

**Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen des
prozessorientierten Modells DNDC zur Schätzung
klimarelevanter Treibhausgasemissionen aus der
Pflanzenproduktion**

Dissertation

zur Erlangung
des akademischen Grades „Dr. rer. nat.“
Doktor der Naturwissenschaften

am Fachbereich 09
“Agrarwissenschaften, Ökötrophologie und Umweltmanagement”

der
Justus-Liebig-Universität
Gießen

vorgelegt von

Brigitta Margarete Szyska
aus Leverkusen

Gießen, den 12. Februar 2009

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Stand des Wissens	3
2.1	Klimarelevante Spurengase	3
2.2	Der anthropogene Treibhauseffekt.....	3
2.3	Klimawirksamkeit von N ₂ O	5
2.4	Quellen und Senken von N ₂ O	6
2.5	Stickstoffumsatzprozesse im Boden.....	8
2.5.1	Nitrifikation.....	9
2.5.2	Denitrifikation.....	10
2.6	Regulation der biologischen Spurengasbildung	11
2.7	Nichtbiologische Prozesse der N ₂ O-Bildung	15
2.8	N ₂ O-Emissionen landwirtschaftlich genutzter Flächen	15
2.9	Prozessorientierte Modelle zur Berechnung der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse im Boden	18
2.10	Sensitivitätsanalyse	22
2.11	Unsicherheitsanalysen	24
2.12	Monte Carlo Simulation.....	26
2.13	Beurteilung der Modellgenauigkeit durch Gütemaße.....	27
3	Das Denitrification Decomposition Modell	29
3.1	Das Bodenklimamodul	31
3.2	Das Mineralisationsmodul	33
3.3	Das Pflanzenwachstumsmodul	34
3.4	Der anaerobe Ballon	35
3.5	Das Nitrifikationsmodul	36
3.6	Das Denitrifikationsmodul	36
4	Methoden	38
4.1	Eingangsvariablen des DNDC Modells	38
4.1.1	Angaben zum Klima und zu den Witterungsverhältnissen	38
4.1.2	Angaben zu den Standortverhältnissen und der Bodenstruktur	38
4.1.3	Angaben zur Landbewirtschaftung und Managementmaßnahmen	39
4.2	Beschreibung der Referenzstandorte.....	42
4.3	Vorgehensweise bei der Modellanalyse	48
4.3.1	Sensitivitätsanalyse	48
4.3.2	Unsicherheitsanalyse	50
4.3.3	Verwendete Modellgütemaße.....	50

5	Ergebnisse und Diskussion	53
5.1	Sensitivitätsanalyse	53
5.1.1	Darstellung der sensitiven Parameter	53
5.1.1.1	Sensitive Parameter der Bodentemperatur	55
5.1.1.2	Sensitive Parameter des Bodenwassergehalts	56
5.1.1.3	Umsetzungsprozesse im Boden (Mineralisation)	59
5.1.1.4	Prozesse der Nitrifikation und der Denitrifikation	63
5.1.2	Wertebereiche der sensitiven Parameter	71
5.1.3	Rangfolge der sensitiven Parameter im Jahresverlauf	72
5.1.4	Diskussion der generalisierten Sensitivitätsanalyse für DNDC	80
5.1.4.1	Anzahl der Parameter und der empirisch ermittelten Koeffizienten	80
5.1.4.2	Parameter der Bodentemperatur	82
5.1.4.3	Parameter der Bodenfeuchtigkeit	83
5.1.4.4	Parameter der Umsatzprozesse	83
5.1.4.5	Parameter der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse	84
5.1.4.6	Betrachtung der wechselnden Sensitivitäten im Jahresverlauf	85
5.1.4.7	Kritische Betrachtung der verwendeten Methode	86
5.2	Unsicherheitsanalyse der DNDC Module Bodenklima, Mineralisation, Nitrifikation und Denitrifikation	88
5.2.1	Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse im Modul Bodenklima - Berechnung der Bodentemperatur	88
5.2.1.1	Punktgraphen für die Parameter aus der Berechnung der Bodentemperatur	88
5.2.1.2	Darstellung der Parameterunsicherheit in der modellierten Bodentemperatur	91
5.2.1.3	Auswirkung der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern der Boden- temperaturberechnung auf die von DNDC simulierte CO ₂ -Emissionen	94
5.2.1.4	Auswirkung der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern der Boden- temperaturberechnung auf die von DNDC simulierte N ₂ O-Emissionen	96
5.2.2	Ergebnisdiskussion der Unsicherheitsanalyse bezüglich der Bodentemperatur-berechnung	99
5.2.2.1	Punktgraphen	99
5.2.2.2	Modellierte Bodentemperatur	99
5.2.2.3	Auswirkungen auf die CO ₂ -Emissionen	101
5.2.2.4	Auswirkungen auf die N ₂ O-Emissionen	102
5.2.2.5	Übertragbarkeit veränderter Parameter auf andere Standorte bezüglich der Auswirkung auf die N ₂ O-Emissionen (Kreuzvalidierung)	105
5.2.3	Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse im Modul Bodenklima - Berechnung des Bodenwassergehalts	106
5.2.3.1	Punktgraphen für die Parameter aus der Berechnung des Bodenwasser- gehaltes	106

5.2.3.2	Darstellung der Parameterunsicherheit der modellierten Bodenwassergehalte	109
5.2.3.3	Auswirkungen der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern der Bodenwasserberechnung auf die von DNDC simulierten CO ₂ -Emissionen.....	113
5.2.3.4	Auswirkungen der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern der Bodenwasserberechnung auf die von DNDC simulierten N ₂ O-Emissionen.....	115
5.2.4	Ergebnisdiskussion der Unsicherheitsanalyse bezüglich der Bodenwassergehalts-berechnung	118
5.2.4.1	Punktgraphen	118
5.2.4.2	Modellierte Bodenwassergehalte	118
5.2.4.3	Auswirkung auf die CO ₂ -Emissionen	120
5.2.4.4	Auswirkung auf die N ₂ O-Emissionen	121
5.2.5	Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen des C-/N-Umsatzmoduls sowie des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls	123
5.2.5.1	Punktgraphen für die Parameter aus der Berechnung des C-/N-Umsatzmoduls und des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls bezüglich der CO ₂ -Emissionen	123
5.2.5.2	Auswirkung der Unsicherheitsanalyse mit den Parameter des Bodenklima-, C/N-Umsatz- und Nitrifikations-/Denitirifikationsmoduls auf die von DNDC simulierten CO ₂ -Emissionen.....	127
5.2.5.3	Punktgraphen für die Parameter aus der Berechnung des C-/N-Umsatzmoduls und des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls bezüglich der N ₂ O-Emissionen	131
5.2.5.4	Auswirkungen der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern des Bodenklima- und C-/N-Umsatzmoduls auf die von DNDC simulierten N ₂ O-Emissionen	134
5.2.5.5	Auswirkungen Unsicherheitsanalyse mit den Parametern des Bodenklima-, C -/N-Umsatz- und des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls auf die von DNDC simulierten N ₂ O-Emissionen	137
5.2.6	Ergebnisdiskussion der Unsicherheitsanalyse bezüglich der Module Bodenklima, C-/N-Umsatz, Nitrifikation und Denitrifikation.....	140
5.2.6.1	Punktgraphen	140
5.2.6.2	CO ₂ -Emissionen	140
5.2.6.3	N ₂ O-Emissionen bei Betrachtung der Module Bodenklima und C-/N-Umsatz	143
5.2.6.4	N ₂ O-Emissionen bei Betrachtung der Module Bodenklima, C-/N-Umsatz sowie Nitrifikation und Denitrifikation	145
6	Schlussbetrachtung und Fazit	147
7	Zusammenfassung	153
8	Literatur	156
9	Anhang auf CD-ROM.....	169

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.	Globale anthropogene Beiträge zur Erhöhung des Treibhausgasgehaltes in der Atmosphäre	4
Abb. 2.	Stickstoffkreislauf und Stickstoffumsetzungsprozesse im Boden	8
Abb. 3.	Darstellung der Reaktionsfolge bei der autotrophen Nitrifikation	9
Abb. 4.	Reaktionsfolge der heterotrophen Denitrifikation	10
Abb. 5.	Das „Hole-in-the-Pipe-Modell“	11
Abb. 6.	Einflussfaktoren auf die Prozesse der Nitrifikation und Denitrifikation	13
Abb. 7.	Darstellung der verschiedenen Schritte in der Monte Carlo Simulation	26
Abb. 8.	Schematische Darstellung des DNDC Modells	30
Abb. 9.	Schema des Bodenwasserhaushaltes in DNDC	32
Abb. 10.	Schematische Darstellung des anaeroben Ballons	35
Abb. 11.	Lage der Untersuchungsflächen in Deutschland und Österreich	44
Abb. 12.	Beispiel für die jahreszeitliche Variabilität der Parametersensitivität	73
Abb. 13.	Punktgraphen der sensitiven Parameter des Bodentemperaturmoduls	89
Abb. 14.	Simulierte und gemessene Bodentemperatur	93
Abb. 15.	Simulierte und gemessene CO ₂ -Emissionen in täglicher Auflösung	95
Abb. 16.	Simulierte und gemessene N ₂ O-Emissionen in täglicher Auflösung	97
Abb. 17.	Punktgraphen der sensitiven Parameter $P_Outwater_2$, P_DBAR und P_tev_1 des Bodenwassermoduls	107
Abb. 18.	Simulierte und gemessene Bodenwassergehalte	111
Abb. 19.	Simulierte und gemessene CO ₂ -Emissionen in täglicher Auflösung	114
Abb. 20.	Simulierte und gemessene N ₂ O-Emissionen in täglicher Auflösung	116
Abb. 21.	Punktgraphen der Parameter P_DRF , P_dBC , P_Fclay , P_RFMM und $P_dfactor$ aus dem C-/N-Umsatzmodul	125
Abb. 22.	Simulierte und gemessene CO ₂ -Emissionen in täglicher Auflösung	129
Abb. 23.	Punktgraphen der Parameter P_aen2o , P_RFMM und P_EEE aus dem C-/N-Umsatzmodul sowie aus dem Nitrifikations- und dem Denitrifikationsmodul	133
Abb. 24.	Simulierte und gemessene N ₂ O-Emissionen in täglicher Auflösung	136
Abb. 25.	Simulierte und gemessene N ₂ O-Emissionen in täglicher Auflösung	139
Abb. 26.	Gemessene und modellierte (DNDCoriginal) N ₂ O-Emissionen für die Untersuchungsfläche in Scheyern in täglicher Auflösung	151
Abb. 27.	Kumulierte gemessene und modellierte N ₂ O-Emissionen	152

Tabellenverzeichnis

Tab. 1.	Durch anthropogene Aktivitäten verursachte Veränderung der Konzentrationen der Treibhaus-gase CO ₂ , CH ₄ und N ₂ O	4
Tab. 2.	Eigenschaften der Treibhausgase CO ₂ , CH ₄ und N ₂ O	5
Tab. 3.	Globale Quellen und Senken von N ₂ O	7
Tab. 4.	Verbreitete prozessorientierte Modelle zur Berechnung von Nitrifikations- und Denitrifikationsprozessen im Boden	19
Tab. 5.	Überblick über verbreitete absolute und relative Gütemaße	28
Tab. 6.	Eingangsparameter für die Landbewirtschaftung des DNDC Modells	41
Tab. 7.	Charakterisierung der verwendeten Referenzstandorte	44
Tab. 8.	Fruchtfolge der Lysimeteranlage in Petzenkirchen	47
Tab. 9.	Übersicht über die sensitiven Parameter in DNDC	54
Tab. 10.	Ermittelte Wertebereiche aller sensitiven Parameter aus den DNDC Modulen	72
Tab. 11.	Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die Bodentemperatur	74
Tab. 12.	Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf den Bodenwassergehalt	75
Tab. 13.	Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die N ₂ O-Emissionen, aus der Berechnung des C-/N-Umsatzmoduls	76
Tab. 14.	Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die CO ₂ -Emissionen, aus der Berechnung des C-/N-Umsatzmoduls	77
Tab. 15.	Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die N ₂ O-Emissionen, aus der Berechnung der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse	78
Tab. 16.	Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die CO ₂ -Emissionen, aus der Berechnung Nitrifikation- und Denitrifikationsprozesse	79
Tab. 17.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der Bodentemperatur	91
Tab. 18.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der CO ₂ -Emissionen	94
Tab. 19.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der N ₂ O-Emissionen	96
Tab. 20.	Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse mit den sensitiven Parameter der Bodenwasserberechnung	109
Tab. 21.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse des Bodenwassergehalts	110
Tab. 22.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der CO ₂ -Emissionen nach Veränderungen im Bodenwassermodul	113
Tab. 23.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der N ₂ O-Emissionen nach Veränderungen im Bodenwasserhaushaltsmodul	115
Tab. 24.	Darstellung der für die Punktgraphen berücksichtigten Parameter aus dem C-/N-Umsatzmodul von DNDC	124
Tab. 25.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der CO ₂ -Emissionen nach Veränderungen im Bodenklima-, C/N-Umsatzmodul sowie in den Nitrifikations- und Denitrifikationsmodulen	128
Tab. 26.	Darstellung der für die Punktgraphen berücksichtigten Parameter aus dem C-/N-Umsatzmodul von DNDC	131
Tab. 27.	Darstellung der für die Punktgraphen berücksichtigten Parameter aus dem Nitrifikations- sowie aus dem Denitrifikationsmodul	132
Tab. 28.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der N ₂ O-Emissionen nach Veränderungen im Bodenklima- und C-/N-Umsatzmodul	135
Tab. 29.	Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der N ₂ O-Emissionen nach Veränderungen im Bodenklima-, C-/N-Umsatz- und Nitrifikation-/Denitrifikationsmodul	137

1 Einleitung

Seit Beginn der Industrialisierung wird ein zunehmender Einfluss von menschlichen Aktivitäten auf das Weltklima beobachtet. Neben dem natürlichen Treibhauseffekt, der für einen Temperaturanstieg sorgt und das Leben auf der Erde in dieser Form erst möglich macht, bedingt der anthropogen verursachte Treibhauseffekt einen starken Anstieg der Treibhausgase CO_2 , CH_4 , N_2O sowie der fluorierten Kohlenwasserstoffe. Die Freisetzung dieser klimarelevanten Gase erfolgt v.a. durch Industrie, Verkehr, private Haushalte und durch Landnutzungswandel bzw. die Landwirtschaft. Die Veränderung der Spurengaskonzentration in der Atmosphäre wirkt sich auf die globale Durchschnittstemperatur der Erdoberfläche, die Höhe und Verteilung von Niederschlägen, die Ausdehnung von Land- und Meereis, den Meeresspiegel, die atmosphärische und ozeanische Zirkulation sowie auf die Häufigkeit, mit der extreme Witterungs- und Klimaereignisse auftreten, aus (IPCC 2001).

Nach bisherigen Annahmen werden bis zu 80 % des anthropogen verursachten Lachgases (N_2O) aus der Landwirtschaft emittiert (Kroeze & Mosier 2002). Dabei stellen die Böden die größte Quelle dar. Die vermehrte Freisetzung von N_2O aus landwirtschaftlichen Systemen ist überwiegend auf den zunehmenden Eintrag von Stickstoff (in Form von N-Dünger) in die Biosphäre zurückzuführen (Mosier et al. 1998, IFA und FAO 2001).

Jedoch sind bei der Abschätzung von Emissionen (auf nationaler wie internationaler Ebene) Unsicherheiten nicht zu vermeiden. Gerade Schätzungen von N_2O -Emissionen aus landwirtschaftlichen Böden zeichnen sich durch große Unsicherheiten aus. Diese können bis zu zwei Zehnerpotenzen betragen (Rypdahl 2002). Sie sind u.a. durch die hohe Komplexität der Prozesse im Boden bzgl. der Mineralisation, Nitrifikation und Denitrifikation zu begründen. Faktoren wie Bodendynamik, Witterung oder Düngung wirken diesbezüglich verstärkend (Motz 2003).

Dennoch wird darüber diskutiert, klimarelevante N_2O -Emissionen als Indikator zur Bewertung der Nachhaltigkeit in der Landwirtschaft einzusetzen. Dazu sind modellgestützte Abschätzungen von N_2O -Emissionen ein unverzichtbares Mittel, da die Messung dieser Emissionen extrem kosten- und zeitaufwendig ist. Aus diesem

Grund wird auf Modelle zurückgegriffen, die die Prozesse im Boden darzustellen versuchen. Ein solches Modell ist das Denitrification Decomposition Modell (DNDC). DNDC ist ein sogenanntes prozessorientiertes biogeochemisches Modell, welches C- und N-Umsatzprozesse im Boden abbilden kann und sowohl die Emissionen von CO_2 , CH_4 , N_2O und NO aus Böden in die Atmosphäre als auch die Verlagerung von NO_3^- in das Grundwasser berechnet. DNDC hat in den vergangenen Jahren immer mehr Anwendung in Europa gefunden (Li et al. 2000, Stange 2001, Lamers et al. 2007a, Lamers et al. 2007b). Das Modell zeichnet sich dadurch aus, dass es im Vergleich zu seiner hochaufgelösten Darstellung der modellierten Größen (viele komplexe Prozesse sowie die Ausgabe von C- und N-Emissionen in täglicher Auflösung) einen relativ geringen Anspruch an Daten hat, mit denen die Modellberechnung initialisiert wird, verhältnismäßig leicht anwendbar ist, sowie jedem frei zur Verfügung steht. Auch wenn DNDC in der Wissenschaft häufig Anwendung findet, wird in umfangreichem Maße an seiner Verbesserung hinsichtlich seiner Prozessorientierung, der Transparenz seines Aufbaus sowie der Genauigkeit der Modellausgaben gearbeitet. Weiterhin wurde DNDC bezüglich seines Einsatzes in gemäßigten Klimazonen fast ausschließlich an Hand von Datensätzen aus Nordamerika überprüft.

Daher ist es Ziel dieser Arbeit, das DNDC Modell hinsichtlich seiner Vorhersagegenauigkeit und Prozessabbildung bzgl. der bodenbürtigen N_2O -Emissionen aus der Pflanzenproduktion zu überprüfen.

Dazu werden mit den verschiedenen Modellmodulen, die in die Berechnung der N_2O -Emissionen involviert sind, Analysen zur Sensitivität der vorherrschenden Parameter im Modell sowie Unsicherheitsanalysen durchgeführt. Darüber hinaus soll überprüft werden, ob es notwendig und möglich ist, DNDC für mitteleuropäische Verhältnisse zu kalibrieren.

2 Stand des Wissens

2.1 Klimarelevante Spurengase

Wasserdampf (H_2O), Kohlendioxid (CO_2), Methan (CH_4), Flurchlorkohlenwasserstoffe (FCKW) sowie Stickstoffoxidverbindungen (NO , N_2O und NO_2) gehören zu den klimarelevanten Spurengasen. Diese bewirken einen Treibhauseffekt, der für das Klima der Erde von großer Relevanz ist. Für die von der Sonne emittierte kurzwellige und energiereiche Strahlung (300 - 800 nm) sind diese Gase fast vollständig durchlässig, so dass die einergiereichen Strahlen nahezu ungehindert auf die Erdoberfläche treffen. Dahingegen wirken sie auf die von der Erde reflektierten langwelligen Strahlungen (4 - 100 μm) fast wie eine Barriere, so dass diese langwelligen Strahlen von den klimarelevanten Gasen zurück zur Erdoberfläche reflektiert werden. Nur ein geringer Teil der langwelligen Strahlungen kann in den Raum außerhalb der Atmosphäre emittieren. Dieses hat eine verringerte Wärmeabstrahlung der Erdoberfläche und der Troposphäre zur Folge, was zu einer Erhöhung der Erdtemperatur führt. Die natürlich vorkommende Treibhausgaskonzentration in der Atmosphäre führt zu einer durchschnittlichen Temperaturerhöhung an der Erdoberfläche von -18 °C auf ca. $+14\text{ °C}$ (IPCC 2001) bzw. $+15\text{ °C}$ (Enquete-Kommission 1992). Durch diesen natürlichen Treibhauseffekt wird das Leben in jetziger Form überhaupt erst ermöglicht.

2.2 Der anthropogene Treibhauseffekt

Mit Beginn der Industrialisierung Anfang des 19. Jahrhunderts ist die Konzentration von CO_2 , CH_4 , N_2O sowie fluorierten Kohlenwasserstoffen stark angestiegen. Dabei konnte zwischen 1970 und 2004 eine Zunahme der Treibhausgase, bezogen auf ihr Treibhausgaspotenzial (global warming potential – GWP^1), um 70 % beobachtet werden (IPCC 2007). Dieser Anstieg hat zu einer signifikanten Änderung der Spurengaskonzentration im Vergleich zur vorindustriellen Zeit geführt (Tab. 1). Gründe dafür sind die Verbrennung von fossilen Energieträgern, industrielle Produktionsprozesse, Landnutzungsänderungen, landwirtschaftliche Managementmaßnahmen wie auch die Produktion fluorierter Kohlenwasserstoffe (Abb. 1).

Tab. 1. Durch anthropogene Aktivitäten verursachte Veränderung der Konzentrationen der Treibhaus-gase CO₂, CH₄ und N₂O bis zum Jahr 2005 (IPCC 2007)

Gase	CO ₂ [ppm]	CH ₄ [ppb]	N ₂ O [ppb]
vorindustrielle Konzentration	280	700	270
aktuelle Konzentration (2005)	379	1774	319
Zunahme seit 1998	+ 13 ppm	+ 11 ppb	+ 5 ppb

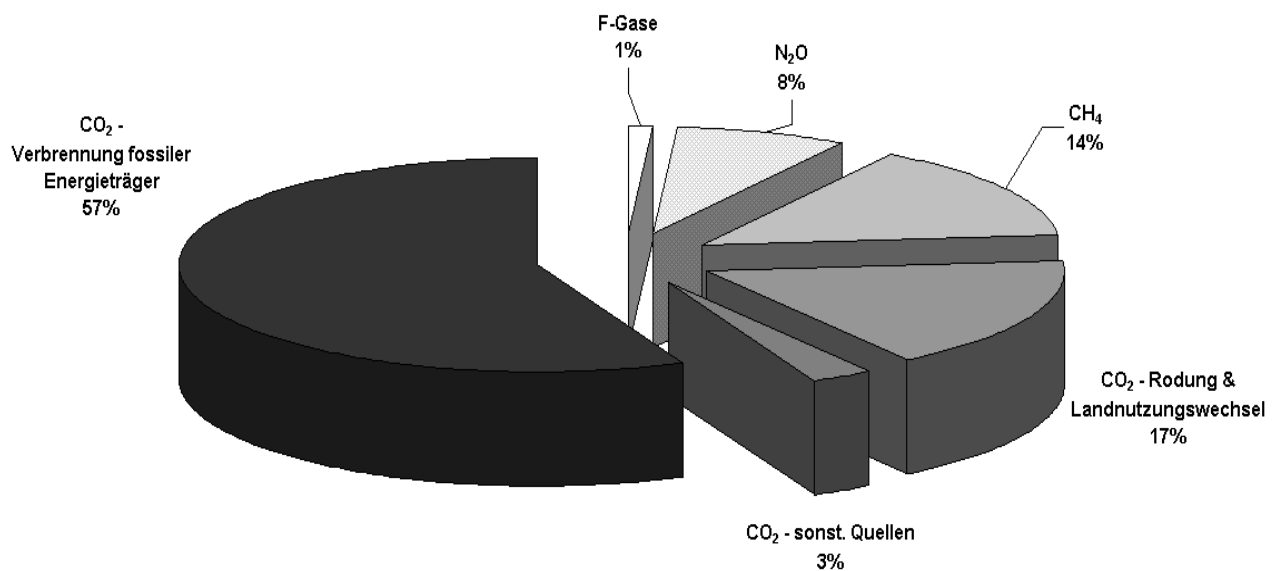


Abb. 1. Globale anthropogene Beiträge zur Erhöhung des Treibhausgasgehaltes in der Atmosphäre für das Jahr 2004 (verändert nach Olivier et al. 2005 und 2006 zitiert in IPCC 2007)

¹ GWP = Global Warming Potential: Index für die Abschätzung des relativen Beitrags verschiedener klimarelevanter Gase zum Treibhauseffekt. Er wird als das Verhältnis des „radiative forcing“ der Emission eines Kilogramms von einem bestimmten Treibhausgas und der Emission eines Kilogramms Kohlendioxid bezeichnet. Dabei wird die Fähigkeit bzgl. der Absorption von Infrarotstrahlung eines Gases, die jeweilige Verweildauer sowie die Zeitspanne (100 Jahre)², über die die klimatischen Effekte bewertet werden, berücksichtigt (IPCC 2001). radiative forcing [W * m²]: Maß für den Einfluss eines Faktors auf die Bilanz zwischen einfallender und ausgehender Energie im System Erde-Atmosphäre. Es ist ein Index für die Bedeutung eines Klimagases als eine Ursache des Klimawandels (IPCC 2007).

Durch die erhöhte Konzentration von Spurengasen wird zusätzlich zu dem natürlichen ein anthropogener Treibhauseffekt ausgelöst. Dieser hat zur Folge, dass die mittlere Temperatur der bodennahen Luftschichten und der Meeresoberflächen im 20. Jahrhundert um ca. $0,6^{\circ}\text{C}$ ($\pm 0,2^{\circ}\text{C}$) angestiegen ist. Generell wird eine Erhöhung der globalen mittleren Jahrestemperatur um mehr als 1°C , bezogen auf das Jahr 2000, als kritisch betrachtet. Als Folge einer solche Temperaturerhöhung werden ein Anstieg des Meeresspiegels sowie ein Verlust an Biodiversität vorhergesagt (Hansen et al. 2006, zitiert in IPCC 2007). Für die nächsten 100 bis 150 Jahre prognostiziert das IPCC (2007) eine bodennahe Temperaturerhöhung um $2,0 - 2,4^{\circ}\text{C}$ (bei einer Reduktion der CO_2 -Emissionen um 50 bis 85 % bezogen auf das Jahr 2000) bzw. bis zu $4,9 - 6,1^{\circ}\text{C}$ (bei einem Anstieg der CO_2 -Emissionen um 90 - 140 % bezogen auf das Jahr 2000).

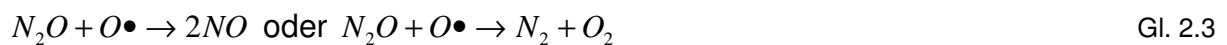
2.3 Klimawirksamkeit von N_2O

N_2O ist nach CO_2 und CH_4 das drittwichtigste natürliche Treibhausgas. Es verfügt über eine hohe Absorptionsfähigkeit für infrarote Strahlung, die die des Kohlenstoffdioxids um das 200-fache übersteigt. Seine Verweilzeit in der Atmosphäre beträgt, wegen seiner Reaktionsträgheit, 114 Jahre (vgl. Tab. 2). Durch diese Eigenschaften trägt N_2O trotz seiner geringen atmosphärischen Konzentration mit ca. 8 % zum anthropogen verursachten Treibhauseffekt bei.

Tab. 2. Eigenschaften der Treibhausgase CO_2 , CH_4 und N_2O bezogen auf das Jahr 2005 (IPCC 2007)

	CO_2	CH_4	N_2O
Mittlere Verweilzeit in der Atmosphäre [Jahre]	5 - 200	12	114
GWP (bezogen auf 100 Jahre)	1	23	296
Radioactive Forcing [W m^{-2}]	1,66	0,48	0,16
Änderung des Radioactive Forcing seit 1998 [%]	+ 13	-	+ 11

Neben seiner Wirkung als Treibhausgas trägt N_2O zum Abbau der Ozonschicht in der Stratosphäre bei (Crutzen 1981, Brasseur & Chatfield 1991, Robertson 1993, Graedel & Crutzen 1994). Aus der Photolyse von N_2O (Gl. 2.1) oder O_3 (Gl. 2.2) geht elektronisch angeregter Sauerstoff ($O\bullet$) hervor. Dieser kann dann mit N_2O weiter zu Stickstoffmonoxid (NO) (Gl. 2.3) oder zu elementarem Stickstoff (N_2) und Sauerstoff (O_2) (Gl. 2.3) reagieren. Aus dem vorhandenen NO kann dann mit dem stratosphärischen Ozon Stickstoffdioxid (NO_2) und Sauerstoff (O_2) gebildet werden (Gl. 2.4).



2.4 Quellen und Senken von N_2O

Seit den 1990er Jahren werden in den Berichten des Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) globale Bilanzierungen für N_2O veröffentlicht. Die Bilanzzahlen des jüngsten Berichtes stützen sich auf Berechnungen von Mosier et al. (1999), Kroeze et al. (1999 und 2005), Olivier et al. (1998) sowie Van Aardenne et al. (2001), Bouwman et al. (2001 und 2002) und Nevison et al. (2003 und 2004). Wie aus Tab. 3 zu entnehmen ist, stellen Böden die stärksten N_2O -Quellen dar. Bei den natürlichen Quellen sind es die tropischen Böden, die den größten Anteil ausmachen. Aus landwirtschaftlich genutzten Böden wird der größte Anteil des anthropogen bedingten N_2O emittiert. Nach Schätzungen von Haider (1996) werden aus ihnen sogar 70 – 80 % des anthropogen verursachten N_2O freigesetzt. Andere Schätzungen beziffern den prozentualen Anteil der N_2O -Emissionen aus der Landwirtschaft an den anthropogen verursachten N_2O -Emissionen auf ca. 62 % (Umweltdaten Deutschland online, www.env-it.de/umweltdaten). Als Hauptverursacher dieser hohen Emissionen wird eine an den Standort und die Ertragsleistungen der Pflanzen nicht angepasste Düngung gesehen. Diese führt dazu, dass der ausgebrachte Stickstoff entweder als NO_3^- ausgewaschen wird und somit in andere Ökosysteme gelangt (und dort u.U. in N_2O umgewandelt werden kann) oder

als N_2O , NH_3 , NO und N_2 in die Atmosphäre entweicht (Kersebaum 2004). Als bedeutende Senke von N_2O gilt der Abbau in der Stratosphäre (Tab. 3).

