parameter von 2018 und 2019. 2019 erfolgte neben einer Aufteilung in Erntegut und Ernterest auch eine weitere Unterscheidung in Maßnahmen- und Kontrollplots. Die CV bei ausschließlicher Betrachtung der Salatkulturen beider Jahre sind in Tabelle 15 aufgeführt. Für die Marktfähigkeit wird jeweils nur ein Wert angegeben, da diese gleichermaßen für Erntegut und Erntereste herangezogen werden kann.

Die niedrigsten CV aller drei Varianten finden sich im TS- und im N-Gehalt. Allerdings ist dieser Effekt bei den Salatkulturen weniger stark ausgeprägt als bei der Betrachtung der einzelnen Jahre. Allerdings lässt sich kein Parameter feststellen, der in jeder der drei Varianten die höchsten CV aufweist. Die drei höchsten CV 0.405, 0.423 und 0.472 finden sich alle bei der gemeinsamen Betrachtung der Salatkulturen. Tendenziell finden sich beim Erntegut im Vergleich zu den Ernteresten geringere Streubreiten, allerdings mit Ausnahmen, wie z.B. bei der FM im Jahr 2018. Beim Vergleich zwischen Kontrolle und Maßnahme im Jahr 2019, jeweils getrennt für Ernte und Rest, nimmt in 90 % der Fälle die Kontrolle den höheren CV an. Die absolute Spannbreite der CV reicht von 0.045 für den N-Gehalt in der Kombination Erntegut und Maßnahme im Jahr 2019 bis zu einem Wert von 0.472 für die Reste pro Kopf bei der Analyse der Salatkulturen.

Tabelle 13 Gemittelte Variationskoeffizienten der in die N-Effizienz-Indikatoren einfließenden Parameter für das Jahr 2018. Da ausschließlich Kontrollplots vorhanden waren, erfolgt nur eine Unterscheidung in Erntegut und Erntereste.

2018	Parameter						
	<i>MF</i>	<i>FM</i>	<i>Kg</i>	<i>TS</i>	<i>N</i>	<i>dt/ha</i>	<i>N/ha</i>
<i>Ernte</i>	0.166	0.293	0.238	0.092	0.075	0.293	0.154
<i>Rest</i>		0.260	0.376	0.170	0.080	0.260	0.228

Tabelle 14 Gemittelte Variationskoeffizienten der in die N-Effizienz-Indikatoren einfließenden Parameter für das Jahr 2019. Die Unterscheidung erfolgt neben Erntegut und Ernteresten auch in Maßnahmen- und Kontrollplots

2019	Parameter					
	<i>MF</i>	<i>FM</i>	<i>Kg</i>	<i>TS</i>	<i>N</i>	<i>N/ba</i>
<i>Ernte*Kontrolle</i>	0.136	0.158	0.091	0.054	0.057	0.166
<i>Ernte*Maßnahme</i>	0.115	0.176	0.077	0.089	0.045	0.104
<i>Rest*Kontrolle</i>		0.189	0.228	0.185	0.071	0.272
<i>Rest*Maßnahme</i>		0.117	0.134	0.051	0.059	0.096

Tabelle 15 Gemittelte Variationskoeffizienten der in die N-Effizienz-Indikatoren einfließenden Parameter für alle Salatkulturen außer Endivie, gemittelt über die Mittelwerte der beiden Jahre 2018 und 2019. Berücksichtigt wurden nur die Werte der Kontrollplots beider Jahre.

Salat	Parameter						
	<i>MF</i>	<i>FM</i>	<i>Kg</i>	<i>TS</i>	<i>N</i>	<i>dt/ha</i>	<i>N/ha</i>
<i>Ernte</i>	0.149	0.293	0.237	0.206	0.187	0.291	0.423
<i>Rest</i>		0.387	0.472	0.134	0.165	0.405	0.405

Die CV für die berechneten gemittelten Variationskoeffizienten der N-Effizienz-Indikatoren sind in Tabelle 16 dargestellt. Da für die Analyse der Salatkulturen beider Jahre nur die Kontrollplots einbezogen wurden, findet sich nur für das Jahr 2019 eine Unterscheidung in Maßnahme und Kontrolle. Im Vergleich zur Kontrolle nehmen die CV der Maßnahme bei allen gemittelten Variationskoeffizienten der in die N-Effizienz-Indikatoren einfließenden Parameter niedrigere Werte an. Die größten Werte finden sich in N2, während N4 im Durchschnitt die niedrigsten CV-Werte aufweist.

Tabelle 16 Mittelwerte und gemittelte Variationskoeffizienten der vier N-Effizienz-Indikatoren für 2018, 2019 sowie die Salatkulturen ohne Endivie aus beiden Jahren. Für das Jahr 2019 erfolgt weiterhin eine Unterscheidung in Maßnahmen- (M) und Kontrollplots (K)

		N1		N2		N3		N4	
		<i>Mean</i>	<i>CV</i>	<i>Mean</i>	<i>CV</i>	<i>Mean</i>	<i>CV</i>	<i>Mean</i>	<i>CV</i>
2018	K	37	0.540	-115	1.137	0.72	0.154	371	0.090
2019	K	45	0.411	-127	0.462	0.73	0.142	489	0.158
	M	-11	0.284	-160	0.187	1.24	0.105	327	0.042
Salat	K	63	0.449	-86	0.946	0.55	0.134	601	0.044

3.4. Fehlerfortpflanzung

```

Proc Mixed Data=Kovarianzen lognote;
Class Merkmal Wiederholung Massnahme;
Model Wert = Merkmal Merkmal*Massnahme*Satz;
Repeated Merkmal / Subject= Wiederholung*Massnahme type=UN;
lsmeans Merkmal*Massnahme*Satz / COV;
Run;

```

SAS Code 5 Multivariates Modell zur Ermittlung der Varianz-Kovarianz-Matrix der zu N1 gehörigen Parameter

SAS Code 5 zeigt den in SAS genutzten Code zur Berechnung der Kovarianzen auf Basis eines multivariaten gemischten Modells.

Zur Beantwortung der ersten Frage, ob die Erfassung der Parameter an abhängigen oder unabhängigen Stichproben erfolgen sollte, wurden für 3 unterschiedliche Modellausprägungen die Mittelwerte der Varianzen und Standardfehler der Kombinationen aus Satz*Massnahme berechnet (vgl. Tabelle 17):

- Unabhängig
- Abhängig
- Berechnet

Zur Berechnung der Gesamtvarianz bei Nutzung von unabhängigen Stichproben wurden im Gegensatz zur abhängigen Gesamtvarianz alle Kovarianzen auf den Wert 0 gesetzt und nur die einzelnen Varianzen der Parameter berücksichtigt. Zusätzlich zeigt Tabelle 17 den Mittelwert der bereits in 3.3. berechneten Varianzen und Standardabweichungen (SD, engl. standard deviation) von N1 ohne Nutzung der Fehlerfortpflanzung. Die Werte zeigen, dass die berechnete Varianz mit

155.89 deutlich höher liegt als die der Fehlerfortpflanzungsberechnungen. Innerhalb der Fehlerfortpflanzung nimmt die Varianz unter Annahme von abhängig genommenen Stichproben mit 125.54 einen höheren Wert an als die unabhängiger Stichproben mit 118.00.

Tabelle 17 Vergleich der mittleren Gesamtvarianz sowie der Standardabweichung (SD) für N1 ($\mu=39.5$ kg N/ha) im Jahr 2019. Berechnungen erfolgten unter der Annahme unabhängiger (Kovarianzen 0 gesetzt) und abhängiger (Einbeziehung der Kovarianzen) Stichproben nach der Delta-Methode. Zusätzlich sind die ermittelten Werte ohne Berücksichtigung der Fehlerfortpflanzung dargestellt.

	unabhängig	abhängig	berechnet
Varianz	118.00	125.54	155.89
SD	10.86	11.20	12.49

Zur Beantwortung der zweiten Frage, welcher Parameter den größten Einfluss auf die Gesamtunsicherheit der N-Effizienz-Indikatoren hat, wurde jeweils die Varianz eines Parameters sowie seine dazugehörigen Kovarianzen auf 0 gesetzt und die prozentuale Veränderung der Gesamtvarianz sowie des Standardfehlers notiert. Tabelle 18 stellt die mittlere Reduktion der Varianz sowie des Standardfehlers über die Kombinationen aus Satz*Massnahme dar. Die größte Reduktion der Gesamtvarianz um durchschnittlich 46.82 % wird mit der Nullsetzung der Varianz der Marktfähigkeit erreicht, während ein Nullsetzen der Varianz der Trockensubstanz die Gesamtvarianz nur um 11.66 % sinken lässt. Mit 19.48 % und 23.59 % führen der Stickstoffgehalt und das Kopfgewicht zu ähnlich hohen Varianzreduktionen.

Tabelle 18 Mittlere Reduktion der Gesamtvarianz und Standardabweichung (SD) in % für N1 im Jahr 2019, wenn für einen bestimmten Parameter Varianz sowie dazugehörige Kovarianzen auf 0 gesetzt werden.

0 gesetzter Parameter	Reduktion Varianz [%]	Reduktion SD [%]
Kg	23.59	4.86
Mf	46.82	6.84
TS	11.66	3.41
N	19.48	4.41

Zusätzlich wurde im Rahmen der Arbeit geprüft, ob die Nullsetzung der Pflanzdichtenvarianz eine legitime Vereinfachung darstellt. Die Berechnung der Pflanzdichte kann zum einen mittels der an

den Plots erhobenen Parametern erfolgen, sodass im Endeffekt drei Werte pro Feld und Maßnahme vorliegen. Zum anderen wurde diese zusätzlich anhand einer größeren abgesteckten Fläche im Feld geschätzt. In diesem Fall erfolgte auch keine Unterscheidung der Maßnahmen und es ist nur ein Wert pro Feld vorhanden. Daher wurde die durchschnittliche Gesamtvarianz von Satz*Maßnahme auf 3 unterschiedliche Art und Weisen erneut berechnet:

- Plot Pflanzdichte + Nutzung der Varianzen (P+V)
- Plot Pflanzdichte + Nullsetzung der Varianzen (P+V0)
- Feld Pflanzdichten + Nullsetzung der Varianzen (F+V0)

Da die vorgegebenen Pflanzdichten nur von der Kultur und damit nicht von der Maßnahme abhängen, sind diese innerhalb eines Satzes identisch, sodass dort keine Varianz vorliegt. Aufgrund der Konvergenzprobleme in GLIMMIX konnten die Berechnungen der Gesamtvarianz von N1 nicht mit den Kovarianzen durchgeführt werden, sodass diese immer auf 0 gesetzt wurden. Tabelle 19 zeigt die durchschnittliche Varianz sowie die Standardabweichung der 3 Berechnungsarten.

Tabelle 19 Durchschnittliche Gesamtvarianzen von N1 ($\mu_P=39.5$ kg N/ha; $\mu_F=41$ kg N/ha) im Jahr 2019 für die drei verschiedenen Arten der Pflanzdichte: berechnet + Nutzung der Varianzen (P+V), berechnet + Nullsetzung der Varianzen (P+V0) und vorgegeben + Nullsetzung der Varianzen (F+V0)

	P+V	P+V0	F+V0
Ø Varianz	119.691	115.385	135.534
Ø StdAbw.	10.940	10.472	11.642

4. Diskussion

4.1. Stickstoffnachlieferungspotential im NitroGäu-Projekt

In der Einleitung wurde bereits herausgearbeitet, dass die N-Dynamik eng mit dem Gehalt an SOM und damit der C-Dynamik verbunden ist. Allerdings basiert das vorgestellte Kohlenstoffflussmodell von Parton et al. (1988) (vgl. Abbildung 2) auf Beobachtungen und Messungen in Waldökosystemen. Da sich die Inhaltsstoffe der Streu sowie die Bewirtschaftungsmaßnahmen grundlegend vom Gemüsebau unterscheiden, kann das Modell nicht 1:1 auf die Situation im NitroGäu-Projekt angewandt werden. Aus diesem Grund und um die berechneten Mineralisationsraten richtig einschätzen zu können, wurde ein neues Konzept erarbeitet, das die Ausgangssituation sowie die pedogenen Prozesse der Projektflächen widerspiegelt.

4.1.1. Verlauf des SOC-Gehaltes

Abbildung 14 zeigt einen potenziellen Verlauf des organischen C-Gehaltes in den Böden des Projektgebietes von 5000 v.Chr. bis heute. Bis zur Begründung der Dünnern um 1940 führte die Auedynamik über Jahrtausende zu einer stetigen Akkumulation der SOM. Betrachtet man diese Akkumulation im Detail, so können zwei unterschiedliche Quellen ausfindig gemacht werden: Die Basis (A) bildet das Vorhandensein großer Mengen an SOM, die autochthonem oder allochthonem Ursprungs sein kann (Pinay et al. 1992; Tockner und Stanford 2002). Im allochthonen Fall erodiert humoses Material im Flusseinzugsgebiet und wird im Überschwemmungsgebiet erneut abgelagert. Anschließend erfolgt eine Überdeckung mit anderen angeschwemmten Materialien oder Sedimenten, bevor in einem neuen Überflutungszyklus erneut humoses Material abgelagert wird. (Pinay et al. 1992) Autochthone Quellen der SOM entstehen durch den hohen Nährstoffreichtum der angeschwemmten Sedimente. Diese steigern die Nettoproduktivität des Ökosystems, wodurch die Auenvegetation einen erhöhten Eintrag an Streu in den Boden verzeichnet. (Tockner und Stanford 2002) Der zweite Grund (B) für die stetige Akkumulation an SOC in Auenböden liegt in einer geringeren Mineralisationsrate der SOM. Wie bereits erläutert werden die größtenteils aerob arbeitenden Mikroorganismen durch die anaeroben Phasen während der Überschwemmungsereignisse gehemmt und der Abbau der SOM findet nur noch eingeschränkt statt. Im Laufe des Sedimentationsprozesses findet in Abhängigkeit von der Strömungsgeschwindigkeit eine Korngrößensortierung statt. Die feinsten Sedimente finden sich zum einen in den meist geringeren Gefällen des Flussunterlaufs und zum anderen in flussferneren Bereichen, da dort die Fließgeschwindigkeiten des Wassers durch erhöhte Widerstände abgebremst

werden. (Amelung et al. 2018) Viele Studien konnten zeigen, dass C- und N-Mineralisation in fein strukturierten, tonigen Böden geringer ausfällt als in grobkörnigen, sandigen Böden (Verberne et al. 1990; Hassink 1995; Whitmore und Groot 1997). Als Erklärung nennen die Autoren den physikalischen Schutz der SOM vor mikrobiellem Abbau, da die Mikroorganismen in die feinen Poren nicht vordringen können. Ergänzend dazu führen Bechtold und Naiman (2009) an, dass fluviale Schluff- und Tonsedimente nur geringen Einfluss auf das labile C im Boden besitzen, dafür umso bedeutsamer für den Gleichgewichtsgehalt und damit die längerfristige Speicherung von C im Boden sind.

Mit der Begradigung der Dünern erfolgte die Urbarmachung der Auenböden für landwirtschaftliche Zwecke. Die Trockenlegung und das damit verbundene Ausbleiben anaerober Phasen in Kombination mit dem vorliegenden humus- und nährstoffreichen Substrat führt zu einem raschen Abbau der SOM im Boden (C). In Verbindung mit der ausbleibenden Sedimentation humusreicher Substrate führt dies zu einem Ungleichgewicht zwischen Anlieferung und Mineralisation der SOM. Die landwirtschaftliche Nutzung übt eine verstärkende Wirkung aus, da im Ackerbau nur wenig Erntereste auf dem Feld verbleiben und Maßnahmen zur Bodenbearbeitung zu einer regelmäßigen Durchmischung der Bodenbestandteile führen. Im Laufe der Zeit sinkt die Abbaurate asymptotisch (Howard und Howard 1974; Berg und Ekbohm 1991) bis sich ein neuer Gleichgewichts-C-Gehalt einstellt (D).

Mit dem Wechsel zum Anbau von Gemüsekulturen im Jahre 2005 erfolgte eine erneute Störung des Gleichgewichts durch erhöhten Eintrag an SOM aufgrund teils sehr hoher Mengen an Ernteresten, die auf dem Feld verbleiben und in den Boden eingearbeitet werden. Zum anderen wurden auf den Flächen des NitroGäu Projektes hohe Mengen an organischen Düngern ausgebracht. Dazu gehören neben der Feststofffraktion von Biogas-Gärresten oder Komposten auch wüchsige Zwischenfrüchte wie beispielsweise Hafer. Ziel der Landwirte war es, den Gehalt an SOM zu steigern (E), um möglichst viele Nährstoffe für ausreichende Quantitäten und Qualitäten der Kulturen zu erhalten. Analog zur Phase des Ackerbaus stellt sich auch im Gemüsebau mit der Zeit ein neues Gleichgewicht (F) ein, das vom Niveau zwar höher als im Ackerbau, aber niedriger als das der ursprünglichen Aue einzuordnen ist.

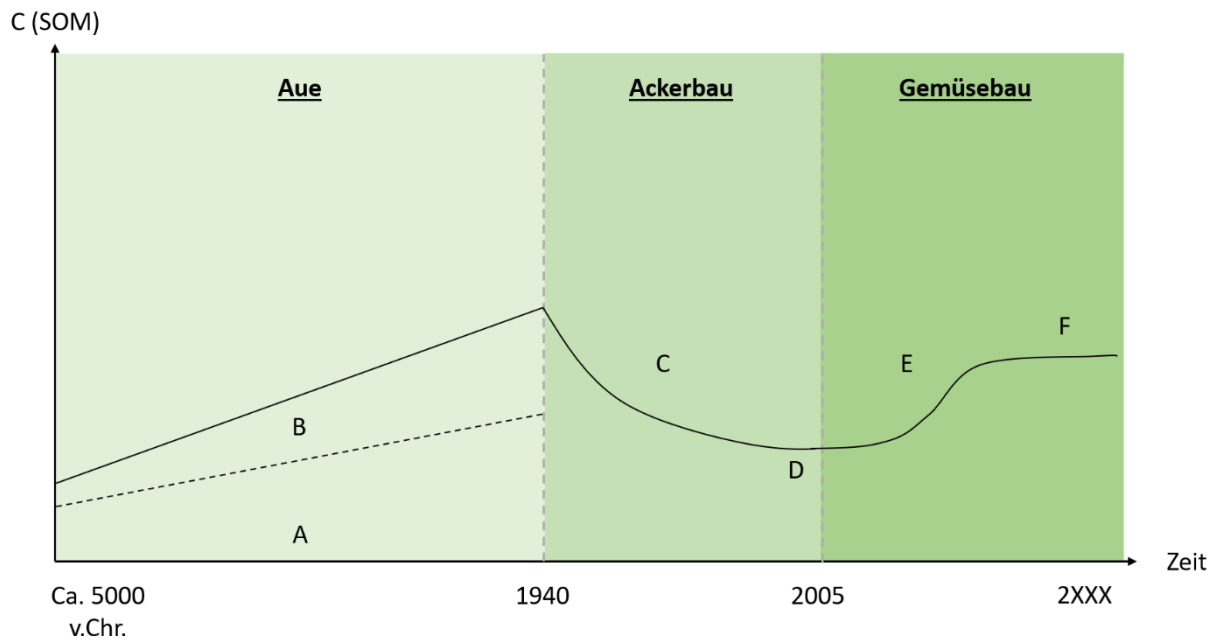


Abbildung 14 Konzeptdarstellung zum zeitlichen Verlauf des SOM Gehaltes in den Böden des NitroGäu-Projektgebietes. Die unterschiedlichen Farben repräsentieren Zeiträume mit unterschiedlichen Nutzungsarten der Flächen. Die Buchstaben (A-F) symbolisieren verschiedene Ereignisse, die zu einer Änderung des SOM Gehaltes führten oder noch führen.

4.1.2. Einstellung eines dynamischen Gleichgewichts

Betrachtet man das Ende der SOC-Kurve im Detail (Abbildung 15), so erkennt man, dass die Linie keineswegs gleichmäßig verläuft. Stattdessen werden saisonale Schwankungen des C-Gehaltes im Boden erkennbar, während die Übersicht die Mittelwerte abbildet. Tritt im Mittel keine Änderung des C-Gehaltes im Boden auf, spricht man von einem dynamischen Gleichgewicht. In diesem Zusammenhang können die Ergebnisse einer Studie von Caruso et al. 2018) genannt werden, die den SOC-Gehalt in einem ökologischen Kontext modellieren. Sie kommen zu dem Ergebnis, dass die Persistenz des Kohlenstoffs im Boden weniger auf chemischer Stabilisation und Rekalzitranz beruht, sondern vielmehr als „direct function oft SOC itself“ gesehen werden kann. Statt einer Betrachtung der verschiedenen C-Pools sollte ihrer Ansicht nach der Fokus auf die Differenzen zwischen Auf- und Abbau der organischen Substanz gelegt werden. Diese werden durch ökologische Faktoren wie Temperatur und die räumliche Verteilung der mikrobiellen Aktivität verursacht. Wie Abbildung 14 zeigt, spielt auch der Faktor Mensch eine entscheidende Rolle: Durch die Änderung der Landnutzung wird ein zuvor etabliertes dynamisches Gleichgewicht zwischen Auf- und Abbau gestört. Im Falle der ersten Landnutzungsänderung um 1940 entstand das Ungleichgewicht durch die erhöhte Mineralisationsrate der trockengelegten Auenstandorte.

Betrachtet man den Wechsel von Acker- zu Gemüsebau, so wurde durch die erhöhte Einbringung an Ernteresten und organischen Düngern zunächst eine Verschiebung zugunsten des Aufbaus an SOM erreicht. Mit der Zeit gleichen sich Auf- und Abbauvorgänge jedoch an. Durch die vielen Einflussfaktoren wird jedoch nie eine vollständig gleiche Ausprägung der beiden Vorgänge erreicht, was zu dem bereits beschriebenen dynamischen Gleichgewicht des SOC-Gehaltes im Boden führt. Dies deckt sich mit den bereits erwähnten Erkenntnissen von Schmidt et al. (2011), die die Persistenz des SOC als Eigenschaft des gesamten Ökosystems identifizieren.

Das langfristige Niveau des dynamischen Gleichgewichtes wird nur zu einem gewissen Anteil durch den absoluten Input an SOM in den Boden definiert. Six et al. (2002) zeigen, dass insbesondere Bodenstruktur und -textur großen Einfluss auf den maximalen Gehalt an C im Boden besitzen. Im Falle der Bodenstruktur sind vor allem die Mikroaggregate relevant, während in Bezug auf die Bodentextur die Anteile der Schluff- und Tonfraktion von Bedeutung sind. Während zur Aggregierung im Rahmen dieser Arbeit keine Aussage getroffen werden kann, zeigen die Analysen in Tabelle 3, dass auf einigen Standorten feinkörnige Bodenarten dominieren. In diesem Zusammenhang kann auch erwähnt werden, dass sich das Projektgebiet am Unterlauf der Dünern befindet, wo sich durch das geringere Gefälle verstärkt feinere Sedimente wiederfinden.

Wie bereits in der Einleitung erläutert, geben Parton et al. (1988) eine Zeitspanne von 150 bis 200 Jahre an, die ein Boden nach der Neukultivierung zum Erreichen eines neuen Gleichgewichtes benötigt. Nach diesen Maßstäben dürften sich auf den erst seit ca. 80 Jahren landwirtschaftlich genutzten Flächen im NitroGäu Projekt noch kein dynamisches Gleichgewicht eingestellt haben. In Anbetracht der bereits außerordentlich hohen C-Vorräte in 0 bis 60 cm (vgl. Tabelle 3), scheint es jedoch unwahrscheinlich, dass langfristig hohe C-Akkumulationen auftreten werden. Allerdings kann dennoch die Annahme getroffen werden, dass der SOM-Gehalt durchaus das dynamische Gleichgewicht erreicht hat, jedoch weiterhin eine Umlagerung des C vom labilen in den intermediären Pool erfolgt und damit ein Humusaufbau im Boden stattfindet.

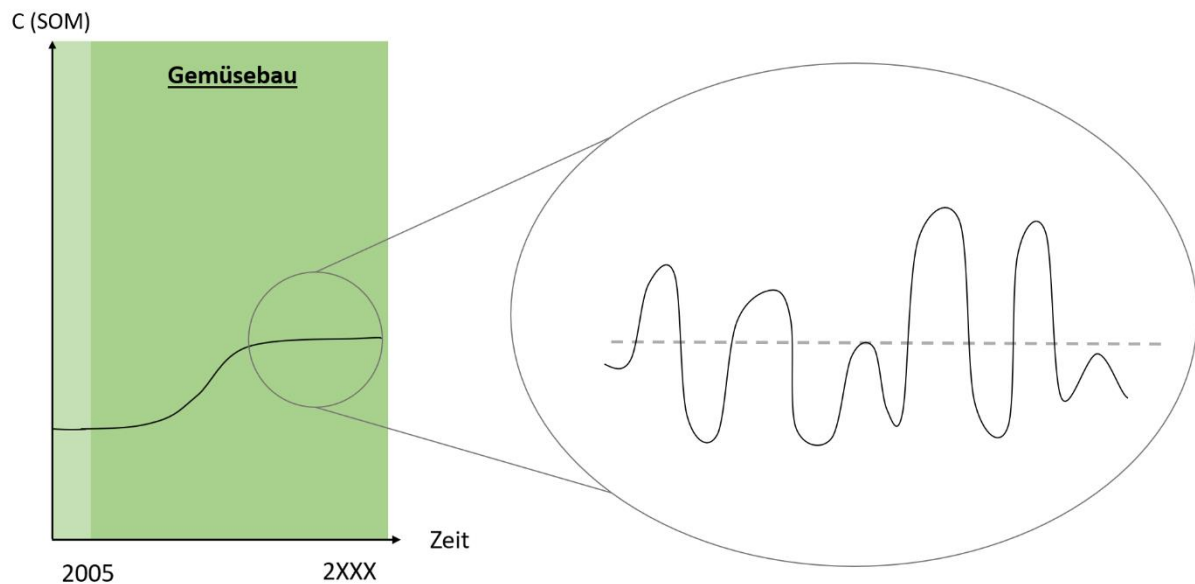


Abbildung 15 Konzeptdarstellung des dynamischen Gleichgewichtes, das sich im Zuge eines Jahrzehnte bis Jahrhunderte andauernden Anbaus von Gemüse auf den Flächen des NitroGäu Projektes einstellen würde. Zu erkennen sind die (jährlichen) Fluktuationen, die im Mittel zu einem konstanten Niveau des SOM Gehaltes führen.

4.1.3. N-Mineralisationsverlauf

Abbildung 16 zeigt einen potenziellen saisonalen Verlauf der N-Mineralisation. Mit der Einarbeitung der Erntereste in den Boden gelangen hohe Mengen N-reichen Substrates in den Boden. Der umgehend einsetzende Abbauprozess in Kombination mit den geringen C/N-Verhältnissen und hohen N-Gehalten in Gemüsekulturen von bis zu 3.8% (Shah et al. 2014) führt zu ebenfalls hohen N-Mineralisationsraten. Cao et al. (2018) geben in ihrer Studie zu Abbauraten von Pak Choi und Romanasalat eine Halbwertszeit von 18 bis 60 Tagen an.

Dies unterstreicht die Zugehörigkeit der Gemüsereste zum labilen C- und N-Pool und stellt den großen Unterschied zum Parton et al. (1987)-Modell der Wald-C-Pools dar, in dem die hohen Anteile an Lignin und Phenolen in der Streu hauptsächlich den langsamen und stabilen Pool speisen. Der hohe Anteil des labilen N führt zudem dazu, dass im Falle des Gemüsebaus statt des C-Pool-Konzepts vielmehr die ökologisch basierten Ansätze von Schmidt et al. (2011) und Caruso et al. (2018) betrachtet werden sollten.

Allerdings existiert auch in den Böden des NitroGäu Projektes ein langsamer Pool, der in Abbildung 16 von der gestrichelten Linie repräsentiert wird.

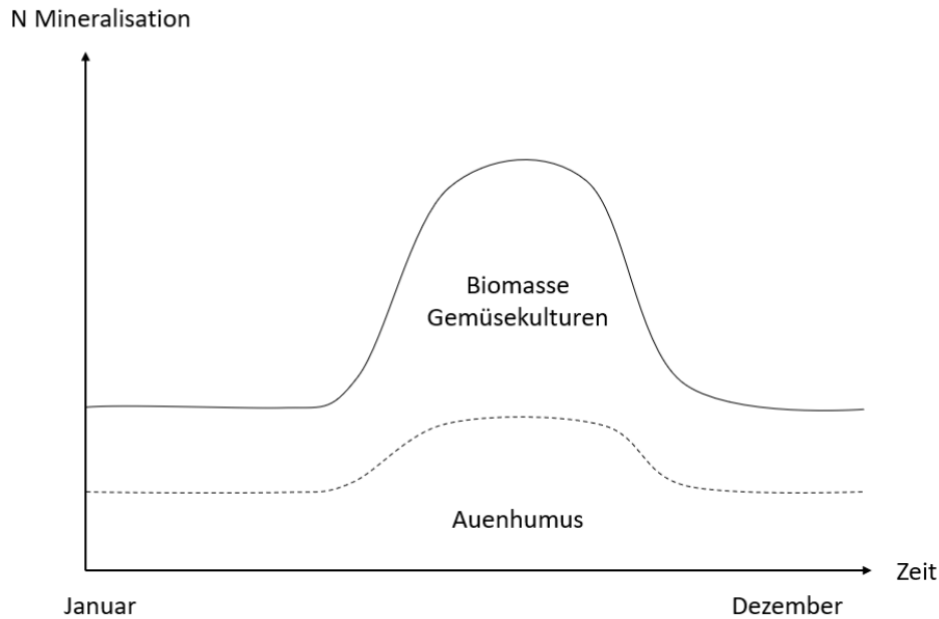


Abbildung 16 Konzeptdarstellung zur N-Mineralisation auf den Flächen des NitroGäu-Projekts. Eine Unterscheidung erfolgt dabei in die Mineralisation aus dem Auenhumus sowie aus der Biomasse der angebauten Gemüsekulturen.

Aus dem humosen Anteil des Auenbodens wird durch die Drainage kontinuierlich N aus der Mineralisation freigesetzt. Durch die bereits erwähnten feine Textur und den damit verbundenen physikalischen Schutz der SOM, kann dieser C dem langsamen Pool zugerechnet werden. Der Anstieg der Mineralisation aus dem Auenhumus kann zum größten Teil erhöhter mikrobieller Aktivität durch optimale Temperatur und Feuchtigkeitsgehalte im Sommer zugerechnet werden. Zusätzlich erfolgt ein Priming-Effekt durch die hohen labilen N-Gehalte in den Ernteresten der Gemüsekulturen sowie der N-Düngung.

Die Kultivierung von Gemüse birgt demnach die Gefahr potenziell hoher N-Auswaschungen, insbesondere nach der letzten Kultur im Herbst ohne folgende Zwischenfrucht, wenn hohe Niederschläge auf den Boden fallen, versickern und den N aus den mineralisierten Ernteresten ins Grundwasser befördern. Trotz des Aufbaus eines überwiegend labilen C-Pools im Gemüsebau zeigt das Konzeptmodell in Abbildung 14, dass der Humusgehalt im Boden erhöht wird und damit eine Steigerung des Ertragspotentials sowie der Ertragssicherheit erzielt werden kann. Dies gilt allerdings nur, wenn der C für den Humusaufbau aus den Ernteresten stammt. Erfolgt der Humusaufbau hauptsächlich aus Kompost oder anderen organischen Düngern, so wurde dieser C anderen Systemen entzogen und dementsprechend nur umverteilt.

Es ist zudem fraglich, SOM bzw. SOC im Boden mit Humus gleichzusetzen, wie zum Beispiel in Amelung et al. (2018) oder Bamminger et al. (2021). Letztere nennen neben einer vielfältigen Fruchtfolge und dem Anbau von Zwischenfrüchten auch eine Steigerung des Eintrags von Ernteresten, sowie die Ausbringung organischer Dünger als geeignete Maßnahmen zur Steigerung des Humusgehaltes. So könnte bei dieser Definition auch der Gemüseanbau im Tal der Dünern als positiv bewertet werden, da im Vergleich zum Ackerbau größere Mengen an SOM in den Boden eingebracht werden und damit der organische C-Gehalt erhöht wird. Allerdings darf dies nicht mit einer C-Sequestrierung gleichgesetzt werden, da dieser labile-C rasch wieder verschwindet, sobald sich die Nutzung ändert und die Zufuhr an SOM verringert wird. Wird dagegen Humus im Boden aufgebaut, so stellt dies einen längerfristigen Aufbau an SOC dar, da dieser gegen Abbau geschützter ist. Statt einer zusammenfassenden Darstellung dieser beiden Begriffe sollte vielmehr eine Unterscheidung in Bodenfruchtbarkeit verbessernde Maßnahmen, sowie in Maßnahmen zur langfristigen Bindung von C im Boden erfolgen. Während erstere den gesamten organischen C im Boden umfassen und sich hauptsächlich auf den Gesamteintrag an organischer Substanz beziehen, ist die C-Sequestrierung an den Humusgehalt und damit an die speziellen Eigenschaften des vorliegenden Ökosystems gebunden.

4.1.4. Abschätzung N-Mineralisation

Neben dem Konzept zur N-Nachlieferung im Gäu sind für die landwirtschaftliche Praxis insbesondere die absoluten Werte von Bedeutung. Die berechneten N-Mineralisationen für das Jahr 2018 (vgl. Tabelle 5) der drei ausgewählten Standorte können mithilfe der Ergebnisse der Bodenuntersuchungen (vgl. Tabelle 3)

Tabelle 20 Darstellung der absoluten N-Mineralisation für das Jahr 2018, sowie der erhobenen N-Vorräte im Jahr 2020 der drei ausgewählten Flächen Dich Unten, Rickenbach 1 und 2. Spalte 4 und 5 zeigen die relative Mineralisation im Vergleich zum N-Vorrat, sowie das Verhältnis von Mineralisation zu aufgebrauchter Düngemenge.

Standort	Mineralisation	N-Vorräte 0-60cm [kg/ha]	Relative Mineralisation [%]	Mineralisation / Düngung
Dich Unten	217	18500	1.173	2.067
Rickenbach 1	133	18900	0.704	0.704
Rickenbach 2	318	20100	1.582	5.889

Die berechneten prozentualen Mineralisationen liegen zwischen 0.7 bis 1.6 % und daher innerhalb des angegebenen Bereiches 0.2 bis 2 % von Amelung et al. (2018). Um auf das Ausmaß der N-

Freisetzungen aufmerksam zu machen, ist auch der Anteil der Mineralisation an der jährlichen Düngung als interessante Größe zu nennen. Tabelle 20 zeigt, dass diese Quotienten deutlich größere Differenzen zwischen den Standorten aufweisen als die absolute und relative Mineralisation. Während auf Rickenbach 1 nur knapp die Hälfte der Düngermenge auch als N aus dem Boden freigesetzt wird, übersteigt die N-Freisetzung auf Rickenbach 2 die Düngung fast um das 6-fache. Dies kann hauptsächlich dadurch erklärt werden, dass auf Rickenbach 2 zum einen nur 1/3 der Düngermenge im Vergleich mit Rickenbach 1 verwendet wurde und zum anderen höhere Mengen an Ernteresten auf dem Feld verblieben.

Diese Beispiele machen deutlich, dass a) eine Pauschalisierung der Mineralisation über verschiedene Standorte hinweg nur eine ungenaue Schätzung der Realität liefert und b) die angebaute Kultur durch individuelle Düngung und Mengen an Ernteresten mitberücksichtigt werden sollte. In Bezug auf den Einfluss der angebauten Kulturen stellen Rahn 2012) fest, dass insbesondere nach dem Anbau von Brokkoli hohe $N_{\min}$ -Werte im Boden gemessen werden können. Dies führt er auf eine hohe Menge an Ernteresten zurück, die auf dem Feld verbleiben. Im Gegensatz dazu finden sich geringere $N_{\min}$ -Werte nach Kohl aufgrund geringer Erntereste und nach Blumenkohl. Bei letzterem war dies durch eine reduzierte N-Düngung in der zuvor angebauten Kultur bedingt. Vergleicht man diese Ergebnisse mit Daten aus dem NitroGäu-Projekt, so können die niedrigen $N_{\min}$ -Werte nach Kohl bestätigt werden, die im November 2019 zwischen ca. 30 und 60 kg N/ha lagen. Allerdings wurden im September desselben Jahres auf einer anderen Fläche nach Anbau von Blumenkohl sehr hohe Werte von bis zu 180 kg N/ha gemessen. Auf Grund der hohen Menge an Ernteresten von 600 bis 1000 dt/ha ist diese Zahl aber durchaus plausibel und wird auch durch Messungen von Neve und Hofman (1996) gestützt. Sie geben eine N-Mineralisation von 136 kg N/ha bei Einarbeitung von Blumenkohlresten in den Boden an. Für den Brokkoli lassen sich keine Vergleiche zum NitroGäu-Projekt ziehen, da dieser nur im Jahr 2018 angebaut wurde und dort nur eine einmalige $N_{\min}$ -Probennahme zu Vegetationsbeginn vorliegt. Beim Vergleich mit einer Kohlkultur desselben Jahres auf einer anderen Fläche zeigt sich allerdings, dass die N-Gehalte in kg N/ha im Ernterest bei Brokkolikulturen mit einem Wert von 110 kg N/ha niedriger als die des Kohls mit 161 kg N/ha lagen. Um verlässlichere Aussagen für die zu erwartenden N-Gehalte im Boden nach dem Anbau einer bestimmten Kultur zu erhalten, sollten daher im weiteren Verlauf des Projektes eine intensive Messung und eingehende Betrachtung der $N_{\min}$ -Gehalte erfolgen.

Da die Messung von $N_{\min}$ -Gehalten nur teilweise Aufschluss zur freigesetzten N-Menge aus den Ernteresten der angebauten Kultur liefert, sind in diesem Zusammenhang auch weitere Ergebnisse von Neve und Hofman (1998) von Interesse. Neben der absoluten N-Mineralisation bestimmen

diese auch die relative Freisetzung des N aus den Kulturen in %. Die höchsten relativen Freisetzungsraten finden sich mit 73 % in Salat- sowie mit 60 % in Blumenkohlblättern, während Stielteile von Brokkoli und Weißkohl mit 45 % und 19 % die niedrigsten Werte aufweisen. Eine Begründung hierfür liefert die physiologische Zusammensetzung der einzelnen Pflanzenteile, da Stielteile im Laufe der Wachstumsperiode teilweise verholzen wodurch sich das C/N-Verhältnis erhöht (Neve und Hofman 1998) und die Abbaurate durch die Mikroorganismen sinkt. Diese Ergebnisse verdeutlichen, dass durch die Einarbeitung von vollständigen Pflanzen, beispielsweise auf Grund von Krankheitsbefall oder zu geringer Nachfrage am Markt, nicht nur höhere N-Mengen in den Boden gelangen, sondern auch relativ gesehen mehr N aus den Resten freigesetzt wird.

Allerdings kann aus diesen Beobachtungen nicht die Schlussfolgerung gezogen werden, dass zur Verminderung der Nitratkonzentrationen die N-Düngung unterlassen werden sollte. Denn obwohl die Gesamt-N-Mineralisation in manchen Fällen den Bedarf der Pflanzen decken würde, so liegt die Problematik in der Asynchronität von N-Freisetzung und N-Nutzung durch die Pflanze. Crews und Peoples (2005) betonen in diesem Zusammenhang den Unterschied zwischen „excess-asynchrony“ and „insufficient-asynchrony“. Letzteres liegt dann vor, wenn die Mineralisation zu gering ist, um den Pflanzenbedarf zu decken. Ohne eine zusätzliche mineralische oder organische Düngung kann es so zu quantitativen oder qualitativen Einbußen für die Landwirte kommen. Da die im Zuge der N-Mineralisation verwendeten $N_{\min}$ -Werte jedoch im Frühjahr kurz vor der Pflanzung der Kultur genommen wurden, können diese direkt auf die eigentliche Düngermenge angerechnet werden. Dabei muss allerdings beachtet werden, dass junge Gemüsepflanzen nur ein geringes Wurzelwerk besitzen und daher nur der mineralische N in den ersten 15 cm angerechnet werden sollte. Eine weitere Besonderheit im Gemüsebau diskutieren (Händel und Wehrmann 1986), die auf den Umstand aufmerksam machen, dass beispielsweise Spinat nur dann seinen maximalen Ertrag erreicht, wenn der Boden mehr als 100 kg N/ha enthält. Da Spinatpflanzen N bis kurz vor der Ernte aufnehmen, ist eine andauernde hohe N-Versorgung essenziell. Dieses Beispiel verdeutlicht erneut die Schwierigkeiten zur Reduktion der aufgewendeten Düngermenge, da die Qualität im Gemüsebau entscheidend für die Wirtschaftlichkeit eines Betriebes ist. Dennoch hält Rahn 2012) fest, dass „Measuring [$N_{\min}$] especially in spring [is] crucial to reduce fertilizer without loss of quantity or quality“, wobei er zudem darauf verweist, dass dies vor jeder Kultur auch innerhalb einer Vegetationszeit erfolgen sollte.