Tab. 3. Globale Quellen und Senken von N_2O . Nach dem dritten und vierten Report des IPCC (2001 und 2007). Berechnungen der globalen N_2O -Emissionen für den 3. IPCC Report nach ^aMosier et al. (1999) und ^bKroeze et al. (1999)/Olivier et al. (1998), zitiert in IPCC (2001). Zahlen des 4. IPCC Report stützen sich auf Van Aardenne et al. (2001), Bouwman et al. (2001 und 2002), Nevison et al. (2003 und 2004) und Kroeze et al. (2005), zitiert in IPCC (2007). Die Zahlen in den Klammern zeigen die Spannweite der berechneten Werte.

	IPCC 2001 Tg $\text{N}_2\text{O-N} * \text{a}^{-1}$	IPCC 2007 Tg $\text{N}_2\text{O-N} * \text{a}^{-1}$
Natürliche Quellen	9,6 ^a / 10,8 ^b	11,0
Böden mit natürlicher Vegetation	6,0 ^a / 6,6 ^b (3,3 – 9,9)	6,6 (3,3 – 9,0)
Ozeane	3,0 ^a / 3,6 ^b (1,0 – 5,7)	3,8 (1,8 – 5,8)
Atmosphäre (Oxidation von NH_3)	0,6 (0,3 – 1,2)	0,6 (0,3 – 1,2)
Anthropogene Quellen	8,1 ^a / 4,1 ^b	6,7
Verbrennung fossiler Energieträger	1,3 ^a / 0,7 ^b (0,2 – 1,8)	0,7 (0,2 – 1,8)
Verbrennung von Biomasse	0,5 ^a (0,2 – 1,0)	0,7 (0,2 – 1,0)
Landwirtschaft	6,3 ^a / 2,9 ^b (0,9 – 17,9)	2,8 (1,7 – 4,8)
Menschliche Exkrememente	-	0,2 (0,1 – 0,3)
Flüsse, Mündungsregionen, Küsten	-	1,7 (0,5 – 2,9)
Atmosphärische Deposition	-	0,6 (0,3 – 0,9)
∑ aller Quellen	17,7 ^a / 14,9 ^b (5,9 – 37,5)	17,7 (8,5 – 27,7)
Senken		
Abbau in der Atmosphäre	12,3 (9,0 – 16,0)	
Konzentrationsanstieg in der Atmosphäre	3,9 (3,1 – 4,7)	
∑ aller Senken	16,2 (12,1 – 20,7)	

Dabei wird N_2O zu 90 % durch die Photodissoziation (Gl. 2.1) abgebaut, lediglich 10 % des N_2O werden mit Hilfe des angeregten Sauerstoffs (Gl. 2.3) zu Stickstoffmonoxid oder elementarem Stickstoff umgewandelt (IFA & FAO 2001). Bei der Betrachtung der globalen Quellen ist weiterhin zu beachten, dass bei sämtlichen Lachgasemissionen aus Böden – natürlichen wie auch anthropogenen – die Unsicherheitsspanne sehr weit sein kann. Diese hohe Unsicherheit der prognostizierten Jahressummen ist damit zu begründen, dass bodenbürtige N_2O -

Emissionen von verschiedenen standortspezifischen Faktoren (Klima, Bodeneigenschaften, Pflanzenbestand) abhängen und somit eine hohe räumliche und zeitliche Variabilität aufweisen (Kammann et al. 1998, Papen & Butterbach-Bahl 1999, Ball et al. 2000, Teepe et al. 2000, Velthof et al. 2000 und Matzner & Borken 2008). Daher ist die Berechnung globaler N_2O -Bilanzen auf Grundlage weniger N_2O -Messungen mit deutlichen Unsicherheiten verbunden.

2.5 Stickstoffumsatzprozesse im Boden

Zu den bedeutendsten Stickstoffumsatzprozessen im Boden gehören die Mineralisation, Nitrifikation, Denitrifikation sowie die Immobilisation von anorganischen Stickstoffverbindungen (Abb. 2). Dabei sind die Nitrifikation und Denitrifikation für den größten Anteil des in Böden gebildeten N_2O verantwortlich (Firestone & Davidson 1989, Davidson 1991, Hutchinson & Davidson 1993, Granli & Bøckman 1994 und Bremner 1997,). An beiden Prozessen können sowohl autotrophe wie auch heterotrophe Mikroorganismen beteiligt sein (Trotoso & Hutchinson 1990, Pennington & Ellis 1993, Skiba et al. 1993).

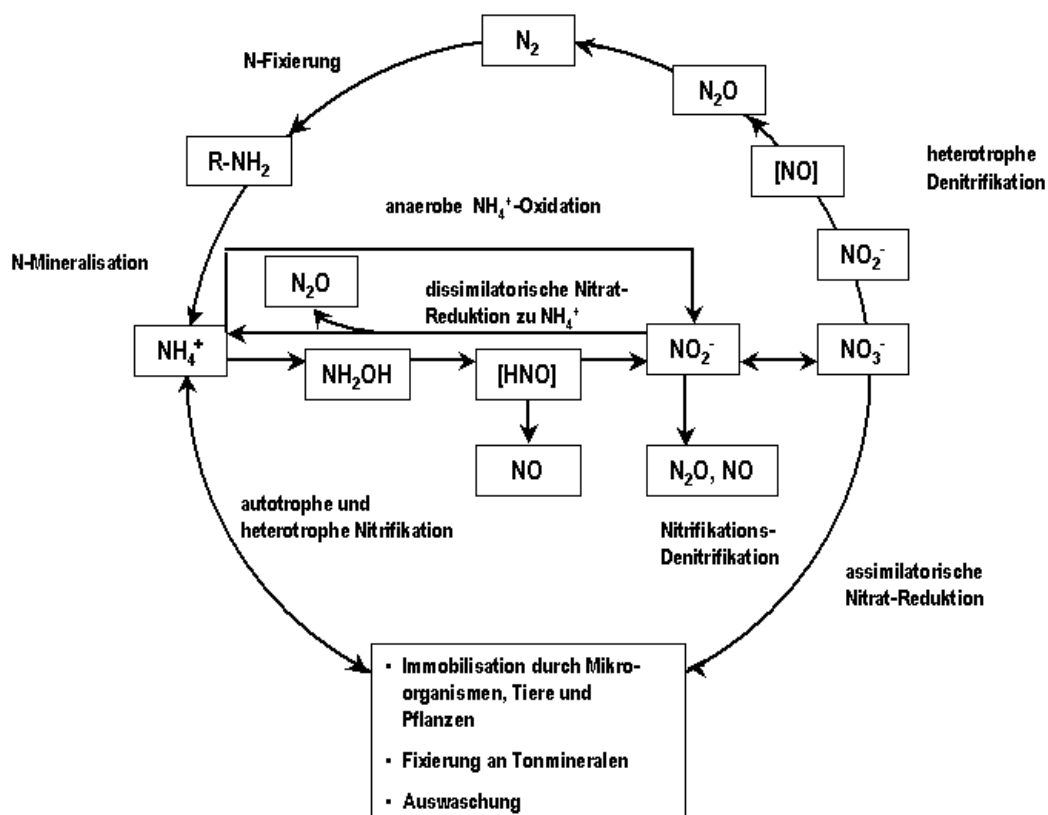


Abb. 2. Stickstoffkreislauf und Stickstoffumsatzprozesse im Boden (verändert nach Benckiser et al. 1996)

2.5.1 Nitrifikation

Das bei der Mineralisation entstandene NH_4^+ wird sowohl durch autotrophe als auch heterotrophe Mikroorganismen im Zuge der Nitrifikation unter aeroben Bedingungen zu NO_3^- umgesetzt. Die autotrophen Mikroorganismen nutzen das in der Bodenluft vorhandene CO_2 als Kohlenstoffquelle (Williams et al. 1992 und Granli & Bøckman 1994). Die dabei freigesetzte Energie wird von den Nitrifizierern überwiegend zur Fixierung des CO_2 verbraucht. Die Nitrifikation erfolgt in zwei Reaktionsschritten. Im ersten Schritt wird Ammonium durch Ammoniumoxidierer zu Nitrit umgesetzt (vgl. Abb. 2 und Abb. 3). Bakterien der Gattungen *Nitrosomonas*, *Nitrosococcus*, *Nitrospira* sowie *Nitrosolobus* sind beispielsweise dazu in der Lage (Bremner & Blackmer 1981).

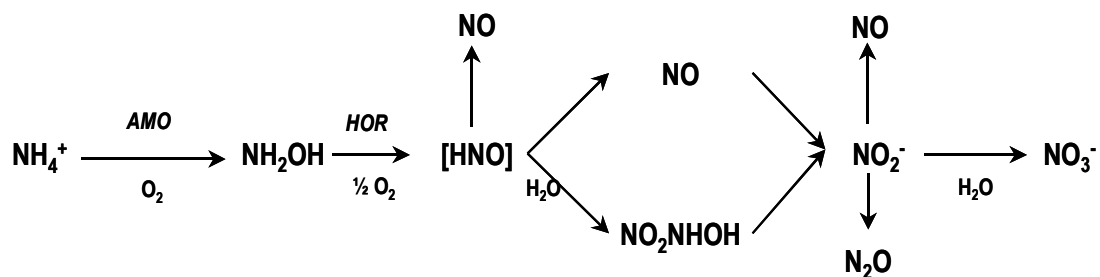


Abb. 3. Darstellung der Reaktionsfolge bei der autotrophen Nitrifikation mit den bei der Umsetzung gebildeten Zwischenprodukten sowie den daraus entweichenden gasförmigen Stickstoffverbindungen (verändert nach Paul und Clark (1996) und Weiske et al. (2001)); AMO = Ammonium-Monooxygenase, HOR = Hydroxylamin-Oxidoreduktase

Im zweiten Schritt der Nitrifikation wird Nitrit zum Nitrat oxidiert. Dieser Umsetzungsprozess wird unter anderem von Organismen der Gattung *Nitrobacter* durchgeführt. Das bei dem ersten Schritt der Nitrifikation produzierte Nitrit, welches ein wirksames Zellgift ist, kann sich nicht akkumulieren, da die beiden Prozesse der Nitrifikation zum Einen *in-situ* sehr stark aneinander gekoppelt sind. Zum Anderen läuft die Umsetzung von Nitrit zu Nitrat deutlich schneller ab, als die Oxidation von Ammonium zu Nitrit.

Tritt während der Nitrifikation Sauerstoffmangel ein, so sind einige Ammoniumoxidierer in der Lage, Nitrit als Elektronenakzeptor zu verwenden (Seiler & Conrad 1981, Firestone & Davidson 1989 und Venterea & Rolston 2000). Da bei dieser Reduktion von Nitrit u.a. N_2O gebildet wird, wird dieser Prozess auch als „Nitrifizierer-Denitrifikation“ bezeichnet. Es wird angenommen, dass die Reduktion des Nitrits dazu dient, bei Sauerstoffmangel ein günstiges Redoxpotential im Boden zu erhalten. Des Weiteren trägt sie dazu bei, dass keine toxischen Nitrit-

Konzentrationen akkumuliert werden können (Firestone & Davidson 1989 und Paul & Clark 1996).

Eine N_2O -Produktion durch heterotrophe Nitrifikation konnte v.a. bei Pilzen und einigen Bakterien festgestellt werden. Dabei werden Ammonium und organische Stickstoffverbindungen zu Nitrat oxidiert. Allerdings kommt es bei der heterotrophen Nitrifikation (Oxidation von NH_4^+ und organischem N zu Nitrat) nicht zum Energiegewinn. Es wird angenommen, dass diese Art der N_2O -Produktion lediglich auf sauren Waldböden eine Rolle spielt (Barraclough & Puri 1995 und Paul & Clark 1996).

2.5.2 Denitrifikation

Bei der Denitrifikation wird schrittweise Nitrat oder Nitrit über die gasförmigen Zwischenprodukte Stickstoffmonoxid und Distickstoffoxid unter strikt anaeroben Bedingungen zu elementarem Stickstoff reduziert (Abb. 4).

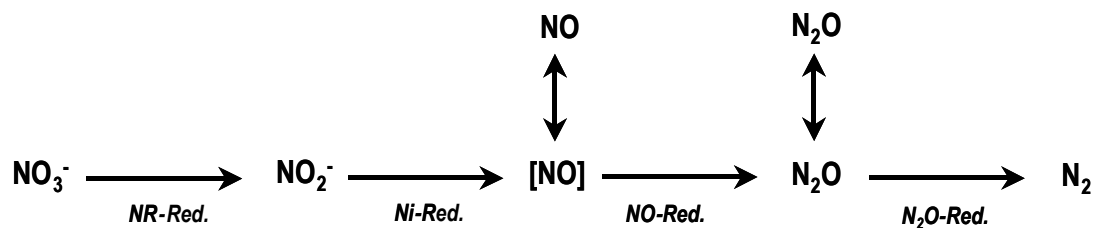


Abb. 4. Reaktionsfolge der heterotrophen Denitrifikation mit den bei der Umsetzung gebildeten Zwischenprodukten (verändert nach Weiske et al. 2001); *NR-Red.* = Nitrat-Reduktase, *Ni-Red.* = Nitrit-Reduktase, *NO-Red.* = NO-Reduktase, *N₂O-Red.* = N₂O-Reduktase

Die Denitrifizierer gewinnen ihre Energie aus der Oxidation ihres Reduktionsmittels. Bei vielen sind dies organische Verbindungen, die auch als Kohlenstoffquelle verwendet werden. Die Gruppe der zur Denitrifikation befähigten Bakterien ist sehr heterogen und ubiquitär vorhanden. Heterotrophe Denitrifikanten nutzen als Reduktionsmittel organische Substrate (Schlegel 1992), wie die meisten Bodenbakterien (*Pseudomonas spec.*, *Alcaligenes spec.*, *Bacillus spec.*, *Agrobacterium spec.*). Lithotrophe Denitrifikanten nutzen als Elektronendonator reduzierte Schwefelverbindungen (Böttcher 1992), wie *Thiobacillus denitrificans*, oder Eisen(II)-Verbindungen wie *Gallionella ferruginea* (Buresh & Moraghan 1976 und Postma 1990). Andere Arten sind phototroph (*Rhodospseudomonas spec.*) oder diazotroph (*Rhizobium* und *Azospirillum*) (Paul & Clark 1996).

Auch wenn der Prozess der Denitrifikation nur unter anaeroben Bedingungen abläuft, sind keine obligat anaeroben Mikroorganismen bekannt. Kommt es im Boden zur Anaerobiose, so stellen die zur Denitrifikation fähigen Organismen von Sauerstoffatmung auf „Nitratatmung“ um (Schlegel 1992) und verwenden Nitrat oder Nitrit an Stelle von elementarem Sauerstoff als Elektronenakzeptor. Neben diesen fakultativ anaeroben Bakterien können auch einige Pilzarten (z.B. *Fusarium*, *Acremonium* und *Aspergillus*) Nitrat reduzieren (Malinowsky & Ottow 1995).

2.6 Regulation der biologischen Spurengasbildung

Mit dem „Hole in the Pipe Modell“ hat Davidson (1991) den Zusammenhang von Bildung, Verbrauch und Freisetzung von N_2O und NO bei der Nitrifikation und Denitrifikation dargestellt (Abb. 5).

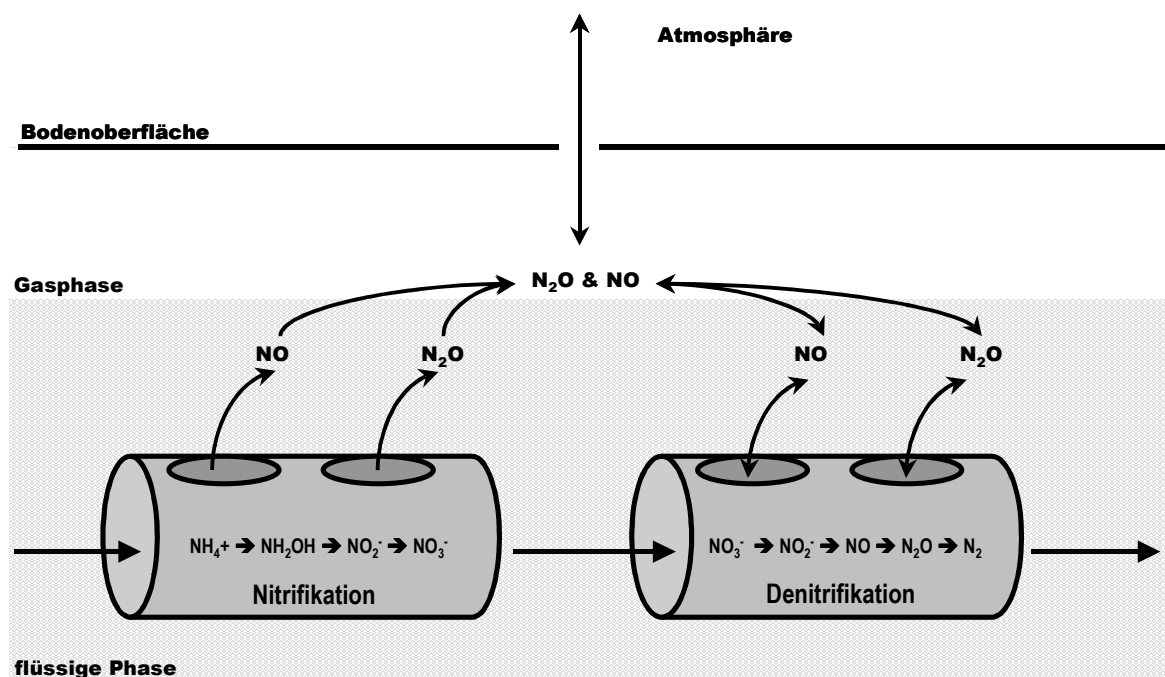


Abb. 5. Das „Hole-in-the-Pipe-Modell“ (verändert nach Davidson 1991)

In dem Konzept von Davidson (1991) entsprechen die Prozessraten den in den Röhren umgesetzten Stickstoffmengen. Die Höhe der freigesetzten Stickstoffverbindungen hängt von den Prozessraten der Nitrifikation und Denitrifikation ab.

Ein weiterer Faktor, der die N-Spurgasfreisetzung beeinflusst, ist das N_2O/N_2 - bzw. NO/N_2 - Verhältnis zum übrigen Reaktionsprodukt NO_3^- . Dieses wird mittels der Leckgrößen (*hole*) in den Prozessröhren (*pipe*) dargestellt (Abb. 5). Der dritte Faktor, der die Emissionen von N_2O und NO beeinflusst, ist die Diffusion der Gase zur

Bodenoberfläche. Auf diesem Weg können die Spurengase durch weitere Denitrifikationsprozesse wieder konsumiert werden. Dieser Faktor wird besonders vom Ort der N_2O - und NO -Bildung im Boden, der Bodentextur sowie vom Wassergehalt des Bodens beeinflusst. Bei dem „Hole in the Pipe“ Konzept wird deutlich, dass die Produktion der N-Spurengase im Boden nicht gleichzusetzen ist mit deren Emission.

Wichtige Einflussgrößen für den Prozess der Nitrifikation sind die Ammonium- und die Sauerstoffkonzentrationen im Boden, der pH-Wert der Bodenlösung, der Bodenwassergehalt und die Bodentemperatur (Abb. 6) (Robertson 1989 und Li 2000). Das Ausgangssubstrat (NH_4^+) stellt in Böden oft den limitierenden Faktor für die Nitrifikation dar. Die Substratnachlieferung von NH_4^+ ist abhängig von unterschiedlichen Faktoren wie der Mineralisationsrate, der Immobilisation, der Aufnahme von Ammonium durch die Vegetation sowie der Adsorption von Ammonium an die Bodenmatrix (vgl. Abb. 6). Durch zusätzliches organisches Material im Boden wird generell die mikrobiologische Aktivität gesteigert. Dies kann dazu führen, dass sich durch die gesteigerte Respiration lokale anaerobe Bedingungen einstellen, die wiederum zu einer Verringerung der Nitrifikation führen. In aeroben Böden herrscht i.d.R. jedoch nur für kurze Zeit ein Sauerstoffmangel (Haynes 1986). Die Wirkung des pH-Wertes auf die N_2O -Produktion im Zuge der Nitrifikation ist komplex (Granli & Bøckman 1994). Ein Anstieg der Nitrifikationsrate kann festgestellt werden, wenn der pH-Wert von sauren auf leicht basische Bedingungen steigt. Dabei nimmt jedoch die Produktion der N-Spurengase ab. Ein Optimum der Nitrifikationsrate kann, wie bei vielen anderen biologischen Prozessen, zwischen 25 und 35 °C festgestellt werden (Bock et al. 1986). Temperaturextreme wirken sich hemmend auf die Nitrifikationsrate aus. Zwar konnten Röver et al. (1998) zeigen, dass mikrobiologische Prozesse sogar noch in gefrorenen Böden stattfinden können, allerdings sind bei diesen Temperaturen keine hohen Umsatzraten zu erwarten. Optimale Bedingungen für die Nitrifikation wurden ebenso bezüglich der Wassergehalte im Boden gefunden. Bei 30 – 60 % wassergefülltem Porenvolumen (*water filled pore space*, WFPS) können die höchsten Nitrifikationsraten verzeichnet werden (Bouwman 1998). Steigt der Wassergehalt des Bodens über 60 % WFPS, so verringert sich die Nitrifikationsrate auf Grund geringerer Aktivität der Nitrifizierer, da steigende Wassergehalte zunehmend anaerobe Verhältnisse im Boden bedingen (Bøckmann 1994).

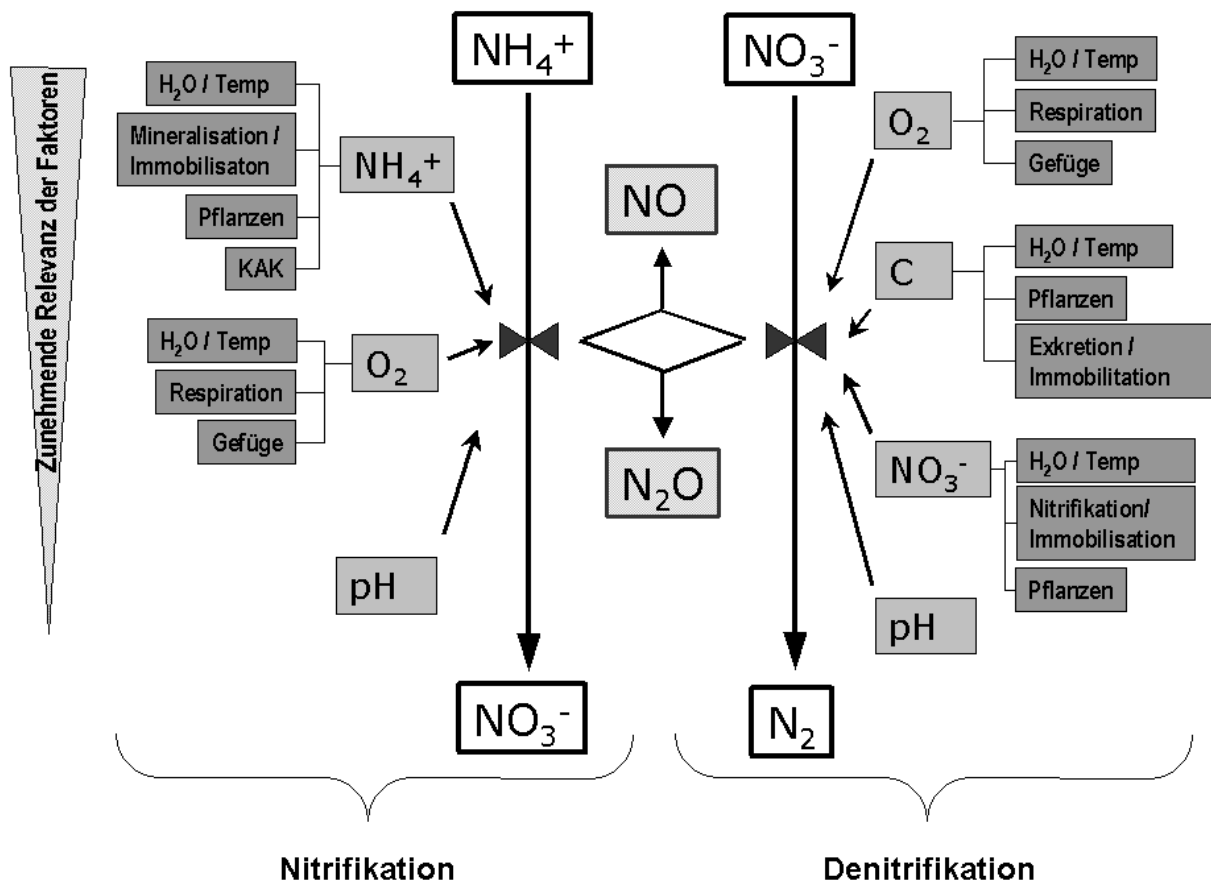


Abb. 6. Einflussfaktoren auf die Prozesse der Nitrifikation und Denitrifikation (verändert nach Robertson 1989)

Die einflussreichsten Faktoren, die auf den Denitrifikationsprozess wirken, sind die Sauerstoffkonzentration im Boden, der Kohlenstoffgehalt, die Bodentemperatur, der Bodenwassergehalt, die Verfügbarkeit von Nitrat sowie der pH-Wert im Boden (Abb. 6). Der Sauerstoffpartialdruck im Boden ist abhängig von der Sauerstoffnachlieferung aus der Atmosphäre und dem Verbrauch durch die Respiration. Anaerobe Verhältnisse, die eine Denitrifikation auslösen, können einerseits durch eine verringerte Sauerstoffdiffusion auf Grund hoher Bodenwassergehalte und andererseits durch ungünstige Aggregatstrukturen (Bodenverdichtung) auftreten (Robertson 1989). Des Weiteren kann eine Verringerung der Sauerstoffdiffusion auch durch einen gestiegenen Sauerstoffverbrauch bei der Zersetzung organischer Substanzen hervorgerufen werden (Avalakki et al. 1995 und Flessa & Beese 1995). Die für die Mikroorganismen verfügbaren Kohlenstoffverbindungen stellen einen weiteren limitierenden Faktor bei der Denitrifikation dar (Weier et al. 1993 a, b). Sie werden von den meisten Denitrifikanten als Energiequelle genutzt. Mit steigender

Nitratkonzentration steigt die Denitrifikationsrate bis zu einem bestimmten Niveau an, bleibt dann allerdings konstant (Granli & Bøckmann 1994).

Bezüglich der Bodenreaktion konnten hohe Raten der Denitrifikation bei neutralen bis leicht alkalischen Bedingungen (pH-Werte 7 bis 8) gemessen werden (Hynes & Knowles 1980). Nach Firestone et al. (1980) unterscheiden sich die Mikroorganismenpopulationen von Standorten mit verschiedener Bodenreaktionen hinsichtlich ihres optimalen pH-Bereiches für die Denitrifikation.

Da nicht alle Denitrifizierer NO_3^- vollständig zu N_2 reduzieren, treten N_2O wie auch NO als Produkte der Denitrifikation auf und können zu gasförmigen N-Verlusten führen. Das Mischungsverhältnis der gasförmigen Produkte der Denitrifikation ist sehr variabel und abhängig von unterschiedlichsten Faktoren. Hohe Emissionsraten von N_2O und NO sind daher nicht unmittelbar mit hohen Denitrifikationsraten gleichzusetzen.

Die N_2O -Reduktase reagiert sensibel auf eine Erhöhung der O_2 -Konzentration. Sie ist unter aeroben Bedingungen nicht persistent und muss beim Auftreten von anaeroben Verhältnissen wieder neu gebildet werden (Dendooven & Anderson 1994). Bei vollständiger Anaerobiose sinkt das $\text{N}_2\text{O}/\text{N}_2$ -Verhältnis und Nitrat wird überwiegend zu N_2 reduziert. Ist die Anaerobiose unvollständig, erhöht sich dagegen der Anteil des freigesetzten N_2O mit zunehmender Sauerstoffkonzentration, wobei die Denitrifikationsrate insgesamt sinkt (Paul & Clark 1996). So wurden z.B. bei der Denitrifikation die höchsten N_2O -Bildungsraten bei einem WFPS von bis zu 60 % (abhängig von den Bodeneigenschaften) nachgewiesen (Smith et al. 1997 und Bouwman 1998).

Wenn bei ausreichendem Nitratangebot die Kohlenstoffquelle limitiert ist, werden Nitrat und Nitrit nur unvollständig reduziert. Sowohl N_2O als auch NO treten dann als gasförmige Verluste auf (Bouwman 1990).

Auch die Bodentemperatur hat einen starken Einfluss auf die Denitrifikation, da sich vor allem die Aktivität der N_2O -Reduktase bei abnehmenden Temperaturen verringert. Deutliche Einschränkungen können bereits ab einer Bodentemperatur von 5 °C festgestellt werden. Das Temperaturoptimum der Denitrifikation liegt wie bei der Nitrifikation zwischen 25 und 35 °C.

Ebenso kommt es zu einer deutlichen Verringerung der N_2O -Reduktase-Aktivität bei pH-Werten < 5. In sauren Böden und bei Temperaturen um den Gefrierpunkt steigt die Menge des emittierten N_2O verglichen zu der des N_2 deutlich an (Weier & Gilliam 1986). Flessa et al. (1998) konnten beobachten, dass mit sinkenden pH-Werten die

Gesamtrate der Denitrifikation sinkt und der Anteil des N_2O ansteigt. Durch die Abhängigkeit der denitrifikatorischen N_2O -Bildung von unterschiedlichsten Faktoren kann der relative Anteil des freigesetzten N_2O -N an der Gesamt N-Freisetzung der Denitrifikation zwischen 0 und 100 % betragen. Daher kann der Anteil des in diesem Prozess gebildeten N_2O nur schwer abgeschätzt werden (Granli & Bøckman 1994).

2.7 Nichtbiologische Prozesse der N_2O -Bildung

In Böden, die saure pH-Bedingungen aufweisen ($pH < 4.0$), kann Nitrit auch chemisch abgebaut werden (McKenney et al 1990 und Li et al. 2000). Dabei werden, wie bei der Denitrifikation, N_2O , NO und N_2 gebildet. Dieser Prozess wird als Chemodenitrifikation bezeichnet.