Ökologisch relevanter ist die „excess“-Asynchronität, da in diesem Fall mehr N freigesetzt wird als die Pflanzen aufnehmen können. Praktisch gesehen tritt dies im Gemüsebau dann auf, wenn die Erntereste in den Boden eingearbeitet werden: Durch die hohen N-Gehalte im Pflanzenmaterial

wird ein Großteil des N nicht in die mikrobielle Biomasse eingebaut, sondern in den Bodenpool freigesetzt, wo der N akkumulieren kann. Wenn die Pflanzung der nachfolgenden Kultur nicht direkt erfolgt, ist dieser freie N stark verlustgefährdet. Neve und Hofman (1996) weisen in diesem Zusammenhang darauf hin, dass zum einen auch bei niedrigen gemessenen Herbst-N_{min}-Gehalten hohe N-Verluste über die vegetationsfreie Zeit auftreten können, wenn die Erntereste der letzten Kultur in den Boden eingearbeitet werden. Zusätzlich kann auch eine N-Mineralisation aus der vorhandenen SOM im Boden zu hohen N-Verlusten führen und zwar vor allem dann, wenn das Feld über einen längeren Zeitraum brach liegt. Dies kann bei einer zu langen Pause im Anbau vor allem im Sommer in niederschlagsreichen Gebieten problematisch werden, da dort durch die höheren Temperaturen auch die Mikroorganismen aktiver sind und die Abbaurate und damit die N-Freisetzung ansteigt.

4.2. Zero-Inflation-Modelle

Heutzutage bieten sich dem Anwender zahlreiche Möglichkeiten Datensätze mit einer hohen Anzahl an Nullwerten zu analysieren (Min und Agresti 2002; Neelon et al. 2016). Vor allem in Zähldaten kann so das Problem der Überdispersion vermieden und die Robustheit der Analysen gestärkt werden (Martin et al. 2005). Es finden sich allerdings auch Beispiele für die in dieser Arbeit vorgestellten Analyse semikontinuierlicher Daten sowohl mit dem Two-Part-, als auch dem Tweedie-Modell.

So beschreiben Liu et al. (2019) die Modellierung von Kosten für medizinische Versorgung mit Hilfe eines Two-Part-Modells in NLMIXED, dass eine logistische Regression für die Nullwerte und eine generalisierte Gammaregression für die positiven Werte zugrunde legt. Sie betonen auch die Wichtigkeit der Implementierung von zufälligen Effekten als sensitives Instrument zur Modellierung der Korrelation zwischen den beiden Phasen. Auch Blozis et al. (2020) nutzen die NLMIXED Prozedur zur Anpassung eines Two-Part-Modells im Rahmen der Analyse von Zeitaufwendungsmessungen, erhöhen allerdings die Komplexität mit der Einführung eines dritten zufälligen Effekts zur Erfassung von Messwiederholungen.

Kurz (2017) vergleicht in seinem Paper verschiedene Modelle zur Auswertung von anfallenden Kosten im Gesundheitswesen. Dabei stellt er fest, dass Tweedie-Modelle vor allem dann gut die anderen Modelle übertreffen, wenn zum einen eine hohe Korrelation zwischen Nutzern und Nicht-Nutzern vorliegt und zum anderen, wenn die Anzahl an Nullwerten vergleichsweise gering ist. Umgekehrt ist das zweistufige Modell die bessere Wahl bei niedrigen Korrelationen und höheren Anteilen von auftretenden Nullwerten. Wie bereits erwähnt, präsentiert Klinker (2011) in seinem

Paper eine Möglichkeit, in GLIMMIX über die Definition einer Varianzfunktion ein gemischtes Tweedie-Modell anzupassen. Allerdings finden sich in seinem Modell ausschließlich die Anpassung von drei Haupteffekten, sowie neben dem `_RESIDUAL_`-Effekt nur ein weiterer zufälliger Effekt. Im Gegensatz zu dem für die Nitratauswaschung benötigten Modell liegt demnach eine geringere Komplexität vor, da die 2- und 3-fach-Interaktionen sowie ein möglicher weiterer zufälliger Effekt fehlen.

Das Ziel der Arbeit bestand in einer vergleichenden Analyse des Two-Part- und des Tweedie-Modells, mit speziellem Fokus auf der Flexibilität des Modelles gegenüber verschiedenen Datensätzen mit und ohne Nullwerten. Des Weiteren wurde im Kontext der praktischen Implementierung auch die Komplexität des Modells in die Beurteilung miteinbezogen.

4.2.1. Two-Part-Modell: Probleme und Lösungsversuche

Bei der sukzessiven Anpassung des Two-Part-Modells an die Nitratauswaschungsdaten im Main-Tauber-Projekt ist deutlich erkennbar, dass vor allem die Einführung eines zweiten zufälligen Effektes zu Problemen in der Modellkonvergenz führt. Die von SAS ausgegeben Fehlermeldung *„QUNEW cannot be completed“* ist laut Kiernan et al. (2012) ein häufig anzutreffendes Problem bei der Arbeit mit NLMIXED, das zudem nicht mit einer Einheitsmethode, sondern modellspezifisch gelöst werden muss. Allerdings konnte mit keinem von ihnen vorgeschlagenen Lösungsansätzen wie:

- Korrekte Anwendung der ‚Subject‘-Anweisung
- Überprüfung auf Rechtschreibfehler und Doppelnutzung von Parameternamen
- Angabe von geeigneten Startwerten in der ‚Parms‘-Anweisung
- Behebung von möglichen Skalierungsproblemen

eine Modellkonvergenz erreicht werden. Da die Fehlermeldung bei den ersten 3 Anpassungen jedoch erst mit der Einführung des zweiten zufälligen Effektes auftrat, liegt das Problem vermutlich in den Startwerten für die Kovarianz *sb12*. Zwar wurde für diesen Parameter vorsorglich mehrere mögliche Startwerte angegeben, doch wenn diese weiterhin zu weit entfernt vom wahren Wert liegen, kann das Modell dennoch nicht konvergieren. Durch die teilweise sehr langen Rechenzeiten konnte auch nicht durch simples Ausprobieren ein passender Wert für die Kovarianz ermittelt werden.

Die vollständig ausbleibende Modellkonvergenz mit der Einführung der 3-fach-Interaktion könnte ein Indiz dafür sein, dass das Modell keine korrekte Anpassung an die Daten aufweist, oder

möglicherweise überparametrisiert wurde. Allerdings wurde die Anpassung des Modells, getrennt für die beiden Phasen, zuvor in GLIMMIX durchgeführt, um die Startwerte zu erhalten. Da dort keine Fehlermeldungen auftraten, könnte die Limitierung auch durch die Zusammenführung der beiden LLs in der ‚Model‘-Anweisung gegeben sein. Die Betrachtung der AIC-Werte aus **Tabelle 8** zeigt deutlich, dass die Modellgüte durch die Einführung eines zufälligen Effekts verbessert werden kann und daher ein GLMM vorzuziehen ist. Daher stellt sich nun noch die Frage, ob der Feld*Profil-Effekt ausreichend ist, oder ob der zweite zufällige Effekt mit Feld*Profil*SIA ebenfalls aufgenommen werden sollte. Die Varianzschätzung von 0 sowie die auftretende Warnung der nicht positiv definiten G-Matrix für die 1. Phase zeigen, dass dort die Anpassung des Feld*Profil-Effekts genügt. Dies begründet sich darin, dass dort mit der Dummy-Variable ‚ispositive‘ nur Nullen und Einsen modelliert werden. Demgegenüber bieten die quantitativen Nitratwerte in der 2. Phase einen höheren Informationsgehalt, wodurch auch eine Varianzschätzung des Feld*Profil*SIA-Effekts erfolgen kann. Dessen Varianzschätzung ist aber in etwa um den Faktor 3 kleiner als die des Feld*Profil-Effekts. Praktisch gesehen bedeutet dies, dass durch die Hinzunahme eines neuen Profils pro Feld ein höherer Informationsgewinn erfolgt, als durch den Einbau eines zusätzlichen SIA innerhalb eines Profils. Allerdings muss dieses Wissen immer vor dem Hintergrund der Praktikabilität betrachtet werden, da der Aufwand zur Anlegung eines neuen Profils den des Einbaus eines zusätzlichen SIA um ein Vielfaches übersteigt. Nichtsdestotrotz zeigen die Varianzschätzungen, dass die einzelnen SIA innerhalb eines Profils hochkorreliert sind und daher nicht als unabhängige Messungen betrachtet werden sollten.

Der Residual-Effekt der 2. Phase repräsentiert den Skalenparameter der Gammaverteilung. Wie in 1.4. erwähnt, wird dieser auf der Skala der beobachteten Werte berechnet, während die Schätzungen der anderen Effekte auf der des linearen Prädiktors des GLMM basieren. Um den Residual-Effekt interpretieren zu können, müsste man demnach die Link-Funktion miteinbeziehen. Allerdings hätte das den Rahmen dieser Arbeit überschritten und wurde daher nicht weiter verfolgt.

In Bezug auf die korrekte Aufstellung des Modells lässt sich anhand der AIC-Werte ableiten, dass die Implementierung des Feld*Profil-Effekts genügt und der Feld*Profil*SIA-Effekt keine Modellverbesserung bewirkt.

4.2.2. Tweedie-Modell: Probleme und Lösungsversuche

Kongruent zum Two-Part-Modell erweist sich auch beim Tweedie-Modell zum einen die Anpassung mehrerer zufälliger Effekte, sowie die Einführung einer komplexeren 3-fach-Interaktion als problematisch.

Die bei der Einführung des zweiten zufälligen Effekts SIA*Feld*Profil im T2-Modell auftretende Warnung *„Estimated G matrix is not positive definite“*, sollte laut Kiernan (2018) auf keinen Fall missachtet werden, da ansonsten Fehlinterpretationen beim Vergleich verschiedener Modellläufe getroffen werden können. Als Gründe für eine nicht positive G-Matrix führt er folgende Punkte an:

- Eine fehlerhafte Modellbeschreibung, die durch eine Änderung des Modelles oder die Wahl einer anderen Kovarianzstruktur behoben werden kann
- Eine zu geringe verbleibende Variation für den (zusätzlich) eingeführten zufälligen Effekt

Führt man sich erneut Tabelle 8 und Tabelle 9 vor Augen, so konnte dort gezeigt werden, dass sich im Falle des Two-Part-Modells mit der Einführung des zufälligen Effekts Feld*Profil*SIA keine Verbesserung der AIC-Werte erreicht wurde. Dies könnte einen Hinweis darauf geben, dass dieser Effekt zu wenig Variation beschreibt und die G-Matrix daher nicht positiv definit ist. Daraus lässt sich die Schlussfolgerung ziehen, dass es genügt, nur den zufälligen Effekt Feld*Profil sowie den _RESIDUAL_-Effekt in das Modell aufzunehmen. Schwieriger erweist sich die Lösung des auftretenden *„did not converge“*-Problems mit der Einführung des zufälligen Effekts im T3-Modell. Truxillo (2016) stellt im Rahmen ihres Buches „Statistical Analysis with the GLIMMIX Procedure Course Notes“ eine Reihe von Ursachen für das Auftreten von Konvergenzproblemen:

- Skalierungsprobleme
- Fehlerhafte Modellanpassung
- Überparametrisierung im Modell
- Nicht angepasste Startwerte
- Nicht angepasste Optimierungsalgorithmen
- Probleme bei der Parametrisierung

Doch auch mit der Anwendung der von ihr vorgeschlagenen Lösungsansätze konnte keine Modellkonvergenz erreicht werden. Möglicherweise liegt das Problem daher in der zu hohen Komplexität des Modells durch die Kombination von zufälligen Effekten und der 3-fach-Interaktion Feld*Saison*Jahr.

Die Betrachtung der Varianzschätzungen der zufälligen Effekte in Tabelle 12 zeigt, dass auch im Falle des Tweedie-Modells die Feld*Profil*SIA-Varianz den Wert 0 annimmt. Theoretisch müssten daher die Varianzschätzungen für Feld*Profil und Residual in beiden Tabellenspalten die gleichen Werte annehmen. Die Abweichungen lassen sich darauf zurückführen, dass die Komplexität des Modelles durch die Hinzunahme des zweiten zufälligen Effekts steigt und in SAS keine vollständige

Konvergenz erreicht wird. Dieses Problem ist für die Ergebnisse der Arbeit jedoch nicht weiter relevant und wurde daher nicht weiterverfolgt, da bereits zuvor die Schlussfolgerung getroffen wurde, dass der zweite zufällige Effekt nicht benötigt wird. Wie auch im Falle der 2. Phase des Two-Part-Modells, entspricht der Residual-Effekt erneut einem Skalenparameter und kann daher nicht direkt als Restfehler interpretiert werden.

4.2.3. Zusammenfassende Diskussion beider Modelle

Vergleicht man die Modellierungsversuche der Two-Part- und Tweedie-Modelle, so lässt sich erkennen, dass sich bei beiden gleichermaßen die Einführung der 3-fach-Interaktion $\text{Feld} \times \text{Saison} \times \text{Jahr}$ als problematisch erweist. Zudem konnte mit dem Two-Part-Modell auch keine Anpassung des zufälligen Effekts $\text{Feld} \times \text{Profil}$ getrennt für beide Phasen erreicht werden. Dahingegen führten zumindest alle geprüften Ausprägungen des T2-Modells zu einer erfolgreichen Konvergenz. Da die AIC-Werte auch die Schlussfolgerung zulassen, dass der zweite zufällige Effekt $\text{Feld} \times \text{Profil} \times \text{SIA}$ nicht benötigt wird, ist die bei diesem Modell auftretende Warnung zur nicht positiven G-Matrix nicht weiter relevant. Wenn das Ziel des Modells darin besteht, die besten Schätzer für Mittelwerte und Varianzen für die Nitratauswaschungen zu generieren, bieten beide Modelle die gleichen Rahmenbedingungen und das weniger komplexe Tweedie-Modell ist vorzuziehen. So kann in GLIMMIX durch die ‚Class‘-Anweisung auch entsprechend einfacher das Modell um eine zusätzliche Variable erweitert werden und es ist keine aufwendige Dummy-Codierung wie im Falle des Two-Part-Modells notwendig. Im Hinblick auf andere Projekte in niederschlagsreicheren Gebieten wie beispielsweise im NitroGäu-Projekt, lässt sich die Tweedie-Verteilung laut Tweedie (1947; 1984) auch auf Daten ohne Zero-Inflation-Problem anwenden. Tentativ wurden daher die zuvor erläuterten Schritte der Modellanpassung auf die NitroGäu-Daten angewandt, die keine Nullwerte besitzen. Die Ergebnisse zeigen, dass für das GLM sowie das GLMM mit einem zufälligen Effekt Konvergenzen erzielt werden können.

Dennoch bleiben beim Tweedie-Modell neben den Konvergenzproblemen bei der Anpassung des 3-fach-Effekts weitere Fragen offen: So wurde in dieser Arbeit für die Anpassung des GLMM in GLIMMIX mit dem Wert für den Power-Parameter p des GLM aus GENMOD gearbeitet. Da die Varianzfunktion aber entscheidend für die Mittelwert- und Varianzschätzungen ist, scheint es für zukünftige Einsätze des Modelles sinnvoll, eine exaktere Methode zur Schätzung von p zu verwenden. Dafür kann die bereits erwähnte Methode von Peel et al. (2013) zur Betrachtung der Mittelwert-Varianz-Zusammenhänge genutzt werden und der so erhaltene Wert für p mit jenem aus GENMOD verglichen werden. Um die Bedeutung des Power-Parameters quantitativ zu erfassen, kann dieser in einem weiteren Schritt um beispielsweise 5 % erhöht oder erniedrigt

werden, um zu überprüfen, inwiefern sich dadurch die Mittelwert- und Varianzschätzungen der Daten verändern.

Trotz der fehlgeschlagenen Anpassung der 3-fach-Interaktion lohnt sich für zukünftige Auswertungen von Nitratauswaschungsmessungen eine intensivere Beschäftigung mit dem Tweedie-Modell. Zwar könnten mit dem Two-Part-Modell deutlich mehr wissenschaftliche Fragestellungen beantwortet werden, doch dessen Komplexität und der damit verbundene zeitliche Aufwand scheinen angesichts der häufig ausbleibenden Modellkonvergenz nicht lohnend.

4.3. Unsicherheiten in den Einzelparametern sowie in den N-Effizienz-Indikatoren

Neben dem Aspekt der reinen Forschung zu Nitratauswaschung senkenden Düngemaßnahmen besitzt das NitroGäu-Projekt auch politisch und gesellschaftlich motivierte Ziele. Daher ist es wichtig, neben der umweltbedingten Variabilität auch die Unsicherheiten bei der Datenerhebung zu quantifizieren, um die Aussagekraft der N-Effizienz-Indikatoren bezogenen Mittelwertschätzungen besser einordnen zu können.

4.3.1. Einzelparameter

Berechnet man den Mittelwert des CV-Werts der Einzelparameter über die Tabelle 13, Tabelle 14 und Tabelle 15, so findet sich der durchschnittlich höchste Wert mit 0.371 in dt/ha, gefolgt von der Frischmasse (FM) mit 0.3215. Mit einem durchschnittlichen CV-Wert von 0.1099 weist der N-Gehalt (N) die niedrigste Unsicherheit auf. Dieser, sowie der ebenfalls niedrige CV-Wert des Trockensubstanzgehaltes (TS) mit 0.1368 lassen sich damit erklären, dass beide Werte im Labor erfasst wurden. Laut Bischoff (2021b) kann eine Labormethode als quantitativ betrachtet werden, wenn deren Fehler maximal 10 % beträgt. Dieser Fehler bezieht sich allerdings auf den Fall, dass eine einzelne Probe mehrfach hintereinander gemessen wird. Da die Einzelproben der TS- und N-Gehalte des NitroGäu-Projekts aber unabhängige Stichproben darstellen, die jeweils nur ein einziges Mal gemessen wurden, beinhalten die CV-Werte auch einen Feldfehler und ein Fehler von 20 % kann noch als akzeptabel gewertet werden. Die Fehler von etwa 11 % und 14 % für N- und TS-Gehalt, liegen demnach im Rahmen der zulässigen Fehlertoleranz und es ist keine Optimierung notwendig.

Auch die durchschnittlichen Unsicherheiten von 25 bis 30 % in den Werten der Frischmasse, des Kopfgewichtes sowie des Ertrages bzw. der Erntereste pro Hektar lassen sich über die natürliche Variabilität erklären. In Bezug auf die Frischmasse rühren die hohen Unsicherheiten daher, dass

teilweise ganze Pflanzen in die Erntereste einfließen und damit im Erntegut fehlen, wenn beispielsweise Krankheit oder Fäulnis die Pflanze nicht vermarktbar machen. Dort spielt demnach zusätzlich die Marktfähigkeit eine entscheidende Rolle und lässt die Variabilität ansteigen. Im Falle des Kopfgewichtes bedeutet eine Unsicherheit von 25 % praktisch gesehen, dass manche Pflanzen ein Viertel schwerer und andere um ein Viertel leichter sind als der Durchschnitt. Dies ist plausibel und so auch praktisch im Feld zu beobachten.

Bedeutend sind dabei auch die Ergebnisse bei einer Zusammenfassung aller Salatkulturen (vgl. Tabelle 15), die teilweise höhere CVs aufweisen als die Mittelung der einzelnen Sätze in beiden Jahren. Dies verdeutlicht zum einen, dass selbst innerhalb der Salate große Sortenunterschiede bestehen und zum anderen, dass auch die jahresbedingte Variabilität eine große Rolle einnimmt.

4.3.2. N-Effizienz-Indikatoren

Wie die Einzelparameter zeigen auch die N-Effizienz-Indikatoren große Unterschiede im CV (vgl. Tabelle 16). Während die Fehler bei N3 und N4 im einstelligen bzw. unteren zweistelligen %-Bereich und damit in einem tolerablen Bereich liegen, sind insbesondere die Werte von N2 als kritisch zu betrachten. Bei Unsicherheiten von über 100 % bietet eine alleinige Betrachtung des Mittelwertes nahezu keine Aussagekraft und kann daher auch nicht als Referenz zur Einführung praktischer Maßnahmen genutzt werden. Allerdings muss in diesem Zusammenhang erwähnt werden, dass diese hohen Werte der Kontrolle im Jahr 2018 und der Salatkulturen auf die beiden Sätze 12 und 42 zurückzuführen sind, die besonders hohe CV aufweisen. Die Unsicherheiten der anderen Sätze lassen sich mit jenen aus dem Jahr 2019 vergleichen. Nichtsdestotrotz finden sich mit CV von teilweise über 0.5 auch bei N1 hohe Unsicherheiten, die verlässliche Aussagen erschweren und daher nicht ignoriert werden sollten.

Weiterhin zeigt Tabelle 16 nochmals eindrücklich die bereits festgestellte positive Wirkung der Maßnahme im Vergleich zur Kontrolle. Zum einen weisen die Mittelwerte auf eine effizientere N-Nutzung sowie einen geringeren auswaschungsgefährdeten $N_{\min}$ -Restgehalt hin und zum anderen nimmt auch der CV durchschnittlich die geringsten Werte an. Mit der Maßnahmenimplementierung kann demnach die Unsicherheit in den N-Effizienz-Indikatoren verringert werden, was eine bessere Bewertung von Fortschritten im Ziel der N-Reduktion ermöglicht.

Insbesondere im Hinblick auf das langfristige Ziel zur Einhaltung des in der Einleitung erwähnten Critical-N ist ein möglichst geringer Fehler entscheidend. Bei den aktuellen hohen Mittelwerten von N4, die das in der Einleitung erwähnte Critical Limit des Stickstoffs entscheidend beeinflussen, fällt ein Fehler von 10 % oder gar 20 % nicht weiter ins Gewicht. Je näher man dem langfristigen

Ziel einer maximalen N-Fracht von 30 kg/ha kommt, desto größer wird die praktische Relevanz der Fehler, da dann selbst Unsicherheiten im einstelligen kg N/ha Bereich bedeutsam werden können.

4.4. Fehlerfortpflanzung

Das Ziel der Fehlerfortpflanzungsberechnungen mit der Delta-Methode bestand darin, die Hauptquellen der Unsicherheit ausfindig zu machen und so ein besseres Verständnis dafür zu bekommen, wie die Datenerfassung verbessert werden könnte. In Bezug auf die Frage, ob man die Datenerhebung an abhängigen oder unabhängigen Stichproben durchführen sollte, hat sich für N1 gezeigt, dass die Gesamtvarianz der Bilanz unter der Annahme nicht vorhandener Korrelationen um ca. 7 % verringert wird (vgl. Tabelle 17). Praktisch gesehen würde dies bedeuten, dass man die Unsicherheit der Messung um etwa 0.5 kg N/ha verbessern könnte. Um dies zu realisieren, würden pro Kombination aus Feld*Massnahme dann nicht mehr nur 1 Plot, sondern 4 Plots benötigt werden – je einer zur Erfassung der Marktfähigkeit, des Kopfgewichts sowie der TS- und N-Gehalte. Da dies auch in etwa den vierfachen Arbeitsaufwand impliziert, steht die geringe Reduktion der Unsicherheit in keinem praktikablen Verhältnis zum benötigten Mehraufwand. Die bisherige Datenerfassung an abhängigen Stichproben ist demnach keine Quelle hoher Unsicherheiten und muss nicht in Frage gestellt werden. Die Abweichung zu den berechneten Varianzen lässt sich zum einen damit erklären, dass die Fehlerfortpflanzungsberechnungen auf Basis der Delta-Methode nur eine Approximation darstellen und daher die wahren Messungen nicht zu 100 % abbilden können. Verstärkt wird dieser Effekt durch die bereits erwähnte Nullsetzung der Pflanzdichtenvarianz im multivariaten Modell zur Aufstellung der Varianz-Kovarianz-Matrizen. Im Gegensatz dazu beinhalten die berechneten Varianzen die teilweise auftretenden Schwankungen in der erhobenen Pflanzdichte.

Im Folgenden wurde im Rahmen der Arbeit der Fokus auf die Unsicherheiten gelegt, die durch die Varianzen jedes einzelnen erhobenen Parameters entstehen. In Anlehnung an die berechneten Variationskoeffizienten kann auch dort beobachtet werden, dass ein Nullsetzen der Varianzen von TS- und N-Gehalten den geringsten Einfluss auf die Gesamtvarianz besitzt. Dies lässt sich erneut damit erklären, dass Messmethoden im Labor im Allgemeinen optimierter arbeiten als menschliche Datenerhebungen ohne technische Hilfsmittel im Feld. Die beinahe doppelt so hohe relative Varianzreduktion durch N im Vergleich zu TS kann auf pflanzenphysiologische Ursachen zurück geführt werden. Bei einem Überangebot an mineralischem N durch beispielweise Düngung, auch Luxusversorgung genannt, kann dieser N im Pflanzengewebe akkumuliert und

zwischengespeichert werden. So können Salat- oder allgemein Gemüsekulturen bei gleichen Erträgen stark verschiedene N-Gehalte aufweisen. (Chapin 1980)

Ein höheres Potential zur Verbesserung liegt allerdings in der Bestimmung der Marktfähigkeit sowie des Kopfgewichts. Mit einer Gesamtvarianzsenkung von ca. 25 % liegt das Kopfgewicht leicht höher als der N-Gehalt. In diesem Zusammenhang muss beachtet werden, dass das Kopfgewicht seinerseits aus den beiden Parametern Frischmasse des Ernteguts pro Plot und der Anzahl an marktfähigen Köpfen bestimmt wird. Damit fließen in diesen Parameter zwei potenzielle Unsicherheitsquellen ein, was eine Erklärung für die hohe Reduktion durch das Nullsetzen der Kopfgewicht-Varianz sein könnte. Eine Verbesserung der Messmethode bestünde beispielsweise darin, das Gewicht der geernteten Köpfe einzeln zu erheben, wodurch sich der Stichprobenumfang für das Kopfgewicht um ca. das sechsfache erhöht. Im Gegensatz zu den bereits erwähnten unabhängigen Messungen, würde diese Vorgehensweise einen geringeren Zeitaufwand darstellen und könnte im Rahmen der nächsten Ernteerhebungen leicht implementiert werden.

Da die Marktfähigkeit im Mittel zu einer Reduktion der Gesamtvarianz um knapp 47 % führt, scheint diese als Ansatzpunkt jedoch vielversprechender zu sein. Eine Begründung für das hohe Potenzial zur Senkung der Gesamtvarianz könnte darin liegen, dass die Marktfähigkeit im Gegensatz zu den anderen Parametern nicht nur von pflanzenphysiologischen Faktoren beeinflusst wird. Vielmehr spielt die menschliche subjektive Einschätzung eine Rolle, ob ein Kopf beispielsweise den vom Markt geforderten optischen Anforderungen entspricht. Teilweise ist auch die Nachfrage geringer als vor der Pflanzung angenommen, sodass eigentlich marktfähige Köpfe dennoch auf dem Feld verbleiben. Eine Möglichkeit zur Verbesserung bestünde möglicherweise darin, neben der eigenen Marktfähigkeitsabschätzung auf Expertenwissen aus der tatsächlich durchgeführten Gemüseernte zurückzugreifen. Ein Vergleich dieser beiden Marktfähigkeiten könnte zusätzlich eingesetzt werden, um zu überprüfen, ob die Marktfähigkeitserhebung an den Plots in größerem Umfang von der des gesamten Felds abweicht.

In Bezug auf die Berechnung der Pflanzdichte zeigt Tabelle 19, dass durch die Nutzung der einmalig bestimmten Feld-Variante (F) im Vergleich zur Plot-Variante (P) mit 6 Wiederholungen pro Feld die Unsicherheit der Mittelwertschätzung von N1 um nur 0.7 kg N/ha erhöht wird. Im Vergleich zum aktuellen geschätzten Mittelwert von ca. 40 kg N/ha für N1, besitzt dieser Unterschied keine praktische Relevanz. Des Weiteren zeigt der Vergleich von P+V und P+V0, dass die in der Delta-Methode verwendete Annahme einer Pflanzdichtenvarianz von 0 keinen relevanten Einfluss auf die Gesamtvarianz von N1 besitzt.

4.5. Zusammenfassende Diskussion

Die vorliegende Arbeit konnte zeigen, dass die N-Mineralisation sowohl in der Theorie als auch in der Praxis eine entscheidende Rolle einerseits für den Gemüsebau und andererseits für die Bestrebungen zur Reduktion der Nitratauswaschung in das Grundwasser spielt. Abbildung 17 stützt die erläuterte quantitative Bedeutung der N-Mineralisation im Vergleich mit den anderen Gliedern einer potenziell geschlossenen N-Bilanz, insbesondere die deutliche Abweichung zur ausgebrachten Düngermenge.

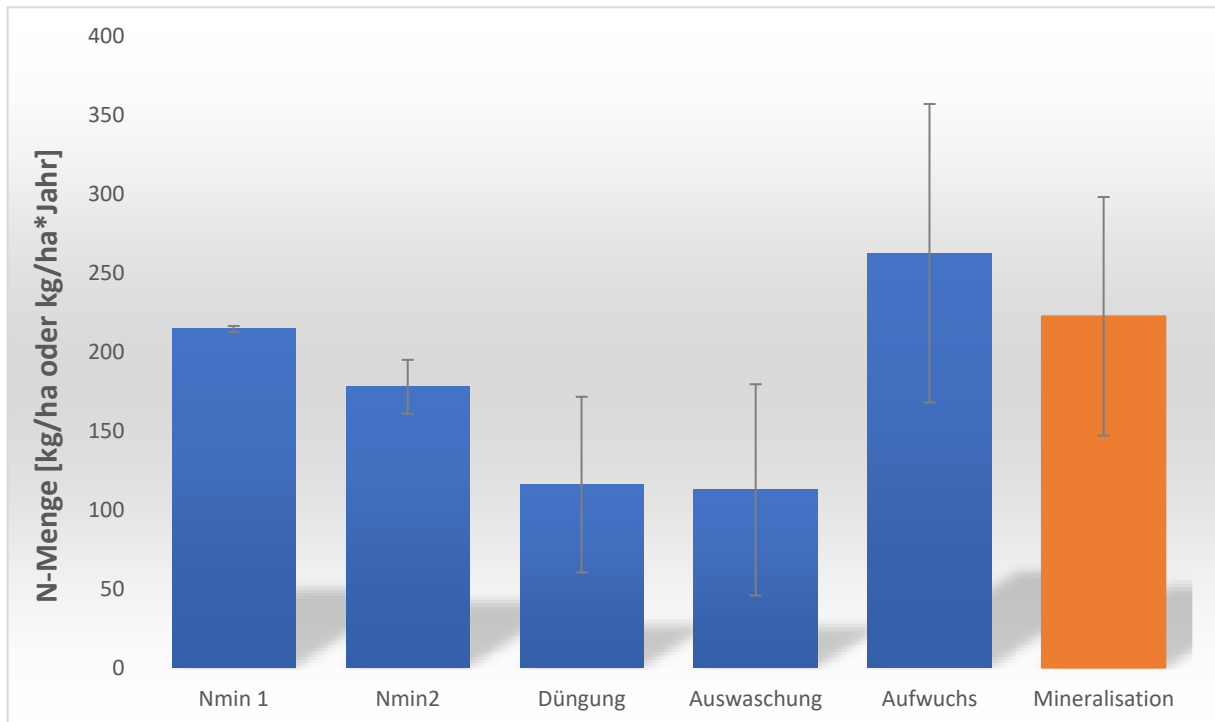


Abbildung 17 Zusammenfassende Abbildung der Mittelwerte und Standardabweichungen der einzelnen Bilanzglieder der N-Mineralisation. Die beiden Nmin-Werte sowie die Düngung sind in kg N/ha dargestellt, während Auswaschung, Aufwuchs und Mineralisation die Einheit kg N/ha besitzen.

Allerdings verdeutlichen die abgebildeten Standardfehler, dass die N-Dynamik den komplexen Prozessen und Interaktionen des Systems Boden-Pflanze-Atmosphäre unterliegt. Eine quantitative Vorhersage der N-Mineralisation auf den Untersuchungsflächen des NitroGäu-Projekts kann daher vorerst nur rudimentär erfolgen. Erst eine langfristige Erfassung gibt hinreichend Aufschluss zu den natürlicherweise auftretenden Schwankungen, um die durchschnittliche N-Freisetzung auch in der Praxis berücksichtigen zu können. Voraussetzung dafür ist, dass sich das neue dynamische Gleichgewicht im Gemüsebau bereits eingestellt hat und in Zukunft keine signifikante Akkumulation von SOM erfolgt.

Im Vergleich mit dem Main-Tauber-Projekt hat sich gezeigt, dass auch die Nitratauswaschung ein Ergebnis des Zusammenspiels von heterogenen Umwelt- und Klimabedingungen repräsentiert.

Hohe Niederschläge und N-Mengen aus dem Gemüseanbau führen im Talbereich der Dünnern zu einer stetigen Auswaschung von Nitrat ins Grundwasser. Demgegenüber steht der hohe Anteil an Nullwerten der Gemeinde Großrinderfeld, ausgelöst durch geringe Jahresniederschläge und Böden mit hoher Wasserspeicherkapazität. Diese Heterogenität erschwert die Suche nach einem universell einsetzbaren statistischen Modell, da vor allem in der Parametrisierung immer spezifische Anpassungen nötig sein werden. Dennoch bietet das Tweedie-Modell durch seine hohe Flexibilität für Datenstrukturen und -verteilungen sowie der einfachen Anpassungsmöglichkeiten einen vielversprechenden Ansatz, trotz hoher Variabilität genaue Mittelwert- und Varianzschätzungen erhalten zu können.

Neben der zwischenprojektlichen Heterogenität herrscht auch innerhalb der Versuchsflächen des NitroGäu-Projekts hohe Variabilität. Daraus ergibt sich eine Vielzahl an potenziellen Fehlerquellen, die ihrerseits zu einer erhöhten Unsicherheit in den erfassten Parametern und damit den N-Effizienz-Indikatoren führen. Verstärkt werden diese Unsicherheiten zudem durch den On-Farm Charakters des Projektes. Statt die Auswirkungen der Maßnahmen an einem Standort durch möglichst viele Wiederholungen genau schätzen zu können, liegt das Interesse viel mehr darin, zu prüfen, wie sich die Maßnahmen in verschiedenen Umwelten auswirken, wodurch die Wiederholungszahlen pro Standort sinken. Die Ergebnisse zeigen allerdings auch, dass die Unsicherheiten der meisten N-Effizienz-Indikatoren durchaus im Rahmen der maximal angestrebten 20 % liegen. Es sollte daher auch in den folgenden Jahren eine Quantifizierung und Überwachung der Unsicherheiten erfolgen, da die aktuelle Untersuchung in zwei einzelnen Jahren nicht als repräsentativ angesehen werden kann. Sollten jedoch auch im weiteren Verlauf des Projekts Fehler von über 50 % regelmäßig auftreten, sollte eine Optimierung der Datenerfassung erfolgen. Die in Abbildung 18 dargestellten CV zeigen, dass die Zielvariable N1 größeren Schwankungen unterliegt als die erfassten Einzelparameter. Es sollten demnach für den Fehler in den N-Effizienz-Indikatoren nicht die erfassten Parameter isoliert betrachtet, sondern vielmehr der gesamte Prozess ins Auge gefasst werden. Nichtsdestotrotz wird deutlich, dass durch eine Reduktion der Einzelvarianzen auch das Potenzial zur Senkung der Gesamtvarianz gegeben ist. Da die Ausführung unabhängiger Messungen keinen praxisrelevanten Einfluss auf die Varianz zu besitzen scheinen, liegen die Ansätze zur Unsicherheitsreduktion in einer Erhöhung der Wiederholungszahlen. Beispielsweise durch eine direkte Bestimmung der Kopfgewichte, statt einer Berechnung aus Frischmasse des Plots und Anzahl marktfähiger Pflanzen. Bei allen

Optimierungsversuchen müssen jedoch zeit- und kostentechnische Limitierungen in die Überlegungen miteinbezogen werden.

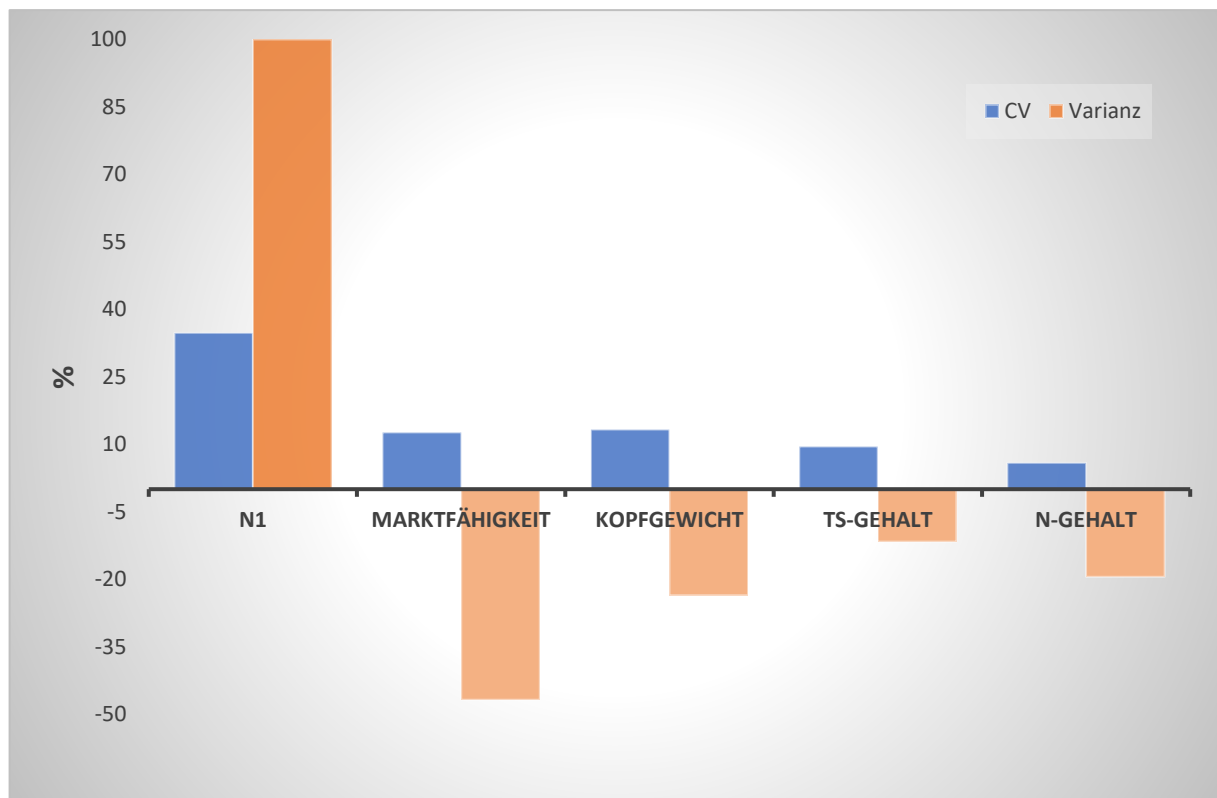


Abbildung 18 Zusammenfassende Abbildung der Unsicherheiten in N1 sowie der dazugehörigen Einzelparameter. Die blauen Balken repräsentieren die CV in %. Der dunkelorange Balken von N1 bildet die auf 100 % normierte Gesamtvarianz ab, während die hellorange Balken der Einzelparameter die Senkung der Gesamtvarianz bei einer Nullsetzung der Varianzen und Kovarianzen der Einzelparameter darstellen.