Ein weiterer nichtbiologischer Prozess, bei dem N_2O entstehen kann, ist der chemische Abbau von Hydroxylamin (NH_2OH). Hydroxylamin wird als Zwischenprodukt bei der Nitrifikation gebildet und kann im Vergleich zur Chemodenitrifikation deutlich größere Mengen an N_2O freisetzen. Bei der Reaktion von Nitrit mit Hydroxylamin wird ebenfalls N_2O gebildet. Die Mengen, die bei diesem Vorgang produziert werden, sind jedoch vernachlässigbar klein.

2.8 N_2O -Emissionen landwirtschaftlich genutzter Flächen

Die N_2O -Emissionsraten verschiedener Standorte weisen eine sehr hohe Variabilität auf. Dieses gilt im besondern für Agrarökosysteme (Bouwman 1990). Daher sind Abschätzungen von N_2O -Emissionen aus landwirtschaftlich genutzten Flächen mit großen Unsicherheiten behaftet. Granli und Bockmann (1994) vermuten als Grund für diese großen Unterschiede, dass die pedogenen Einflussfaktoren der N_2O -Emissionen durch landwirtschaftliche Managementmaßnahmen beeinflusst werden. So haben Bodenbearbeitungsmaßnahmen unterschiedlichste Auswirkungen auf die N_2O -Emissionen. Staley et al. (1990), Hansen et al. (1993), Ruser et al. (1998) sowie Chatskikh und Olesen (2007) zeigten, dass die Bodenbearbeitung selbst bzw. eine Intensivierung derselben eine Erhöhung der N_2O -Emissionen bewirkten. Motz (2003) stellte dagegen fest, dass aus Flächen mit Bodenbearbeitung deutlich weniger N_2O emittiert wurde als aus Flächen mit reduzierter Bodenbearbeitung und Direktsaat. Sie führte dieses darauf zurück, dass in ungestörten Böden eine höhere Mikroorganismenaktivität vorherrscht (Hilton et al. 1994 und Palma et al. 1997),

bedingt durch eine höhere Bodenfeuchte (Staley et al. 1990) und höhere Kohlenstoffgehalte (Hilton et al. 1994, Ball et al. 1997 und van Bochove et al. 2000). Die Verdichtung des Bodens durch schwere Bearbeitungsgeräte kann ebenfalls zur Erhöhung der N₂O-Emissionen beitragen. Hilton et al. (1994) sowie Flessa et al. (2002) fanden höhere N₂O-Emissionen in Fahrspuren und verdichteten Zwischenreihen als in den unverdichteten. Motz (2003) konnte zeigen, dass durch einen geringeren Reifendruck die N₂O-Emissionen einer Fläche um bis zu 39 % vermindert werden konnten.

Neben der applizierten N-Menge beeinflusst die Fruchtfolge und die Einarbeitung von Ernterückständen auf erhebliche Weise die N₂O-Emissionen. Flessa und Beese (1995) konnten nach Einarbeitung der Erntereste einen Anstieg der Emissionen beobachten. Motz (2003) stellte fest, dass bei einer leguminosenreichen Fruchtfolge nach Stoppelbearbeitung 6 bis 157 % mehr Lachgas emittiert wurde als bei einer leguminosenarmen Fruchtfolge. Auch Kaiser et al. (1998b) fanden signifikant verschiedene N₂O-Verluste in Fruchtfolgen mit und ohne Leguminosen. Dabei konnten Kaiser et al. (1998b) während der Vegetationsperiode die geringsten Emissionen bei einer ungedüngten Kleefläche und die höchsten Emissionen bei einer gedüngten Weidelgrasfläche beobachten. In einer anderen Studie von Kaiser et al. (1998a) zeigte sich der Einfluss der Fruchtfolge und der damit verbundenen verschiedenen Erntereste auf die Lachgasemission. In Versuchsreihen, in denen der Anbau von Zuckerrüben, Raps, Winterweizen und Gerste hinsichtlich ihrer N₂O-Emissionen untersucht wurden, waren die höchsten N₂O-Emissionen in den Zuckerrübenflächen zu verzeichnen, obwohl für diese Kultur die geringste Stickstoffmenge appliziert wurde.

Die stärksten N₂O-Emissionen sind allerdings in Folge von Stickstoffdüngungen zu beobachten. So führt eine Stickstoff-Düngung i.d.R. zu einem Anstieg der Emission (Bouwman 1990, Eichner 1990, van Kessel et al. 1993 und Granli & Bøckmann 1994). Auch hat die Düngerart sowie deren Ausbringungsverfahren Einfluss auf die Produktion und Emission von N₂O. Oft ist nach organischer Düngung eine stärkere N₂O-Emission zu beobachten als nach mineralischer Düngung (Velthof & Oenema 1995, Kaiser & Ruser 2000 und Boeckx & van Cleemput 2001). Leik (2003) konnte hingegen keinen eindeutigen Einfluss der Düngerform beobachten. Auch Robertson et al. (2000) fanden keine Unterschiede von N₂O-Emissionen zwischen organisch gedüngten, reduziert gedüngten und konventionell gedüngten Flächen.

Bei Untersuchungen hinsichtlich des Einflusses der Ausbringungsverfahren von Wirtschaftsdüngern auf die N_2O -Emissionen stellte sich heraus, dass es bei Verdünnung mit Wasser (Motz 2003) sowie bei der Anwendung von Schlitzdrill- oder Schleppschauchverfahren zu höheren N_2O -Emissionen kommt, verglichen mit der Ausbringung mittels eines Pralltellers (Schürer 2001 und Leik 2003). Eine Einarbeitung von Flüssigmist auf Grünland bewirkte höhere N_2O -Emissionen, auf Ackerland dagegen deren Minderung (Motz 2003).

Basierend auf dem positiven Zusammenhang zwischen der Höhe der N-Gabe und der Höhe der N_2O -Freisetzung wurden Richtlinien entwickelt, die für die nationale Abschätzung des Beitrags landwirtschaftlich genutzter Böden zu den N_2O -Emissionen verwendet werden. Nach den Richtlinien des IPCC (2006) werden die N-Einträge mit dem Faktor von 0,01 unabhängig von der Stickstoffform multipliziert, um die N_2O -Emission abzuleiten. Zu diesem Wert wird eine bodenbürtige Hintergrundemission von $1 \text{ kg } \text{N}_2\text{O-N ha}^{-1}$ addiert (Mosier et al. 1998 und Kroeze et al. 1999). Der von der IPCC verwendete Faktor basiert auf Untersuchungen von Bouwman et al. (2002a, b), Stehfest & Bouwman (2006) sowie Novoa & Tejeda (2006). Nach IPCC (2006) ist dieser Berechnungsansatz für die durch N-Dünger induzierten N_2O -Emissionen für eine große Anzahl von Standorten anwendbar. Allerdings weisen die Autoren der Richtlinie selber darauf hin, dass dieser Berechnungsansatz stark vereinfacht ist und nicht für jeden Standort plausible Ergebnisse liefert. Sofern es die Datenlage erlaubt, sollten die Berechnungen für N_2O -Emissionen aus landwirtschaftlich genutzten Flächen detaillierter vorgenommen werden. Es sollten verschiedene Umweltfaktoren (Klima, organischer Kohlenstoffgehalt des Bodens, Bodentextur, Dränung sowie der pH-Wert der Bodenlösung) sowie managementinduzierte Faktoren (N-Applikationsrate pro Mineraldüngertyp, Fruchtart, Unterscheidung zwischen Leguminosen und Nichtleguminosen sowie Grünland) mehr Berücksichtigung finden (IPCC 2006).

Dass das Verfahren des IPCC zur Abschätzung von N_2O -Emissionen nur bedingt auf alle Standorte und Kulturen übertragbar ist, wird aus diversen Untersuchungen zu N_2O -Emissionen deutlich. Ruz-Jerez et al. (1994) berichteten von N_2O -Verlusten zwischen 0,01 und 3,45 % der applizierten N-Menge. Untersuchungen aus Großbritannien zeigten, dass teilweise deutlich höhere Emissionsfaktoren vorlagen, mit N-Verlusten von 0,3 - 7,1 % im Grünland und 0,2 - 1,3 % bei Getreide. In Gemüsekulturen konnten sogar N_2O -Emissionen gemessen werden, die 5,6 - 11,2 % des applizierten Stickstoffs ausmachten (Smith & Dobby, 2002). Crutzen et al. (2007)

gehen davon aus, dass 3-5 % des in der Landwirtschaft ausgebrachten Stickstoffs als N_2O in die Atmosphäre emittieren. Ihren vergleichsweise hohen Prozentsatz, bezogen auf den des IPCC (2006), begründen sie mit einer globalen Auswertung der Lachgaskonzentration in der Atmosphäre vor und nach dem Einsetzen der Industrialisierung. Die Differenz zum IPCC-Ansatz ist durch das Einbeziehen außerlandwirtschaftlicher Emittenten begründet, die jedoch laut Crutzen et al. (2007) alle auf den Einsatz von Düngemitteln in der Landwirtschaft zurückzuführen sind.

Aus diesem Grund sind verschiedene Versuche unternommen worden, die Abschätzungen von N_2O -Emissionen aus landwirtschaftlich genutzten Flächen zu verbessern und präziser darzustellen. Es wurden diverse Modellansätze entwickelt: empirische Modelle (Conen et al. 2002), Regressionsmodelle, die regionale und standortspezifische Faktoren berücksichtigen (Freibauer & Kaltschmitt 2003, Freibauer 2003), kulturspezifische Emissionsfaktoren (Kaiser et al. 1998a & b), Grenzlinienanalysen (Schmidt et al. 1998) sowie zahlreiche prozessorientierte Modelle.

2.9 Prozessorientierte Modelle zur Berechnung der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse im Boden

Parton et al. (1996) teilen N-Kreislauf-Modelle, die die Denitrifikation berücksichtigen, in drei Klassen ein: Modelle, die das Wachstum der mikrobiellen Biomasse beschreiben; Modelle, die einen Schwerpunkt auf die Gasdiffusion und die Abbildung anoxischer Verhältnisse in den Bodenaggregaten legen; und schließlich sogenannte vereinfachte Prozessmodelle, die durch vereinfachte Ansätze die Prozesse anhand einfacher Parameter beschreiben und nicht auf mikrobielle Prozesse oder eine genaue Beschreibung der Gasdiffusion eingehen (Heinen, 2006). Über 50 der letztgenannten, vereinfachten Modelle werden in Heinen (2006) vorgestellt und einer eingehenden Diskussion unterzogen. Darüber hinausgehend werden in Tab. 4 häufig angewendete Modelle zur Beschreibung von N_2O -Emissionen, die in Konkurrenz zu dem in dieser Arbeit betrachteten Denitrification Decomposition (DNDC) Modell (Li et al. 1992, Li 2000 und Zhang et al. 2002) stehen, genannt und im Weiteren kurz vorgestellt.

Tab. 4. Verbreitete prozessorientierte Modelle zur Berechnung von Nitrifikations- und Denitrifikationsprozessen im Boden

Modell	Referenz	Verwendung	Skalen	Nitrifikations- / Denitrifikationsprozess
DAYCENT / CENTURY	Parton et al., 1996, 1998 / Parton et al. 1987 & 1988	Agrarökosysteme, v.a. Grünland, Wald und Savanne	Schlagebene bis zur Berechnung globaler Emissionen (Stehfest 2005, Stehfest et al. 2005 a, b)	Vereinfachte Prozessabbildung
NASA CASA / CASA	Potter et al. 1997 / Potter et al. 1993 & 1996	diverse Ökosysteme	mesoskala -global	Vereinfachte Prozessabbildung
EXPERT-N	Engel & Priesack 1993, Baldioli et al. 1994, Stenter et al. 1999	Agrarökosysteme	Plot - Schlagebene	Vereinfachte Prozessabbildung
ECOSYS	Grant et al. 1993 a & b, Grant & Pattey, 1999, 2003, Grant 2001	Agrar-, Forst, Graslandökosysteme, Savannen, Tundra und Wüste	Mikroskala - Landschaftsebene	Wachstum von Mikroorganismenpopulationen, Berechnung der Gasdiffusion und anoxischer Verhältnisse

Das DAYCENT Modell (Parton et al. 1996 & 1998) wird dazu verwendet, um Kohlenstoff-, Stickstoff-, Phosphor- und Schwefel-Kreisläufe zu modellieren. Es ist eine Erweiterung des CENTURY Modells (Parton et al. 1987 & 1988) und stellt die verschiedenen Prozesse in täglicher Auflösung dar. Ihre Anwendung finden DAYCENT und CENTURY in Agrar-, Grasland-, Waldökosystemen sowie in Savannen (Parton et al. 1996, Del Grosso et al. 2000 und Parton et al. 2001). Während CENTURY sich mit langfristigen Veränderungen des Bodens auseinandersetzt, berechnet DAYCENT Prozesse des Pflanzenwachstums sowie Umsatzprozesse und bodenbürtige Emissionen von NO, N₂O, N₂ und CH₄ in einer hohen zeitlichen Auflösung. DAYCENT wie auch CENTURY sind modular aufgebaut und bestehen aus einem Landflächen-, Pflanzenwachstums- und Bodenkohlenstoff-Modul.

NASA-CASA ist eine Weiterentwicklung des CASA-Modells, mit dieser Erweiterung des CASA-Modells können saisonale Muster der Kohlenstofffixierung, Nährstoffverteilungen, Laubfall, N-Mineralisation wie auch bodenbürtige CO₂-, N₂O- und NO-Emissionen in Tagesschritten berechnet werden. Dieses Modell wurde für größere Skalen entwickelt. Es wird für Emissionsvorhersagen im mesoskaligen Bereich bis hin zu globalen Vorhersagen verwendet. Dabei wird die netto Primärproduktion (CO₂-Fixierung durch die Vegetation) mit Hilfe des NDVI (Normalized Difference Vegetation Index) berechnet. Das Modell ist, wie das zuvor beschriebene DAYCENT Modell, ebenfalls modular aufgebaut. Es werden in täglicher Auflösung die

Bodentemperatur und die Bodenfeuchtigkeit kalkuliert. Nach Folking et al. (1998) ist das Modul, welches die C- und N-Kreisläufe beschreibt sowie die Flüsse der gasförmigen C- und N-Verbindungen berechnet, vergleichbar mit dem des CENTURY Modells. Die gasförmigen N-Verluste werden nach dem „Hole in the pipe“ Modell von Firestone und Davidson (1989) beschrieben, wobei die Emissionen eine Funktion der N-Mineralisationsrate (Menge/Flussrate durch die Röhre) und des Wassergehaltes des Bodens (Größe der Lecks, durch die das Gas entweichen kann) darstellen (vgl. auch Kap. 1.8). Diese Modellkonstruktion macht es möglich, dass das Modell ausreichend generalisierbar ist, um es mit Hilfe von Fernerkundungsdaten zu initialisieren. Allerdings ist NASA-CASA für kleinräumige Agrarsysteme mit verschiedenen Kulturen und Managementmaßnahmen in einem Jahr nicht einsetzbar (Folking et al. 1998).

Expert-N stellt ein Programmpaket bzw. einen Modellverbund dar, mit dessen Hilfe Wasser-, Stickstoff- und Kohlenstoffkreisläufe simuliert werden können. Es ist, wie die zuvor beschriebenen Modelle ebenfalls modular aufgebaut (Bodenwasserprozess-, Boden-N- und Boden-C-, Pflanzenprozess-, Management- sowie ein Systemkontroll-Modul). Die verwendeten Berechnungsansätze stammen u.a. aus folgenden Modellen: LEACHM (Hutson & Wagenet 1992), CERES (Jones & Kiniry 1986 und Ritchie 1991), HYDRUS (Vogel et al. 1996), SUCROS (von Laar et al. 1992), SOILN (Johnsson et al. 1987), NCSOIL (Nicolardot & Molina 1994) und DAISY (Hansen et al. 1990). Die in Expert-N integrierten Modelle unterscheiden sich hinsichtlich ihrer Komplexität von funktionalen bis hin zu mechanistischen Ansätzen (Stenger et al. 1999). Der modulare Aufbau erlaubt den Austausch der Sub-Module, der es ermöglicht, den Einfluss verschiedener Modellansätze auf das Simulationsergebnis darzustellen. Je nach Datenlage bzw. Anspruch an die Vorhersagen kann das Modell individuell zusammengestellt und best möglich angepasst werden (Stenter et al. 1999).

Als eines der umfangreichsten Modelle kann das ECOSYS Modell (Grant et al. 1993 a & b, Grant & Pattey 1999 & 2003, Grant 2001) angesehen werden. Es werden Transport und Transformation von Wärme, Wasser, Kohlenstoff, Sauerstoff, Stickstoff, Phosphor und anorganisch gelöster Stoffe im System Boden-Pflanze-Atmosphäre dargestellt. Mit ECOSYS können Prozesse in einer zeitlichen Auflösung von Sekunden bis hin zu Dekaden berechnet werden (Grant, 2008 <http://www.ecosys.rr.ualberta.ca>). Die räumliche Auflösung ist ähnlich detailliert. Das

Modell bietet die Möglichkeit, die Berechnungen im Millimeterbereich bis hin für ganzen Landschaften durchzuführen. Es kann – je nach Datenlage – die Prozesse eindimensional oder aber auch für zwei oder drei Dimensionen kalkulieren. ECOSYS besteht aus sechs verschiedenen Modulen (Photosynthese, Masse- und Energieaustausch, Pflanzenwachstum, Wasser- und Energieübertragung, Transfer gelöster und gasförmiger Stoffe sowie die mikrobielle Aktivität). Bezüglich der Auflösung biologischer Prozesse werden – bezogen auf die Systeme der Mikroorganismen und Pflanzen – sowohl die der einzelnen Organe als auch die der Gesellschaften berücksichtigt. Daher wird mit ECOSYS auch versucht, bzgl. der N₂O-Emissionsverluste alle bekannten Prozesse möglichst genau zu beschreiben.

Unabhängig von der Komplexität eines Modells haben alle mit der gleichen Problematik zu kämpfen: die allgemeine Gültigkeit ihrer Vorhersagen bzgl. der gasförmigen N-Verluste. Sie sind zwar in der Lage, generelle Emissionstrends darzustellen, allerdings weichen ihre Vorhersagen häufig deutlich von den gemessenen Flüssen ab (Folking et al. 1998).

2.10 Sensitivitätsanalyse

In der Regel wird mit der Sensitivität die Veränderung von Modellergebnissen bei der Änderung von Parametern beurteilt. McCuen (1973) beschreibt sie als den Grad der Änderung eines Parameters oder ganzer Parametersätze in Bezug zu der Änderung eines anderen Parameters bzw. simulierter Ausgabegrößen. Dabei werden die simulierten Modellergebnisse zunächst nicht mit beobachteten Größen des Systems verglichen. Ist die Reaktion des Modellergebnisses auf die Veränderung eines Parameters sehr stark, so wird von einem sensitiven Parameter gesprochen. Mittels einer Sensitivitätsanalyse kann herausgefunden werden, wo in einem Modell Parameteroptimierungen vorgenommen werden müssen (Kirkby et al. 1993). Weiterhin dient sie zur Identifikation von Variablen, welche am meisten zur Modellunsicherheit beitragen. Nach Anderson & Burt (1995) ist eine Sensitivitätsanalyse nützlich, die Variablen in einem Modell zu kennzeichnen, bei denen Vorsicht bei der Schätzung ihrer Werte geboten ist. Des Weiteren können somit auch Variablen ermittelt werden, für die detailliertere Untersuchungen und Datenaufnahmen erfolgen sollten, wenn für diese zu wenige Informationen vorliegen. Darüber hinaus kann eine Sensitivitätsanalyse ebenso Wechselbeziehungen zwischen den bestehenden Parametern aufzeigen (Schröder 2000). Im Allgemeinen kann durch die Anwendung einer Sensitivitätsanalyse ein Modell besser kennen gelernt und sein Verhalten verstanden werden (Schröder 2000).

Sensitivitätsanalysen können in deterministische und stochastische Ansätze gegliedert werden (Beven 2001). Im Folgenden werden drei Verfahren kurz vorgestellt: (1) *one factor at a time* Analyse, (2) Reaktionsoberflächen, (3) generalisierte Sensitivitätsanalyse.

Bei der deterministischen *one factor at a time* Analyse wird die Bedeutung eines einzelnen Parameters in einem Modell untersucht (Anderson & Burt 1995 und Saltelli et al. 2004). Dabei wird ein Parameter verändert und alle anderen werden konstant gehalten. Dieses Analyseverfahren wird auf Grund seiner vergleichsweise einfachen Handhabung in vielen Wissenschaftsbereichen häufig angewendet (Stange 2001 und Lenhart et al. 2002). Allerdings kann die Anwendung dieses Analyseverfahrens bei komplexen Modellen sehr aufwendig werden, wenn bei hohen Parameterzahlen jeder Parameter einzeln bezüglich seiner Sensitivität getestet werden muss.

Weiterhin können bei einer klassischen Sensitivitätsanalyse die Interaktionen der Parameter untereinander nicht dargestellt werden.

Mit einer Sensitivitätsanalyse an Hand von Reaktionsoberflächen (response surface), einem ebenfalls deterministischen Verfahren, ist es möglich, die Interaktionen zwischen verschiedenen Parametern und die Reaktion des Modells auf die Variation eines Parameters darzustellen. Die Beurteilung der Parametersensitivität kann mittels der vorhergesagten Zielgröße (z.B. Abfluss, Emissionsrate) oder mit Hilfe von Gütemaßen erfolgen. Es erfolgt eine Berechnung von Modellausgaben mit allen möglichen Parameterkombinationen. Die Modellantwort kann als Reaktionsoberfläche, ähnlich wie ein digitales Höhenmodell, visualisiert werden. Wird für die Beurteilung der Parametersensitivität ein Gütemaß verwendet, so werden gute Simulationsergebnisse als Optima (Berge) und schlechte als Minima (Täler) dargestellt. Mit diesem Verfahren können auch die Interaktionen von mehr als zwei Parametern dargestellt werden. Jedoch wird die Reaktionsoberfläche mit zunehmender Anzahl von Parametern komplexer und schwieriger zu visualisieren (Beven 2002).

Mit der generalisierten Sensitivitätsanalyse (GSA) (Spear & Hornberger 1980), einem stochastischen Verfahren, ist es möglich, mehrere Parameter miteinander zu vergleichen (Beven 2002). Bei der GSA werden für jeden Parameter aus einem zuvor definierten Parameterraum n Realisierungen gezogen. Dieser Parameterraum kann durch verschiedene Verteilungsfunktionen (z.B. gleichverteilt, normalverteilt, dreiecksverteilt) beschrieben werden. Um Parametersätze aus zufälligen Kombinationen von Parameterwerten zu erhalten, wird eine Ziehung der Parameterwerte mittels stochastischer Verfahren durchgeführt (z.B. Monte Carlo Verfahren, Latin Hypercube Verfahren).

Die Bewertung der Sensitivität eines Parameters kann subjektiv und visuell erfolgen, indem die Veränderung der Modelantwort des veränderten Parameters mit der des unveränderten Parameters verglichen wird. Dieses Verfahren kann für alle Arten der Sensitivitätsanalysen verwendet werden.

Darüber hinaus gibt es für die Beurteilung der Sensitivität quantitative Ansätze. Beispielsweise können bei der one factor at a time Sensitivitätsanalyse der Sensitivitätsindex (SI) nach De Roo (1993) sowie das Sensitivitätsmaß (S) nach Nearing et al. (1990) verwendet werden. Dabei ist der SI ein relatives Maß zur Beschreibung der Ergebnisvariation um einen mittleren Ausgabewert. Das

Sensitivitätsmaß ist dagegen ein lineares Maß, welches die relative, normalisierte Änderung der Modellausgabe zur relativen normalisierten Änderung der zugehörigen Parameterwerte darstellt (Schröder 2000).

Bei der GSA kann die Beurteilung der Parametersensitivität ebenfalls mit Hilfe von Gütemaßen erfolgen. Die Güte einer Simulation wird an Hand von (subjektiven) Grenzwerten beurteilt. Die Anzahl guter und schlechter Simulationen wird kumuliert und gegenübergestellt. Es wird angenommen, dass für einen Parameter zunächst genauso viele gute wie schlechte Simulationen existieren, bzw. diese gleichverteilt sind. Treten jedoch Unterschiede in der Verteilung auf, so wird der betrachtete Parameter als sensitiv eingestuft.

Eine Beurteilungsmöglichkeit der Sensitivität von Parametern stellt die multiple lineare Regressionsanalyse (Saltelli et al. 2004) der realisierten Parametersätze und der dazugehörigen Simulationsergebnisse dar. Dabei wird als Maß für die Parametersensitivität der standardisierte Regressionskoeffizient verwendet. Diese Form der generalisierten Sensitivitätsanalyse wurde vor allem für komplexe hydrologische Modelle angewendet (Muleta & Nicklow 2005, Sieber & Uhlenbrook 2005 und Pohlert et al. 2006).

2.11 Unsicherheitsanalysen

Die Anwendung von Modellen, die für Vorhersage-, Bewertungs- und Beratungszwecke eingesetzt werden, erfordert zuverlässige Aussagen. Denn Modelle mit hohen Simulationsunsicherheiten können Entscheidungen ungünstig beeinflussen. Generell können Modellergebnisse durch eine Vielzahl von Ungenauigkeiten im Modellierungsprozess beeinflusst werden. So können Ungenauigkeiten in den Eingangsparametern, unzureichenden Modellannahmen bzgl. der Algorithmen der Prozessbeschreibung oder auch ungenaue Messdaten zur Validierung oder Kalibrierung der Modellergebnisse Unsicherheiten in den Ergebnissen erzeugen (Rykiel 1996 und Giertz 2004). Parameterunsicherheiten resultieren aus schlecht bestimmbar Parametern, falsch begrenzten Wertebereichen, dem Einfluss sensitiver Parameter und Parameterinteraktionen. Modellunsicherheiten ergeben sich aus Fehlern in der theoretischen Struktur des Modells, Lücken im Systemverständnis, welche durch empirische Beziehungen ausgeglichen werden, sowie aus der mathematischen Umsetzung der Prozessalgorithmen. Hinsichtlich der Unsicherheit von Validierungsdaten gibt es

ebenso verschiedene Gründe. Dazu gehören Fehler in der Erhebung der Daten, sowie während der Datenaufbereitung entstehende Fehler (De Roo 1993 und Refsgaard et al. 2007). Hat ein Modell einen hohen Parameterbedarf, so ist es anfälliger für Unsicherheiten in den Einzelparametern (Giertz 2004).

Beven & Binley (1992) gehen davon aus, dass jedes Modell bis zu einem gewissen Maß Fehler beinhaltet, genauso wie auch alle Messwerte, auf denen die Modellkalibrierungen beruhen. Aus diesem Grund kann nicht erwartet werden, dass es nur *einen* Parameterwert gibt, der einen Parametersatz innerhalb einer bestimmten Modellstruktur repräsentiert und durch eine Kalibrierungsmethode gefunden werden kann. Vielmehr gibt es zahlreiche Parametersätze, die akzeptable Simulationsergebnisse liefern können und mit dem Begriff der *Equifinalität* (Schulze et al. 1999, Beven & Freer 2001 und Beven 2006) beschrieben werden.

Kenntnisse über die Zuverlässigkeit von Modellergebnissen sind demnach von hoher Bedeutung. Im Rahmen einer Unsicherheitsanalyse kann durch Schätzung der Vorhersagegenauigkeit die Qualität einer Simulation bestimmt werden.

Einerseits ist es Ziel einer Unsicherheitsanalyse, die Sicherheit eines Modellergebnisses durch Angabe seines Konfidenzbereichs zu charakterisieren. Andererseits dienen Unsicherheitsanalysen dazu, die Unsicherheiten der sensitiven Parameter zu kennzeichnen und zu reduzieren (Beven 1995).

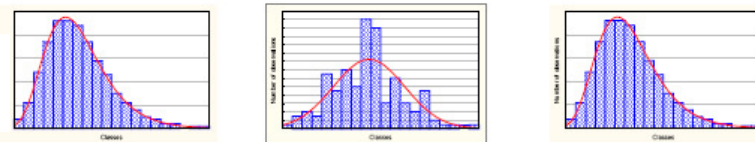
Beven und Binley (1992) entwickelten den Ansatz der *Generalised Likelihood Uncertainty Estimation* (GLUE), in dem – basierend auf Monte-Carlo-Simulationen – eine hohe Anzahl von Modellläufen mit einer jeweils zufällig gewählten Parametrisierung durchgeführt wird. Beim Vergleich gemessener und modellierter Werte wird den ermittelten Parametersätzen ein Effizienzkriterium zugewiesen, das als Maß für die Akzeptanz beziehungsweise das Verwerfen eines Parametersatzes herangezogen wird. GLUE wurde in zahlreichen Anwendungen wie z.B. in Niederschlags-Abfluss-Modellen (Beven und Freer 2001), hydro-biogeochemischen Modellen (Pohlert et al. 2007), N-Simulationen (Schulze et al. 1999) und *critical load* Untersuchungen (Zak & Beven 1999) angewendet.

2.12 Monte Carlo Simulation

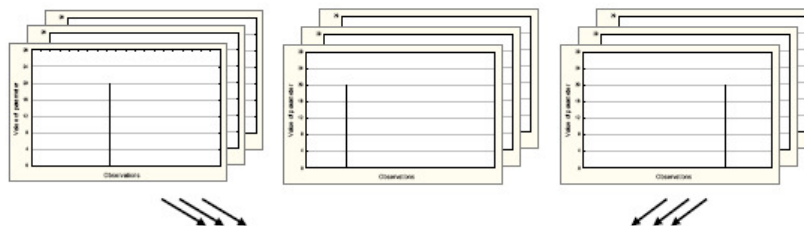
Die Monte Carlo (MC) Simulation ist ein verbreitetes Verfahren, um Modellsensitivitäten und -unsicherheiten zu beurteilen (Dubus & Brown 2002). Sie besteht aus verschiedenen Schritten (Abb. 7).