5. Schlussfolgerung

„Error is not a mistake in science”

Mit diesem Satz leiten (Singh und Chaturvedi 2021) ihr Paper zur Herkunft der Fehlerfortpflanzung ein und beziehen sich dabei auf die natürlich vorkommende Unsicherheit bei der Messung von Daten. Diese angesprochene Variabilität ist auch ein fester Bestandteil vieler On-Farm-Projekte, die durch starke Heterogenität in Böden sowie Bewirtschaftungsmaßnahmen hervorgerufen wird. Auf Grund der komplexen Wechselwirkungen vieler, oftmals unbekannter Parameter kann die Unsicherheit auch nur in geringem Maße durch eine Optimierung der Messmethoden verringert werden und es werden die Grenzen einer optimalen statistischen Auswertung deutlich. Entscheidend ist es, sich der Variabilität bewusst zu sein, diese mittels geeigneter statistischer Methoden quantitativ zu erfassen und anschließend in die Umsetzung praktischer Handlungsempfehlungen einzubeziehen. Ansonsten könnten die Bemühungen zum Aufbau einer umweltverträglicheren Landwirtschaft durch auftretende Verzerrungen wirkungslos bleiben.

6. Ausblick

Neben den in dieser Arbeit behandelten Themen und vorgeschlagenen Optimierungsmöglichkeiten zur Reduktion der Unsicherheit, gibt es im Rahmen des NitroGäu-Projekts noch weitere Aspekte, die genauer untersucht werden könnten. Es wurde bereits kurz angerissen, dass die N-Mineralisation als Bestandteil des dynamischen Gleichgewichtes keinesfalls als über die Jahre konstante N-Nachlieferung gesehen werden kann. Daher ist es wichtig, diese im weiteren Verlauf des Projektes über die Standorte hinweg zu dokumentieren, um trotz der hohen zu erwartenden Varianzen ein Gefühl für die Menge des jährlich freigesetzten Stickstoffes zu bekommen. In diesem Zuge könnten beispielsweise mithilfe von GIS-Karten der Projektregion N-Mineralisationspotenzialkarten erstellt und den Landwirten zugänglich gemacht werden.

In Bezug auf die N-Effizienz-Indikatoren wäre es zudem interessant, weitere potenzielle Unsicherheitsquellen zu quantifizieren. An erster Stelle steht dabei die $N_{\min}$ -Probennahme, die aktuell als Mischprobe pro Feld*Massnahme genommen wird. Es ist allerdings davon auszugehen, dass sich die $N_{\min}$ -Werte sowohl kleinräumig innerhalb eines Feldes als auch zeitlich gesehen stark unterscheiden. Ein Ansatz wäre daher, zum einen die 8-9 Einzeleinstiche separat zu analysieren und zum anderen im Abstand von wenigen Tagen die Probennahme zu wiederholen und die auftretenden Abweichungen zu quantifizieren. In diesem Zusammenhang kann auch eine Untersuchung der Variabilität des Steingehaltes erfolgen. Bereits optisch sind auf einigen Feldern teilweise größere Flächen zu erkennen, die einen deutlich erhöhten Steinanteil im Vergleich zum restlichen Feld aufweisen. Diese Unterschiede werden durch eine Mischprobe nicht erfasst, was zu einer falschen Abschätzung der tatsächlichen $N_{\min}$ -Werte führen kann.

Im Rahmen dieser Arbeit erfolgten die Varianzberechnungen der N-Effizienz-Indikatoren getrennt für jeden Satz eines Feldes. Für die landwirtschaftliche Praxis wäre es nun interessant zu untersuchen, welche Kulturfolge pro Anbaujahr die besten N-Effizienz-Indikatoren aufweisen. Dies kann aktuell noch nicht abgeschätzt werden, da die Landwirte ihre Kulturfolgen selbst bestimmen. Durch die Fortsetzung des Projektes bis ins Jahr 2026 bestehen dennoch gute Chancen, dass dieselben Kulturfolgen auf den gleichen oder auch unterschiedlichen Feldern wiederholt auftreten und verglichen werden können.

Aktuell wird ausschließlich die Menge und Ausbringungsform des mineralischen sowie organischen Düngers in Form der Erntereste als Maßnahme zur Optimierung der N-Effizienz-Indikatoren untersucht. Diese geben einen guten Eindruck der kurzfristigen N-Dynamiken, die einen Einfluss auf die Nitratauswaschung besitzen. Das übergeordnete Ziel des Projektes liegt allerdings vielmehr in den langfristigen N-Überschüssen und dem daraus resultierenden Anstieg der Nitratgehalte im

Grundwasser. In diesem Zusammenhang spielt die Ausbringung des Hofdüngers eine entscheidende Rolle, wobei nicht nur die Menge, sondern auch Ort und Zeitpunkt der Ausbringung von Interesse sind.

In Hinblick auf die projektübergreifende Einführung des Tweedie-Modells muss in einem nächsten Schritt geklärt werden, ob sich damit auch die für die praktischen Handlungsempfehlungen entscheidenden Mittelwertschätzungen der Parameter realisieren lassen. In GLIMMIX erfolgt diese Schätzung mittels einer ‚LSMeans‘-Anweisung. Allerdings kann dies bei komplexen Modellen mit vielen Variablen sowie Interaktionen Probleme bereiten. Mittelwertschätzungen eines Parameters können nur dann ausgegeben werden, wenn jeder Interaktion ein Wert dieses Parameters zugewiesen werden kann. Insbesondere bei On-Farm-Versuchen hat man es oftmals mit unbalancierten Daten zu tun, die diese Bedingung nicht erfüllen.

Literaturverzeichnis

Alvarez, Carina Rosa; Alvarez, Roberto (2016): Are active organic matter fractions suitable indices of management effects on soil carbon? A meta-analysis of data from the Pampas. In: *Archives of Agronomy and Soil Science* 62 (11), S. 1592–1601. DOI: 10.1080/03650340.2016.1150590.

Amelung, Wulf; Blume, Hans-Peter; Fleige, Heiner; Horn, Rainer; Kandeler, Ellen; Kögel-Knabner, Ingrid et al. (2018): Scheffer/Schachtschabel Lehrbuch der Bodenkunde. Unter Mitarbeit von Sören Thiele-Bruhn, Gerhard Welp, Rolf Tippkötter, Thomas Gaiser, Jürgen Gauer und Nina Stoppe. 17., überarbeitete und ergänzte Auflage. Heidelberg: Springer Spektrum Akademischer Verlag; Springer Spektrum.

ARD aktuell (2021): Schleim verseucht Maramameer. Hg. v. Tagesschau. Online verfügbar unter <https://www.tagesschau.de/ausland/europa/marmameer-verschmutzung-101.html>, zuletzt geprüft am 28.08.2021.

Awale, Rakesh; Emeson, Micco A.; Machado, Stephen (2017): Soil Organic Carbon Pools as Early Indicators for Soil Organic Matter Stock Changes under Different Tillage Practices in Inland Pacific Northwest. In: *Front. Ecol. Evol.* 5. DOI: 10.3389/fevo.2017.00096.

Ballenberger, Nikolaus; Lluís, Anna; Mutius, Erika von; Illi, Sabina; Schaub, Bianca (2012): Novel statistical approaches for non-normal censored immunological data: analysis of cytokine and gene expression data. In: *PloS one* 7 (10). DOI: 10.1371/journal.pone.0046423.

Bamminger, Chris; Schilli, Carsten; Hädicke, Andrea; Welp, Gerhard; Amelung, Wulf; Herbst, Michael; Heggemann, Tobias (2021): Humusmonitoring auf Ackerflächen in Nordrhein-Westfalen. In: *Bodenschutz* (3). DOI: 10.37307/j.1868-7741.2021.03.03.

Bar-Lev, Shaul K.; Stramer, Osnat (1987): Characterizations of natural exponential families with power variance functions by zero regression properties. In: *Probab. Th. Rel. Fields* 76 (4), S. 509–522. DOI: 10.1007/BF00960071.

Bartholomew, W. V. (1965): Mineralization and Immobilization of Nitrogen in the Decomposition of Plant and Animal Residues. In: W. V. Bartholomew und Francis E. Clark (Hg.): *Soil Nitrogen*: ASA, S. 285–306.

Basak, Nirmalendu; Mandal, Biswapati; Datta, Ashim; Kundu, Manik Chandra; Rai, Arvind Kumar; Basak, Piu; Mitran, Tarik (2021): Stock and stability of organic carbon in soils under major agro-ecological zones and cropping systems of sub-tropical India. In: *Agriculture, Ecosystems & Environment* 312, S. 107317. DOI: 10.1016/j.agee.2021.107317.

- Battle, J. M.; Golladay, S. W. (2001): Hydroperiod Influence on Breakdown of Leaf Litter in Cypress-Gum Wetlands. In: *The American Midland Naturalist* 146 (1), S. 128–145. Online verfügbar unter <https://www.jstor.org/stable/3083160>.
- Baveye, Philippe C.; Wander, Michelle (2019): The (Bio)Chemistry of Soil Humus and Humic Substances: Why Is the “New View” Still Considered Novel After More Than 80 Years? In: *Front. Environ. Sci.* 7. DOI: 10.3389/fenvs.2019.00027.
- Bechtold, J. Scott; Naiman, Robert J. (2009): A Quantitative Model of Soil Organic Matter Accumulation During Floodplain Primary Succession. In: *Ecosystems* 12 (8), S. 1352–1368. DOI: 10.1007/s10021-009-9294-9.
- Bell, M.; Lawrence, D. (2009): Soil carbon sequestration – myths and mysteries. In: *Tropical Grasslands* 43, S. 227–231.
- Bending, G. D.; Turner, Mary K. (1999): Interaction of biochemical quality and particle size of crop residues and its effect on the microbial biomass and nitrogen dynamics following incorporation into soil. In: *Biol Fertil Soils* 29 (3), S. 319–327. DOI: 10.1007/s003740050559.
- Berg, Björn; Ekbohm, Gunnar (1991): Litter mass-loss rates and decomposition patterns in some needle and leaf litter types. Long-term decomposition in a Scots pine forest. VII. In: *Can. J. Bot.* 69 (7), S. 1449–1456. DOI: 10.1139/b91-187.
- Bernal, Blanca; Mitsch, William J. (2008): A comparison of soil carbon pools and profiles in wetlands in Costa Rica and Ohio. In: *Ecological Engineering* 34 (4), S. 311–323. DOI: 10.1016/j.ecoleng.2008.09.005.
- Bevington, Philip R.; Robinson, D. Keith (2003): Data reduction and error analysis for the physical sciences. 3. ed. Boston, Mass.: McGraw-Hill.
- Bielek, P. (1998): Nitrate in nature: product of soil cover. In: Klaas van der Hoek (Hg.): Nitrogen, the Confer-N-s. Amsterdam: Elsevier, S. 527–530.
- Bingham, Andrew H.; Cotrufo, M. Francesca (2016): Organic nitrogen storage in mineral soil: Implications for policy and management. In: *The Science of the total environment* 551-552, S. 116–126. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2016.02.020.
- Bischoff, Wolf-Anno (2007): Vergleichende Prüfung von CULTAN-Düngung und konventioneller N-Düngung im Main-Tauber-Kreis. Auswirkungen auf den Nitrataustrag in das Grundwasser und die Ertrags-/Qualitätsbildung bei Winterraps, Winterweizen und Sommerbraugerste. Endbericht Frühjahr 2003 bis Frühjahr 2007.

- Bischoff, Wolf-Anno (2008): Development and Applications of the Self-Integrating Accumulators: A Method to quantify the Leaching Losses of Environmentally Relevant Substances.
- Bischoff, Wolf-Anno (2021a): Handhabung Fehlerfortpflanzungen in der Praxis, 20.05.2021. mündlich.
- Bischoff, Wolf-Anno (2021b): Maximaler Fehler quantitativer Labormessungen, 07.2021. mündlich.
- Bischoff, Wolf-Anno; Liebisch, Frank (2021): Critical-N: Wissenschaftliche Begleitung im Nitratprojekt Niederbipp-Gäu-Olten.
- Bischoff, Wolf-Anno; Schwarz, Andreas; Kühfuss, Stefanie; Williams, David (2021): Stickstoffeffizienz im Acker- und Gemüsebau für eine Reduktion des Nitratreintrages ins Grundwasser (NitroGäu). Abschlussbericht zu TP 2.2: N-Verluste und N-Bilanzen im praktischen Gemüsebau der Region Niederbipp-Gäu-Olten. Gutachterbüro TerrAquat.
- Bischoff, Wolf-Anno; Schwarz, Andreas; Müller, V.; Bünemann, Else (2020): Gemüsebaupraxis im Wasserschutzgebiet. In: G-03: Grundwasserverträglicher Acker- und Gemüsebau in der Region Gäu-Olten.
- Blazejewski, Gary A.; Stolt, Mark H.; Gold, Arthur J.; Gurwick, Noel; Groffman, Peter M. (2009): Spatial Distribution of Carbon in the Subsurface of Riparian Zones. In: *Soil Science Society of America Journal* 73 (5), S. 1733–1740. DOI: 10.2136/sssaj2007.0386.
- Blozis, Shelley A.; McTernan, Melissa; Harring, Jeffrey R.; Zheng, Qiwen (2020): Two-part mixed-effects location scale models. In: *Behavior research methods* 52 (5), S. 1836–1847. DOI: 10.3758/s13428-020-01359-7.
- Bottomley, P. J.; Myrold, D. D. (2007): Biological N Inputs. In: Eldor Alvin Paul (Hg.): *Soil microbiology and biochemistry*. 3rd ed. Amsterdam, London: Academic, S. 365–387.
- Bouallagui, H.; Touhami, Y.; Ben Cheikh, R.; Hamdi, M. (2005): Bioreactor performance in anaerobic digestion of fruit and vegetable wastes. In: *Process Biochemistry* 40 (3-4), S. 989–995. DOI: 10.1016/j.procbio.2004.03.007.
- Breslow, N. E.; Clayton, D. G. (1993): Approximate Inference in Generalized Linear Mixed Models. In: *Journal of the American Statistical Association* 88 (421), S. 9. DOI: 10.2307/2290687.
- Brunet, R.-C.; Astin, K. Brian; Dartiguelongue, Sophie; Brunet, P. (2008): The Mineralisation of Organic Nitrogen: Relationship with Variations in the Water-Table Within a Floodplain of the

River Adour in Southwest France. In: *Water Resour Manage* 22 (3), S. 277–289. DOI: 10.1007/s11269-007-9159-y.

Bullinger-Weber, G.; Le Bayon, R.-C.; Thébault, A.; Schlaepfer, R.; Guenat, C. (2014): Carbon storage and soil organic matter stabilisation in near-natural, restored and embanked Swiss floodplains. In: *Geoderma* 228-229, S. 122–131. DOI: 10.1016/j.geoderma.2013.12.029.

Bünemann, Else; Frick, Hanna; Wey, Hannah; Hunkeler, Daniel; Bischoff, Wolf-Anno; Schwarz, Andreas et al. (2020): G-03: Grundwasserverträglicher Acker- und Gemüsebau in der Region Gäu-Olten.

Buyanovsky, G. A.; Aslam, M.; Wagner, G. H. (1994): Carbon Turnover in Soil Physical Fractions. In: *Soil Science Society of America Journal* 58 (4), S. 1167–1173. DOI: 10.2136/sssaj1994.03615995005800040023x.

Cameron, K. C.; Di, H. J.; Moir, J. L. (2013): Nitrogen losses from the soil/plant system: a review. In: *Ann Appl Biol* 162 (2), S. 145–173. DOI: 10.1111/aab.12014.

Cao, Chun; Liu, Si-Qi; Ma, Zhen-Bang; Lin, Yun; Su, Qiong; Chen, Huan; Wang, Jun-Jian (2018): Dynamics of multiple elements in fast decomposing vegetable residues. In: *The Science of the total environment* 616-617, S. 614–621. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2017.10.287.

Caruso, Tancredi; Vries, Franciska T. de; Bardgett, Richard D.; Lehmann, Johannes (2018): Soil organic carbon dynamics matching ecological equilibrium theory. In: *Ecology and evolution* 8 (22), S. 11169–11178. DOI: 10.1002/ece3.4586.

Chapin, F. S. (1980): The Mineral Nutrition of Wild Plants. In: *Annu. Rev. Ecol. Syst.* 11 (1), S. 233–260. DOI: 10.1146/annurev.es.11.110180.001313.

Cooch, E. G.; White, G. C. (2002): Appendix B. The Delta method. In: E. G. Cooch und G. C. White (Hg.): *Program MARK: a gentle introduction*. Online verfügbar unter http://www.phidot.org/software/mark/docs/book/pdf/app_2.pdf.

Cragg, John G. (1971): Some Statistical Models for Limited Dependent Variables with Application to the Demand for Durable Goods. In: *Econometrica* 39 (5), S. 829. DOI: 10.2307/1909582.

Crews, Timothy E.; Peoples, Mark B. (2005): Can the Synchrony of Nitrogen Supply and Crop Demand be Improved in Legume and Fertilizer-based Agroecosystems? A Review. In: *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 72 (2), S. 101–120. DOI: 10.1007/s10705-004-6480-1.

Dahmer, A. (o. D.): Carbon to Nitrogen Ratios in Cropping Systems. Hg. v. Natural Resources Conservation Service (NRCS). United States Department of Agriculture USDA. Online verfügbar

unter <https://advancecovercrops.com/resources-advanced-cover-crops/carbon-nitrogen-ratio/>,
zuletzt geprüft am 09.10.2021.

D'Elia, Amanda H.; Liles, Garrett C.; Viers, Joshua H.; Smart, David R. (2017): Deep carbon storage potential of buried floodplain soils. In: *Scientific reports* 7 (1), S. 8181. DOI: 10.1038/s41598-017-06494-4.

Di, H. J.; Cameron, K. C. (2002): Nitrate leaching in temperate agroecosystems: Sources, factors and mitigating strategies. In: *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 64 (3), S. 237–256. DOI: 10.1023/A:1021471531188.

Dise, N. B. (2011): Nitrogen as a threat to European terrestrial biodiversity. In: Mark A. Sutton (Hg.): *The European nitrogen assessment. Sources, effects and policy perspectives*. Cambridge: Cambridge Univ. Press, S. 463–495.

DLG e.V. (Hg.) (2016): *Landwirtschaft in Deutschland. DLG-Nachhaltigkeitsbericht 2016*. Online verfügbar unter https://www.dlg.org/fileadmin/downloads/landwirtschaft/themen/Nachhaltigkeit/DLG_Nachhaltigkeitsbericht_2016.pdf, zuletzt geprüft am 18.06.2021.

Doran, J. W.; Smith, M. S. (1995): Organic Matter Management and Utilization Of Soil and Fertilizer Nutrients. In: Ronald F. Follett (Hg.): *Soil fertility and organic matter as critical components of production systems. Proceedings*. Madison, Wis.: Soil Science Soc. of America (SSSA special publication series, 19), S. 53–72.

Dorfman, R. (1938): A Note on the δ -Method for Finding Variance Formulae. In: *The Biometric Bulletin* 1, S. 129–137.

Duan, Naihua; Manning, Willard G.; Morris, Carl N.; Newhouse, Joseph P. (1983): A Comparison of Alternative Models for the Demand for Medical Care. In: *Journal of Business & Economic Statistics* 1 (2), S. 115. DOI: 10.2307/1391852.

Dunn, Peter K.; Smyth, Gordon K. (2005): Series evaluation of Tweedie exponential dispersion model densities. In: *Stat Comput* 15 (4), S. 267–280. DOI: 10.1007/s11222-005-4070-y.

Eijsackers, H.; Zehnder, A. J. B. (1990): Litter decomposition: a Russian matriochka doll. In: *Biogeochemistry* 11 (3), S. 153–174. DOI: 10.1007/BF00004495.

Ekschmitt, Klemens; Kandeler, Ellen; Poll, Christian; Brune, Andreas; Buscot, Francois; Friedrich, Michael et al. (2008): Soil-carbon preservation through habitat constraints and biological limitations

on decomposer activity. In: *Z. Pflanzenernaehr. Bodenk.* 171 (1), S. 27–35. DOI: 10.1002/jpln.200700051.

Everaarts, A. P.; Moel, C. P. de; van Noordwijk, M. (1996): The effect of nitrogen and the method of application on nitrogen uptake of cauliflower and on nitrogen in crop residues and soil at harvest. In: *NJAS* 44 (1), S. 43–55. DOI: 10.18174/njas.v44i1.557.

Feller, William (1986): An introduction to probability theory and its applications. 2d ed. New York: Wiley (A Wiley publication in mathematical statistics).

Flanagan, P. W.; van Cleve, K. (1983): Nutrient cycling in relation to decomposition and organic-matter quality in taiga ecosystems. In: *Can. J. For. Res.* 13 (5), S. 795–817. DOI: 10.1139/x83-110.