1. Auswahl der Eingangs- und Ausgangsgrößen

2. Zuweisung der Verteilung (pdf)



3. Ziehung der Datensätze



4. Modelllauf

MODEL

5. Auswertung der Ergebnisse

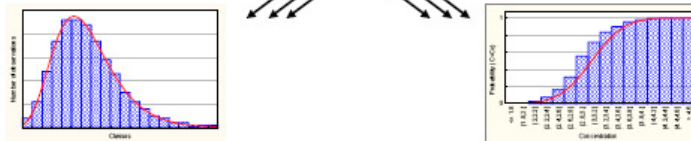


Abb. 7. Darstellung der verschiedenen Schritte in der Monte Carlo Simulation (aus Dubus & Brown 2002). Auswahl der Eingangs- und Ausgangsgrößen, Zuweisung der Verteilung, Ziehung der verschiedenen Datensätze, Modelllauf und Auswertung der Ergebnisse. pdf = probability density function (Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion)

Der erste Schritt beinhaltet die Auswahl der Modelleingangs- und -ausgangsparameter (Zielgröße), auf denen die Analyse basiert. Dabei sollten möglichst Informationen über die Unsicherheit der Parameter bekannt sein, sowie über die Sensitivität des Modells bezüglich der ausgewählten Parameter, wobei in der Praxis die Parameter i.d.R. subjektiv vom Modellierer ausgewählt werden (Dubus & Brown 2002).

Als nächstes wird die Unsicherheit eines jeden Parameters bestimmt. Sie ist charakterisiert durch die Art ihrer Verteilung und die Verteilungsparameter, die die Streuung der Eingangsdaten bestimmen, wie z.B. Varianz oder Spannweite. Es werden also Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (pdf = probability density function) zugewiesen. Eine genaue Parametrisierung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen kann nur erfolgen, wenn Messdaten, aus denen die Verteilungen abgeleitet werden können, vorhanden sind. Sind jedoch nicht genügend Daten vorhanden oder liegen keine ausreichenden Kenntnisse über die Verteilung und Varianzen der Parameter

vor, wird i.d.R. eine Gleichverteilung oder eine triangulare Verteilung angenommen (Dubus & Brown 2002). Soweit möglich sollte die Korrelation verschiedener Eingangsparameter untereinander berücksichtigt werden.

Im dritten Schritt wird eine randomisierte Ziehung der Parameterwerte aus der zuvor für jeden Parameter zugewiesenen Werteverteilung (Wertebereich) generiert.

Nach der Ziehung der Wertepaare wird für jeden gezogenen Parameter eine Modellsimulation durchgeführt.

Die Ergebnisse werden dann im fünften Schritt entweder für eine Unsicherheitsanalyse statistisch bezüglich ihrer Genauigkeit oder bezüglich der Parametersensitivität untersucht (Dubus & Brown 2002).

2.13 Beurteilung der Modellgenauigkeit durch Gütemaße

Eine quantitative Einschätzung der Modellergebnisse durch den Vergleich von beobachteten mit simulierten Werten kann durch Gütemaße erfolgen (Legates & McCaben 1999). Sie helfen dabei, eine möglichst objektive Bewertung von Modellen durchzuführen, die nicht auf einem rein visuellen und damit subjektiven Vergleich beruht. Mit Hilfe von Gütemaßen kann quantifiziert werden, inwieweit ein Modell zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Sie stellen somit einen wesentlichen Bestandteil der Modellvalidierung dar (Kirkby et al. 1993). Weiterhin können sie aufzeigen, ob eine Über- oder Unterschätzung der Modellergebnisse im Vergleich zu gemessenen Werten besteht. Dieses kann wiederum Anhaltspunkte liefern, für welche Teile des Modells noch weitere Anpassungen oder Kalibrierungen durchgeführt werden sollten. Bei dem Einsatz von Gütemaßen im Rahmen von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen können mit ihrer Hilfe Schwellenwerte oder Grenzwerte festgelegt werden, oberhalb derer akzeptable Modellergebnisse generiert werden konnten.

Es existieren zahlreiche Modellgütemaße. Die Wahl der Gütemaße ist subjektiv, wobei berücksichtigt werden sollte, dass verschiedene Gütemaße mit unterschiedlichen Beurteilungsschwerpunkten zur Anwendung kommen. Allgemein kann zwischen absoluten und relativen Gütemaßen unterschieden werden (Tab. 5).

Tab. 5. Überblick über verbreitete absolute und relative Gütemaße

absolute Gütemaße	SSQ	Summe der quadrierten Residuen (Sum of the squares of the residuals)
	SSQR	Summe der quadrierten Differenzen aus den gemessenen und simulierten Werten nach einer Rangeinteilung der Werte (Sum of the squares of the differences of the measured and simulated values after ranking)
	RSME	Wurzel aus dem mittleren quadrierten Fehler (root mean square error)
	MSE	Mittlerer absoluter Fehler (mean absolute error)
	VE _{abs}	Absoluter Volumenfehler (absolute volume error)
	BIAS	Mittlerer Fehler
relative Gütemaße	r^2	Bestimmtheitsmaß
	DS _{grad}	Doppelsummengradient / Systematischer Volumenfehler
	VE _{rel}	Relativer Volumenfehler (relative volume error)
	EFFIC	Modelleffizienz (Modelefficiency)
	E	Effizienzkoeffizient nach Nash und Sutcliffe 1970
	d	Übereinstimmungsmaß (Index of agreement)

Durch die Verwendung von absoluten Gütemaßen können Fehler in den Einheiten der Modellvariablen dargestellt werden. Relative Gütemaße sind dagegen dimensionslos. Die Verwendung relativer Gütemaße ermöglicht einen Vergleich der Qualität der Prognose verschiedener Modellergebnisse in *einem* Modell sowie den Vergleich von Modellausgangsgrößen *verschiedener* Modelle. Für eine umfassende Einschätzung des Modellverhaltens sollten sowohl relative als auch absolute Gütemaße verwendet werden (Legates und McCaben 1999).

3 Das Denitrification Decomposition Modell

Das Denitrification Decomposition (DNDC) Modell gehört zu den Modellen, die nach einem prozessorientierten, biogeochemischen Ansatz konstruiert wurden. Es stellt die wesentlichen Prozesse dar, die für die Umsetzung von organischen Materialien (Kohlenstoff- und Stickstoff) in Ökosystemen verantwortlich sind. Der Schwerpunkt von DNDC liegt in der Beschreibung der an der Spurengasproduktion und -konsumption beteiligten Prozesse, wie Mineralisation, Nitrifikation, Denitrifikation und Methanoxidation. Ursprünglich wurde DNDC zur Abschätzung der Kohlenstoff-Sequestrierung sowie von N_2O -Emissionen aus landwirtschaftlich genutzten Böden von Li et al. (1992a) entwickelt. Es wurde in den vergangenen Jahren zu einem wesentlich komplexeren Ökosystemmodell weiterentwickelt, das neben N_2O -Emissionen auch die Emissionen von NO , N_2 , CO_2 , CH_4 , NH_3 sowie NO_3^- -Austräge ins Grundwasser berechnet (vgl. Li 1994, Li 2000, Zhang et al. 2002 und Li et al. 2006,). DNDC besteht aus zwei Kompartimenten, denen sechs verschiedene Module zugeordnet werden. Initialisiert wird das Modell von den sogenannten „Ökologischen Treibern“. Unter diesen werden die auf Prozesse wirkenden Umweltbedingungen wie Temperatur, Niederschlag, Bodenart, Vegetation und Management verstanden (Abb. 8). Diese Eingangsfaktoren sind für jeden Standort einzigartig und müssen jeweils individuell angepasst werden (Li et al. 2000). Durch die „Ökologischen Treiber“ werden im ersten Modellteil durch die Module Bodenklima, Pflanzenwachstum und Mineralisation die sogenannten pedogenen Umweltfaktoren wie das Substrat (C- und N-Gehalte und die Aufteilung des Kohlenstoffs in verschiedene Pools), die Bodentemperatur und die Bodenfeuchte sowie die Anteile aerober und anaerober Bodenbereiche berechnet. Diese pedogenen Umweltfaktoren dienen im zweiten Modellteil dazu, die Prozesse der Nitrifikation, Denitrifikation, Methanogenese sowie Methanoxidation und die damit verbundenen Gasflüsse zu steuern (vgl. Abb. 8). Das DNDC Modell kann für eine Bodenprofilltiefe von 50 bis maximal 100 cm eingesetzt werden. Für die Berechnungen wird das gesamte Bodenprofil automatisch in mehrere, uniforme Bodenschichten von 2 cm Mächtigkeit aufgeteilt. Für jede Bodenschicht werden die zuvor beschriebenen Prozesse stündlich berechnet. Im Folgenden werden die in dieser Arbeit relevanten Module beschrieben.

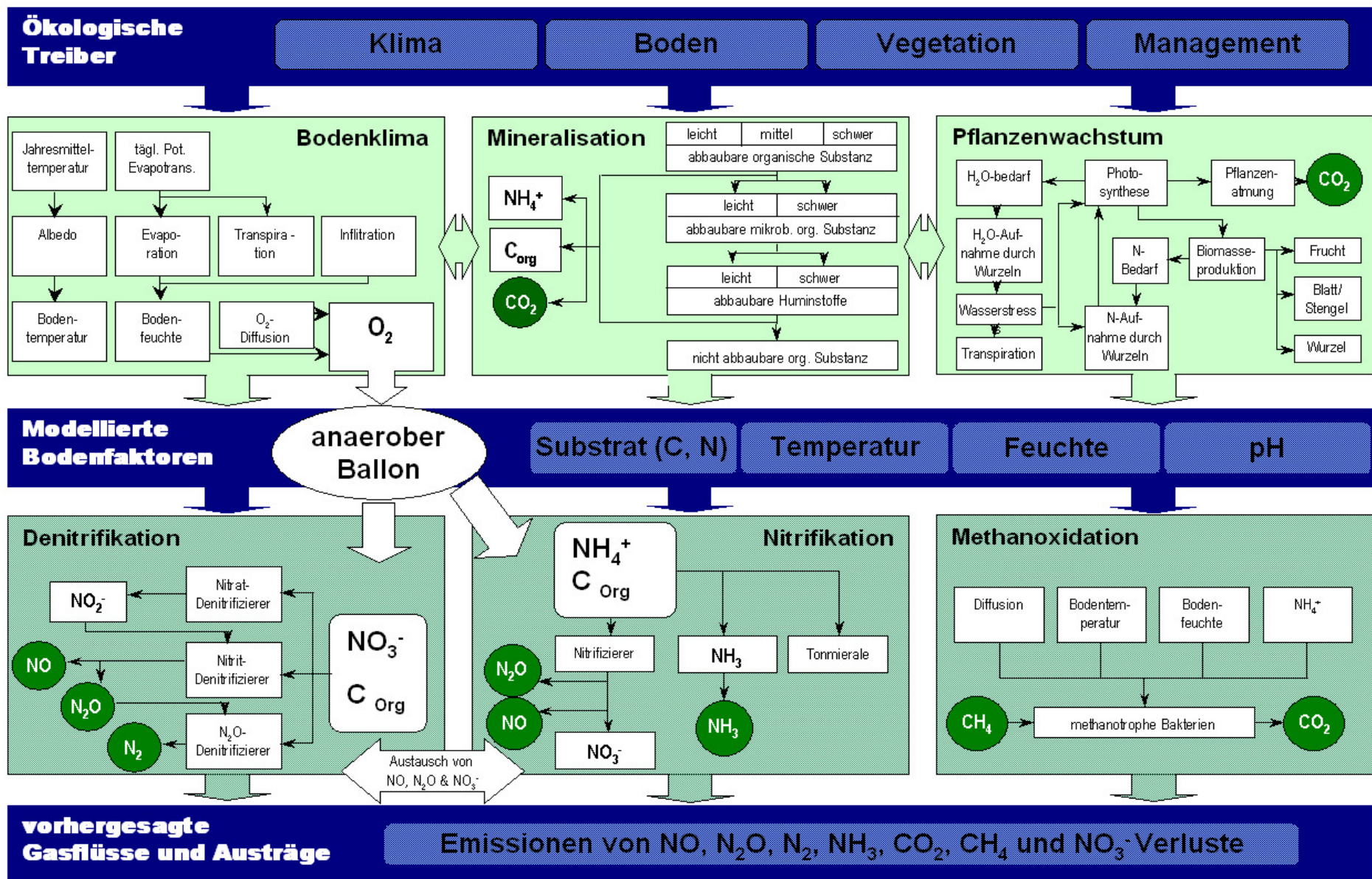


Abb. 8. Schematische Darstellung des DNDC Modells, mit den sechs Modulen Bodenklima, Mineralisation, Pflanzenwachstum, Nitrifikation, Denitrifikation sowie der Methanoxidation (nach Li et al. 2000, modifiziert)

3.1 Das Bodenklimamodul

Im Bodenklimamodul werden tägliche Daten über die Witterung verwendet, um daraus die Bodentemperatur, Bodenfeuchte sowie die Sauerstoffkonzentration der Bodenluft für den jeweiligen Standort zu berechnen. Dabei werden die Bodentemperatur sowie die Temperatur im Pflanzenbestand aus der täglichen Maximum- und Minimumlufttemperatur berechnet (Zhang et al. 2002). Es wird angenommen, dass die Temperatur im Bestand gleich der Lufttemperatur in 1,5 m Höhe ist, es sei denn, dass eine geschlossene Schneedecke existiert. Daneben beeinflusst die durchschnittliche Jahrestemperatur der Luft ebenfalls die Temperatur im Boden. Sie wird gleich der Bodentemperatur in 5 m Tiefe gesetzt und stellt somit eine Einflussgröße an der Untergrenze des modellinternen Bodenprofils dar (Li et al. 1992a). Das Temperaturprofil im Boden wird durch die Finite-Differenzen-Approximation der Wärmediffusionsgleichung beschrieben. Der Antrieb erfolgt durch die vorliegende Temperaturdifferenz zwischen zwei Bodenschichten (Gl. 3.1).

$$C_T \frac{\partial T}{\partial t} = -k_T \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad \text{Gl. 3.1}$$

C_T	Wärmekapazität
T	Temperatur
t	Zeit
k_T	Wärmeleitfähigkeit
z	vertikale Koordinate

Der Wärmetransport an der Profiluntergrenze wird durch die Differenz der Jahresmitteltemperatur und der untersten Bodenschicht ermittelt. Die Wärmeleitfähigkeit des Bodens ist abhängig vom Wassergehalt des Bodens und der Zusammensetzung der festen Bodenphase (mineralische und organische Anteile). Existiert eine geschlossene Schneedecke, so wird berücksichtigt, dass der Temperatureaustausch zwischen Atmosphäre und Pedosphäre beeinträchtigt ist.

Der Bodenwassergehalt wird in DNDC in Anlehnung an Ritchie et al. (1988) berechnet. Dabei kommt nach Angaben des Modellautors im Modell die Richards Gleichung (Richards 1931) zum Einsatz. Diese ist so jedoch nicht im Quellcode implementiert. Die Kalkulation der Bodenfeuchtigkeit wird durch eine einfachere Bucket-Formulierung vorgenommen. Die folgendes beschreibt:

Die Wasserbewegungen im Boden sind abhängig von Oberflächenabfluss, Infiltration, Gravitation, Matrixpotential, Evaporation sowie Transpiration (Abb. 9). Infiltriertes Wasser stammt in DNDC aus dem Niederschlag, der Bewässerung, der Schneeschmelze und stehendem Wasser auf der Bodenoberfläche. Das Wasser infiltriert in das Bodenprofil von einer Bodenschicht zur nächsten.

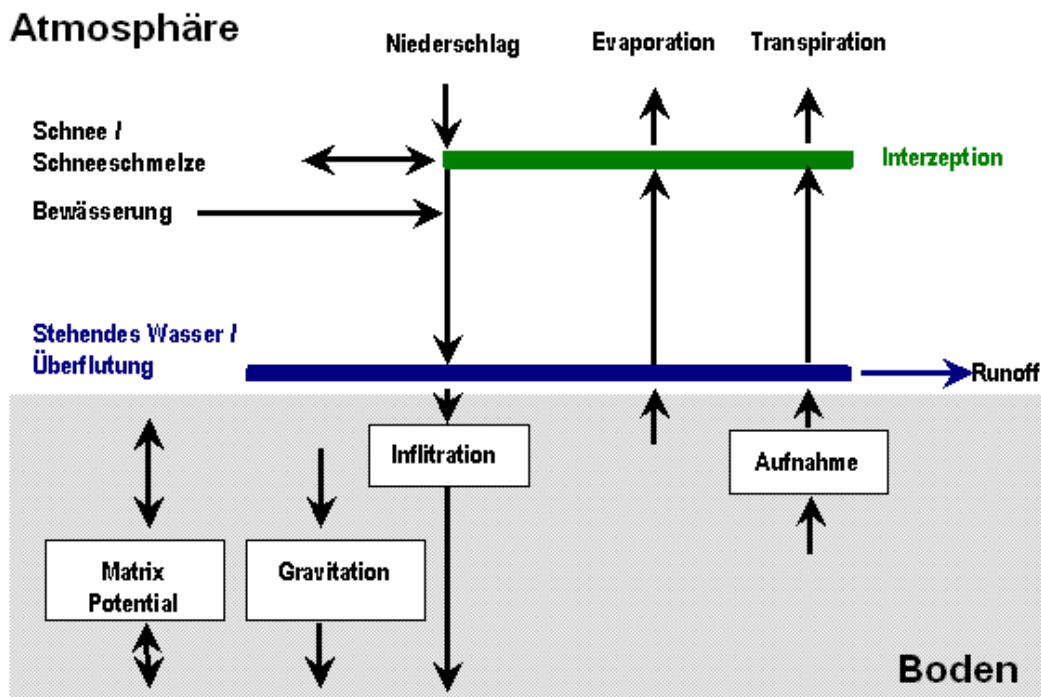


Abb. 9. Schema des Bodenwasserhaushaltes in DNDC. (Zhang et al. 2002, modifiziert). Die Pfeile stellen die Wasserflüsse zwischen der Atmosphäre und dem Boden sowie die Aufnahme durch die Vegetation dar

Der Wasserfluss wird dabei durch die Differenz des Wasserpotentials zwischen zwei Schichten gesteuert. Dränung in eine tiefere Bodenschicht tritt ein, wenn die Bodenfeuchtigkeit die Feldkapazität übersteigt. Der Wasseraustrag an der Profiluntergrenze wird durch die Gravitation angetrieben (Zhang et al. 2002).

Wird durch den Niederschlag die gesättigte Leitfähigkeit des Bodens überschritten, so entsteht auf der Bodenoberfläche stehendes Wasser. In diesem Fall wird ein Oberflächenabfluss in Abhängigkeit von der Hangneigung simuliert.

Der Wasserentzug aus dem Boden basiert in DNDC auf der Evaporation und auf dem Transpirationsstrom. Die potentielle Evapotranspiration wird nach Thornthwaite (1948) kalkuliert. Bestimmt wird sie durch die durchschnittliche Lufttemperatur eines Monates und die Sonnenscheindauer, bezogen auf 12 h (Dunne & Leopold, 1978) und wird unterteilt in die potentielle Evaporation und Transpiration. Die tägliche

potentielle Transpiration wird durch den täglichen Wasserbedarf der Pflanzen bestimmt, der wiederum abhängig von der täglichen Wachstumsrate ist. Die aktuelle Transpiration der Pflanzen berechnet sich aus der potentiellen Transpiration und dem Bodenwassergehalt. Die potentielle Evaporation ergibt sich aus der Differenz der potentiellen Evapotranspiration und der aktuellen Transpiration. Die Evaporation ist in DNDC auf die oberen 20 cm des Bodenprofil beschränkt (Li et al. 2006).

Fällt die Bodentemperatur in einer Bodenschicht unter 0 °C, gefriert das dort vorhandene Wasser zu Eis. Aus der Differenz von Bodentemperatur und benötigter Eistemperatur wird mit Hilfe der Schmelzenthalpie für Wasser die Menge des gefrierenden Wassers berechnet (Stange 2001).

3.2 Das Mineralisationsmodul

Die Zersetzung von organischem Material in anorganische N- und C- Verbindungen (NH_4^+ , NO_3^- und CO_2) sowie in gelösten organischen Kohlenstoff (DOC) wird in DNDC mittels des Mineralisationsmoduls simuliert. Dieses Modul basiert im Wesentlichen auf dem Modell NCSOIL (Molina et al. 1983).

Wichtige Steuergrößen für die Umsatzprozesse in dem Modell stellen die Bodentemperatur und die Bodenfeuchtigkeit dar. Anhand der O'Neill-Funktion wird die Temperaturabhängigkeit der Mineralisation in DNDC dargestellt. Der Einfluss der Bodenfeuchtigkeit auf die Dekompostierung wird in dem Modell durch eine Weibull-Funktion berechnet (Stange 2001), wobei mit zunehmender Bodenfeuchtigkeit auch die Mineralisation bis zu einem bestimmten Punkt zu- und danach wieder abnimmt. Weitere wichtige Einflussgrößen sind die Stickstoffverfügbarkeit im Boden, die Textur des Bodens (Adsorption von organischer Substanz und NH_4^+ an die Tonfraktion) und die Managementmaßnahmen (Düngung, Erntereste, Bodenbearbeitung). Die gesamte organische Substanz wird ihrer Abbaubarkeit entsprechend in drei aktive Kohlenstoffpools (abbaubare organische Substanz, abbaubare org. Biomasse und abbaubare Huminstoffe) und einen passiven Pool (nicht abbaubare organische Substanz) aufgeteilt. In den drei aktiven Pools wird die organische Substanz wiederum, je nach ihrem Abbauwiderstand, in zwei bzw. drei Unterpools aufgeteilt und unabhängig voneinander zersetzt (Li et al. 1992a und Zhang et al. 2002). Bei der sehr stabilen organischen Substanz, die dem passiven Kohlenstoffpool zugeordnet ist, wird angenommen, dass der Kohlenstoff innerhalb eines (Bewirtschaftungs-)

Jahres nicht umgesetzt werden kann (Li et al. 1992a). Anfallende Erntereste oder ausgebrachter Wirtschaftsdünger werden für die Berechnung der Mineralisation, je nach C/N-Verhältnis, in die verschiedenen Pools aufgeteilt (Li et al. 1992a und Zhang et al. 2002). Die Produkte der Mineralisation Ammonium sowie Nitrat stehen in DNDC dann für weitere Prozesse wie z.B. die N-Aufnahme durch die Pflanzen, die mikrobielle Immobilisation, die Nitrifikation oder Denitrifikation zur Verfügung. Das entstandene CO₂ entweicht in die Atmosphäre (Li et al. 1992a, 2000).

3.3 Das Pflanzenwachstumsmodul

Das Pflanzenwachstumsmodul von DNDC basiert auf verschiedenen anderen Pflanzenwachstumsmodellen wie CERES (Ritchie et al. 1987, 1988), FSE-ORYZA1 (Kropff & van Laar 1993, 1994), INTERCOM (Kropff et al. 1993), MACROS-L 1D (Penning de Vries et al. 1989) sowie SUCROS (van Laar et al. 1992). Es beinhaltet folgende Prozesse: Phänologische Entwicklung der Pflanze, Berechnung des Blattflächenindex, Photosynthese und Dissimilation, Verteilung der Assimilationsprodukte in die verschiedenen Pflanzenorgane (Blatt, Stengel, Frucht und Wurzel). Weiterhin wird das Wurzelwachstum sowie die Aufnahme von Wasser und Stickstoff durch die Pflanze berücksichtigt (Zhang et al. 2002).

Generell wird in DNDC das Pflanzenwachstum und der Biomasseaufbau auf Basis der tatsächlichen Photosyntheseleistung der Pflanze berechnet. Aus der Differenz von Wachstum und Seneszens der Blätter wird in DNDC der Blattflächenindex kalkuliert. Das Wachstum ist dabei abhängig von der Verteilung der Assimilate. Das Absterben von Pflanzenteilen basiert auf dem phänologischen Stadium der Kultur sowie auf Stress, der z.B. durch Wasser- oder Stickstoffmangel ausgelöst wird. Die Steuerungsgröße für die Biomasseproduktion ist neben dem Entwicklungsstadium der Pflanze und der Photosyntheserate das Ertragspotential einer Kultur. Die Photosyntheserate wird durch die CO₂-Verfügbarkeit in der Atmosphäre, die Stickstoff- und Wasserverfügbarkeit im Boden, die Temperatur, den Entwicklungszustand der Pflanze sowie kulturspezifische Faktoren gesteuert (Zhang et al. 2002). Die Aufnahme von Stickstoff durch die Pflanze ist abhängig vom tatsächlichen N-Bedarf der Pflanze und dem verfügbaren N-Angebot im Boden. Die Menge des aus dem Boden aufgenommenen Stickstoffs wird an Hand der in der jeweiligen Bodenschicht vorhanden N-Menge und der vorhanden Wurzel-Biomasse berechnet. Dabei startet die N-Aufnahme der Pflanze in den oberen Bodenschichten

und erfolgt schrittweise in der nächst tieferen Schicht, bis der Stickstoffbedarf der Pflanze gedeckt ist (Li et al. 1994).

3.4 Der anaerobe Ballon

Durch den anaeroben Ballon wird in DNDC das Nebeneinander aerober und anaerober Bodenbereiche simuliert. Dazu wird aus den sauerstoffverbrauchenden Prozessen wie der Mineralisation und der Wurzelatmung, den bodenbelüftenden Maßnahmen (Bodenbearbeitung) sowie aus der Höhe der Diffusivität des Bodens (abhängig von Temperatur, Feuchte und Textur) die O_2 -Konzentration jeder Bodenschicht errechnet. Durch den ermittelten Sauerstoffpartialdruck kann jede Bodenschicht in einen aeroben und einen anaeroben Bereich unterteilt werden (Li et al. 2000). In den aeroben Bodenbereichen kommt es zur Berechnung der Prozesse von Mineralisation und Nitrifikation, in den anaeroben Bereichen zur Denitrifikation. Die Größe des anaeroben Ballons basiert auf der O_2 -Konzentration in jeder Bodenschicht; bei einer O_2 -Konzentration, wie sie in der Atmosphäre vorherrscht, wird der anaerobe Ballon beispielsweise vollständig reduziert. Eine Zunahme des anaeroben Ballons bedingt einen Anstieg der Substrate C_{org} , NO_3^- , NO und N_2O , die dann ausschließlich für die Denitrifikation zur Verfügung stehen. Der Anteil der Substrate, die für die Nitrifikation bereitgestellt werden, wird dementsprechend reduziert. Bei einer Ausweitung des anaeroben Bodenbereiches verlängert sich der Diffusionsweg von NO und N_2O aus dem anaeroben Ballon.

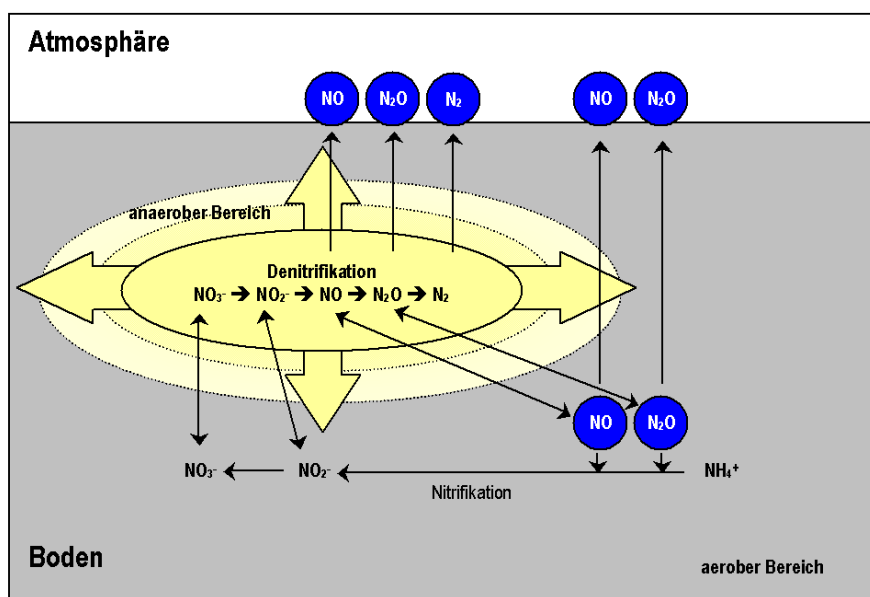


Abb. 10. Schematische Darstellung des anaeroben Ballons. Im aeroben Bereich findet die Nitrifikation, im anaeroben Bodenbereich die Denitrifikation statt (verändert nach Li et al. 2000)

Mit einer längeren Verweilzeit dieser gasförmigen Stickstoffoxidverbindungen unter reduzierenden Verhältnissen wird die Wahrscheinlichkeit größer, dass die N-Gase vollständig zu N_2 reduziert werden. Bei einer Abnahme des anaeroben Ballons wird dieser Prozess entsprechend umgekehrt (Li et al. 2000). Dieses Konzept ermöglicht es, oxidative wie reduktive Prozesse gleichzeitig zu berechnen (Abb. 10). Dieses trägt dazu bei, die Bedingungen im Boden realistischer darzustellen, da anaerobe und aerobe Bedingungen zeitgleich auftreten (Firestone & Davidson 1989, Williams et al. 1992 und Li et al. 2000).

3.5 Das Nitrifikationsmodul

Die Nitrifikation wird mit Hilfe der Darstellung von Wachstum und Sterben der nitrifizierenden Bakterien simuliert. Neben der Abbildung der Nitrifiziererpopulation wird der N-Umsatz während der Nitrifikation sowie die damit verbundene Spurengasproduktion (NO , N_2O und NH_3) berechnet. Dabei ist die Nitrifikationsrate sowie die Höhe der NO - und N_2O -Produktion abhängig von der Temperatur, der Feuchtigkeit und dem NH_4^+ - sowie C_{org} -Gehalt im Boden. Die Aktivität und Populationsgröße der Mikroorganismen sowie deren Enzyme bestimmen die N-Umsatzgeschwindigkeit. Die durch die Nitrifikation induzierte NO - und N_2O -Produktion basiert auf dem „hole-in-the-pipe“-Modell von Firestone & Davidson (1989). Dieser Ansatz wurde in DNDC durch eine Temperatur- und Feuchtefunktion ergänzt. Der Temperaturparameter wird – wie im Mineralisationsmodul – durch die O'Neill-Funktion, der Bodenfeuchteparameter durch eine Weibull-Funktion beschrieben.

3.6 Das Denitrifikationsmodul

Im Denitrifikationsmodul wird ebenfalls die Populationsdynamik der Mikroorganismen im Boden berücksichtigt. Es baut auf dem Modell von Leffelaar & Wessel (1988) auf. Dabei wird zwischen drei Denitrifizierer-Populationen unterschieden, die jeweils andere Elektronenakzeptoren (NO_3^- , NO_2^- , NO sowie N_2O) nutzen.

Die Umweltfaktoren, auf denen die Berechnung der Denitrifiziererpopulation basiert, sind ebenfalls die Bodentemperatur und Bodenfeuchtigkeit sowie die Verfügbarkeit der Substrate DOC , NO_3^- , NO_2^- , NO und N_2O , die u.a. aus den nitrifikatorischen Prozessen stammen. Die denitrifikationsbedingte Produktion von N_2O und NO wird

auf Grundlage des Belüftungszustandes des Bodens, der Verfügbarkeit des Substrats und der Gasdiffusion berechnet (Butterbach-Bahl et al. 2001).

Die Chemodenitrifikation findet in DNDC ebenfalls Berücksichtigung. Sie ist als eigenständige chemische Reaktion beschrieben, die zusätzlich mit einer Arrhenius-Funktion ausgestattet ist und deren Temperaturabhängigkeit abbildet (Li et al. 2000 und Stange 2001).

4 Methoden

4.1 Eingangsvariablen des DNDC Modells

In dieser Arbeit wird DNDC (Version 9.0) verwendet. Alle hier beschriebenen Eingangsdaten beziehen sich auf die Erfordernisse von DNDC 9.0.

Die Berechnungen der biologischen Prozesse in DNDC werden durch Informationen über die Klima- und Bodeneigenschaften eines Standortes sowie die angewendeten Managementmaßnahmen initialisiert. Die Dateneingabe in das Modell ist durch verschiedene Eingabemasken organisiert. Im Folgenden wird dargestellt, welche Angaben von DNDC abgefragt werden. Die jeweiligen Eingangsvariablen der verschiedenen Standorte sind im Anhang I dargestellt.

4.1.1 Angaben zum Klima und zu den Witterungsverhältnissen

Für die Berechnungen der Umsatzprozesse im Boden benötigt DNDC Informationen zur Witterung wie Niederschlagswerte [cm] und Lufttemperaturen (Minimum- und Maximumtemperaturen oder Mittelwerte) [°C] in täglicher Auflösung. Die geographische Lage (Breitengrad) dient zur Berechnung der Tageslänge und der Strahlungsintensität. Weiterhin wird die nasse Deposition von Stickstoff [ppm] mit dem Niederschlag, der NH_3 - und der CO_2 -Gehalt der Luft [$\mu\text{g N} \cdot \text{m}^{-3} / \text{ppm}$] sowie die Anstiegsrate von CO_2 in der Atmosphäre [$\text{ppm} \cdot \text{a}^{-1}$] abgefragt. Die atmosphärischen Gehalte von NH_3 und CO_2 sowie die jährliche Anstiegsrate des CO_2 -Gehaltes der Luft sind optionale Eingaben. Für diese Angaben gibt DNDC Werte vor, die bei Bedarf, bzw. vorliegenden Messergebnissen angepasst werden können.

4.1.2 Angaben zu den Standortverhältnissen und der Bodenstruktur

DNDC bietet fünf vorgegebene Landnutzungstypen (upland crop field, rice paddy field, moist grassland / pasture, dry grassland / pasture und pristine wetland) zur Auswahl an. Für den Boden werden vom Modell 12 verschiedene Bodenarten zur Auswahl gestellt, denen jeweils bodenphysikalische Attribute zugeordnet sind. Durch den gewählten Boden werden von dem Modell automatisch Werte für den Tongehalt [%], die Feldkapazität [ausgedrückt als water filled pore space, WFPS] und für den permanenten Welkepunkt [PWP ebenfalls ausgedrückt als WFPS] zugewiesen. Diese können jedoch durch vorhandene Messergebnisse präzisiert werden. Nähere

Informationen über die in DNDC definierten Bodenarten können dem Anhang II (DNDC/Library/Lib-soil) entnommen werden. Angaben zur Dichte des Bodens [$\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$] und zum pH-Wert der Bodenlösung müssen für jeden Standort vorliegen, da hier keine Ableitungen erfolgen können. Ein weiterer Bodenparameter, der für jeden Standort erhoben werden muss, ist der organische Kohlenstoffgehalt des Bodens SOC [$\text{kg C} \cdot \text{kg Boden}^{-1}$] in den ersten fünf Zentimetern des Oberbodens.

Bei detaillierten Kenntnissen über den Standort kann die Charakterisierung des Bodens in DNDC noch verfeinert werden. Optional können Veränderungen der Grundeinstellung des Modells vorgenommen werden für:

- das Vorhandensein von Makroporen [ja / nein]
- das Vorkommen einer wasserstauenden Bodenschicht [in x cm Tiefe]
- die prozentuale Abnahme des organischen Kohlenstoffs mit zunehmender Bodentiefe [%]
- die Aufteilung des organischen Kohlenstoffs in verschiedene schnell zersetzbare Pools [%]
- das C/N-Verhältnis des organischen Kohlenstoffs [-]
- die NH_4^+ - und NO_3^- -Konzentration im Oberboden [$\text{mg N} \cdot \text{kg}^{-1}$]
- den Aktivitätsindex der Mikroorganismen [%]
- das Gefälle [%]
- den Grundwasserstand

Für die Angaben der Bodenfaktoren ist zu beachten, dass in DNDC der Boden als eine homogene Einheit betrachtet wird. D.h. verschiedene Horizonte und die sich darin üblicherweise unterscheidenden bodenphysikalischen Faktoren können nicht berücksichtigt werden. Lag für einen untersuchten Standort in dieser Arbeit eine detaillierte Horizontabfolge mit Mächtigkeitsangabe vor, so wurde für sämtliche Bodenfaktoren ein gewichtetes Mittel des Bodenprofils berechnet und dieser Mittelwert in DNDC eingegeben.

4.1.3 Angaben zur Landbewirtschaftung und Managementmaßnahmen

Die Informationen bezüglich der Bewirtschaftungsmaßnahmen werden sehr detailliert von DNDC abgefragt. Zum Beispiel wurden vom Modellentwickler 49 verschiedene

Feldfrüchte und Dauerkulturen mit ihren pflanzenphysiologischen Parametern definiert. Aus Tab. 6 kann entnommen werden, welche Angaben zur Initialisierung von DNDC notwendig sind.

Bei den Managementmaßnahmen sind lediglich die Angaben über die Fruchtfolge bzw. Feldfrucht für den Modellantrieb notwendig. Alle anderen Maßnahmen sind abhängig von ihrer tatsächlichen Durchführung. Für die ausgewählte Fruchtart können bei genauen Kenntnissen über die Sorte und die jeweiligen Wachstumsbedingungen in der Region die spezifischen pflanzenphysiologischen Parameter noch weiter angepasst werden. Welche Größen zur Anpassung zur Verfügung stehen, kann aus Anhang III entnommen werden.

Tab. 6. Eingangsparmeter für die Landbewirtschaftung des DNDC Modells

Management	Eingangsparmeter für DNDC	Anmerkung
Feldfrucht / Fruchtfolge	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Fruchtart ▪ Anzahl der Fruchtarten in einem Jahr ▪ Haupt- oder Zwischenfrucht ▪ Maximaler zu erwartender Ertrag [kg TM * ha⁻¹] ▪ Saat-, Pflanz- und Erntezeitpunkt ▪ Anteil der auf dem Feld verbleibenden Pflanzenbiomasse 	Bis auf die Angabe zum Ertragspotential sind alle übrigen Angaben obligatorisch
Bodenbearbeitung	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Anzahl der Bearbeitungsgänge ▪ Zeitpunkt der Bearbeitung ▪ Art der Bearbeitung 	Mulchen, reduzierte Bodenbearbeitung 5 cm Tiefe, Grubbern 10 cm Tiefe, Pflügen 20 cm Tiefe
Mineraldüngergabe	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Anzahl der Applikationen ▪ Applikationszeitpunkt ▪ Ausbringungsmethode (oberflächlich oder Injektion) ▪ Menge [kg N * ha⁻¹] ▪ Mineraldüngerart ▪ Verwendung von N-Düngern mit kontrollierter Freisetzung 	Mineraldüngerarten: CH ₄ N ₂ O, NH ₃ , NH ₄ HCO ₃ , NH ₄ NO ₃ , (NH ₄) ₂ SO ₄ , NO ₃ ⁻ , (NH ₄) ₂ HPO ₄
Wirtschaftsdüngergabe	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Anzahl der Wirtschaftsdüngergaben ▪ Zeitpunkt ▪ Düngerart ▪ Menge des ausgebrachten Kohlenstoffs [kg C * ha⁻¹] ▪ C/N-Verhältnis des Wirtschaftsdüngers 	Wirtschaftsdüngertypen: Stallmist, Gründüngung, Stroh, Gülle, Kompost
Herbizidbehandlung	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Maß der Verunkrautung ▪ Anzahl der Anwendungen ▪ Zeitpunkt der Herbizidapplikation 	
Bewässerung durch Flutung	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Anzahl der Flutungen ▪ Dauer ▪ Sickerwasserrate [mm * d⁻¹] ▪ pH-Wert des Wassers 	nur für den Reisanbau
Bewässerung durch Beregnung	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Anzahl der Bewässerungen ▪ Zeitpunkt ▪ Wassermenge pro Beregnung [cm * Tag⁻¹] ▪ pH-Wert des Beregnungswassers 	
Beweidung	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Anzahl der Weidegänge ▪ Dauer der Beweidungsperiode [Tage] ▪ tägliche Beweidungsdauer [h] ▪ Anzahl der Tiere 	Tiere: Rinder, Pferde, Schafe
Mahd	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Anzahl der Schnitte ▪ Zeitpunkt ▪ Erntemenge [kg C * ha⁻¹] 	

4.2 Beschreibung der Referenzstandorte

Für die Analysen, die mit DNDC durchgeführt wurden, kamen Untersuchungsergebnisse aus unterschiedlichen Regionen in Deutschland und aus Österreich zur Verwendung. Für diese Flächen standen neben den Eingangsdaten, zur Initialisierung des Modells, Messungen der Bodentemperatur und der Bodenwassergehalte in verschiedenen Bodentiefen sowie Messungen zu N₂O- und CO₂-Emissionen zur Verfügung.

Da Untersuchungen gezeigt haben, dass sich das Emissionsverhalten von N₂O in verschiedenen klimatischen Regionen Deutschlands stark unterscheiden kann (Jungkunst et al. 2006), wurde versucht, mit dem vorhandenen Datenmaterial möglichst verschiedene klimatische Räume abzudecken (Nord- / Westdeutschland: über 600 mm Niederschlag und weniger als 100 Frosttage pro Jahr, Ostdeutschland: unter 600 mm Niederschlag und weniger als 100 Frosttage pro Jahr sowie Süddeutschland und die Mittelgebirge: über 600 mm Niederschlag und mehr als 100 Frosttage pro Jahr). Weiterhin wurden bei der Standortwahl verschiedene Böden, landwirtschaftliche Managementmaßnahmen sowie Kulturen berücksichtigt. Die Auswahl nur eines Bodentyps sowie einer Kulturart als Referenzstandort wurde als zu gering erachtet. Einschränkungen gab es bei der vollständigen Abdeckung der bei Jungkunst et al. (2006) definierten Klimaregionen in Deutschland mit Untersuchungsstandorten. Es wurden insgesamt 44 Datensätze zu N₂O-Messungen und 7 Datensätze mit zusätzlicher Messung der CO₂-Emissionen zusammengetragen. Allerdings wurden zum Einen viele Messungen an gleichen Standorten durchgeführt, zum Andern erfüllte ein großer Teil der recherchierten Untersuchungen der Treibhausgasemissionen nicht die erforderlichen Kriterien (Vorhandensein der Eingangsdaten, Messungen der Bodentemperatur, Bodenfeuchte, N₂O- und CO₂-Emissionen). Für die Standorte Göttingen, Arolsen, Gießen, Scheyern und Petzenkirchen in Österreich (Abb. 11) waren die relevanten Eingangs- wie auch Validierungsdaten vorhanden. Ein weiterer Vorteil der Untersuchungen an den genannten Standorten gegenüber den übrigen N₂O- sowie CO₂-Erhebungen war, dass sämtliche Emissionsmessungen mit der „closed chamber“ Methode durchgeführt wurden. Des Weiteren wurden die Klimadaten direkt bei den Untersuchungsflächen erhoben, so dass nicht auf Daten der nächstgelegenen Klimastationen zurückgegriffen werden musste. Lediglich die

feuchte N-Deposition wurde in den vorliegenden Untersuchungen nicht erhoben. Die N-Deposition wurde für die entsprechenden Untersuchungsjahre und den jeweiligen Standort aus den Berechnungen von Gauger et al. (2002). entnommen. Fehlende Informationen über die Zeitpunkte von Bodenbearbeitung oder Düngung wurden aus den Saat- und Erntezeitpunkten der einzelnen Feldfrüchte abgeleitet.

Göttingen

Die N₂O- und CO₂-Emissionsmessungen wurden von Schmädeke (1998) zur Untersuchung von Lachgas- und Methanflüssen eines Gley-Auenbodens unter dem Einfluss einer Rapsfruchtfolge und in Abhängigkeit von der N-Düngung erhoben. Die Versuche wurden auf dem Versuchsgut „Reinshof“ 2 km südlich von Göttingen (51°31'48" Breite; 9°56'39" Länge) auf 153 m über NN durchgeführt. Die Bodenart des Standorts wurde als ein stark bis mittel schluffiger Ton (30,4 % Ton, 64,9 % Schluff, 4,7 % Sand) charakterisiert. Weitere Kenngrößen des Standortes sind Tab. 7 zu entnehmen. Der Messzeitraum erstreckte sich über fast zwei Jahre von März 1995 bis Februar 1997. Neben den Treibhausgasen wurden auch die Bodentemperatur in 2,5 cm, 5 cm und 10 cm Tiefe sowie die Bodenfeuchtigkeit in 5 cm Tiefe gemessen. Die dreigliedrige Fruchtfolge bestand aus Winterraps, Winterweizen und Wintergerste. Die für DNDC als Referenz ausgewählte Variante der Versuchsreihe wurde mit einer um 50 % reduzierten Stickstoffmenge nach betriebsüblicher Düngung gedüngt. Die Stickstoffgaben für den Winterraps beliefen sich auf 91 kg N * ha⁻¹ und die für den Winterweizen auf 55 kg N * ha⁻¹. Die eingesetzten closed chambers für die N₂O- und CO₂-Emissionsmessungen hatten eine Größe von 1900 cm² und konnten je nach Wuchsstadium der Pflanze erhöht werden. Die Messungen wurden wöchentlich mit jeweils vier Wiederholungen durchgeführt.

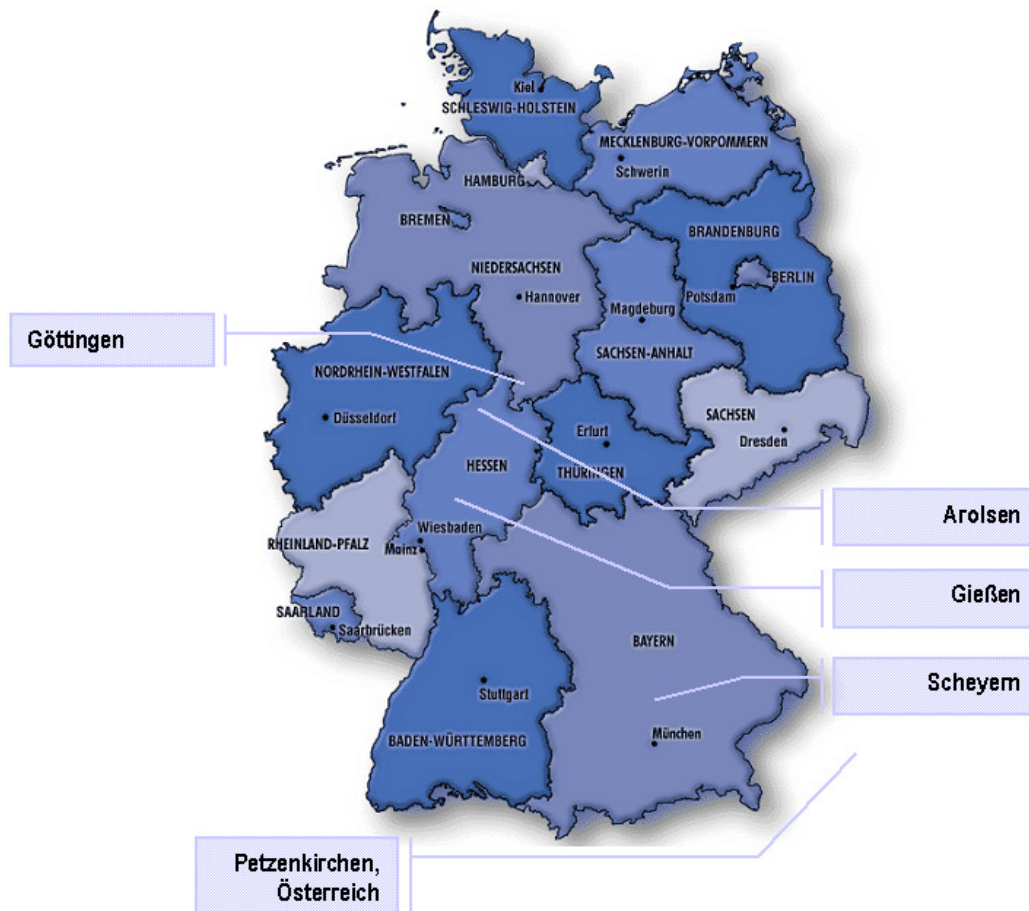


Abb. 11. Lage der Untersuchungsflächen in Deutschland und Österreich

Tab. 7. Charakterisierung der verwendeten Referenzstandorte. Nds = Niederschlag, Temp. = Lufttemperatur, Raps = Winterraps, US = Untersaat, ZF = Zwischenfrucht

Standort / Autor	Boden				Nds. [mm * a ⁻¹]	Ø Temp. [°C]	Kultur	Düngung [kg N ha ⁻¹ * a ⁻¹]	Bereitgestellte Messdaten
	Ton [%]	C _{org} [%]	pH	Dichte g*cm ⁻³					
Göttingen, Schmädeke, 1998	30,4	1,5	7,5 (CaCl ₂)	1,24	635	8,6	Raps, Getreide	55, 90 mineralisch	Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, N ₂ O-, CO ₂ -Emissionen
Arolsen, Teepe 2004, 2001 & 2000	16	1,5	5,7 (CaCl ₂)	1,54	670	7,6	Grün- brache	0	Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, N ₂ O-, CO ₂ -Emissionen
Gießen, Kammann, 2001	16,0	2,8	5,9 (H ₂ O)	1,4	644	9,9	Grünland	40 mineralisch	Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, N ₂ O- Emissionen
Scheyern, Kamp, 1998	18	1,8	5,2 (CaCl ₂)	1,56	833	7,4	Getreide, US, ZF	100, 150 mineralisch	Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, N ₂ O-, CO ₂ -Emissionen
Petzenkirchen, Feichtinger, 2005	24	2,56	7,5 (CaCl ₂)	1,5	770	9,4	Mais, ZF, Getreide, Gras	0, 21, 70, 120, mineralisch, organisch	Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit

Arolsen

Die Untersuchungen von Teepe (2000, 2001 und 2004) wurden auf den Versuchsflächen Canstein bei Arolsen (51°23' Breite; 9°01' Länge) durchgeführt (Tab. 7). Der Standort befindet sich etwa 30 km westlich von Kassel im nordwesthessischen Bergland auf einer Höhe von 430 m ü. NN. Für den Standort wurde eine Pseudogley-Braunerde angesprochen mit der Bodenart sandig-lehmiger Schluff (16 % Ton, 51 % Schluff und 33 % Sand). Die für die Analysen mit DNDC ausgewählte Variante war eine Brachfläche, die seit 1987 landwirtschaftlich nicht mehr genutzt wurde. Sie war im Untersuchungszeitraum flächendeckend vergrast, Pflege- und Düngemaßnahmen fanden während der gesamten Zeit nicht statt (Teepe 2000). Die Messungen der Treibhausgase (N_2O und CO_2) sowie die der Bodentemperatur (20 cm Tiefe) und der Bodenfeuchte (0 – 5 cm Tiefe und 5 – 30 cm Tiefe) wurden über ein Jahr von Dezember 1995 bis November 1996 einmal wöchentlich durchgeführt. Die Fläche der closed chamber hatte eine Größe von 0,25 m², das Volumen fasste 20 l. Auf jeder Versuchsvariante wurden fünf Wiederholungsmessungen vorgenommen.

Gießen

Die N_2O -Emissionen wurden im Rahmen von Versuchen zur Auswirkung steigender atmosphärischer CO_2 -Konzentrationen auf die Flüsse der Klimaspurengase N_2O und CH_4 in einem Grünlandökosystem gemessen (Kammann et al. 1998 und Kammann 2001). Dazu wurden verschiedene Experimente auf der Umweltbeobachtungs- und Klimafolgeforschungsstation des Instituts für Pflanzenökologie der Universität Gießen und des Hessischen Landesamtes für Umwelt und Geologie (HLUG) in Linden südöstlich von Gießen durchgeführt. Die Forschungsstation ist bei 50°32' Breite und 8°41,3' Länge und einer Höhe von 172 m über NN im westhessischen Berg- und Senkland gelegen. Der Boden im Untersuchungsgebiet ist als ein Pseudogley, die Bodenart als mittel-sandiger Lehm (17,8 % Ton, 39 % Schluff und 43 % Sand, s.a. Tab. 7) charakterisiert. Sämtliche Messungen der Spurengasflüsse wurden im Grünland auf einer frischen bis wechselfeuchten Glatthaferwiese durchgeführt, welche seit 50 Jahren extensiv bis mäßig intensiv mit zwei Schnitten pro Jahr und einer Düngeintensität von 50 bis 80 kg $N \cdot ha^{-1} a^{-1}$ bewirtschaftet wurde. In den aktuellen Versuchsjahren wurden die für diese Arbeit herangezogenen Versuchsflächen mit 40 kg $N \cdot ha^{-1} a^{-1}$ gedüngt. Als Referenzwerte für die

Modellergebnisse von DNDC wurden die Versuchspartzen ausgewählt, die nicht zusätzlich mit CO₂ angereichert wurden. Für den gesamten Untersuchungszeitraum, Juni 1996 bis Dezember 1998, lagen Messungen zu N₂O-Emissionen, zur Bodentemperatur in 5 cm, 10 cm und 20 cm Tiefe sowie zur Bodenfeuchtigkeit in 5 cm Tiefe vor. Die Messkammern für die Treibhausgasemissionen hatten einen Durchmesser von 100 cm und eine Höhe von 50 cm. Pro Parzelle gab es drei Wiederholungen der Gasmessungen. Die Messungen wurden ein bis dreimal pro Woche vorgenommen.

Scheyern

Auf der Versuchsstation „Klostergut Scheyern“ des Forschungsverbundes Agrar-ökosysteme München (FAM) wurden die Untersuchungen zu Lachgasemissionen unter definierten Temperaturbedingungen von Kamp (1998) durchgeführt. Das Klostergut Scheyern ist ca. 40 km nördlich von München (48°30,0' Breite, 11°20,7' Länge) im bayrischen Tertiärhügelland gelegen. Das Versuchsgelände liegt in einer Höhe von 445 bis 495 m über NN. Auch an diesem Standort wurden die Wetterdaten während der Untersuchungen direkt an der Versuchsstation gemessen. Der vorherrschende Bodentyp auf den Untersuchungsflächen ist eine Parabraunerde, die Bodenart ist ein schluffiger Lehm (18 % Ton, 57 % Schluff und 25 % Sand, Tab. 7). Die Untersuchungen wurden von August 1994 bis einschließlich März 1996 durchgeführt. In dieser Zeit wurde auf den Flächen folgende Fruchtfolge angebaut: Sommerweizen (1994) mit Untersaat Senf – Winterweizen (1994/95) gefolgt von Senf als Zwischenfrucht. Für das Jahr 1995/96 wurde erneut Winterweizen eingesät. Gedüngt wurde mit dem mineralischen Stickstoffdünger AHL (Ammonnitrat-Harnstoff-Lösung) und zwar der Sommerweizen 1994 mit 150 kg N*ha⁻¹a⁻¹, der Winterweizen für 1994/95 mit 100 kg N*ha⁻¹a⁻¹ und der darauffolgende Winterweizen (1995/96) mit 174 kg N*ha⁻¹a⁻¹. Auf dem Feld wurde eine 50 m² Untersuchungsfläche eingerichtet, die mit einer Bodenheizung ausgestattet wurde. Auf der Hälfte der Fläche wurde dadurch die Bodentemperatur um einige Grad Celsius angehoben, der andere Teil diente als unbeheizte Kontrollfläche. Sämtliche Daten, die für diese Arbeit verwendet wurden, stammen von der unbeheizten Kontrolle. Pro Versuchsvariante wurden fünf Messkammern auf dem Feld installiert. Die hier verwendeten closed chambers bedeckten eine Fläche von 0,07 m². Ihr Volumen ist mit 11,3 l angegeben, welches jedoch je nach Wachstumshöhe der Pflanzen durch zusätzliche Aufsätze (0,3 m Höhe) verändert wurde. Gemessen wurde über den Messzeitraum einmal pro

Woche. Neben den Messungen der N₂O- und der CO₂-Emissionen wurden auch bei diesen Untersuchungen Messungen der Bodentemperatur sowie der Bodenfeuchtigkeit in 5 cm Tiefe durchgeführt.

Petzenkirchen

Die Daten aus Petzenkirchen in Österreich wurden von dem Institut für Kulturtechnik (IKT) und Bodenwasserhaushalt des österreichischen Bundesamts für Wasserwirtschaft zur Verfügung gestellt. Das Versuchsgelände des IKT in Petzenkirchen ist in Niederösterreich (48°9' Breite; 15°9' Länge) auf 258 m über NN gelegen. Die Messstelle unterscheidet sich im Vergleich zu den anderen Standorten dahingehend, dass es sich in Petzenkirchen um eine Lysimeteranlage handelt, bestehend aus drei monolithischen, nicht wägbaren Feldlysimetern (0,4 m * 0,7m * 0,4m / 0,7 m / 1,1 m), die 1989 in Betrieb genommen wurden. Der Boden in den Lysimetern ist eine Braunerde, als Bodenart wurde schluffiger Lehm (24 % Ton, 57 % Schluff und 19 % Sand, weitere Bodenparameter s. Tab. 7) angegeben. Der Untersuchungszeitraum erstreckte sich von Oktober 1989 bis 2004. In diesem Zeitraum wurden die Lysimeter mit folgenden Kulturen bepflanzt (Tab. 8):

Tab. 8. Fruchtfolge der Lysimeteranlage in Petzenkirchen von 1989 bis 2004

Jahr	Kulturen	Düngung [kg N * ha⁻¹ a⁻¹]	Düngerart
1989	Senf, Schwarzbrache	21	Organisch
1990	Mais, Winterweizen	133	organisch & mineralisch
1991	Winterweizen, Senf, Schwarzbrache	97,5	organisch & mineralisch
1992	Schwarzbrache, Ackerbohne, Wintergerste	0	-
1993	Wintergerste, Senf, Schwarzbrache	123,5	organisch & mineralisch
1994	Schwarzbrache, Mais, Grünbrache	127	organisch & mineralisch
1995	Grünbrache, Grünland mit Schnittnutzung	0	-
1996 - 2004	Grünland mit Schnittnutzung	0	Schnittgut verbleibt auf Fläche

In den Lysimetern wurde u.a. die Bodentemperatur sowie der Bodenwassergehalt in 10 cm Schritten von 10 cm bis 100 cm Bodentiefe bestimmt. Treibhausgasmessungen wurden hier nicht durchgeführt, so dass dieser Standort

ausschließlich für die Überprüfung des Bodenklimamoduls in DNDC verwendet wurde. Für die Analysen wurden verschiedene Zeiträume aus der Untersuchungsperiode ausgewählt. Die Evaluation der Bodentemperatur erfolgte an Hand der Jahre 1989 bis 1992, die des Bodenwassergehaltes in den Jahren 1996 bis 1999. Die Auswahl dieser Zeiträume begründet sich darauf, dass die Bodentemperaturmessungen von 1989 bis 1992 ohne größere Ausfälle durchgeführt wurden. Ab 1993 traten größere Lücken in den Messreihen auf. Bei der Bestimmung des Bodenwassergehaltes gab es im Jahr 1994 die Umstellung von Gipsblockmessungen auf TDR-Sonden. Um eine einheitliche und möglichst genaue Methodik bei den gemessenen Referenzdaten beizubehalten, wurde hier die Bestimmung der Bodenfeuchtigkeit mittels der TDR-Sonden gewählt. Weiterhin wurde bezüglich der Messtiefen von Bodentemperatur und Bodenfeuchtigkeit eine Auswahl getroffen. Als Referenzdaten wurden die Messungen in 10 cm, 20 cm und 40 cm Tiefe herangezogen.

4.3 Vorgehensweise bei der Modellanalyse

Das Modell DNDC wurde schrittweise Modul für Modul überprüft. Nach einer Sensitivitätsanalyse wurde eine Unsicherheitsanalyse für die Teilmodule Bodentemperatur und Bodenfeuchtigkeit sowie für die C- und N-Umsätze durchgeführt.