Forbes, Catherine S.; Evans, Merran (2010): Statistical distributions. 4th ed. Oxford: Wiley-Blackwell.

Frank, S.; Tiemeyer, B.; Gelbrecht, J.; Freibauer, A. (2014): High soil solution carbon and nitrogen concentrations in a drained Atlantic bog are reduced to natural levels by 10 years of rewetting. In: *Biogeosciences* 11 (8), S. 2309–2324. DOI: 10.5194/bg-11-2309-2014.

Fuller, M. E. (2005): Pollutants. Effects on Microorganisms. In: Daniel Hillel und Jerry L. Hatfield (Hg.): *Encyclopedia of soils in the environment*. Amsterdam: Elsevier Acad. Press, S. 258–264.

Galloway, James N.; Townsend, Alan R.; Erisman, Jan Willem; Bekunda, Mateete; Cai, Zucong; Freney, John R. et al. (2008): Transformation of the nitrogen cycle: recent trends, questions, and potential solutions. In: *Science* 320 (5878), S. 889–892. DOI: 10.1126/science.1136674.

Goh, K. M.; Haynes, R. J. (1986): Nitrogen and Agronomic Practice. In: R. J. Haynes (Hg.): *Mineral Nitrogen in the Plant–Soil System*: Elsevier, S. 379–468.

Guiot, J.; Grevy, L. (1990): Evolution des nitrates dans une terre soumise à la rotation: betterave-froment-escourgeon. In: *International Symposium Paris-La Défense* (Hg.): Nitrates, agriculture, eau, S. 417–423.

Haider, K. (1992): Problems related to the humification processes in soils of temperate climate. In: J.-M. Bollag und G. Stotzky (Hg.): *Soil Biochemistry*. 7. Aufl. New York: Marcel Dekker, S. 55–94.

Händel, R.; Wehrmann, J. (1986): Einfluss der NO₃⁻ bzw. NH₄⁺-Ernährung auf Ertrag und Nitratgehalt von Spinat und Kopfsalat. In: *Z. Pflanzenernaehr. Bodenk.* 149, S. 290–302.

Hassink, J. (1995): Density fractions of soil macroorganic matter and microbial biomass as predictors of C and N mineralization. In: *Soil Biology and Biochemistry* 27 (8), S. 1099–1108. DOI: 10.1016/0038-0717(95)00027-C.

Haynes, R. J. (Hg.) (1986): Mineral Nitrogen in the Plant–Soil System: Elsevier.

Haynes, R. J. (2005): Labile Organic Matter Fractions as Central Components of the Quality of Agricultural Soils: An Overview. In: *Advances in Agronomy* 85, S. 221–268. DOI: 10.1016/S0065-2113(04)85005-3.

He, Fang (2016): Parameter estimates for ergot susceptibility in rye based on harvest ware from artificially inoculated trials and from farmers' fields. Master Thesis. University of Hohenheim, Stuttgart-Hohenheim. Biostatistics.

Hefting, M.; Clément, J. C.; Dowrick, D.; Cosandey, A. C.; Bernal, S.; Cimpian, C. et al. (2004): Water table elevation controls on soil nitrogen cycling in riparian wetlands along a European climatic gradient. In: *Biogeochemistry* 67 (1), S. 113–134. DOI: 10.1023/B: BIOG.0000015320.69868.33.

Hemond, Harold F. (1983): The Nitrogen Budget of Thoreau's Bog. In: *Ecology* 64 (1), S. 99–109. DOI: 10.2307/1937333.

High, R. (2016): Fitting Complex Statistical Models with PROCs NLMIXED and MCMC. Hg. v. SAS Institute Inc. University of Nebraska Medical Center.

Hoffland, Ellis; Kuyper, Thomas W.; Comans, Rob N. J.; Creamer, Rachel E. (2020): Eco-functionality of organic matter in soils. In: *Plant Soil* 455 (1-2), S. 1–22. DOI: 10.1007/s11104-020-04651-9.

Horwath, W. (2007): Carbon Cycling and Formation of Soil Organic Matter. In: Eldor Alvin Paul (Hg.): Soil microbiology and biochemistry. 3rd ed. Amsterdam, London: Academic, S. 303–339.

Howard, P. J. A.; Howard, D. M. (1974): Microbial Decomposition of Tree and Shrub Leaf Litter. 1. Weight Loss and Chemical Composition of Decomposing Litter. In: *Oikos* 25 (3), S. 341. DOI: 10.2307/3543954.

Hsieh, Yuch-Ping (1992): Pool Size and Mean Age of Stable Soil Organic Carbon in Cropland. In: *Soil Science Society of America Journal* 56 (2), S. 460–464. DOI: 10.2136/sssaj1992.03615995005600020020x.

Huang, S. (2015): Risk Assessment and Pricing for Group Health Claims. Dissertation. University of Connecticut.

Jackson, Robert B.; Lajtha, Kate; Crow, Susan E.; Hugelius, Gustaf; Kramer, Marc G.; Piñeiro, Gervasio (2017): The Ecology of Soil Carbon: Pools, Vulnerabilities, and Biotic and Abiotic

Controls. In: *Annu. Rev. Ecol. Evol. Syst.* 48 (1), S. 419–445. DOI: 10.1146/annurev-ecolsys-112414-054234.

Jenkinson, D. S.; Powlson, D. S. (1976): The effects of biocidal treatments on metabolism in soil—V. In: *Soil Biology and Biochemistry* 8 (3), S. 209–213. DOI: 10.1016/0038-0717(76)90005-5.

Jha, Pramod; De, Arpan; Lakaria, Brij Lal; Biswas, A. K.; Singh, M.; Reddy, K. S.; Rao, A. S. (2012): Soil Carbon Pools, Mineralization and Fluxes Associated with Land Use Change in Vertisols of Central India. In: *Natl. Acad. Sci. Lett.* 35 (6), S. 475–483. DOI: 10.1007/s40009-012-0082-2.

Johnson, N. L.; Kotz, S. (1995): Continuous Univariate Distributions, Volume 2. 2. ed., 2. [print.]. New York NY u.a.: Wiley.

Jørgensen, Bent (1987): Exponential Dispersion Models. In: *Journal of the Royal Statistical Society. Series A (Statistics in Society)* 49 (2), S. 127–162. Online verfügbar unter <https://www.jstor.org/stable/2345415>.

Jørgensen, Bent (1997): The theory of dispersion models. London: Chapman & Hall (Monographs on statistics and applied probability, 76).

Keith, H.; Oades, J.; Martin, J. P. (1986): Input of carbon to soil from wheat plants. In: *Soil Biology and Biochemistry* 18 (4), S. 445–449. DOI: 10.1016/0038-0717(86)90051-9.

Kiernan, K. (2018): Insights into Using the GLIMMIX Procedure to Model Categorical Outcomes with Random Effects. Hg. v. SAS Institute Inc. Online verfügbar unter <https://www.sas.com/content/dam/SAS/support/en/sas-global-forum-proceedings/2018/2179-2018.pdf>, zuletzt geprüft am 03.09.2021.

Kiernan, K.; Tao, J.; Gibbs, P. (2012): Tips and Strategies for Mixed Modeling with SAS/STAT® Procedures. Hg. v. SAS Global Forum. SAS Institute Inc. Cary, NC, USA (Paper 332-2012).

Klinker, F. L. (2011): Generalized Linear Mixed Models for Ratemaking: A Means of Introducing Credibility into a Generalized Linear Model Setting. Hg. v. Casualty Actuarial Society (CAS).

Knicker, Heike (2011): Soil organic N - An under-rated player for C sequestration in soils? In: *Soil Biology and Biochemistry* 43 (6), S. 1118–1129. DOI: 10.1016/j.soilbio.2011.02.020.

Krishnamoorthy, K. (2006): Handbook of Statistical Distributions with Applications: Chapman and Hall/CRC.

Kurz, Christoph F. (2017): Tweedie distributions for fitting semicontinuous health care utilization cost data. In: *BMC medical research methodology* 17 (1), S. 171. DOI: 10.1186/s12874-017-0445-y.

- Lambert, Diane (1992): Zero- inflated poisson regression, with an application to defects in manufacturing. In: *Technometrics* (34). DOI: 10.1080/00401706.1992.10485228.
- Langhans, S. D.; Tiegs, S.; Uehlinger, U.; Tockner, K. (2006): Environmental heterogeneity controls organic-matter dynamics in river floodplain ecosystems. In: *Polish Journal of Ecology* 54 (4675-680).
- Lavelle, Patrick; Blanchart, Eric; Martin, Agnes; Martin, Serge; Spain, Alister (1993): A Hierarchical Model for Decomposition in Terrestrial Ecosystems: Application to Soils of the Humid Tropics. In: *Biotropica* 25 (2), S. 130. DOI: 10.2307/2389178.
- Lawes, J. B.; Gilbert, J. H.; Warington, R. (1882): On the amount and composition of the rain and drainage water collected at Rothamsted. London: William Clowes and Sons.
- Leemis, Lawrence M. (1986): Relationships Among Common Univariate Distributions. In: *The American Statistician* 40 (2), S. 143–146. Online verfügbar unter <http://www.jstor.org/stable/2684876>, zuletzt geprüft am 17.06.2021.
- Liddle, Kaylin; McGonigle, Terence; Koiter, Alexander (2020): Microbe Biomass in Relation to Organic Carbon and Clay in Soil. In: *Soil Syst.* 4 (3), S. 41. DOI: 10.3390/soilsystems4030041.
- Lindsey, James K. (2000): Applying generalized linear models. Corr. 3. printing. New York, Berlin, Heidelberg: Springer (Springer texts in statistics).
- Liu, Yang; Liu, Xiaoyu; Feng, Yanfang; Yu, Dongsheng; Shi, Xuezheng (2019): Composition of a Soil Organic Carbon Increment under Different Vegetable Cultivation Patterns: A Study Using Three SOC Pools. In: *Sustainability* 11 (1), S. 35. DOI: 10.3390/su11010035.
- Marschner, Bernd; Brodowski, Sonja; Dreves, Alexander; Gleixner, Gerd; Gude, Antje; Grootes, Pieter M. et al. (2008): How relevant is recalcitrance for the stabilization of organic matter in soils? In: *Z. Pflanzenernaehr. Bodenk.* 171 (1), S. 91–110. DOI: 10.1002/jpln.200700049.
- Martin, Tara G.; Wintle, Brendan A.; Rhodes, Jonathan R.; Kuhnert, Petra M.; Field, Scott A.; Low-Choy, Samantha J. et al. (2005): Zero tolerance ecology: improving ecological inference by modelling the source of zero observations. In: *Ecology letters* 8 (11), S. 1235–1246. DOI: 10.1111/j.1461-0248.2005.00826.x.
- Maydeu-Olivares, A.; García-Forero, C. (2010): Goodness-of-Fit Testing. In: Penelope Peterson, Eva Baker und Barry McGraw (Hg.): International encyclopedia of education. 3. ed. Oxford: Elsevier, S. 190–196.

McCullagh, P.; Nelder, J. A. (1989): Generalized Linear Models. 2nd Edition. Boston, MA: Springer US.

McGonigle, Terence P.; Turner, William G. (2017): Grasslands and Croplands Have Different Microbial Biomass Carbon Levels per Unit of Soil Organic Carbon. In: *Agriculture* 7 (7), S. 57. DOI: 10.3390/agriculture7070057.

Melillo, Jerry M.; Aber, John D.; Linkins, Arthur E.; Ricca, Andrea; Fry, Brian; Nadelhoffer, Knute J. (1989): Carbon and nitrogen dynamics along the decay continuum: Plant litter to soil organic matter. In: *Plant Soil* 115 (2), S. 189–198. DOI: 10.1007/BF02202587.

Middelkoop, Hans; Asselman, Nathalie E. M. (1998): Spatial variability of floodplain sedimentation at the event scale in the Rhine–Meuse delta, The Netherlands. In: *Earth Surf. Process. Landforms* 23 (6), S. 561–573. DOI: 10.1002/(SICI)1096-9837(199806)23:6<561::AID-ESP870>3.0.CO;2-5.

Mills, Elizabeth Dastrup (2013): Adjusting for covariates in zero-inflated gamma and zero-inflated log-normal models for semicontinuous data. Dissertation.

Min, Yongi; Agresti, Alan (2002): Modeling nonnegative data with clumping at zero: A survey. In: *Journal of the Iranian Statistical Society (JISS)* 1, S. 7–33.

Minami, M.; Lennert-Cody, C. E.; Gao, W.; Roman-Verdesoto, M. (2007): Modeling Shark Bycatch: The Zero-Inflated Negative Binomial Regression Model with Smoothing. In: *Fisheries Research* 84, S. 210–221.

Minderman, G. (1968): Addition, Decomposition and Accumulation of Organic Matter in Forests. In: *The Journal of Ecology* 56 (2), S. 355. DOI: 10.2307/2258238.

Moore, J. M.; Klose, S.; Tabatabai, M. A. (2000): Soil microbial biomass carbon and nitrogen as affected by cropping systems. In: *Biol Fertil Soils* 31 (3-4), S. 200–210. DOI: 10.1007/s003740050646.

Moulton, Lawrence H.; Halsey, Neal A. (1995): A Mixture Model with Detection Limits for Regression Analyses of Antibody Response to Vaccine. In: *Biometrics* 51 (4), S. 1570. DOI: 10.2307/2533289.

Murphy, D. V.; Stockdale, E. A.; Poulton, P. R.; Willison, T. W.; Goulding, K. W. T. (2007): Seasonal dynamics of carbon and nitrogen pools and fluxes under continuous arable and ley-arable rotations in a temperate environment. In: *Eur J Soil Science* 58 (6), S. 1410–1424. DOI: 10.1111/j.1365-2389.2007.00946.x.

- Natali, C.; Bianchini, G.; Carlino, P. (2020): Thermal stability of soil carbon pools: Inferences on soil nature and evolution. In: *Thermochimica Acta* 683. DOI: 10.1016/j.tca.2019.178478.
- Neelon, Brian; O'Malley, A. James; Smith, Valerie A. (2016): Modeling zero-modified count and semicontinuous data in health services research Part 1: background and overview. In: *Statistics in medicine* 35 (27), S. 5070–5093. DOI: 10.1002/sim.7050.
- Nelder, J. A.; Wedderburn, R. W. M. (1972): Generalized Linear Models. In: *Journal of the Royal Statistical Society. Series A (General)* 135 (3), S. 370. DOI: 10.2307/2344614.
- Neve, S. de; Hofman, G. (1998): N mineralization and nitrate leaching from vegetable crop residues under field conditions: a model evaluation. In: *Soil Biology and Biochemistry* 30 (14), S. 2067–2075. DOI: 10.1016/S0038-0717(98)00082-0.
- Newbould, P. (1982): Losses and Accumulation of Organic Matter in Soils. In: D. Boels (Hg.): Soil degradation. Proceedings of the Land Use Seminar on Soil Degradation/Wageningen/13-15 October 1980. Rotterdam: Balkema, S. 107–131.
- Olsen, Maren K.; Schafer, Joseph L. (2001): A Two-Part Random-Effects Model for Semicontinuous Longitudinal Data. In: *Journal of the American Statistical Association* 96 (454), S. 730–745. DOI: 10.1198/016214501753168389.
- Olson, Jerry S. (1963): Energy Storage and the Balance of Producers and Decomposers in Ecological Systems. In: *Ecology* 44 (2), S. 322–331. DOI: 10.2307/1932179.
- Parton, W. J.; Schimel, D. S.; Cole, C. V.; Ojima, D. S. (1987): Analysis of Factors Controlling Soil Organic Matter Levels in Great Plains Grasslands. In: *Soil Science Society of America Journal* 51 (5), S. 1173–1179. DOI: 10.2136/sssaj1987.03615995005100050015x.
- Parton, W. J.; Stewart, J. W. B.; Cole, C. V. (1988): Dynamics of C, N, P and S in grassland soils: a model. In: *Biogeochemistry* 5 (1), S. 109–131. DOI: 10.1007/BF02180320.
- Parveen, Nabila; Mullah, Mohammad; Ahshanullah, Mohammad (2016): Tweedie Model for Analyzing Zero-Inflated Continuous Response: An Application to Job Training Data. In: *BJEMT* 14 (3), S. 1–7. DOI: 10.9734/BJEMT/2016/26043.
- Peel, D.; Bravington, M. V.; Kelly, N.; Wood, S. N.; Knuckey, I. (2013): A Model-Based Approach to Designing a Fishery-Independent Survey. In: *JABES* 18 (1), S. 1–21. DOI: 10.1007/s13253-012-0114-x.
- Pennington, P. (1986): Some Statistical Techniques for Estimating Abundance Indices from Trawl Surveys. In: *Fishery Bulletin* 84, S. 519–525.

Piccolo, Alessandro (2016): In memoriam Prof. F.J. Stevenson and the Question of humic substances in soil. In: *Chem. Biol. Technol. Agric.* 3 (1). DOI: 10.1186/s40538-016-0076-2.

Piepho, H. P.; Buchse, A.; Emrich, K. (2003): A Hitchhiker's Guide to Mixed Models for Randomized Experiments. In: *J Agron Crop Sci* 189 (5), S. 310–322. DOI: 10.1046/j.1439-037X.2003.00049.x.

Piepho, Hans-Peter (2021): Likelihood Two-Part Modell - gemeinsame Dichte, 03.08.2021. Schriftlich.

Piepho, Hans-Peter; Möhring, Jens (2011): On Estimation of Genotypic Correlations and Their Standard Errors by Multivariate REML using the MIXED Procedure of the SAS System. In: *Crop Science* 51 (6), S. 2449–2454. DOI: 10.2135/cropsci2011.02.0088.

Pinay, G.; Fabre, A.; Vervier, Ph.; Gazelle, F. (1992): Control of C,N,P distribution in soils of riparian forests. In: *Landscape Ecol* 6 (3). DOI: 10.1007/BF00130025.

Powlson, D. S.; Prookes, P. C.; Christensen, B. T. (1987): Measurement of soil microbial biomass provides an early indication of changes in total soil organic matter due to straw incorporation. In: *Soil Biology and Biochemistry* 19 (2), S. 159–164. DOI: 10.1016/0038-0717(87)90076-9.

Prescott, C. E. (2005): Decomposition and Mineralization of Nutrients from Litter and Humus. In: Hormoz BassiriRad (Hg.): Nutrient Acquisition by Plants, Bd. 181. Berlin/Heidelberg: Springer-Verlag (181), S. 15–41.

Rahn, C. (2012): Soil Nitrogen Supply for field vegetables. Hg. v. Horticultural Development Company (HDC). Agriculture and Horticulture Development Board (AHDB). Warwickshire. Online verfügbar unter <https://projectblue.blob.core.windows.net/media/Default/Horticulture/Publications/Soil%20Nitrogen%20Supply%20for%20field%20vegetables.pdf>.

Raykov, Tenko; Marcoulides, George A. (2004): Using the Delta Method for Approximate Interval Estimation of Parameter Functions in SEM. In: *Structural Equation Modeling: A Multidisciplinary Journal* 11 (4), S. 621–637. DOI: 10.1207/s15328007sem1104_7.

Robertson, P. M.; Groffman, Peter M. (2007): Nitrogen Transformations. In: Eldor Alvin Paul (Hg.): Soil microbiology and biochemistry. 3rd ed. Amsterdam, London: Academic, S. 341–364.

Rockström, Johan; Steffen, W. L.; Noone, Kevin; Persson, Asa; Chapin, F. Stuart (2009): Planetary Boundaries: Exploring the Safe Operating Space for Humanity. In: *Ecology and Society* 14 (2). Online verfügbar unter <https://www.ecologyandsociety.org/vol14/iss2/art32/>.

Rovira, Pere; Jorba, Montserrat; Romanyà, Joan (2010): Active and passive organic matter fractions in Mediterranean forest soils. In: *Biol Fertil Soils* 46 (4), S. 355–369. DOI: 10.1007/s00374-009-0437-0.

Sahoo, Uttam Kumar; Singh, Soibam Lanabir; Gogoi, Anudip; Kenye, Alice; Sahoo, Snehasudha S. (2019): Active and passive soil organic carbon pools as affected by different land use types in Mizoram, Northeast India. In: *PloS one* 14 (7). DOI: 10.1371/journal.pone.0219969.

SAS Institute (2021): Choice of continuous response distribution in log-linked GLMs. Usage Note 60335. SAS Institute Inc.