4.3.1 Sensitivitätsanalyse

Im ersten Schritt wurde eine globale Sensitivitätsanalyse (GSA) durchgeführt. Diese diente dazu, die Parameter zu identifizieren, die das Modellergebnis signifikant beeinflussen. Dazu wurden alle Parameter, die in den Modellmodulen Bodenklima, Mineralisation, Nitrifikation und Denitrifikation in die Berechnungen integriert sind, überprüft, inwieweit sie für eine GSA verwendet werden konnten.

Hervorzuheben ist, dass keine ausführliche Beschreibung von DNDC existiert, aus der nähere Informationen über die verwendeten Algorithmen sowie die Herkunft von Parameterwerten entnommen werden könnte. Auch weichen die im Quellcode dargestellten Berechnungen teilweise von den Ansätzen und verwendeten Parametern ab, die in Veröffentlichungen zum Modell aufgeführt sind (Li et al. 1992a). Aus diesem Grund lagen generell wenige Informationen über die Herkunft, Größe, Variabilitäten oder Unsicherheiten für die einzelnen Modellparameter vor.

Die gleichzeitige Veränderung aller Parameter stellte sicher, dass der Einfluss der Parameter untereinander und deren gemeinsame Wirkung auf das Modellergebnis berücksichtigt werden konnte. Mit Hilfe einer Monte-Carlo-Analyse (MC) (Saltelli et al. 2004) wurden zufällig 200 Parameterkombinationen aus dem gesamten Parameterraum für sämtliche Parameter ausgewählt. Dabei wurde eine uniforme Verteilung der Parameterwerte angenommen, da keine Informationen über die Verteilungen der Parameterwerte vorlagen. Die Spannweite der Parameterwerte wurde mit Hilfe des Expertenwissens vom Modellautor festgelegt und sehr weit gefasst. Jeder Parameter wurde von seinem ursprünglichen Wert (x) um eine Zehnerpotenz nach unten und nach oben variiert ($x \cdot 10^{-1} < x < x \cdot 10$), da keine Angaben zur Variabilität der Werte vorlagen, die als Anhalt für Ober- und Untergrenzen hätten dienen können. Aus den resultierenden Parametersätzen und den dazugehörigen Modellergebnissen wurden mit Hilfe multipler linearer Regressionen an Hand der standardisierten Regressionskoeffizienten (β) die Parameter identifiziert, die das Modellergebnis signifikant ($P = 0,05$) beeinflussten (Saltelli et al. 2004). Als Grenzwert wurde ein β von 0,115 gewählt. Alle Parameter, für die bei der multiplen Linearen Regression ein Wert von $\beta \geq 0,1$ erzielt wurde, wurden als sensitiv bezeichnet. Ausnahme bildeten hier Parameter aus der Berechnung des Bodenwassergehaltes (2 Parameter) und der Frost-N₂O-Berechnung (1 Parameter). Für diese Parameter wurde eine starke Modellreaktion beim Vergleich der modifizierten und nichtmodifizierten Parameter festgestellt, ohne dass sie einen β von 0,1 erreichten. Um den Wertebereich eines jeden sensitiven Parameters näher zu bestimmen, wurde für jeden sensitiven Parameter eine eindimensionale Sensitivitätsanalyse durchgeführt (one factor at a time, OAT) (Saltelli et al. 2004). Dazu wurde jeder Faktor einzeln und unabhängig von den anderen variiert. Die Parameterwerte wurden dabei nach dem Zufallsprinzip gezogen. Die Ober- und Untergrenzen der jeweiligen Parameter wurden dazu prozentual, bis zur maximalen Spannweite von einer Zehnerpotenz ($x \cdot 10^{-1} < x < x \cdot 10$) als Ober- und Untergrenze, verändert. Somit konnte der Wertebereich für jeden Faktor bei Bedarf eingegrenzt werden. Die so ausgewählten Parameter wurden für die folgende Analyse der Modellunsicherheit herangezogen.

4.3.2 Unsicherheitsanalyse

Die Unsicherheitsanalyse wurde ebenfalls mithilfe einer Monte Carlo Simulation durchgeführt. Dazu wurden mit den zuvor bestimmten signifikanten Parametern 10.000 Modellläufe durchgeführt. Der gleichverteilte Parameterwertebereich $x \cdot 10^{-1} < x < x \cdot 10$ ergab sich aus der eindimensionalen Sensitivitätsanalyse und dem ursprünglichen Parameterwert in DNDC.

Als zusätzliches Analysewerkzeug wurden Punktgraphen (dotty plots) für jeden einzelnen Parameter aus den Ziehungen für die Unsicherheitsanalysen dargestellt. Dabei wurde die Modellgüte sämtlicher Simulationen den gezogenen Parameterwerten gegenübergestellt. Mit dieser visuellen Methode kann der Einfluss sowie das Verhalten eines jeden Parameters (auch in Kombination mit den übrigen Werten) auf die Modellgüte dargestellt werden. Punktgraphen liefern ein Verfahren, mit dem optimale Wertebereiche der Parameter auf einfache Weise bestimmt und (subjektiv) bewertet werden können.

4.3.3 Verwendete Modellgütemaße

Sämtliche Modellergebnisse wurden mit Hilfe von statistischen Gütemaßen evaluiert. Folgende Gütemaße kamen in dieser Arbeit zur Verwendung:

Index of Agreement (d)

Der Index of Agreement (Willmot 1981) zeigt das Verhältnis zwischen dem mittleren quadratischen Fehler und dem potentiellen Fehler. Der Wertebereich für d liegt zwischen 0 (keine Übereinstimmung) und 1 (totale Übereinstimmung).

$$d = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^n (|P_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2} \quad \text{Gl. 4.1}$$

P = prognostizierter Wert

O = beobachteter Wert

\bar{O} = mittlerer beobachteter Wert

n = Prognosenhorizont

Modelleffizienz nach Nash und Sutcliffe (E)

Die Modelleffizienz nach Nash und Sutcliffe (1970) bewertet die Güte der Anpassung durch das Verhältnis aus dem mittleren quadratischen Fehler und der Varianz der Beobachtungen. Der Wertebereich reicht von minus unendlich bis 1, wobei $E = 1$ für den Fall der optimalen Anpassung gilt. Für $E < 0$ stellt der Mittelwert der Beobachtungen eine bessere Prognose dar als die Modellvorhersage.

$$E = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2} \quad \text{Gl. 4.2}$$

Bestimmtheitsmaß (r^2)

Das Bestimmtheitsmaß ist definiert als der quadrierte Wert des Korrelationskoeffizienten nach Pearson. Dabei gibt r^2 den Anteil der durch die unabhängige Variable erklärten Varianz an der Gesamtvarianz an. Der Wertebereich von r^2 liegt zwischen 0 (keine erklärte Varianz) und 1 (Varianz der Vorhersage ist gleich der Varianz der Messungen) (Köhler et al., 2007).

$$r^2 = \left(\frac{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})(P_i - \bar{P})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (P_i - \bar{P})^2}} \right)^2 \quad \text{Gl. 4.3}$$

Root Mean Square Error (RMSE)

Der *RMSE* ist die Wurzel aus dem mittleren quadratischen Fehler. Er liefert die Information, inwieweit die vorhergesagten Werte im Durchschnitt den beobachteten Werten entsprechen. Dabei werden größere Abweichungen stärker gewichtet als kleinere Abweichungen. Der Wertebereich reicht von plus unendlich bis 0, wobei ein möglichst geringer Wert auf eine hohe Übereinstimmung zwischen vorhergesagtem und beobachtetem Wert hinweist.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2} \quad \text{Gl. 4.4}$$

Basierend auf den Ergebnissen der Effizienzkriterien wurden in Anlehnung an das von Beven und Binley (1992) entwickelte GLUE-Verfahren die Parametersätze herausgesucht, die für das Simulationsergebnis die höchste Übereinstimmung im Vergleich zu den gemessenen Werten aufzeigten. Die jeweils besten fünf Parametersätze eines jeden Effizienzkriteriums wurden ausgewählt, so dass pro Standort für jeden einzelnen Parameter 20 Werte vorlagen.

Um die Übertragbarkeit der generierten Parameter auf andere Standorte zu überprüfen, wurden mit den Parametersätzen, die die besten Effizienzkriterien an einem Untersuchungsort hervorbrachten, Simulationen für alle übrigen Standorte durchgeführt (Kreuzvalidierung). Mit Hilfe der berechneten Effizienzkriterien und der graphischen Darstellung der Simulationsverläufe konnten somit Aussagen über die Standortabhängigkeit der Parameter getroffen werden.

5 Ergebnisse und Diskussion

5.1 Sensitivitätsanalyse

5.1.1 Darstellung der sensitiven Parameter

Auf Grund der großen Anzahl der Parameter wurde die Sensitivitätsanalyse schrittweise für die verschiedenen Module von DNDC durchgeführt. Insgesamt sind 235 Parameter hinsichtlich ihrer Sensitivität getestet worden. Dabei zeigen für die Berechnung der Bodentemperatur 3 Parameter von 11 eine höhere Sensitivität. Für die Berechnung des Bodenwassergehaltes sind es 7 aus 52 Parametern. In den Modulen, in denen die C-/N-Umsatzprozesse sowie die N₂O-Emission kalkuliert werden, können 34 Parameter aus 172 als sensitiv eingestuft werden. Tab. 9 gibt einen Überblick über die ermittelten sensitiven Parameter der einzelnen Module, sie beschreibt kurz, in welche Prozessberechnung sie einfließen, nennt den Basiswert, mit dem die Parameter initialisiert sind und führt die Nummer der Gleichung auf, in die sie eingehen.

Tab. 9. Übersicht über die sensitiven Parameter in DNDC. Die farbliche Markierung zeigt die Zugehörigkeit der Parameter zu den verschiedenen Modulen. Rot = Bodentemperatur, blau = Bodenfeuchtigkeit, grün = C-/N-Umsatz, violett = anaerober Bodenbereich, Nitrifikation und Denitrifikation.

Parameterbezeichnung	Berechnung	Wert	Gleichung
<i>P_C_{soil}</i>	Wärmekapazität der Bodenmatrix	4,0	5.1
<i>P_C_i</i>	Wärmekapazität der Bodenschicht [I]	0,5	5.2
<i>P_K_{soil}</i>	Wärmeleitfähigkeit des Bodens	10,0	5.3
<i>P_DayPET_1</i>	tägliche potenzielle Evapotranspiration	0,015	5.4
<i>P_DayPET_2</i>	tägliche potenzielle Evapotranspiration	1,6	5.4
<i>P_OutWater_1</i>	Wasserabfluss pro Bodenschicht & Stunde	72,0	5.5
<i>P_Outwater_2</i>	Wasserabfluss pro Bodenschicht & Stunde	1,4	5.5
<i>P_DBAR</i>	Perkolationsvermögen des Bodenwassers	0,00001	5.6
<i>P_tev_1</i>	Stündliche Evaporation pro Bodenschicht	2,92	5.7
<i>P_tev_2</i>	Stündliche Evaporation pro Bodenschicht	1,43	5.7
<i>P_doc</i>	gelöster organischer Kohlenstoffpool im Boden	0,05	5.8
<i>P_dfactor</i>	Humusumsetzungsfaktor	0,004	5.9
<i>P_DRF</i>	Faktor für die C-Umsetzung im Boden	0,045	5.10
<i>P_Krcvl</i>	spezifische Umsetzungsrate für C in der sehr leicht umsetzbaren organischen Auflage	0,25	5.11
<i>P_clayc</i>	Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von SOC	0,14	5.12
<i>P_cy</i>	Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von Humus	0,015	5.13
<i>P_Fclay</i>	Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von Huminstoffen	0,471	5.14
<i>P_dBC</i>	Korrekturfaktor für die SOC Bilanz	0,8	5.15
<i>P_RFMM</i>	Bodenfeuchtigkeitsfaktor	0,5455	5.16
<i>P_Fleak</i>	Auswaschungsfaktor	50,0	5.17
<i>P_maxClayN</i>	maximale Adsorption von NH ₄ ⁺ an Ton	2,0	5.18
<i>Para_vg</i>	NH ₃ -Absorptionspotential der Pflanze	0,05	5.19
<i>P_PORO</i>	Einfluss der Porosität auf die Gasdiffusion im Boden	4,0	5.20
<i>P_aveAnvf</i>	mittleres anaerobes Bodenvolumen pro Bodenschicht	5,0	5.21
<i>P_aere</i>	Beeinflussung des Gastransportes durch Pflanzenwurzeln	0,00001	5.22
<i>P_AA1</i>	Bodenfaktor, organische Böden	0,25	5.23
<i>P_AA2</i>	Bodenfaktor, übrige Böden	1,0	5.24
<i>P_PA1</i>	Bodenfeuchtefaktor	1,0	5.25
<i>P_PA2</i>	Bodenfeuchtefaktor	0,25	5.26
<i>P_factm</i>	Bodenfeuchtefaktor	0,21	5.27
<i>P_K</i>	Bypass-flow Faktor	0,001	5.28
<i>P_mircoGrowth</i>	stündliche Wachstumsrate der Nitrifizierer	0,0166	5.29
<i>P_EFFNO</i>	Effizienz der Mikroorganismen	0,2	5.30
<i>P_mno3</i>	Erhaltungsrate der NO ₃ ⁻ Nitrifizierer	0,9	5.31
<i>P_ymn2o</i>	maximale Wachstumsrate der Denitrifizierer an N ₂ O	0,151	5.32
<i>P_Fph</i>	pH Faktor	4,3095	5.33
<i>P_phk2</i>	pH- Faktor für die Nitrit-Reduktions-Rate	5,25	5.34
<i>P_phk3</i>	pH- Faktor für die N ₂ O-Reduktions-Rate	6,25	5.35
<i>P_EEE</i>	Beitrag der Nitrifikationsrate zur N ₂ O-Produktion	0,02	5.36
<i>P_aen2o</i>	N ₂ O-Bildung bei der Nitrifikation	0,0001	5.37
<i>P_b1</i>	Fraktion der emittierten N-Gase aus gefroren Bodenwasser	0,005	5.38
<i>P_b2</i>	Fraktion der emittierten N-Gase dem teilweise gefroren Boden	10,0	5.39
<i>P_TE</i>	Temperaturfaktor	0,01	5.40
<i>P_DocFrost</i>	Doc-Gehalt, Bodenfrost	0,02	5.41

5.1.1.1 Sensitive Parameter der Bodentemperatur

In der Berechnung der Wärmekapazität des gesamten Bodens, der einzelnen Bodenschichten sowie der Wärmeleitfähigkeit des Bodens sind die Parameter zu finden, welche das Simulationsergebnis für die Bodentemperatur am stärksten beeinflussen. Diese sind folgendermaßen in die Berechnungsschritte integriert (Gl. 5.1 – 5.3):

$$C_{soil} = 4,0 \cdot \left(\frac{3450000 \cdot V_{org}}{V_{soil}} + \frac{2350000 \cdot V_{min}}{V_{soil}} \right) \quad (\text{Gl. 5.1})$$

mit :

C_{soil}	Wärmekapazität der Bodenmatrix	$[\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{°C}^{-1}]$
4,0	anpassungsfähiger Parameter sensitiv, als $P_{C_{soil}}$ bezeichnet	$[-]$
3450000	Wärmekapazität der organischen Bodensubstanz	$[\text{J} \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}]$
V_{org}	Volumen des organischen Bodenanteils	$[\text{m}^3 \cdot \text{ha}^{-1}]$
2350000	Wärmekapazität der mineralischen Bodensubstanz	$[\text{J} \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}]$
V_{min}	Volumen des mineralischen Bodenanteils	$[\text{m}^3 \cdot \text{ha}^{-1}]$
V_{soil}	Volumen des gesamten Boden	$[\text{m}^3 \cdot \text{ha}^{-1}]$

Die Wärmekapazität der Bodenmatrix (Gl. 5.1) berechnet sich anteilig aus den Wärmekapazitäten der organischen und der mineralischen Bodenbestandteile. Sensitivität zeigt hier der Parameter, $P_{C_{soil}}$ mit dem Wert 4,0. Nach Li (2008, persönliche Mitteilung) wird diese Variable zur Anpassung des Modells verwendet.

DNDC bildet mit Hilfe eines kaskadenartigen Aufbaus die sich ändernden Eigenschaften im Boden ab. Es ist daher in mehrere Bodenschichten untergliedert. Die Wärmekapazität wird demnach nicht einmalig für den gesamten Boden berechnet, sondern es erfolgt deren Kalkulation in jeder dieser Bodenschichten. Die Wärmekapazität einer Bodenschicht [I] wird anteilig aus der festen Bodensubstanz, der Wärmeleitfähigkeit der Bodenmatrix und aus der vorhandenen Wassermenge bzw. der daraus abgeleiteten Wärmekapazität berechnet (Gl. 5.2). Der in dieser Gleichung gefundene sensitive Parameter hat den Wert 0,5 (P_{C_i}) und gehört ebenfalls zu den anpassungsfähigen Faktoren (Li 2008, persönliche Mitteilung).

$$C_l = 0,5 \cdot (V_{soil} \cdot C_{soil} + V_{water} \cdot 4180000) \quad (\text{Gl. 5.2})$$

mit:

C_l	Wärmekapazität der Bodenschicht l	$[\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{°C}^{-1}]$
0,5	anpassungsfähiger Parameter sensitiv, als P_{C_l} bezeichnet	$[-]$
V_{soil}	Volumen der Bodenschicht	$[\text{m}^3 \cdot \text{ha}^{-1}]$
C_{soil}	Wärmekapazität des gesamten Bodens	$[\text{J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{°C}^{-1}]$
V_{water}	Volumen Wassers pro Fläche	$[\text{m}^3 \cdot \text{ha}^{-1}]$
4180000	Wärmekapazität von Wasser (Richter 1996)	$[\text{J} \cdot \text{ha}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}]$

Der letzte für die Kalkulation der Bodentemperatur sensitive Parameter ist in der Berechnung der Wärmeleitfähigkeit des Bodens zu finden. Wie in Gleichung 5.3 zu sehen ist, wird die Wärmeleitfähigkeit ebenfalls anteilig aus den Einzelleitfähigkeiten berechnet. Auch hier ist der sensitive Parameter mit dem Wert 10,0 ($P_{K_{soil}}$) wiederum anpassungsfähig.

$$K_{soil} = \left(\frac{0,0025 \cdot Org}{TM} + \frac{0,029 \cdot Min}{TM} \right) \cdot 10,0 \quad (\text{Gl. 5.3})$$

mit:

K_{soil}	Wärmeleitfähigkeit des Bodens	$[\text{J} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}]$
0,0025	Wärmeleitfähigkeit der organischen Substanz	$[\text{J} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}]$
Org	Anteil organischer Substanz	$[\text{m}^3 \cdot \text{ha}^{-1}]$
Min	Anteil mineralischer Substanz	$[\text{m}^3 \cdot \text{ha}^{-1}]$
TM	gesamte Bodensubstanz	$[\text{m}^3 \cdot \text{ha}^{-1}]$
10,0	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als $P_{K_{soil}}$ bezeichnet	$[-]$

5.1.1.2 Sensitive Parameter des Bodenwassergehalts

Starken Einfluss auf die Simulationsergebnisse der Bodenwassergehalte von DNDC haben die Parameter aus folgenden Berechnungen:

- tägliche potentielle Evapotranspiration
- Wasserabfluss pro Bodenschicht
- Perkolationsvermögen zwischen den Bodenschichten
- Evaporation pro Bodenschicht

Die Parameter sind wie folgt implementiert (Gl. 5.4 – 5.10):

Die Berechnung der Evapotranspiration in DNDC basiert auf dem Ansatz von Thornthwaite (Gl. 5.4). Die Gleichung beinhaltet zwei Parameter (0,015 und 1,6), die sich

als sensitiv herausgestellt haben. Es sind beides Koeffizienten, die aus der ursprünglichen Thornthwaite-Gleichung stammen.

$$DayPET = 0,015 \cdot \frac{(1,6 \cdot x^A)}{30} \quad (\text{Gl. 5.4})$$

mit:

<i>DayPET</i>	tägliche potentielle Evapotranspiration	[m * Tag ⁻¹]
0,015	Koeffizient der Thornthwaite Gleichung sensitiv, als <i>P_DayPET_1</i> bezeichnet	[-]
1,6	Koeffizient der Thornthwaite Gleichung sensitiv, als <i>P_DayPET_2</i> bezeichnet	[-]
<i>X</i>	Temperaturkoeffizient nach Thornthwaite	[-]
<i>A</i>	empirischer Koeffizient nach Thornthwaite	[-]
30	Anzahl der Tage pro Monat	[Tag]

Zwei weitere einflussreiche Variablen wurden in der Kalkulation des stündlichen Wasserabflusses pro Bodenschicht identifiziert. Die Übertragung von Wasser aus einer Bodenschicht in die nächste ist abhängig von der vorhandenen Wassermenge, der Feldkapazität, dem Porenvolumen, der Mächtigkeit der Bodenschicht sowie den empirisch ermittelten Faktoren mit den Werten 72,0 und 1,4 (*P_OutWater_1* und *P_OutWater_2*; Gl. 5.5). Auch sie sind durch den Modellautor zur Anpassung des Modells integriert worden.

$$OutWater [l][h] = 72,0 \cdot (water [l][h] - feldcapw) \cdot 10^{\left(\frac{1,4}{\frac{(water [l][h] - feldcapw)}{(sts \cdot h - feldcapw)}}} \right)} \quad (\text{Gl. 5.5})$$

mit:

<i>OutWater[l][h]</i>	Wasserabfluss pro Bodenschicht und Stunde	[m ³ * h ⁻¹]
72,0	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_OutWater_1</i> bezeichnet	[-]
<i>water [l][h]</i>	Wassergehalt pro Bodenschicht und Stunde	[m ³ * h ⁻¹]
<i>feldcapw</i>	Feldkapazität	[m ³]
1,4	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_OutWater_2</i> bezeichnet	[-]
<i>sts</i>	Porosität	[-]
<i>h</i>	Mächtigkeit der Bodenschicht	[cm]

Neben dem Wasserabfluss aus den Bodenschichten stellt auch die Perkolation des Bodenwassers von einer Bodenschicht in die nächste eine wichtige Größe für die Vorhersage der Bodenfeuchtigkeit dar. *DBAR* steigt mit der Zunahme des zur Perkolation verfügbaren Wassers exponentiell an. Die simulierten Bodenwassergehalte des Modells reagieren sensitiv auf eine Variation der Variablen mit dem Zahlenwert 0,00001

(P_DBAR ; Gl. 5.6). Es ist ein weiterer Parameter, der für die Modellanpassung Verwendung findet.

$$DBAR = 0,00001 \cdot \exp^{(35,4 \cdot (THET1 + THET2) - 0,5)} \quad (\text{Gl. 5.6})$$

mit:

$DBAR$	Perkolationsvermögen des Bodenwassers	$[m^3 \cdot h^{-1}]$
0,00001	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_DBAR bezeichnet	$[-]$
35,4	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung)	$[-]$
$THET1$	verfügbares Wasser in Bodenschicht [I] $THET1 = water[I][h] - witptw$	$[m^3 \cdot h^{-1}]$
$THET2$	verfügbares Wasser in Bodenschicht [I + 1] $THET2 = water[I+1][h] - witptw$	$[m^3 \cdot h^{-1}]$
$water[I][h]$	Wassergehalt pro Bodenschicht	$[m^3 \cdot h^{-1}]$
$witptw$	permanenter Welkepunkt	$[m^3]$

Die vierte Größe, die die Bodenfeuchtigkeit beeinflusst, ist die stündliche Evaporation des Wassers aus den einzelnen Bodenschichten. Dabei ist anzumerken, dass in der verwendeten DNDC Version (9.0) Wasser aus den oberen 20 cm des Bodens evaporieren kann. Für Bodenschichten, die sich darunter befinden, greift dieser Prozess nicht mehr. In die Kalkulation der Evaporation (Gl. 5.7) gehen das verfügbare Bodenwasser einer Bodenschicht [I], das Verhältnis von Bodentiefe zur maximalen Bodentiefe, in der Evaporation stattfinden kann, sowie die Koeffizienten -2,92 (P_tev_1) und 1,43 (P_tev_2) ein. Beide Koeffizienten stellen sensitive Parameter dar.

$$tev = hrPET3 \cdot \left[\frac{\left(\frac{zz}{EVL} \right)}{\left(EVL + \exp \left(-2,92 - 1,43 \cdot \left(\frac{zz}{EVL} \right) \right) \right)} \right] \quad (\text{Gl. 5.7})$$

mit:

tev	stündliche Evaporation pro Bodenschicht	$[m^3 \cdot Schicht^{-1} \cdot h^{-1}]$
$hrPET3$	für die Evaporation verfügbares Bodenwasser pro Stunde	$[m \cdot h^{-1}]$
EVL	maximale Bodentiefe für die Evaporation, 0,2 m	$[m]$
zz	Bodentiefe	$[m]$
2,92	Koeffizient, (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_tev_1 bezeichnet	$[-]$
1,43	Koeffizient, (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_tev_2 bezeichnet	$[-]$

5.1.1.3 Umsetzungsprozesse im Boden (Mineralisation)

Die Überprüfung der Parameter aus der Mineralisation und Immobilisation hinsichtlich ihres Einflusses auf die berechneten N₂O-Emissionen sowie auf die dargestellten C-/N-Umsatzprozesse zeigt, dass 12 Parameter als sensitiv identifiziert werden können. Dabei sind über die Hälfte dieser sensitiven Parameter in Prozessen zu finden, die die Umsetzung von organischem Kohlenstoff darstellen oder die Kohlenstoffverfügbarkeit beeinflussen. Die übrigen Parameter befinden sich in den Berechnungen zur Stickstoff- und Wasserverfügbarkeit.

In DNDC resultiert der gelöste organische Kohlenstoffpool einer Bodenschicht u.a. aus der Streuauflage. Aus der Auflagenmenge wird mittels eines empirisch ermittelten Umrechnungsfaktors die Menge des gelösten organischen Kohlenstoffgehalts (DOC-Gehalt) pro Bodenschicht ermittelt. Der Umrechnungsfaktor (0,05) erweist sich als einer der sensitiven Parameter.

$$doc[l] = suflit \cdot 0,05 \quad (\text{Gl. 5.8})$$

mit:

<i>doc</i> [l]	gelöster organischer Kohlenstoffpool im Boden	[kg C * ha ⁻¹]
<i>suflit</i>	Streuauflage	[kg C * ha ⁻¹]
0,05	empirischer Umrechnungsfaktor, (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_{doc}</i> bezeichnet	[-]

Eine weitere Variable, die als sensitiv eingestuft werden kann, ist in der Berechnung eines Umsetzungsfaktors (Gl. 5.9) zu finden, der bei der Abbildung der Mineralisation von Humus in DNDC zum Einsatz kommt.

$$d_factor = dphum[l] \cdot 0,000005 - 0,004 \quad (\text{Gl. 5.9})$$

mit:

<i>d_factor</i>	Humusumsetzungsfaktor	[-]
<i>dphum</i> [l]	passiver Humus Pool pro Bodenschicht	[kg C * ha ⁻¹]
0,000005	empirischer Umsetzungsfaktor, (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
0,004	empirischer Umsetzungsfaktor, (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_{dfactor}</i> bezeichnet	[-]

Weitere Parameter, die das Modellergebnis beeinflussen und im Modell für die Umsetzung von organischen Kohlenstoffverbindungen verwendet werden, sind die Variablen *DRF* und *Krcvl*. Diese Variablen sind in DNDC als globale Faktoren definiert und stehen im Programmcode an zentraler Stelle (main.h). Da sie in diverse Formeln

eingehen, welche C-Umsatzprozesse und -Raten beschreiben, ist hier lediglich der Variablenname und Zahlenwert aufgeführt.

$$DRF = 0,045 \quad (\text{Gl. 5.10})$$

mit:
DRF systematisch justierter Faktor für die C-Umsetzung (Li et al. 1992) [-]
 sensitiv, als *P_DRF* bezeichnet

$$Krcvl = 0,25 \quad (\text{Gl. 5.11})$$

mit:
Krcvl als spezifische Umsetzungsrate für den Kohlenstoff in der sehr leicht umsetzbaren organischen Auflage (Li et al. 1992) [Rate / Tag]
 sensitiv, als *P_Krcvl* bezeichnet

Neben den Parametern, die einen direkten Einfluss auf die Umsetzung von organischen Kohlenstoffverbindungen haben, können 3 sensitive Parameter in DNDC identifiziert werden, die die Auswirkungen des Tongehaltes im Boden auf den Kohlenstoff beschreiben (Gl. 5.12 – 5.14).

Dabei wird durch *clayc* (Gl 5.12) der Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung des gesamten organischen Kohlenstoffs des Bodens in DNDC dargestellt. In die Berechnung von *clayc* gehen neben dem Tonanteil der Bodensubstanz drei anpassungsfähige Parameter ein.

$$clayc = \left(\frac{\log \left(\frac{0,14}{clay} \right)}{2,3026 + 1,0} \right) \quad (\text{Gl. 5.12})$$

mit:
clayc Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von SOC [-]
clay Tonanteil im Boden [-]
 0,14 anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) [-]
 sensitiv, als *P_clayc* bezeichnet
 2,3026 anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) [-]
 1,0 anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) [-]

Mit cy wird der Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von Humus abgebildet (Gl. 5.13). Durch die Hilfe des Tonanteils im Boden und zwei empirisch ermittelten Koeffizienten wird cy berechnet.

$$cy = -0,0127 \cdot clay + 0,015 \quad (\text{Gl. 5.13})$$

mit:

cy	Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von Humus	[-]
$clay$	Tonanteil des Bodens	[-]
0,0127	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
0,015	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_{cy} bezeichnet	[-]

$Fclay$ findet Verwendung in der Kalkulation des Umsatzes der Huminstoffe (Gl. 5.14). Auch hier dient der Tongehalt des Bodens als Ausgangsgröße, die mit verschiedenen Variablen multipliziert bzw. potenziert wird.

$$Fclay = 0,1793 \cdot clay^{-0,471} \cdot 20,0 \quad (\text{Gl. 5.14})$$

mit:

$Fclay$	Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von Huminstoffen	[-]
$clay$	Tonanteil des Bodens	[-]
0,1793	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
- 0,471	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_{Fclay} bezeichnet	[-]
20,0	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]

Als letzte Einflussgröße, die im Zusammenhang mit dem organischen Kohlenstoffgehalt des Bodens steht, ist DBC zu nennen (Gl. 5.15). Mittels dieser Gleichung werden mögliche Ungleichgewichte in der Bilanz des gesamten organischen Kohlenstoffgehalts des Bodens ausgeglichen.

$$DBC = (CRB1[l] + CRB2[l]) - ocini[l] \cdot 0,8 \quad (\text{Gl. 5.15})$$

mit:

DBC	Korrekturfaktor für Ungleichgewichte der SOC-Bilanz	[kg C * ha ⁻¹]
$CRB1$ [l]	umgesetzte labile mikrobielle Biomasse je Bodenschicht	[kg C * ha ⁻¹]
$CRB2$ [l]	umgesetzte schwer zersetzbare mikrobielle Biomasse je Bodenschicht	[kg C * ha ⁻¹]
$ocini$ [l]	Humadgehalt je Bodenschicht	[kg C * ha ⁻¹]
0,8	Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_{DBC} bezeichnet	[-]

Weitere Faktoren, die die Ergebnisse von DNDC beeinflussen und bei den Umsatzprozessen lokalisiert sind, sind in den Berechnungen der Bodenfeuchtigkeit und N-Verfügbarkeit zu finden.