SAS Institute Inc. (2018): SAS/STAT 15.1. User's Guide: The GENMOD Procedure. SAS Institute. Cary, NC, USA. Online verfügbar unter https://documentation.sas.com/api/collections/pgmsascdc/9.4_3.4/docsets/statug/content/genmod.pdf?locale=en#nameddest=statug_genmod_details28, zuletzt geprüft am 17.06.2021.

SAS Institute Inc. (2020): SAS/STAT 15.2. User's Guide: The NLMIXED Procedure. SAS Institute. Cary, NC. Online verfügbar unter https://documentation.sas.com/api/docsets/statug/15.2/content/nlmixed.pdf?locale=en#nameddest=statug_nlmixed_overview01, zuletzt geprüft am 17.06.2021.

SchALVO (2001): Schutzgebiets- und Ausgleichs-Verordnung, Verordnung des Umweltministeriums über Schutzbestimmungen und die Gewährung von Ausgleichsleistungen in Wasser- und Quellenschutzgebieten.

Schmidt, Michael W. I.; Torn, Margaret S.; Abiven, Samuel; Dittmar, Thorsten; Guggenberger, Georg; Janssens, Ivan A. et al. (2011): Persistence of soil organic matter as an ecosystem property. In: *Nature* 478 (7367), S. 49–56. DOI: 10.1038/nature10386.

Schwarz, A.; Bischoff, Wolf-Anno (2017): Besteht ein Zusammenhang zwischen dem Herbst-Nmin-Wert und der gemessenen Nitratauswaschung? Deutsche Bodenkundliche Gesellschaft, DBG. Online verfügbar unter <http://www.dbges.de>.

Schwarz, A.; Bischoff, Wolf-Anno; Maier, J.; Müller-Sämann, K. (2013): CULTAN-Düngung und Grundwasserschutz – Kann die Nitratauswaschung durch CULTAN-Düngung reduziert werden? Deutsche Bodenkundliche Gesellschaft, DGB. Online verfügbar unter <http://www.dbges.de>.

Scott, Neal A.; Cole, C. Vernon; Elliott, Edward T.; Huffman, Steve A. (1996): Soil Textural Control on Decomposition and Soil Organic Matter Dynamics. In: *Soil Science Society of America Journal* 60 (4), S. 1102–1109. DOI: 10.2136/sssaj1996.03615995006000040020x.

- Seneviratne, G. (2000): Litter quality and nitrogen release in tropical agriculture: a synthesis. In: *Biol Fertil Soils* 31 (1), S. 60–64. DOI: 10.1007/s003740050624.
- Shah, Zahir; Jani, Yaakob Mohd; Khan, Farmanullah (2014): Evaluation of Organic Wastes for Composting. In: *Communications in Soil Science and Plant Analysis* 45 (3), S. 309–320. DOI: 10.1080/00103624.2013.861909.
- Shrestha, J.; Niklaus, P. A.; Frossard, E.; Samaritani, E.; Huber, B.; Barnard, R. L. et al. (2012): Soil nitrogen dynamics in a river floodplain mosaic. In: *Journal of environmental quality* 41 (6), S. 2033–2045. DOI: 10.2134/jeq2012.0059.
- Singh, Arvind; Chaturvedi, Priyanka (2021): Error Propagation. In: *Reson* 26 (6), S. 853–861. DOI: 10.1007/s12045-021-1185-1.
- Six, J.; Conant, R. T.; Paul, E. A.; Paustian, K. (2002): Stabilization Mechanisms of Soil Organic Matter: Implications for C-Saturation of Soils. In: *Plant Soil* 241 (2), S. 155–176. DOI: 10.1023/A:1016125726789.
- Smith, J. L.; Elliott, L. F. (1990): Tillage and Residue Management Effects on Soil Organic Matter Dynamics in Semiarid Regions. In: R. P. Singh, J. F. Parr und B. A. Stewart (Hg.): *Advances in Soil Science. Dryland Agriculture: Strategies for Sustainability*, Bd. 13. New York, NY: Springer New York (Advances in Soil Science, 13), S. 69–88.
- Smyth, Gordon K.; Jørgensen, Bent (2002): Fitting Tweedie's Compound Poisson Model to Insurance Claims Data: Dispersion Modelling. In: *ASTIN Bull.* 32 (1), S. 143–157. DOI: 10.2143/AST.32.1.1020.
- Sokol, Noah W.; Kuebbing, Sara E.; Karlsen-Ayala, Elena; Bradford, Mark A. (2019): Evidence for the primacy of living root inputs, not root or shoot litter, in forming soil organic carbon. In: *The New phytologist* 221 (1), S. 233–246. DOI: 10.1111/nph.15361.
- Sørensen, L. H. (1974): Rate of decomposition of organic matter in soil as influenced by repeated air drying-rewetting and repeated additions of organic material. In: *Soil Biology and Biochemistry* 6 (5), S. 287–292. DOI: 10.1016/0038-0717(74)90032-7.
- Sperisen, Miriam (2018): Was bringt das Nitratprojekt Gäu-Olten? Wissenschaft soll Antworten liefern. Nach 20 Jahren werden die Resultate des Nitratprojektes Gäu-Olten wissenschaftlich geprüft. In: *Solothurner Zeitung*, 20.10.2018. Online verfügbar unter <https://www.solothurnerzeitung.ch/solothurn/thal-gaeu/was-bringt-das-nitratprojekt-gau-olten-wissenschaft-soll-antworten-liefern-ld.1321509>, zuletzt geprüft am 19.05.2021.

Stevenson, Frank J. (1994): Humus chemistry. Genesis, composition, reactions. 2. ed. New York: Wiley.

Stooss, Werner (2013): 70 Jahre Dünnern-Korrektion. Alte Dünnern – Korrektion 1933 bis 1943 – Revitalisierung. Hg. v. Stadt Oensingen. Online verfügbar unter http://www.oensingen.ch/dl.php/de/537c66a760acc/Dokumentation_70_Jahre_Duennern-Korrektion.pdf.

Stott, Diane E.; Kassim, Ghiath; Jarrell, W. M.; Martin, J. P.; Haider, K. (1983): Stabilization and incorporation into biomass of specific plant carbons during biodegradation in soil. In: *Plant Soil* 70 (1), S. 15–26. DOI: 10.1007/BF02374746.

Sun, Zhigao; Mou, Xiaojie; Sun, Wanlong (2016): Decomposition and heavy metal variations of the typical halophyte litters in coastal marshes of the Yellow River estuary, China. In: *Chemosphere* 147, S. 163–172. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2015.12.079.

Sutfin, Nicholas A.; Wohl, Ellen E.; Dwire, Kathleen A. (2016): Banking carbon: a review of organic carbon storage and physical factors influencing retention in floodplains and riparian ecosystems. In: *Earth Surf. Process. Landforms* 41 (1), S. 38–60. DOI: 10.1002/esp.3857.

Sutton, Rebecca; Sposito, Garrison (2005): Molecular structure in soil humic substances: the new view. In: *Environmental science & technology* 39 (23), S. 9009–9015. DOI: 10.1021/es050778q.

Swift, M. J.; Heal, O. W.; Anderson, J. M. (1979): Decomposition in terrestrial ecosystems. Berkeley: Univ. of Calif. Pr (Studies in ecology, 5).

Tate, Robert L. (1987): Soil organic matter. Biological and ecological effects. New York: Wiley (A Wiley-interscience publication).

Tobin, James (1958): Estimation of Relationships for Limited Dependent Variables. In: *Econometrica* 26 (1), S. 24. DOI: 10.2307/1907382.

Tockner, Klement; Stanford, Jack A. (2002): Riverine flood plains: present state and future trends. In: *Envir. Conserv.* 29 (3), S. 308–330. DOI: 10.1017/S037689290200022X.

Truxillo, C. (2016): Statistical Analysis with the GLIMMIX Procedure. Course Notes.

Tweedie (1984): An index which distinguishes between some important exponential families. In: J. K. Gosh, J. Roy und Indian State Institute (Hg.): Statistics : applications and new directions. Indian Statistical Institute Golden Jubilee International Conference. Calcutta. Indian Statistical Institute, S. 579–604.

Tweedie, M. C. K. (1947): Functions of a statistical variate with given means, with special reference to Laplacian distributions. In: *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.* 43 (1), S. 41–49. DOI: 10.1017/S0305004100023185.

UNECE (1999): Protocol to Abate Acidification, Eutrophication and Ground-level Ozone. The 1999 Gothenburg Protocol to Abate Acidification, Eutrophication and Ground-level Ozone (Gothenburg Protocol). Online verfügbar unter <https://unece.org/environment-policyair/protocol-abate-acidification-eutrophication-and-ground-level-ozone>, zuletzt geprüft am 21.05.2021.

van Dijk, H. (1982): Survey of Dutch soil organic matter research with regard to humification and degradation rates in arable land. In: D. Boels (Hg.): Soil degradation. Proceedings of the Land Use Seminar on Soil Degradation/Wageningen/13-15 October 1980. Rotterdam: Balkema, S. 133–144.

Ver Hoef, Jay M. (2012): Who Invented the Delta Method? In: *The American Statistician* 66 (2), S. 124–127. DOI: 10.1080/00031305.2012.687494.

Verberne, E.L.J.; Hassink, J.; Willigen, P. de; Groot, J.J.R.; van Veen, J. A. (1990): Modelling organic matter Modelling organic matter dynamics in different soils. In: *Netherlands Journal of Agricultural Science* 38, S. 221–238.

Vieira, F.C.B.; Bayer, C.; Zanatta, J. A.; Dieckow, J.; Mielniczuk, J.; He, Z. L. (2007): Carbon management index based on physical fractionation of soil organic matter in an Acrisol under long-term no-till cropping systems. In: *Soil and Tillage Research* 96 (1-2), S. 195–204. DOI: 10.1016/j.still.2007.06.007.

Waksman, S. A. (1925): What Is Humus? In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 11 (8), S. 463–468. DOI: 10.1073/pnas.11.8.463.

Waksman, S. A. (1936): Humus. Origin, Chemical Composition and Importance Nature. New York: William and Wilkins.

Wehrmann, J.; Scharpf, H. C. (1979): Der Mineralstoffgehalt des Bodens als Maßstab für den Stickstoffdüngerbedarf (Nmin-Methode). In: *Plant and Soil* 52 (1), S. 109–126. Online verfügbar unter <https://www.jstor.org/stable/42933713>.

Wehrmann, J.; Scharpf, H. C. (1986): The Nmin-method – an aid to integrating various objectives of nitrogen fertilization. In: *Z. Pflanzenernaehr. Bodenk.* 149 (4), S. 428–440. DOI: 10.1002/jpln.19861490407.

- Weil, Ray. R.; Magdoff, Fred (2004): Significance of Soil Organic Matter to Soil Quality and Health. In: Fred Magdoff und Ray R. Weil (Hg.): *Soil Organic Matter in Sustainable Agriculture*: CRC Press, S. 1–44.
- Whitmore, A. P.; Groot, J.J.R. (1997): The decomposition of sugar beet residues: mineralization versus immobilization in contrasting soil types. In: *Plant Soil* 192 (2), S. 237–247. DOI: 10.1023/A:1004288828793.
- Wiesmeier, Martin; Schad, Peter; Lützw, Margit von; Poeplau, Christopher; Spörlein, Peter; Geuß, Uwe et al. (2014): Quantification of functional soil organic carbon pools for major soil units and land uses in southeast Germany (Bavaria). In: *Agriculture, Ecosystems & Environment* 185, S. 208–220. DOI: 10.1016/j.agee.2013.12.028.
- Wuest, S. B.; McCool, D. K.; Miller, B. C.; Veseth, R. J. (1999): Development of more effective conservation farming systems through participatory on-farm research. In: *Am J Alt Ag* 14 (3), S. 98–102. DOI: 10.1017/S0889189300008195.
- Xie, Yajun; Xie, Yonghong; Xiao, Huayun; Chen, Xinsheng; Li, Feng (2017): Controls on Litter Decomposition of Emergent Macrophyte in Dongting Lake Wetlands. In: *Ecosystems* 20 (7), S. 1383–1389. DOI: 10.1007/s10021-017-0119-y.
- Zemek, Oliver; Neuweiler, Reto; Spiess, Ernst; Stüssi, Martin; Richner, Walter (2020): Nitratauswaschungspotenzial im Freilandgemüsebau – eine Literaturstudie. In: *Agroscope Science* 95. DOI: 10.34776/as95g.
- Zhang, Yanwei (2013): Likelihood-based and Bayesian methods for Tweedie compound Poisson linear mixed models. In: *Stat Comput* 23 (6), S. 743–757. DOI: 10.1007/s11222-012-9343-7.

I. SAS Code des finalen ,TP3 – GLMM‘ Modells

```
Proc nlmixed data=MTk1 lognote;
Parms a0=16.6059 a1=-0.02191 /*a2=0.05*/
      a3=0.02707 a4=0.01251 a5=11.8881 a6=-14.8601 a7=0.01318 a8=-0.4422 a9=-
      13.3943 a10=-17.4421 a11=-13.6499 /*a12=0.05*/
      a13=-12.6808 a14=-1.5407 a15=1.0470 /*a16=0
      a17=0 a18=0 a19=0 a20=0*/
      a21=-16.2166 a22=-14.4813 a23=0.06482 a24=0.06482 a25=0.06534
      /*a26=0*/
      a27=-16.8082 a28=0.06425 a29=-14.4102 /*a30=0*/
      a31=0.07796 a32=0.07796 a33=0.1396 a34=-14.4044 a35=0.07783
      a36=0.07796 a37=0.07796 /*a38=0*/
      a39=-1.9356 a40=1.1561 a41=14.8962 a42=14.8963 a43=14.8963 /*a44=0*/
      a45=-16.2027 a46=-17.3808 a47=0.06472 a48=-13.7171 a49=0.06483
      a50=0.06483 a51=-16.5022 /*a52=0*/
      a53=-18.5018 a54=-33.3734 a55=0.06742 a56=-14.9399 a57=-17.2165 a58=-
      18.1411 a59=-18.5018 /*a60=0*/
      a61=-4.8605 a62=-19.2933 a63=-1.9611 a64=0.7705 a65=-1.1777 a66=-
      3.4026 a67=0.7705 /*a68=0*/
      a69=-0.00018 a70=-1.2935 a71=17.4783 a72=17.4770 a73=3.7916
      a74=17.4777 a75=2.9867 /*a76=0*/
      a77=-4.0437 a78=13.6865 a79=-0.00059 a80=-0.7478 a81=13.6865 /*a82=0*/
      a83=-13.6504 /*a84=0*/
      b0=0.7686 b1=0.2741 /*b2=0*/
      b3=2.4780 b4=1.7556 b5=2.0314 b6=0.3351 b7=2.7818 b8=-0.07381 b9=0.9376
      b10=-1.3848 b11=-0.2142 /*b12=0*/
      b13=-0.3626 b14=-1.0932 b15=-0.9103 b16=-0.6097 b17=-1.7015 b18=0.2987
      b19=-1.4842 b20=-0.7288 b21=-0.3062 /*b22=0
      b23=0 b24=0 b25=0 b26=0 b27=0 b28=0 b29=0 b30=0 b31=0 b32=0*/
      b33=0.002451 b34=0.001148
      b35=-3.6536 b36=-2.1562 b37=-0.6196 b38=-1.1512 b39=-0.1604 /*b40=0*/
      b41=-1.7152 b42=0.2479 b43=-1.2446 /*b44=0*/
      b45=-1.5202 b46=-0.4901 b47=0.5962 b48=-0.7342 b49=-0.3719 b50=0.7973
      b51=0.9974 /*b52=0*/
      b53=-1.4691 b54=0.8892 b55=2.1944 b56=1.4252 b57=-0.08543 /*b58=0*/
      b59=-2.5702 b60=-3.3003 b61=-1.9164 b62=-1.5134 b63=-2.1084 b64=-
      0.8338 b65=-2.7081 /*b66=0*/
      b67=-1.4797 /*b68=*/ b69=0.8642 b70=1.0378 b71=-0.3508 b72=0.2791 b73=-
      0.7229 /*b74=0*/
      b75=-1.2191 /*b76=*/ b77=-0.4537 b78=-1.5329 b79=-0.1780 b80=-0.7348
      b81=1.0658 /*b82=0*/
      b83=0.6010 b84=0.1707 b85=3.2601 b86=3.3832 b87=1.3023 b88=3.3198
      b89=1.1256 /*b90=0*/
      b91=-0.9061 b92=2.2126 b93=1.9189 b94=1.2504 b95=0.8947 /*b96=0
      b97=0 b98=0*/
      c=0.5256;

/* 1. Part: Nitrat ja oder nein (Binomialverteilung) */
eta = a0 + a1*M1 + /*a2*M2*/ +
      a3*F1 + a4*F2 + a5*F3 + a6*F4 + a7*F5 + a8*F6 + a9*F7 + a10*F8 + a11*F9
      + /*a12*F11*/
      a13*M1*T4 + a14*M1*T3 + a15*M1*T2 + /*a16*M1*T1
      a17*M2*T4 + a18*M2*T3 + a19*M2*T2 + a20*M2*T1*/
      a21*F1*S1*J1 + a22*F1*S1*J2 + a23*F1*S1*J3 + a24*F1*S2*J1 +
      a25*F1*S2*J2 + /*a26*F1*S2*J3*/
```

```

a27*F2*S1*J1 + a28*F2*S1*J2 + a29*F2*S1*J4 + /*a30*F2*S2*J4*/
a31*F3*S1*J1 + a32*F3*S1*J2 + a33*F3*S1*J3 + a34*F3*S1*F4 +
a35*F3*S2*J1 + a36*F3*S2*J2 + a37*F3*S2*J3 + /*a38*F3*S2*J4*/
a39*F4*S1*J1 + a40*F4*S2*J2 + a41*F4*S1*J4 + a42*F4*S2*J1 +
a43*F4*S2*J2 + /*a44*F4*S2*J4*/
a45*F5*S1*J1 + a46*F5*S1*J2 + a47*F5*S1*J3 + a48*F5*S1*J4 +
a49*F5*S2*J1 + a50*F5*S2*J2 + a51*F5*S2*J3 + /*a52*F5*S2*J4*/
a53*F6*S1*J1 + a54*F6*S1*J2 + a55*F6*S1*J3 + a56*F6*S1*J4 +
a57*F6*S2*J1 + a58*F6*S2*J2 + a59*F6*S2*J3 + /*a60*F6*S2*J4*/
a61*F7*S1*J1 + a62*F7*S1*J2 + a63*F7*S1*J3 + a64*F7*S1*J4 +
a65*F7*S2*J1 + a66*F7*S2*J2 + a67*F7*S2*J3 + /*a68*F7*S2*J4*/
a69*F8*S1*J1 + a70*F8*S1*J2 + a71*F8*S1*J3 + a72*F8*S1*J4 +
a73*F8*S2*J1 + a74*F8*S2*J2 + a75*F8*S2*J3 + /*a76*F8*S2*J4*/
a77*F9*S1*J2 + a78*F9*S1*J3 + a79*F9*S1*J4 + a80*F9*S2*J1 +
a81*F9*S2*J3 + /*a82*F9*S2*J4*/
a83*F11*S1*J4 /*+ a84*F11*S2*J4*/;
p = 1 / (1 + exp(-eta));
/* Definition LL der Binomialverteilung */
If ispositiv = 0 then loglike = ispositiv*log(p) + (1-ispositiv)*log(1-p) +
lgamma(1+1) - lgamma(ispositiv+1) - lgamma(1-ispositiv+1);

/* 2. Part: Menge an Nitrat (Gammaverteilung) */
if ispositiv = 1 then do;
linp = b0 + b1*M1 /*+ b2*M2*/ +
b3*F1 + b4*F2 + b5*F3 + b6*F4 + b7*F5 + b8*F6 + b9*F7 + b10*F8 + b11*F9
+ /*b12*F11*/
b13*M1*F1 + b14*M1*F2 + b15*M1*F3 + b16*M1*F4 + b17*M1*F5 + b18*M1*F6
+ b19*M1*F7 + b20*M1*F8 + b21*M1*F9 + /*b22*M1*F11
b23*M2*F1 + b24*M2*F2 + b25*M2*F3 + b26*M2*F4 + b27*M2*F5 + b28*M2*F6
+ b29*M2*F7 + b30*M2*F8 + b31*M2*F9 + b32*M2*F11*/
b33*Niederschlag*M1 + b34*Niederschlag*M2 +
b35*F1*S1*J1 + b36*F1*S1*J2 + b37*F1*S1*J3 + b38*F1*S2*J1 +
b39*F1*S2*J2 + /*b40*F1*S2*J3*/
b41*F2*S1*J1 + b42*F2*S1*J2 + b43*F2*S1*J4 + /*b44*F2*S2*J4*/
b45*F3*S1*J1 + b46*F3*S1*J2 + b47*F3*S1*J3 + b48*F3*S1*F4 +
b49*F3*S2*J1 + b50*F3*S2*J2 + b51*F3*S2*J3 + /*b52*F3*S2*J4*/
b53*F4*S1*J1 + b54*F4*S2*J2 + b55*F4*S1*J4 + b56*F4*S2*J1 +
b57*F4*S2*J2 + /*b58*F4*S2*J4*/
b59*F5*S1*J1 + b60*F5*S1*J2 + b61*F5*S1*J3 + b62*F5*S1*J4 +
b63*F5*S2*J1 + b64*F5*S2*J2 + b65*F5*S2*J3 + /*b66*F5*S2*J4*/
b67*F6*S1*J1 + /*b68*F6*S1*J2 */ b69*F6*S1*J3 + b70*F6*S1*J4 +
b71*F6*S2*J1 + b72*F6*S2*J2 + b73*F6*S2*J3 + /*b74*F6*S2*J4*/
b75*F7*S1*J1 + /*b76*F7*S1*J2 */ b77*F7*S1*J3 + b78*F7*S1*J4 +
b79*F7*S2*J1 + b80*F7*S2*J2 + b81*F7*S2*J3 + /*b82*F7*S2*J4*/
b83*F8*S1*J1 + b84*F8*S1*J2 + b85*F8*S1*J3 + b86*F8*S1*J4 +
b87*F8*S2*J1 + b88*F8*S2*J2 + b89*F8*S2*J3 + /*b90*F8*S2*J4*/
b91*F9*S1*J2 + b92*F9*S1*J3 + b93*F9*S1*J4 + b94*F9*S2*J1 +
b95*F9*S2*J3 /*+ b96*F9*S2*J4
b97*F11*S1*J4 /*+ b98*F11*S2*J4*/;
mu = exp(linp);
a = mu/c;
/* Definition LL der Gammaverteilung + Binomialverteilung */
loglike = -a*log(c) - lgamma(a) + (a-1) * log(Nitrat) - (Nitrat/c) +
ispositiv*log(p) + (1-ispositiv)*log(1-p) + lgamma(1+1) - lgamma(ispositiv+1)
- lgamma(1-ispositiv+1) ;
End;

/* Anpassung kombiniertes Modell */
model Nitrat ~ General(loglike);