Der Bodenfeuchtigkeitsfaktor $RFMM$ wird aus dem täglichen wassergefüllten Porenvolumen einer Bodenschicht zusammen mit verschiedenen anpassungsfähigen Parametern ermittelt (Gl. 5.16). $RFMM$ bildet zusammen mit dem Bodentemperaturfaktor einen Temperatur-Feuchtigkeits-Faktor, der in die Berechnung sämtlicher Umsatzprozesse in DNDC eingeht.

$$RFMM = (-4,3717 \cdot day_wfps[l] \cdot day_wfps[l] + 5,1364 * day_wfps[l] - 0,5455) \quad (\text{Gl. 5.16})$$

mit

$RFMM$	Bodenfeuchtigkeitsfaktor	[-]
day_wfps	durchschnittlicher Wassergehalt pro Bodenschicht und Tag	[WFPS]
-4,3717	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
5,1364	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
0,5455	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_RFMM bezeichnet	[-]

Die Versickerung von Wasser aus dem betrachteten Bodenprofil wird über F_leak beschrieben. Sie beeinflusst unter anderem die Bodenfeuchtigkeit, den Nitratverlust und die Methanoxidation. F_leak wird aus der Wasserversickerungsrate an der Untergrenze des modellierten Bodenprofils und einem spezifischen Faktor berechnet (Gl. 5.17). Dabei beschreibt die Variable $WaterLeakRate$ nach Angaben des Modellautors die Wasserverlustrate an der Horizontuntergrenze von überfluteten Böden.

$$F_leak = \max 1,0^{(WaterLeakRate * 50,0)} \quad (\text{Gl. 5.17})$$

mit:

F_leak	Auswaschungsfaktor	[-]
$WaterLeakRate$	Wasserverlustrate an der Horizontuntergrenze von überfluteten Böden	[m * Tag ⁻¹]
1,0	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, pers. Mitteilung)	[-]
50,0	anpassungsfähiger Parameter (Li 2008, pers. Mitteilung) sensitiv, als P_Fleak bezeichnet	[-]

Die beiden letzten sensitiven Parameter im C-/N-Umsatzmodul von DNDC sind in den Berechnungen der Ad- sowie Absorption von Stickstoff zu finden. Die Gleichung max_clay_N (Gl. 5.18) stellt die maximale Adsorption von Ammonium an Tonminerale dar.

$$\max_clay_N = 2,0 * base_clay_N \quad (\text{Gl. 5.18})$$

mit:

\max_clay_N	maximale Adsorption von NH_4^+ an Ton	$[\text{kg N} * \text{ha}^{-1}]$
$base_clay_N$	Basis Adsorption von NH_4^+ an Tonminerale	$[\text{kg N} * \text{ha}^{-1}]$
2,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als $P_maxClayN$ bezeichnet	$[-]$

Mit der Berechnung von vg (Gl. 5.19) wird das NH_3 -Absorptionspotenzial von Pflanzen beschrieben. Beeinflusst wird dieses vom N-Gehalt der Pflanzen sowie von der Feuchtigkeit der Pflanzenblätter.

$$vg = 0,05 * fpn * flm \quad (\text{Gl. 5.19})$$

mit:

vg	NH_3 -Absorptionspotential der Pflanze	$[\text{kg N} * \text{ha}^{-1} * \text{Tag}^{-1}]$
fpn	Effekt des N-Gehaltes in der Pflanze auf das NH_3 -Absorptionspotential	$[-]$
flm	Effekt der Blattfeuchtigkeit auf das NH_3 -Absorptionspotential	$[-]$
0,05	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als $Para_vg$ bezeichnet	$[\text{kg N} * \text{ha}^{-1} * \text{Tag}^{-1}]$

5.1.1.4 Prozesse der Nitrifikation und der Denitrifikation

Von allen sensitiven Parametern konnten 50 % in den Berechnungen für die Nitrifikation und Denitrifikation lokalisiert werden. Sie sind in Kalkulationen zu finden, die

- den Sauerstoffgehalt des Boden,
- die Zuführung von Substrat in den anaeroben Bodenbereich,
- den Einfluss von Bodenwasser, pH-Wert, Kohlenstoffgehalt des Bodens und Bodentemperatur auf die Nitrifikation und Denitrifikation,
- die Wachstumsrate von Mikroorganismen und
- die N_2O -Emissionsraten bei Bodenfrost darstellen.

Die Berechnungen der Größe $PORO$ (Gl. 5.20) bilden den Einfluss der Porosität auf die Gasdiffusion im Boden ab. Der aus dieser Berechnung resultierende Wert kommt beispielsweise bei der Kalkulation der Emissionen von NO , N_2O und N_2 zur Verwendung.

$$PORO = sts \cdot 4,0 \quad (\text{Gl. 5.20})$$

mit:

<i>PORO</i>	Einfluss der Porosität auf die Gasdiffusion im Boden	[-]
<i>sts</i>	Porosität des Bodens	[Vol. %]
4,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_PORO</i> bezeichnet	[-]

Ein weiterer sensibler Parameter ist bei der Berechnung bezüglich der Änderung des mittleren anaeroben Bodenvolumens in einer Bodenschicht zu finden (Gl. 5.21). Maßgeblich beeinflusst wird die Veränderung von *ave_anvf* in einer Bodenschicht durch die bereits vorhandene Ausdehnung des anaeroben Bodenbereiches sowie einen empirischen Koeffizienten.

$$ave_anvf[l] = ave_anvf[l] + \frac{anvf[l]}{5,0} \quad (\text{Gl. 5.21})$$

mit:

<i>ave_anvf[l]</i>	mittleres anaerobes Bodenvolumen pro Bodenschicht	[-]
<i>anvf[l]</i>	anaerobes Bodenvolumen pro Bodenschicht	[-]
5,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_aveAnvf</i> bezeichnet	[-]

Der dritte Faktor im Bereich Gasdiffusion/Sauerstoffgehalt im Boden ist die Berechnung des Gastransportes durch Pflanzenwurzeln (Gl. 5.22). Dieser kommt allerdings nur dann zum Einsatz, wenn eine Überflutung der Fläche vorliegt. In diesem Fall wird ein Teil der N-Gase N₂O, NO und N₂ durch die Pflanze emittiert. Sie werden über die Wurzeln im Boden aufgenommen, bevor sie über die Spaltöffnungssysteme der Pflanzen an die Atmosphäre abgegeben werden. Zur Berechnung dieses Vorganges ist daher die Wurzelbiomasse von Bedeutung.

$$aere = 0,00001 * \frac{Root_Wt[cwc]}{2200,0} \quad (\text{Gl. 5.22})$$

mit:

<i>aere</i>	Beeinflussung des Gastransportes durch Pflanzenwurzeln	[-]
<i>Root_WT [cwc]</i>	Wurzelbiomasse	[kg C * ha ⁻¹]
2200,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
0,00001	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_aere</i> bezeichnet	[-]

Mittels des Faktors AA wird in DNDC der Einfluss verschiedener Bodenzusammensetzungen auf den Transport von Stoffen (NH_4^+ , NO_3^- , NO_2^- , DOC) und die Diffusion von Gasen (N_2O , NO und N_2) in den anaeroben Bodenbereich bestimmt (vgl. Gl. 5.23 und 5.24). Da AA wieder in verschiedenste Gleichungen eingeht, sind hier lediglich die Definitionen der Variablen sowie deren Zahlenwert dargestellt. Dabei nimmt AA für organische Böden einen anderen Wert an als für die übrigen Böden.

$$AA = 0,25 \quad (\text{Gl. 5.23})$$

mit:

AA	Bodenfaktor, organische Böden	[-]
0,25	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_{AA1} bezeichnet	[-]

$$AA = 1,00 \quad (\text{Gl. 5.24})$$

mit:

AA	Bodenfaktor, übrige Böden	[-]
1,00	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_{AA2} bezeichnet	[-]

Inwieweit die Bodenfeuchtigkeit die Gasdiffusion beeinflusst, wird durch die Gleichungen 5.25a und b verdeutlicht. Der hier berechnete Wert für PA beeinflusst die N_2O - und NO-Diffusion bzw. Emission. PA wird aus dem Verhältnis von Wassergehalt zum Porenvolumen je Bodenschicht abgeleitet. Für überflutete Böden (z.B. im Reisanbau) wird der empirische Koeffizient, der standardmäßig auf 1,0 gesetzt ist, auf 0,25 reduziert.

$$PA = 1,0 \cdot \left(1,0 - \left(\frac{\text{water}[T][l]}{ps} \right) \right) \quad (\text{Gl. 5.25a})$$

mit:

PA	Bodenfeuchtigkeitsfaktor	[-]
$\text{water}[T][l]$	Wassergehalt pro Bodenschicht	[m Wasser * l ⁻¹]
ps	Porenvolumen des Bodens	[m * l ⁻¹]
1,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
1,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_{PA1} bezeichnet	[-]

für überflutete Böden gilt:

$$PA = 0,25 \cdot \left(1,0 - \left(\frac{\text{water}[T][l]}{ps} \right) \right) \quad (\text{Gl. 5.25b})$$

mit:

0,25	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_{PA2} bezeichnet	[-]
------	---	-------

Der Einfluss der Bodenfeuchtigkeit auf die Populationsgröße von Nitrifizierern und Denitrifizierern wird über den Wert $fact_m$ angezeigt. Neben dem wassergefüllten Porenvolumen wird $fact_m$ mit Hilfe von empirischen Koeffizienten ermittelt.

$$fact_m = 0,8 + 0,21 * (1,0 - day_wfps[l]) \quad (\text{Gl. 5.27})$$

mit

$fact_m$	Bodenfeuchtigkeitsfaktor	[-]
$day_wfps [l]$	wassergefülltes Porenvolumen pro Bodenschicht und Tag	[-]
0,8	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
0,21	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_{factm} bezeichnet	[-]

Mit dem Koeffizienten K (Gl. 5.28) wird der Einfluss hoher Bodenwassergehalte, die zu einem Bypass-flow führen, auf die Effizienz der Nitrifizierer in DNDC abgebildet.

$$K = 0,001 \quad (\text{Gl. 5.28})$$

mit:

K	Bypass-flow Faktor	[-]
0,001	Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_K bezeichnet	[-]

Wichtige Bestandteile in DNDC sind die Berechnungen des Wachstums der Mikroorganismenpopulationen. In Gleichung 5.29 ist die tägliche Wachstumsrate der Nitrifizierer dargestellt. Sie berechnet sich u.a. aus dem gelösten organischen Kohlenstoffgehalt im Boden, sowie aus dem zuvor beschriebenen Bodenfeuchtigkeitsfaktor $fact_m$.

$$micro_growth = 0,0166 \cdot \frac{\frac{doc_d[l]}{(1,0 + doc_d[l])} + \frac{fact_m}{(1,0 + fact_m)}}{24} \quad (\text{Gl. 5.29})$$

mit		
<i>mirco_growth</i>	stündliche Wachstumsrate der Nitrifizierer	[kg C * ha ⁻¹ * h ⁻¹]
<i>doc_d[l]</i>	gelöster organischer Kohlenstoff, in aeroben Bodenbereichen	[kg C * ha ⁻¹]
<i>fact_m</i>	Bodenfeuchtefaktor	[-]
24	Stunden pro Tag	[h]
0,0166	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_mircoGrowth</i> bezeichnet	[-]

Im Folgenden sind weitere Faktoren dargestellt, die sich als sensitiv herausstellten und in verschiedene Prozesse eingehen.

Der Faktor *EFFNO* stellt die Effizienz der Mikroorganismen dar. Er geht beispielsweise in die Berechnung von neu gebildeten, schwer abbaubaren Huminstoffen ein, die aus der Zersetzung von Mikroorganismen resultieren.

$$EFFNO = 0,2 \quad (\text{Gl. 5.30})$$

mit:		
<i>EFFNO</i>	Effizienz der Mikroorganismen	[-]
0,2	empirischer Koeffizient (Li 1992) sensitiv, als <i>P_EFFNO</i> bezeichnet	[-]

Der Faktor *m_no3* beschreibt die maximale Wachstumsrate bzw. Erhaltungsrate von NO₃⁻-Denitrifizierern.

$$m_no3 = 0,09 \quad (\text{Gl. 5.31})$$

mit:		
<i>m_no3</i>	Erhaltungsrate der NO ₃ ⁻ Nitrifizierer	[kg N * kg ⁻¹ * h ⁻¹]
0,9	nach van Verseveld et al. (1977) sensitiv, als <i>P_mno3</i> bezeichnet	[kg N * kg ⁻¹ * h ⁻¹]

Der maximale Wachstumsquotient der Denitrifizierer durch die Reduktion von N_2O zu N_2 ist in DNDC auf 0,151 [$kg\ C * kg\ N^{-1}$] festgelegt (Gl. 5.32).

$$ym_n2o = 0,151 \quad (\text{Gl. 5.32})$$

mit

ym_n2o	maximale Wachstumsrate der Denitrifizierer an N_2O	[$kg\ C * kg\ N^{-1}$]
0,151	nach van Verseveld et al. (1977) sensitiv, als P_ymn2o bezeichnet	[$kg\ C * kg\ N^{-1}$]

Durch die Sensitivitätsanalyse wurden drei Parameter identifiziert, die sich auf die pH-Bedingungen im Denitrifikationsmodul auswirken. Mit FpH (Gl. 5.33) wird der Einfluss des pH-Wertes auf die Populationsgröße der Nitrifizierer und Denitrifizierer dargestellt. In die Berechnung dieses Wertes gehen neben dem pH-Wert der jeweiligen Bodenschicht auch verschiedene empirische Koeffizienten ein.

$$Fph = -0,1225 \cdot sph[l]^2 + 1,6165 \cdot sph[l] - 4,3095 \quad (\text{Gl. 5.33})$$

mit

Fph	pH-Faktor	[-]
$sph [l]$	pH-Wert der Bodenschicht	[-]
-0,1225	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
1,6165	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
4,3095	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als P_Fph bezeichnet	[-]

Die pH-Faktoren $phk2[l]$ und $phk3[l]$ werden dazu benötigt, die Auswirkungen der Bodenreaktion auf die NO_2^- -Reduktions-Rate ($phk2[l]$, Gl. 5.34) und auf die N_2O -Reduktions-Rate ($phk3[l]$, Gl. 5.35) abzubilden. Sie werden wie folgt berechnet:

$$phk\ 2[l] = 2,0 * \left(1,0 - \frac{1,0}{\left(1,0 + \exp\left(\frac{(sph[l]-5,25)}{1,0}\right) \right)} \right) \quad (\text{Gl. 5.34})$$

mit:

$phk2[l]$	pH-Faktor für die Nitrit-Reduktions-Rate	[-]
$sph [l]$	pH-Wert der Bodenschicht [l]	[-]
2,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
1,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
5,25	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als bezeichnet	[-]

$$phk\ 3[l] = 2,0 * \left(1,0 - \frac{1,0}{\left(1,0 + \exp \left(\frac{(sph [l] - 6,25)}{1,5} \right) \right)} \right) \quad (\text{Gl. 5.35})$$

mit:

<i>phk3</i> [l]	pH-Faktor für die N ₂ O-Reduktions-Rate	[-]
<i>sph</i> [l]	pH Wert der Bodenschicht [l]	[-]
2,0	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
1,5	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
6,25	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
	sensitiv, als <i>P_{phk3}</i> bezeichnet	

Sensitive Parameter wurden auch in Berechnungen gefunden, die die direkten N₂O-Emissionen aus den jeweiligen Prozessen beschreiben. Dabei wird durch *EEE* (Gl. 5.36) der Anteil der Nitrifikationsrate quantifiziert, die zur N₂O-Produktion beiträgt. Beeinflusst wird dieser durch einen Bodenbearbeitungsfaktor, der die verschiedenen Durchlüftungsbedingungen des Bodens auf Grund von Managementmaßnahmen darstellt.

$$EEE = 0,02 \cdot till_fact^{1,8} \quad (\text{Gl. 5.36})$$

mit

<i>EEE</i>	Beitrag der Nitrifikationsrate zur N ₂ O-Produktion	[-]
<i>till_fact</i>	Bodenbearbeitungsfaktor	[-]
1,8	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
0,02	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
	sensitiv, als <i>P_{EEE}</i> bezeichnet	

Die Berechnung der N₂O-Produktion aus der Nitrifikation beinhaltet ebenfalls einen als sensitiv eingestuften Parameter. Dargestellt wird die Produktion von N₂O durch die Multiplikation der Nitrifikationsraten mit zuvor ermittelten Faktoren bzw. durch die Berücksichtigung empirischer Korrekturkoeffizienten (Gl. 5.37).

$$ae_n2o = EEE * nno - 0,0001 \quad (\text{Gl. 5.37})$$

mit:

<i>ae_n2o</i>	N ₂ O-Bildung bei der Nitrifikation	[kg N * ha ⁻¹ * h ⁻¹]
<i>EEE</i>	Beitrag der Nitrifikationsrate zur N ₂ O-Produktion	[-]
<i>nno</i>	Brutto Nitrifikationsrate	[kg N * ha ⁻¹ * h ⁻¹]
0,0001	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	[-]
	sensitiv, als <i>P_{aen2o}</i> bezeichnet	

Eine andere N₂O-relevante Variable ist der Anteil der N-Gase, die bei Frostbedingungen täglich von den im gefrorenen Boden eingeschlossenen N-Gasen an die Atmosphäre abgegeben werden. Dieser Anteil ist für zwei Zustände definiert. Ist das Wasser im Boden vollständig gefroren, so ist die Emissionsrate für die N-Gase konstant (Gl. 5.38).

$$b = 0,005 \quad (\text{Gl. 5.38})$$

mit:

<i>b</i>	Fraktion der emittierten N-Gase aus vollständig gefrorenen Boden	[-]
0,005	anpassungsfähiger Faktor (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_b1</i> bezeichnet	[-]

Ist der Boden nur zum Teil gefroren und taut das Eis / der Schneedecke, dann ist die Emissionsrate abhängig von der täglichen Menge an geschmolzenem Schnee (Gl. 5.39).

$$b = \text{SnowMelt} \cdot 10,0 \quad (\text{Gl. 5.39})$$

mit:

<i>b</i>	Fraktion der emittierten N-Gase aus teilweise gefrorenem Boden	[-]
<i>SnowMelt</i>	Menge der täglichen Schneeschmelze	[m Wasser * Tag ⁻¹]
10,0	empirischer Faktor (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_b2</i> bezeichnet	[-]

Ebenfalls als sensitiv hatte sich der Wert des Temperaturfaktors *TE* herausgestellt (Gl. 5.40). *TE* wird in DNDC bei sämtlichen Reduktionsschritten von Nitrat zu Stickstoff berücksichtigt.

$$TE[l] = 0,01 \quad (\text{Gl. 5.40})$$

mit:

<i>TE[l]</i>	Temperaturfaktor	[-]
0,01	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als <i>P_TE</i> bezeichnet	[-]

Der sensitive Parameter *doc[l]*, der in der Berechnung des gelösten organischen Kohlenstoffgehalts im gefrorenen Boden verwendet wird (Gl. 5.41), errechnet sich aus dem gesamten organischen Kohlenstoffgehalt einer Bodenschicht und wird wie folgt ermittelt:

$$doc[l] = soc[l] \cdot 0,02 \cdot 0,01 \quad (\text{Gl. 5.41})$$

mit:

$doc [l]$	gelöster organischer Kohlenstoffgehalt pro Bodenschicht	$[\text{kg C} \cdot \text{ha}^{-1}]$
$soc [l]$	gesamter organischer Kohlenstoffgehalt pro Bodenschicht	$[\text{kg C} \cdot \text{ha}^{-1}]$
0,01	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung)	$[-]$
0,02	empirischer Koeffizient (Li 2008, persönliche Mitteilung) sensitiv, als $P_DocFrost$ bezeichnet	$[-]$

5.1.2 Wertebereiche der sensitiven Parameter

Im Zuge der Sensitivitätsanalyse wurde mittels einer *one factor at a time* Analyse untersucht, in welchem Rahmen die Werte der als sensitiv betrachteten Parameter variiert werden konnten. Dabei zeigte sich nach der Überprüfungen der simulierten mit den beobachteten Werten, dass die ausgewählten Parameter des Bodentemperaturmoduls (P_C_{soil} , P_C_l und P_K_{soil}) um maximal das 1,5-fache, ausgehend vom Ausgangswert, erhöht werden sollten. Bei einer Überschreitung dieser Grenze kam es zu einer zeitlichen Verschiebung sowie zu einer Stauchung der Temperaturamplitude mit zunehmender Bodentiefe. Bei der Verringerung der Parameterwerte konnte dieser Effekt nicht beobachtet werden. Für die weiteren Analysen ergaben sich daher für P_C_{soil} , P_C_l und P_K_{soil} die aus Tab. 10 dargestellten Wertebereiche.

Die Betrachtungen der sensitiven Parameter aus dem Bodenfeuchtigkeitsmodul zeigten, dass lediglich für die Parameter $P_OutWater_1$ und $P_OutWater_2$ eine Einschränkung vorgenommen werden musste. Für Werte $< 7,0$ und $> 72,0$ ($P_OutWater_1$) sowie $< 1,0$ und $> 2,0$ ($P_OutWater_2$) wurden von DNDC keine plausiblen Bodenwassergehalte mehr berechnet. Bei den übrigen Parametern konnten die ursprünglich gesetzten Grenzen, mit einer Variation von +/- einer Zehnerpotenz, ausgehend vom Originalwert, beibehalten werden (Tab. 10). Bei diesen Parametern konnten weder unrealistische Modellergebnisse noch zeitliche Verschiebungen des berechneten Bodenwassergehaltes mit zunehmenden Bodenschichten beobachtet werden.

Die *one factor at a time* Analyse für alle übrigen Parameter der Bereiche Umsatzprozesse im Boden sowie Prozesse der Nitrifikation und Denitrifikation zeigte ebenfalls, dass die ursprünglich gewählte Begrenzung (+/- eine Zehnerpotenz) beibehalten werden konnte. (Tab. 10).

Tab. 10. Ermittelte Wertebereiche aller sensitiven Parameter aus den DNDC Modulen Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, Umsatzprozesse im Boden und Prozesse der Nitrifikation und Denitrifikation. Aufgeführt ist neben den ermittelten Wertebereichen der ursprünglich in DNDC verwendete Basiswert eines jeden Parameters.

Parameter	Wert	Wertebereich	Parameter	Wert	Wertebereich
<i>P_C_{soil}</i>	4,0	0,4 – 10,0	<i>P_PORO</i>	4,0	0,4 - 40,0
<i>P_C_l</i>	0,5	0,05 - 1,25	<i>P_aveAnvf</i>	5,0	0,5 – 50,0
<i>P_K_{soil}</i>	10,0	1,0 - 25,0	<i>P_aere</i>	0,00001	0,000001 - 0,0001
<i>P_DayPET_1</i>	0,015	0,0015 - 0,15	<i>P_AA1</i>	0,25	0,025 - 2,5
<i>P_DayPET_2</i>	1,6	0,16 – 16,0	<i>P_AA2</i>	1,0	0,1 – 10,0
<i>P_OutWater_1</i>	72,0	7,0 - 72,0	<i>P_PA1</i>	1,0	0,1 – 10,0
<i>P_Outwater_2</i>	1,4	1,0 - 2,0	<i>P_PA2</i>	0,25	0,0025 - 2,5
<i>P_DBAR</i>	0,00001	0,000001 - 0,0001	<i>P_factm</i>	0,21	0,021 - 2,1
<i>P_tev_1</i>	2,92	0,292 - 29,2	<i>P_K</i>	0,001	0,0001 - 0,01
<i>P_tev_2</i>	1,43	0,143 - 14,3	<i>P_mircoGrowth</i>	0,0166	0,00166 - 0,166
<i>P_doc</i>	0,05	0,005 - 0,5	<i>P_EFFNO</i>	0,2	0,02 – 2,0
<i>P_dfactor</i>	0,004	0,0004 - 0,004	<i>P_mno3</i>	0,9	0,09 - 9,0
<i>P_DRF</i>	0,045	0,0045 - 0,45	<i>P_ymn2o</i>	0,151	0,0151 - 1,51
<i>P_Krcvl</i>	0,25	0,025 - 2,5	<i>P_Fph</i>	4,3095	0,43092 - 43,092
<i>P_clayc</i>	0,14	0,014 - 1,4	<i>P_phk2</i>	5,25	0,525 - 52,5
<i>P_cy</i>	0,015	0,0015 - 0,15	<i>P_phk3</i>	6,25	0,625 - 62,5
<i>P_Fclay</i>	0,471	0,0471 - 4,71	<i>P_EEE</i>	0,02	0,002 - 0,2
<i>P_dBC</i>	0,8	0,08 - 8,0	<i>P_aen2o</i>	0,0001	0,00001 - 0,001
<i>P_RFMM</i>	0,5455	0,05455 - 5,455	<i>P_b1</i>	0,005	0,0005 - 0,05
<i>P_Fleak</i>	50,0	5,0 – 500,0	<i>P_b2</i>	10,0	1,0 – 100,0
<i>P_maxClayN</i>	2,0	0,2 – 20,0	<i>P_TE</i>	0,01	0,001 - 0,1
<i>Para_vg</i>	0,05	0,005 - 0,5	<i>P_DocFrost</i>	0,02	0,002 - 0,2

Zusätzlich wurden die Sensitivitätsanalysen für die Bodentemperatur und die Bodenfeuchtigkeit für verschiedene Tiefen (5 cm, 20 cm sowie 40 cm) vorgenommen. Zur weiteren Verwendung wurden die Parameterkombinationen herangezogen, mit denen für jede Bodentiefe plausible Modellrealisationen bezüglich der Bodentemperatur und der Bodenfeuchtigkeit erzielt werden konnten.

5.1.3 Rangfolge der sensitiven Parameter im Jahresverlauf

Aufgrund der unterschiedlichen Klima- und Vegetationsbedingungen im Jahresverlauf können einzelne Parameter zu bestimmten Zeiten (z.B. zu Frostzeiten) im Jahr einen stärkeren Einfluss auf das Modellergebnis haben als in der übrigen Zeit. Deshalb wurde für jedes Modul (Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, C-/N-Umsatzprozesse im Boden sowie Prozesse der Nitrifikation und Denitrifikation) über den gesamten Simulationszeitraum aus jedem Monat zufällig ein Tag ausgewählt. Mit den für diese Tage kalkulierten Modellergebnissen wurde jeweils eine multiple lineare Regression

durchgeführt. Damit standen für jedes Modul und jeden Parameter mehrere standardisierte Regressionskoeffizienten (β) für die weiteren Auswertungen zur Verfügung. Durch diese Vorgehensweise sollte sichergestellt werden, dass es zu keiner Verzerrung bei der Auswahl sensibler Parameter durch die Jahreszeit kommt. In Abb. 12 wird am Beispiel des Parameters $P_DayPET1$ ein solches Verhalten dargestellt. Deutlich zu erkennen ist die erhöhte Sensitivität in den Monaten Juli und August, wohingegen die Sensitivität im Winter gegen Null geht.

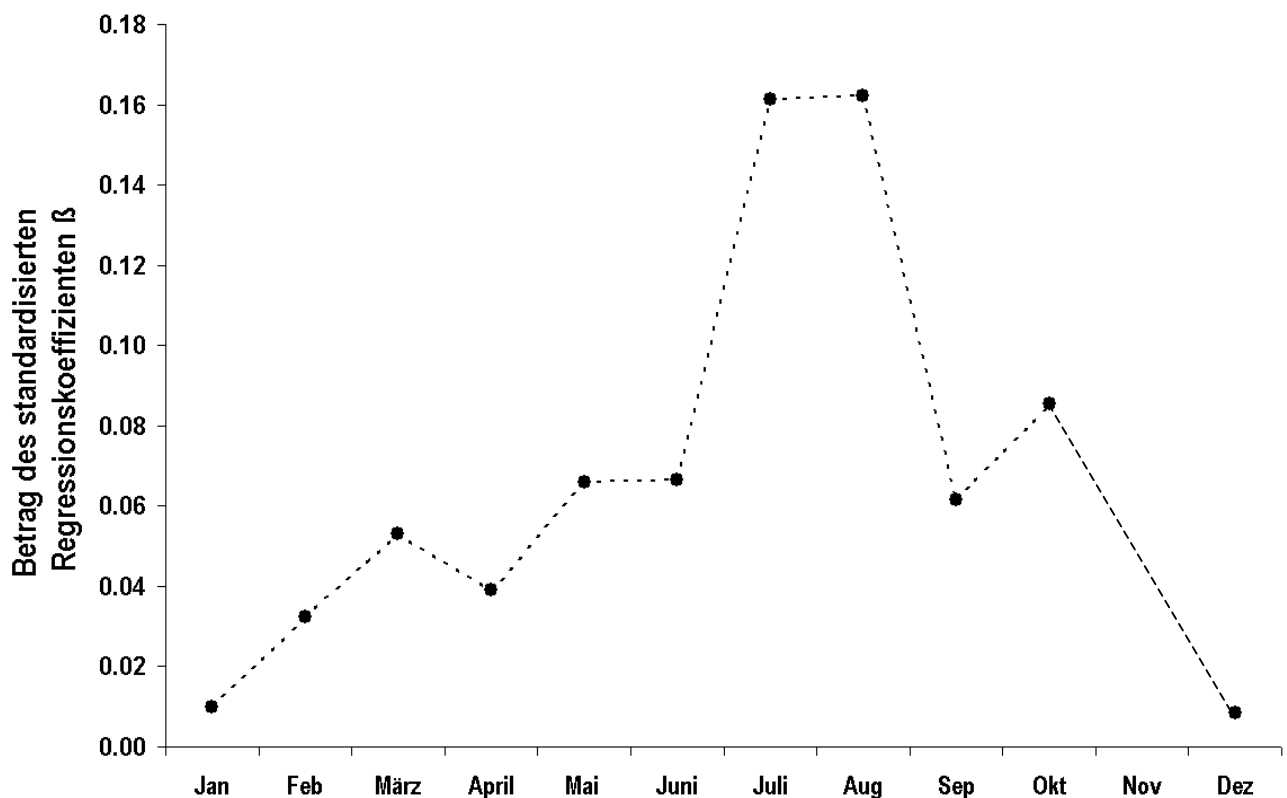


Abb. 12. Beispiel für die jahreszeitliche Variabilität der Parametersensitivität. Dargestellt sind die standardisierten Regressionskoeffizienten (β) des Parameters $P_DayPET1$.