```

II. SAS Code des finalen ,TP3 - GLM + LK‘ Modells

```

Proc nlmixed data=MTk1 lognote;
Parms a0=16.6059 a1=-0.02191 /*a2=0.05*/
      a3=0.02707 a4=0.01251 a5=11.8881 a6=-14.8601 a7=0.01318 a8=-0.4422 a9=-
      13.3943 a10=-17.4421 a11=-13.6499 /*a12=0.05*/
      a13=-12.6808 a14=-1.5407 a15=1.0470 /*a16=0
      a17=0 a18=0 a19=0 a20=0*/
      a21=-16.2166 a22=-14.4813 a23=0.06482 a24=0.06482 a25=0.06534
      /*a26=0*/
      a27=-16.8082 a28=0.06425 a29=-14.4102 /*a30=0*/
      a31=0.07796 a32=0.07796 a33=0.1396 a34=-14.4044 a35=0.07783
      a36=0.07796 a37=0.07796 /*a38=0*/
      a39=-1.9356 a40=1.1561 a41=14.8962 a42=14.8963 a43=14.8963 /*a44=0*/
      a45=-16.2027 a46=-17.3808 a47=0.06472 a48=-13.7171 a49=0.06483
      a50=0.06483 a51=-16.5022 /*a52=0*/
      a53=-18.5018 a54=-33.3734 a55=0.06742 a56=-14.9399 a57=-17.2165 a58=-
      18.1411 a59=-18.5018 /*a60=0*/
      a61=-4.8605 a62=-19.2933 a63=-1.9611 a64=0.7705 a65=-1.1777 a66=-
      3.4026 a67=0.7705 /*a68=0*/
      a69=-0.00018 a70=-1.2935 a71=17.4783 a72=17.4770 a73=3.7916
      a74=17.4777 a75=2.9867 /*a76=0*/
      a77=-4.0437 a78=13.6865 a79=-0.00059 a80=-0.7478 a81=13.6865 /*a82=0*/
      a83=-13.6504 /*a84=0*/
      /*sb1=0.9352*/
      e=0.1 1 10 f=0.1 1 10
      c=0.4672;

/* 1. Part: Nitrat ja oder nein (Binomialverteilung) */
eta = a0 + a1*M1 + /*a2*M2*/ +
      a3*F1 + a4*F2 + a5*F3 + a6*F4 + a7*F5 + a8*F6 + a9*F7 + a10*F8 + a11*F9
      + /*a12*F11*/
      a13*M1*T4 + a14*M1*T3 + a15*M1*T2 + /*a16*M1*T1
      a17*M2*T4 + a18*M2*T3 + a19*M2*T2 + a20*M2*T1*/
      a21*F1*S1*J1 + a22*F1*S1*J2 + a23*F1*S1*J3 + a24*F1*S2*J1 +
      a25*F1*S2*J2 + /*a26*F1*S2*J3*/
      a27*F2*S1*J1 + a28*F2*S1*J2 + a29*F2*S1*J4 + /*a30*F2*S2*J4*/
      a31*F3*S1*J1 + a32*F3*S1*J2 + a33*F3*S1*J3 + a34*F3*S1*F4 +
      a35*F3*S2*J1 + a36*F3*S2*J2 + a37*F3*S2*J3 + /*a38*F3*S2*J4*/
      a39*F4*S1*J1 + a40*F4*S2*J2 + a41*F4*S1*J4 + a42*F4*S2*J1 +
      a43*F4*S2*J2 + /*a44*F4*S2*J4*/
      a45*F5*S1*J1 + a46*F5*S1*J2 + a47*F5*S1*J3 + a48*F5*S1*J4 +
      a49*F5*S2*J1 + a50*F5*S2*J2 + a51*F5*S2*J3 + /*a52*F5*S2*J4*/
      a53*F6*S1*J1 + a54*F6*S1*J2 + a55*F6*S1*J3 + a56*F6*S1*J4 +
      a57*F6*S2*J1 + a58*F6*S2*J2 + a59*F6*S2*J3 + /*a60*F6*S2*J4*/
      a61*F7*S1*J1 + a62*F7*S1*J2 + a63*F7*S1*J3 + a64*F7*S1*J4 +
      a65*F7*S2*J1 + a66*F7*S2*J2 + a67*F7*S2*J3 + /*a68*F7*S2*J4*/
      a69*F8*S1*J1 + a70*F8*S1*J2 + a71*F8*S1*J3 + a72*F8*S1*J4 +
      a73*F8*S2*J1 + a74*F8*S2*J2 + a75*F8*S2*J3 + /*a76*F8*S2*J4*/
      a77*F9*S1*J2 + a78*F9*S1*J3 + a79*F9*S1*J4 + a80*F9*S2*J1 +
      a81*F9*S2*J3 + /*a82*F9*S2*J4*/
      a83*F11*S1*J4 + /*a84*F11*S2*J4*/ + v;
p = 1 / (1 + exp(-eta));
/* Definition LL der Binomialverteilung */
If ispositiv = 0 then loglike = ispositiv*log(p) + (1-ispositiv)*log(1-p) +
lgamma(1+1) - lgamma(ispositiv+1) - lgamma(1-ispositiv+1);

/* 2. Part: Menge an Nitrat (Gammaverteilung) */
if ispositiv = 1 then do;
/* Definition 2. Phase als Linearkombination der 1. Phase */
linp = e + f*eta;

```

```

mu = exp(linp);
a = mu/c;
/* Definition LL der Gammaverteilung + Binomialverteilung */
loglike = -a*log(c) - lgamma(a) + (a-1) * log(Nitrat) - (Nitrat/c) +
ispositiv*log(p) + (1-ispositiv)*log(1-p) + lgamma(1+1) - lgamma(ispositiv+1)
- lgamma(1-ispositiv+1) ;
End;

/* Anpassung kombiniertes Modell */
model Nitrat ~ General(loglike);
Run;

```

III. SAS Code des finalen ,TP3 – GLMM' Modells

```

Proc nlmixed data=MTk1 lognote;
Parms a0=16.6059 a1=-0.02191 /*a2=0.05*/
a3=0.02707 a4=0.01251 a5=11.8881 a6=-14.8601 a7=0.01318 a8=-0.4422 a9=-
13.3943 a10=-17.4421 a11=-13.6499 /*a12=0.05*/
a13=-12.6808 a14=-1.5407 a15=1.0470 /*a16=0
a17=0 a18=0 a19=0 a20=0*/
a21=-16.2166 a22=-14.4813 a23=0.06482 a24=0.06482 a25=0.06534
/*a26=0*/
a27=-16.8082 a28=0.06425 a29=-14.4102 /*a30=0*/
a31=0.07796 a32=0.07796 a33=0.1396 a34=-14.4044 a35=0.07783
a36=0.07796 a37=0.07796 /*a38=0*/
a39=-1.9356 a40=1.1561 a41=14.8962 a42=14.8963 a43=14.8963 /*a44=0*/
a45=-16.2027 a46=-17.3808 a47=0.06472 a48=-13.7171 a49=0.06483
a50=0.06483 a51=-16.5022 /*a52=0*/
a53=-18.5018 a54=-33.3734 a55=0.06742 a56=-14.9399 a57=-17.2165 a58=-
18.1411 a59=-18.5018 /*a60=0*/
a61=-4.8605 a62=-19.2933 a63=-1.9611 a64=0.7705 a65=-1.1777 a66=-
3.4026 a67=0.7705 /*a68=0*/
a69=-0.00018 a70=-1.2935 a71=17.4783 a72=17.4770 a73=3.7916
a74=17.4777 a75=2.9867 /*a76=0*/
a77=-4.0437 a78=13.6865 a79=-0.00059 a80=-0.7478 a81=13.6865 /*a82=0*/
a83=-13.6504 /*a84=0*/
sb1=0.9352
b0=0.7686 b1=0.2741 /*b2=0*/
b3=2.4780 b4=1.7556 b5=2.0314 b6=0.3351 b7=2.7818 b8=-0.07381 b9=0.9376
b10=-1.3848 b11=-0.2142 /*b12=0*/
b13=-0.3626 b14=-1.0932 b15=-0.9103 b16=-0.6097 b17=-1.7015 b18=0.2987
b19=-1.4842 b20=-0.7288 b21=-0.3062 /*b22=0
b23=0 b24=0 b25=0 b26=0 b27=0 b28=0 b29=0 b30=0 b31=0 b32=0*/
b33=0.002451 b34=0.001148
b35=-3.6536 b36=-2.1562 b37=-0.6196 b38=-1.1512 b39=-0.1604 /*b40=0*/
b41=-1.7152 b42=0.2479 b43=-1.2446 /*b44=0*/
b45=-1.5202 b46=-0.4901 b47=0.5962 b48=-0.7342 b49=-0.3719 b50=0.7973
b51=0.9974 /*b52=0*/
b53=-1.4691 b54=0.8892 b55=2.1944 b56=1.4252 b57=-0.08543 /*b58=0*/
b59=-2.5702 b60=-3.3003 b61=-1.9164 b62=-1.5134 b63=-2.1084 b64=-
0.8338 b65=-2.7081 /*b66=0*/
b67=-1.4797 /*b68=0*/ b69=0.8642 b70=1.0378 b71=-0.3508 b72=0.2791 b73=-
0.7229 /*b74=0*/
b75=-1.2191 /*b76=0*/ b77=-0.4537 b78=-1.5329 b79=-0.1780 b80=-0.7348
b81=1.0658 /*b82=0*/
b83=0.6010 b84=0.1707 b85=3.2601 b86=3.3832 b87=1.3023 b88=3.3198
b89=1.1256 /*b90=0*/
b91=-0.9061 b92=2.2126 b93=1.9189 b94=1.2504 b95=0.8947 /*b96=0
b97=0 b98=0*/

```

```

c=0.4672 sb2=0.07600 sb12=0;

/* 1. Part: Nitrat ja oder nein (Binomialverteilung) */
eta = a0 + a1*M1 + /*a2*M2*/ +
a3*F1 + a4*F2 + a5*F3 + a6*F4 + a7*F5 + a8*F6 + a9*F7 + a10*F8 + a11*F9
+ /*a12*F11*/
a13*M1*T4 + a14*M1*T3 + a15*M1*T2 + /*a16*M1*T1
a17*M2*T4 + a18*M2*T3 + a19*M2*T2 + a20*M2*T1*/
a21*F1*S1*J1 + a22*F1*S1*J2 + a23*F1*S1*J3 + a24*F1*S2*J1 +
a25*F1*S2*J2 + /*a26*F1*S2*J3*/
a27*F2*S1*J1 + a28*F2*S1*J2 + a29*F2*S1*J4 + /*a30*F2*S2*J4*/
a31*F3*S1*J1 + a32*F3*S1*J2 + a33*F3*S1*J3 + a34*F3*S1*F4 +
a35*F3*S2*J1 + a36*F3*S2*J2 + a37*F3*S2*J3 + /*a38*F3*S2*J4*/
a39*F4*S1*J1 + a40*F4*S2*J2 + a41*F4*S1*J4 + a42*F4*S2*J1 +
a43*F4*S2*J2 + /*a44*F4*S2*J4*/
a45*F5*S1*J1 + a46*F5*S1*J2 + a47*F5*S1*J3 + a48*F5*S1*J4 +
a49*F5*S2*J1 + a50*F5*S2*J2 + a51*F5*S2*J3 + /*a52*F5*S2*J4*/
a53*F6*S1*J1 + a54*F6*S1*J2 + a55*F6*S1*J3 + a56*F6*S1*J4 +
a57*F6*S2*J1 + a58*F6*S2*J2 + a59*F6*S2*J3 + /*a60*F6*S2*J4*/
a61*F7*S1*J1 + a62*F7*S1*J2 + a63*F7*S1*J3 + a64*F7*S1*J4 +
a65*F7*S2*J1 + a66*F7*S2*J2 + a67*F7*S2*J3 + /*a68*F7*S2*J4*/
a69*F8*S1*J1 + a70*F8*S1*J2 + a71*F8*S1*J3 + a72*F8*S1*J4 +
a73*F8*S2*J1 + a74*F8*S2*J2 + a75*F8*S2*J3 + /*a76*F8*S2*J4*/
a77*F9*S1*J2 + a78*F9*S1*J3 + a79*F9*S1*J4 + a80*F9*S2*J1 +
a81*F9*S2*J3 + /*a82*F9*S2*J4*/
a83*F11*S1*J4 + /*a84*F11*S2*J4*/ + v;
p = 1 / (1 + exp(-eta));
/* Definition LL der Binomialverteilung */
If ispositiv = 0 then loglike = ispositiv*log(p) + (1-ispositiv)*log(1-p) +
lgamma(1+1) - lgamma(ispositiv+1) - lgamma(1-ispositiv+1);

/* 2. Part: Menge an Nitrat (Gammaverteilung) */
if ispositiv = 1 then do;
linp = b0 + b1*M1 /*+ b2*M2*/ +
b3*F1 + b4*F2 + b5*F3 + b6*F4 + b7*F5 + b8*F6 + b9*F7 + b10*F8 + b11*F9
+ /*b12*F11*/
b13*M1*F1 + b14*M1*F2 + b15*M1*F3 + b16*M1*F4 + b17*M1*F5 + b18*M1*F6
+ b19*M1*F7 + b20*M1*F8 + b21*M1*F9 + /*b22*M1*F11
b23*M2*F1 + b24*M2*F2 + b25*M2*F3 + b26*M2*F4 + b27*M2*F5 + b28*M2*F6
+ b29*M2*F7 + b30*M2*F8 + b31*M2*F9 + b32*M2*F11*/
b33*Niederschlag*M1 + b34*Niederschlag*M2 +
b35*F1*S1*J1 + b36*F1*S1*J2 + b37*F1*S1*J3 + b38*F1*S2*J1 +
b39*F1*S2*J2 + /*b40*F1*S2*J3*/
b41*F2*S1*J1 + b42*F2*S1*J2 + b43*F2*S1*J4 + /*b44*F2*S2*J4*/
b45*F3*S1*J1 + b46*F3*S1*J2 + b47*F3*S1*J3 + b48*F3*S1*F4 +
b49*F3*S2*J1 + b50*F3*S2*J2 + b51*F3*S2*J3 + /*b52*F3*S2*J4*/
b53*F4*S1*J1 + b54*F4*S2*J2 + b55*F4*S1*J4 + b56*F4*S2*J1 +
b57*F4*S2*J2 + /*b58*F4*S2*J4*/
b59*F5*S1*J1 + b60*F5*S1*J2 + b61*F5*S1*J3 + b62*F5*S1*J4 +
b63*F5*S2*J1 + b64*F5*S2*J2 + b65*F5*S2*J3 + /*b66*F5*S2*J4*/
b67*F6*S1*J1 + /*b68*F6*S1*J2 +*/ b69*F6*S1*J3 + b70*F6*S1*J4 +
b71*F6*S2*J1 + b72*F6*S2*J2 + b73*F6*S2*J3 + /*b74*F6*S2*J4*/
b75*F7*S1*J1 + /*b76*F7*S1*J2 +*/ b77*F7*S1*J3 + b78*F7*S1*J4 +
b79*F7*S2*J1 + b80*F7*S2*J2 + b81*F7*S2*J3 + /*b82*F7*S2*J4*/
b83*F8*S1*J1 + b84*F8*S1*J2 + b85*F8*S1*J3 + b86*F8*S1*J4 +
b87*F8*S2*J1 + b88*F8*S2*J2 + b89*F8*S2*J3 + /*b90*F8*S2*J4*/
b91*F9*S1*J2 + b92*F9*S1*J3 + b93*F9*S1*J4 + b94*F9*S2*J1 +
b95*F9*S2*J3 /*+ b96*F9*S2*J4
b97*F11*S1*J4 /*+ b98*F11*S2*J4*/ + u;
mu = exp(linp);
a = mu/c;

```

```

/* Definition LL der Gammaverteilung + Binomialverteilung */
loglike = -a*log(c) - lgamma(a) + (a-1) * log(Nitrat) - (Nitrat/c) +
ispositiv*log(p) + (1-ispositiv)*log(1-p) + lgamma(1+1) - lgamma(ispositiv+1)
- lgamma(1-ispositiv+1) ;
End;

/* Anpassung kombiniertes Modell */
model Nitrat ~ General(loglike);
Random v u ~ normal ([0,0],[sb1,sb12,sb2]) Subject= profilk;
Run;

```

Erklärung

Erklärung*

Hiermit erkläre ich,

Name, Vorname Bort, Katrin

Matrikelnummer 641139

dass ich bei der vorliegenden

- ☐ Bachelor-Arbeit ☒ Master-Thesis/Master-Arbeit
☐ Seminararbeit ☐ Diplomarbeit

die Regeln guter wissenschaftlicher Praxis eingehalten habe. Ich habe diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt und die wörtlich oder inhaltlich übernommenen Stellen als solche kenntlich gemacht.

Betreuende/r
Dozent/in Prof. Dr. Hans - Peter Piepho

Thema der Arbeit Bedeutung der Variabilität von N-Dynamiken und N-Flüssen für die Güte lokaler N-Bilanzen in der Landwirtschaft - Prozessbetrachtung und statistische Modellierung anhand des Vergleiches einer trockenen mit einer feuchten Region

Semester 5

Ich erkläre weiterhin, dass das unverschlüsselte digitale Textdokument der Arbeit übermittelt wurde, das in Inhalt und Wortlaut ausnahmslos der gedruckten Ausfertigung entspricht. Ich bin damit einverstanden, dass diese elektronische Form anhand einer Analyse-Software auf Plagiate überprüft wird.

Waiblingen, 15.10.2021, K. Bort

Ort, Datum, Unterschrift

* Diese Erklärung ist der eigenständig erstellten Arbeit als Anhang beizufügen. Arbeiten ohne diese Erklärung werden nicht angenommen.