Für die Darstellung und die Erstellung einer Rangliste der sensiblen Parameter wurden die standardisierten Regressionskoeffizienten dahingehend modifiziert, dass aus ihren Beträgen der Mittelwert gebildet wurde. An Hand des Mittelwerts der Werte für β wurden die Parameter hinsichtlich ihrer Sensitivität sortiert. Um die Variabilität der Einflussnahme eines Parameters darzustellen, wurden die minimalen und die maximalen standardisierten Regressionskoeffizienten mit aufgeführt. Da einige Parameter deutliche Schwankungen ihrer Sensitivität über das Jahr zeigen, werden zusätzlich die Monate im Jahr dargestellt, für die die höchsten Werte für β zu finden sind (Tab. 11 – Tab. 16). Die nicht modifizierten standardisierten Regressionskoeffizienten sind im Anhang IV aufgelistet.

Wie aus Tab. 11 hervorgeht, erweist sich P_{Ksoil} , der die Wärmeleitfähigkeit der Bodenmatrix beeinflusst, mit einem Mittelwert der standardisierten Regressionskoeffizienten von 0,32 als sensitivster Parameter, bezogen auf die simulierten Bodentemperaturen. Im Gegensatz zu den anderen sensitiven Parametern $P_{C[l]}$ und P_{Csoil} des Bodentemperaturmoduls zeigt P_{Ksoil} keine eindeutige an Jahreszeiten orientierte Sensitivität, da er sowohl im Frühjahr wie auch im Spätsommer Maxima erreicht (Tab. 11). Allerdings wird aus die Betrachtung der Mittelwerte der Beträge von β ersichtlich, dass lediglich geringe Unterschiede zwischen den drei Parametern vorliegen. Generell kann angemerkt werden, dass das Niveau der standardisierten Regressionskoeffizienten mit Werten bis maximal 0,44 gering ausfällt. Dies verdeutlicht, dass das Modellergebnis insgesamt von zahlreichen Faktoren bestimmt wird und es kaum einzelne Faktoren gibt, die in besonderem Maße das Modellergebnis dominieren.

Tab. 11. Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die Bodentemperatur, aus der Berechnung des Bodenklimamoduls von DNDC. Aus den Beträgen der standardisierten Regressionskoeffizienten (β) wurden die Mittelwerte (MW), die minimalen (Min) sowie die maximalen (Max) Werte von β berechnet und dargestellt. Monate mit Höchstwerten für β ($> 0,1$) wurden grau hinterlegt.

Parameter	MW	Min	Max	Höchstwerte von β											
				Jan	Feb	März	April	Mai	Juni	Juli	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez
P_{Ksoil}	0,316	0,004	0,414												
$P_{C[l]}$	0,297	0,107	0,436												
P_{Csoil}	0,278	0,139	0,336												

Ähnliche Größenordnungen liegen für die standardisierten Regressionskoeffizienten der Parameter aus der Berechnung des Bodenwassergehaltes vor. Der maximale Wert $\beta = 0,39$ kann für den Parameter P_{DBAR} aus der Berechnung des Versickerungsvermögens des Bodenwassers ermittelt werden (Tab. 12). P_{DBAR} stellt daneben auch den sensitivsten Parameter dar, gefolgt von den Parametern der Evaporationsberechnung des Bodens, P_{tev} , sowie der Berechnung der täglichen potentiellen Evapotranspiration, P_{DayPET} . Jahreszeitlich bedingte Maxima sind für P_{DBAR} nicht zu erkennen, da die höchsten Regressionskoeffizienten sowohl im Frühjahr als auch im Hochsommer (Tab. 12) zu finden sind. Ein ereignisbezogener Schwerpunkt ist hier wahrscheinlicher, da es an den Tagen vor dem ausgewählten Zeitpunkt für die Simulation wie auch an dem Tag selbst geregnet hatte. Die Parameter der Evaporation des Bodens und die der täglichen potentiellen Evapotranspiration zeigen in dieser Hinsicht stärkere Ausprägungen. Für P_{tev1} und P_{tev2} sind die höchsten

Regressionskoeffizienten im Winter und im Frühjahr zu finden, $P_{DayPET1}$ zeigt höchste Koeffizienten in den Sommermonaten (Tab. 12).

Tab. 12. Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf den Bodenwassergehalt, aus den Berechnungen des Bodenklimamoduls von DNDC. Aus den Beträgen der standardisierten Regressionskoeffizienten (β) wurden die Mittelwerte (MW), die minimalen (Min) sowie die maximalen (Max) Werte berechnet und dargestellt. Monate mit Höchstwerten für β ($> 0,1$) wurden grau hinterlegt.

Parameter	MW	Min	Max	Höchstwerte von β											
				Jan	Feb	März	April	Mai	Juni	Juli	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez
P_{DBAR}	0,129	0,004	0,389	■	■	■	■	■				■			
P_{tev1}	0,097	0,016	0,249	■	■										■
P_{tev2}	0,091	0,033	0,132			■	■	■							
$P_{DayPET2}$	0,076	0,016	0,138	■									■		
$P_{DayPET1}$	0,068	0,008	0,162							■	■	■			
$P_{OutWater1}$	0,047	0,030	0,071			■	■						■		
$P_{OutWater2}$	0,037	0,008	0,060		■	■						■			

Bei der Sensitivitätsanalyse des C-/N-Umsatzmoduls wurden die darin vorkommenden Parameter hinsichtlich ihres Einflusses auf die N_2O - und CO_2 -Emissionen untersucht. Die Betrachtung der standardisierten Regressionskoeffizienten, bezogen auf die Veränderungen bei den simulierten N_2O -Emissionen, zeigt, dass auch hier die β -Werte aller Parameter sehr gering ausfallen (maximale Werte von 0,25, Tab. 13, C-/N-Umsatzmodul, N_2O). Auffällig ist, dass in diesem Modul die Parameter aus den Berechnungen für die Umsetzung des organischen Kohlenstoffes (P_{dBC} , P_{DRF} und P_{krcvl}) mehr Einfluss auf die N_2O -Emission haben als die, die in die Kalkulation des direkten Stickstoffumsatzes des Bodens eingehen ($P_{maxClayN}$ und P_{vg}) (Tab. 13). Hervorzuheben ist weiterhin, dass fast alle Parameter über den gesamten Betrachtungszeitraum kaum Variationen bezüglich ihrer Sensitivität aufweisen. Sie zeigen für das gesamte Jahr gleich hohe Werte. Ausnahmen sind dagegen P_{DRF} und P_{krcvl} . Für diese können im Frühjahr bis Sommer deutlich höhere Regressionskoeffizienten festgestellt werden als in der übrigen Zeit.

Tab. 13. Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die N₂O-Emissionen, aus der Berechnung des C-/N-Umsatzmoduls von DNDC. Aus den Beträgen der standardisierten Regressionskoeffizienten (β) wurden die Mittelwerte (MW), die minimalen (Min) sowie die maximalen (Max) Werte von β berechnet und dargestellt. Monate mit Höchstwerten für β (> 0.1) wurden grau hinterlegt.

Parameter	MW	Min	Max	Höchstwerte von β												
				Jan	Feb	März	April	Mai	Juni	Juli	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez	
<i>P_dBC</i>	0,172	0,171	0,172													
<i>P_DRF</i>	0,152	0,008	0,252													
<i>P_krcvl</i>	0,142	0,008	0,240													
<i>P_maxClayN</i>	0,139	0,139	0,140													
<i>P_clayc</i>	0,134	0,134	0,134													
<i>P_Fclay</i>	0,130	0,130	0,131													
<i>P_cy</i>	0,127	0,127	0,128													
<i>P_Fleak</i>	0,127	0,127	0,127													
<i>P_doc</i>	0,126	0,125	0,126													
<i>P_RFMM</i>	0,122	0,122	0,122													
<i>P_dfactor</i>	0,122	0,121	0,122													
<i>P_vg</i>	0,121	0,121	0,122													

Bei der Untersuchung des Einflusses der Parameter des C-/N-Umsatzmoduls im Boden, bezogen auf die Veränderungen bei den CO₂-Emissionen, kann festgestellt werden: Die Parameter, die den größten Einfluss auf die N₂O-Emissionen aufweisen, sind ebenfalls für die berechneten CO₂-Emissionen von Bedeutung (Tab. 13 und Tab. 14). Es sind lediglich leichte Unterschiede in der Rangfolge der einzelnen Parameter zu beobachten. Die die CO₂-Emissionen beeinflussenden Parameter des C-/N-Umsatzmoduls zeigen ebenfalls allgemein geringe Werte der standardisierten Regressionskoeffizienten sowie geringe Schwankungen. Lediglich bei *P_DRF* (C-Umsatzfaktor) und *P_krcvl* (C-Umsatzfaktor für sehr labile organische Substanz) sind Variationen ihrer Sensitivität über den Jahresverlauf zu beobachten. Bei ihnen sind sowohl im Frühjahr bis zum Hochsommer als auch im Winter hohe Regressionskoeffizienten zu finden.

Tab. 14. Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die CO₂-Emissionen, aus der Berechnung des C-/N-Umsatzmoduls von DNDC. Aus den Beträgen der standardisierten Regressionskoeffizienten (β) wurden die Mittelwerte (MW), die minimalen (Min) sowie die maximalen (Max) Werte von β berechnet und dargestellt. Monate mit Höchstwerten für β (> 0.1) wurden grau hinterlegt.

Parameter	MW	Min	Max	Höchstwerte von β												
				Jan	Feb	März	April	Mai	Juni	Juli	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez	
<i>P_DRF</i>	0,218	0,042	0,255													
<i>P_krcvl</i>	0,189	0,047	0,241													
<i>P_dBC</i>	0,172	0,172	0,172													
<i>P_maxClayN</i>	0,139	0,139	0,139													
<i>P_clayc</i>	0,134	0,134	0,134													
<i>P_Fclay</i>	0,130	0,130	0,130													
<i>P_cy</i>	0,127	0,127	0,128													
<i>P_Fleak</i>	0,127	0,127	0,127													
<i>P_doc</i>	0,126	0,125	0,126													
<i>P_RFMM</i>	0,122	0,122	0,122													
<i>P_dfactor</i>	0,122	0,122	0,122													
<i>P_vg</i>	0,121	0,121	0,121													

Schließlich wurden die Parameter des Moduls, in dem die Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse dargestellt werden, hinsichtlich ihrer Sensitivität, bezogen auf die N₂O- und CO₂-Emissionen, getestet. Bei der Überprüfung dieser Parameter ist wieder zu erkennen, dass allgemein ein geringes Niveau aller standardisierten Regressionskoeffizienten vorliegt. Es zeigt sich, dass für die Parameter aus dem Nitrifikationsprozess (*P_EEE*), der N₂O-Emissionsrate zur Zeit des Bodenfrostes (*P_b1*) sowie aus dem pH-Wert (*P_FpH*), die höchsten standardisierten Regressionskoeffizienten ermittelt werden können. Parameter aus den Kalkulationen der Denitrifikation wie *P_ymn2o* (maximale Wachstumsrate der Denitrifizierer) oder *P_EFFNO* (Effizienz der Mikroorganismen) haben einen deutlich geringeren Einfluss (Tab. 15). Weiterhin kann aus Tab. 15 entnommen werden, dass sich die Werte für β bezüglich ihrer Variabilität bei jedem Parameter sehr stark unterscheiden: *P_EEE*, *P_b1*, *P_aen2o* und *P_b2* weisen fast über das gesamte Jahr gleich hohe Werte auf. Parameter wie *P_FpH*, *P_DocFrost*, *P_EFFNO*, *P_microGrowth* und *P_factm* zeigen keine saisonale Schwankung. Bei *P_TE*, *P_ymn2o*, *P_aere* und *P_mno3* hingegen ist ein jahreszeitlich beeinflusstes Muster zu erkennen.

Tab. 15. Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die N₂O-Emissionen, aus der Berechnung der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse von DNDC. Aus den Beträgen der standardisierten Regressionskoeffizienten (β) wurden die Mittelwerte (MW), die minimalen (Min) sowie die maximalen (Max) Werte von β berechnet und dargestellt. Monate mit Höchstwerten für β (> 0.1) wurden grau hinterlegt.

Parameter	MW	Min	Max	Höchstwerte von β												
				Jan	Feb	März	April	Mai	Juni	Juli	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez	
<i>P_EEE</i>	0.203	0.007	0.372													
<i>P_b1</i>	0.175	0.174	0.175													
<i>P_FpH</i>	0.170	0.046	0.337													
<i>P_DocFrost</i>	0.143	0.007	0.285													
<i>P_aen2o</i>	0.144	0.038	0.272													
<i>P_b2</i>	0.115	0.115	0.115													
<i>P_EFFNO</i>	0.112	0.012	0.176													
<i>P_TE</i>	0.103	0.007	0.150													
<i>P_ymn2o</i>	0.103	0.003	0.192													
<i>P_microGrowth</i>	0.099	0.009	0.175													
<i>P_aere</i>	0.093	0.007	0.165													
<i>P_mno3</i>	0.090	0.006	0.280													
<i>P_factm</i>	0.083	0.014	0.190													
<i>P_K</i>	0.069	0.007	0.127													

Nach Überprüfung der Parameter des Moduls der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse hinsichtlich ihrer Wirkung auf die CO₂-Emissionen ist deutlich zu erkennen, dass eine Reihe anderer Parameter diese Emissionen beeinflussen als bei der Berechnung der N₂O-Emissionen (vgl. Tab. 15, N₂O und Tab. 16, CO₂). Ausnahmen bilden *P_b1*, *P_EFFNO* und *P_ymn2o*. Beachtenswert ist, dass einige der sensitivsten Faktoren (*P_b1*, N₂O-Emissionsrate während Bodenfröste und *P_ymn2o*, maximale Wachstumsrate der Denitrifizierer an N₂O) Prozesse abbilden, die nicht direkt mit den Berechnungen der CO₂-Produktion in Verbindung stehen. Starken Einfluss auf die CO₂-Emissionen hat der Faktor *P_EFFNO*, der die Effizienz der Mikroorganismen im Allgemeinen darstellt. Des Weiteren erzielt *P_EFFNO* den maximalen Wert für den standardisierten Regressionskoeffizienten von $\beta = 0,49$, was die Bedeutung der Mikroorganismen im Modell unterstreicht. Faktoren, die den Einfluss des Bodenwassergehaltes (*P_PA1* und *P_PA2*) und des organischen Kohlenstoffgehaltes des Bodens (*P_AA1* und *P_AA2*) auf die CO₂-bildenden Prozesse beeinflussen, sind deutlich weniger sensitiv. Werden die Werte für β im Gesamten betrachtet, so zeigt sich nach der Sensitivitätsanalyse dieses Moduls, dass diese Regressionskoeffizienten das geringste Niveau, verglichen mit allen übrigen überprüften Modulen, aufweisen (vgl. Tab. 11 - Tab. 15).

Schwerpunkte bezüglich hoher Regressionskoeffizienten sind für das Modul der Nitrifikations- und Denitrifikationsberechnungen bei der Mehrzahl der Parameter in den Wintermonaten zu finden. Parameter wie P_{b1} , P_{ymn2o} , P_{PA1} sowie P_{Poro} und P_{b2} haben fast das gesamte Jahr über erhöhte Werte für den standardisierten Regressionskoeffizienten (Tab. 16).

Tab. 16. Rangfolge der sensitiven Parameter, bezogen auf die CO₂-Emissionen, aus der Berechnung Nitrifikation- und Denitrifikationsprozesse von DNDC. Aus den Beträgen der standardisierten Regressionskoeffizienten (β) wurden die Mittelwerte (MW), die minimalen (Min) sowie die maximalen (Max) Werte von β berechnet und dargestellt. Monate mit Höchstwerten für β (> 0.1) wurden grau hinterlegt.

Parameter	MW	Min	Max	Höchstwerte von β												
				Jan	Feb	März	April	Mai	Juni	Juli	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez	
P_{b1}	0,175	0,174	0,175	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
P_{EFFNO}	0,167	0,086	0,468	■	■											
P_{ymn2o}	0,159	0,024	0,193		■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
P_{PA1}	0,139	0,017	0,188	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
P_{PA2}	0,128	0,016	0,210					■	■	■	■	■	■	■	■	■
P_{AA1}	0,125	0,010	0,222							■	■	■	■	■	■	■
P_{phk2}	0,122	0,074	0,169	■	■			■	■	■	■	■	■	■	■	■
P_{FpH}	0,122	0,040	0,163	■					■	■	■	■	■	■	■	■
P_{PORO}	0,112	0,027	0,136	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
P_{b2}	0,115	0,115	0,115	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
$P_{aveAnvf}$	0,104	0,052	0,146					■	■	■	■	■	■	■	■	■
P_{AA2}	0,086	0,033	0,141					■	■	■	■	■	■	■	■	■
P_{phk3}	0,081	0,002	0,146							■	■	■	■	■	■	■

5.1.4 Diskussion der generalisierten Sensitivitätsanalyse für DNDC

5.1.4.1 Anzahl der Parameter und der empirisch ermittelten Koeffizienten

Die Untersuchung sämtlicher Parameter der DNDC-Module ergab, dass bei 44 Parametern ein Einfluss auf die Modellergebnisse festzustellen ist. In dem Modul *C-/N-Umsatz* und in den Modulen für die *Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse* sind 77 % aller als sensitiv identifizierten Parameter vorzufinden. Kritisch zu betrachten ist, ob in einem Modell tatsächlich so viele Parameter sensitiv sein können. Eine große Anzahl von sensitiven Parametern deuten vielmehr auf eine hohe Zahl von unabhängigen Variablen hin, die in das Modell integriert wurden.

Mit dem DNDC Modell wird versucht, verschiedenste Prozesse in der Pedosphäre sowie ihre Wechselwirkungen mit der Vegetation und der bodennahen Atmosphäre darzustellen. Auszüge aus verschiedenen Modellen wie z.B. NCSOIL (Molina et al. 1983), CERES (Ritchie et al. 1987, 1988), FSE-ORYZA1 (Kropff & van Laar 1993 & 1994), INTERCOM (Kropff et al. 1993), MACROS-L 1D (Penning de Vries et al. 1989) sowie SUCROS (van Laar et al. 1992) sind in DNDC integriert worden. Zudem wird mit DNDC ein sehr breites Spektrum des jeweils zu modellierenden Landnutzungstyps abgedeckt. Neben dem einfachen Ackerbau und Dauergrünland können auch Grünlandsysteme simuliert werden, die grund- und stauwasserbeeinflusst sind. Zudem ermöglicht DNDC die Modellierung von natürlichen Feuchtgebieten und Reisanbausystemen (Li 2007). Neben diesem weiten Anwendungsspektrum von DNDC wird ein großer Teil der Prozesse von dem Modell sehr detailliert dargestellt. Die Prozesse im Boden werden beispielsweise für jede Bodenschicht mit einer Schichtdicke von 0,02 m bis in einer Tiefe von 1,0 m einzeln berechnet. Die maximale zeitliche Auflösung beträgt 1 h. Ein Beispiel für eine sehr detaillierte Darstellung von Prozessen ist auch der Austausch von Wärme zwischen der Luft und dem Boden. Dieser Wärmeaustausch wird – je nach Jahreszeit und Managementmaßnahme – durch Albedo, Pflanzen, Streuauflage oder Schnee beeinflusst. Jede dieser Einflussgrößen wird wiederum berechnet und je nach Entwicklungsstadium der kultivierten Pflanzen simuliert. Veränderungen bei der Mächtigkeit der Schneedecke (durch Tauprozesse / Evaporation von Schnee) wirken sich ebenfalls unterschiedlich auf den Wärmeaustausch zwischen der Luft und der Bodenoberfläche aus.

Die Aufnahme von einer großen Zahl möglichst detaillierten Prozessen in ein Simulationsmodell ist allerdings nicht unproblematisch.

Viele Prozesse der Stoffumsetzung im Boden oder solche, die Aufschluss über die Entstehung von N-Treibhausgasen geben könnten, sind bisweilen nicht geklärt und können daher auch noch nicht mathematisch beschrieben werden. Aus diesem Grund werden in prozessorientierten Modellen, so auch in DNDC, Lücken im Systemverständnis mit Hilfe von empirischen Beziehungen ausgeglichen. Gerade die verschiedenen Ratenkoeffizienten in DNDC (z.B. P_{EEE} oder P_{b1} und P_{b2}) sowie die hohe Anzahl von Parametern, die der Modellautor als empirisch ermittelte Koeffizienten bezeichnet, sind Beispiele dafür.

Bei den durch Messungen abgeleiteten empirischen Koeffizienten oder Faktoren treten zudem dahingehend Schwierigkeiten auf, generell anwendbare Zahlen zu erhalten, wenn sich diese auf eine zu geringe Anzahl von Datensätzen stützen. Dieses zeigt sich z.B. bei der Überarbeitung von DNDC hinsichtlich der Berechnung der Sickerwassermengen und des damit verbunden Nitrataustrages (Li et al. 2006). Die neu integrierten Berechnungsansätze beinhalten ebenfalls empirisch erhobene Zahlen, die allerdings nur auf den für die Modellüberprüfung verwendeten Untersuchungsdaten basieren (Li et al. 2006). Die generelle räumliche Modellübertragbarkeit ist damit noch nicht geklärt. Eine von Tonitto et al. (2007) erschienene Untersuchung zur Anwendung von DNDC auf einem dränierten Ackerstandort mit Kalibrierung, Validierung und Unsicherheitsanalyse des Modells zeigte, dass die von DNDC allgemein verwendeten Parameterwerte, welche empirisch abgeleitet wurden, für die verwendete Referenzfläche in erheblichem Umfang angepasst werden mussten. Zu beachten ist in diesem Zusammenhang, dass die in dieser Studie untersuchten Parameter für den Anwender im Normalfall nicht zu Kalibrierung freigegeben sind, da sie in Berechnungsschritten integriert sind, auf die über die Benutzeroberfläche nicht zugegriffen werden kann.

Ein anderes Beispiel, welches darstellt, dass auf wenige Untersuchungen basierende Koeffizienten nur unzureichend übertragbar sind, zeigt sich auch bei dem Berechnungsansatz für landwirtschaftlich bedingte N_2O -Emission des IPCC (2006). Wie in Kap. 2.8 dargelegt, werden bei dem IPCC Ansatz N_2O -Emissionen anteilig mit 1 % (+/- 0,3 – 3,0 %) Verlust der eingetragenen N-Menge kalkuliert. Dass dieser Ansatz nicht generalisierbar ist, zeigen die Arbeiten von Ruz-Jerez et al. (1994), Kaiser et al. (1998 a & b) sowie von Smith und Dobbie (2002) die alle sehr starke Variationen von N_2O -Verlusten, bezogen auf die applizierte N-Menge, feststellen konnten. Auch die für diese Arbeit verwendeten N_2O -Messdaten aus Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen machen deutlich, dass mehr an N_2O als 1 % der applizierten N-Düngermenge (in $kg\ ha^{-1}$)

emittiert werden kann und dass sich die Emissionen zwischen den Standorten stark unterscheiden können. Die emittierten Mengen an N_2O schwanken zwischen 1,1 (Gießen) und 3,7 % (Scheyern) der applizierten Stickstoffmenge (kg N ha^{-1}). Bei der Untersuchungsfläche in Arolsen, die nicht gedüngt wurde, konnten sogar 3,9 $\text{kg N}_2\text{O-N ha}^{-1}$ als Hintergrundwert verzeichnet werden. Der IPCC nimmt als bodenbürtige Hintergrundemission 1 $\text{kg N}_2\text{O-N ha}^{-1}$ an.

Die in DNDC integrierten empirisch ermittelten bzw. anpassungsfähigen Parameter weisen sich durch Zahlenwerte aus, deren Herkunft in den meisten Fällen nicht eindeutig nachzuvollziehen ist. Liegen für diese empirischen Parameter keine Angaben über die Variabilität vor, so tritt bei statistischen Modellanalysen (Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen) oder Kalibrierverfahren die Schwierigkeit auf, den Wertebereich der Parameter einzugrenzen. Falsch begrenzte Wertebereiche führen zu Parameterunsicherheiten, die wiederum die Qualität der Modellergebnisse beeinträchtigen (De Roo 1993). Um dahingehend Fehler zu vermeiden, mussten große Spannen bei den Parameterwertebereichen ausgewählt werden.

5.1.4.2 *Parameter der Bodentemperatur*

Die für die Kalkulation der Bodentemperatur sind sensitive Parameter in der Berechnung der Wärmekapazität und der Wärmeleitfähigkeit der verschiedenen Kompartimente des Bodens festgestellt worden. Dabei wurden die in diese Berechnungen integrierten Größen wie die Wärmekapazität und -leitfähigkeit des Wassers, der organischen und der mineralischen Bodensubstanz bei den durchgeführten Analysen nicht verändert, da diese physikalische und damit nicht veränderbare Konstanten darstellen. In DNDC werden bei der Berechnung der Wärmeleitfähigkeit und -kapazität im Boden nicht nur die verschiedenen Wärmeleitfähigkeiten und -kapazitäten der Substrate anteilig addiert, sondern zusätzlich jeweils noch mit einem Anpassungsfaktor multipliziert (Gl. 5.1 – Gl. 5.3). Da nach Li (2007, persönliche Mitteilung) diese Variablen zur Veränderung bzw. Anpassung des Modells vorgesehen sind, wurden sie auch in die hier durchgeführten Analysen integriert. Allerdings sollte diese Art der Anpassung kritisch betrachtet werden. Werden physikalische Berechnungsschritte bzw. Größen in einem Modell verwendet, sollten diese nicht kalibriert werden müssen. Auch wenn, wie in diesem Fall, die physikalischen Größen an sich nicht verändert werden, allerdings mit einem anpassungsfähigen Faktor multiplizierbar sind, dann wird letztendlich der gleiche Effekt erzielt, als wenn diese Größen selbst für eine Kalibrierung herangezogen werden. Eine

solche Darstellung lässt darauf schließen, dass dieser Prozess physikalisch gesehen nicht hinreichend genau abgebildet ist.

5.1.4.3 *Parameter der Bodenfeuchtigkeit*

Die Analysen hinsichtlich der beeinflussenden Parameter des Bodenfeuchtigkeitsmoduls ergaben, dass Parameter zur Berechnung der Wasserverluste und -austräge (P_{DBAR} , P_{tev} und $P_{DayPET2}$) die einflussreichsten Größen darstellen. Auffällig an der Prozessbeschreibung ist, dass sich in jedem Berechnungsschritt anpassungsfähige Faktoren oder Koeffizienten befinden. Ihre Herkunft konnte aus der zur Verfügung stehenden Literatur über das DNDC Modell nicht eindeutig geklärt werden. Die sich aus empirisch abgeleiteten Variablen ergebende Problematik ist zuvor dargestellt worden (s.o.). Ebenfalls wurden auch schon die Schwierigkeiten diskutiert, die sich aus Variablen ergeben, über die es keinerlei Informationen gibt, woher sie kommen und in welchem Rahmen sie zulässige Werte annehmen. Dadurch kann nicht nur die Unsicherheit der Modellergebnisse erhöht werden, sondern es können Fehler in der mathematischen Darstellung auftreten, wenn bei Analysen, wie z.B. bei einer Kalibrierung, Faktoren variiert werden, die eigentlich nicht veränderbare Konstanten darstellen.

Neben den Verlustpfaden für das Wasser über die Transpiration, Evaporation und Abgabe an tiefere Bodenschichten wurde bei den hier durchgeführten Analysen die Aufnahme durch die Pflanze nicht berücksichtigt, obwohl diese i.d.R. einen starken Einfluss auf die Wassermenge im Boden hat. Zwar ist dieser Verlustpfad teilweise durch die Darstellung der potentiellen Evapotranspiration nach Thornthwaite integriert, allerdings wird die direkte Wasseraufnahme der Pflanze im Bodenwassermodul (vgl. Abb. 8, Kap. 3) nicht berücksichtigt. Diese ist in das Pflanzenwachstumsmodul integriert und ist zudem abhängig von dem jeweiligen Wasserbedarf der Kulturpflanze. Da für die Berücksichtigung sämtlicher Kulturpflanzen in den Sensitivitätsanalysen keine hinreichenden Referenzdaten zur Verfügung standen, wurde dieser Aspekt nicht aufgenommen.

5.1.4.4 *Parameter der Umsatzprozesse*

Beim C-/N-Umsatzmodul zeigt sich, dass fast die gleichen Größen sowohl die CO_2 - als auch die N_2O -Emissionen beeinflussen. Für die Berechnung der standardisierten Regressionskoeffizienten werden für die sensitiven Parameter leicht höhere Werte bei den CO_2 -Emissionen im Vergleich zu den N_2O -Emissionen erzielt. Erstaunlich ist dennoch, dass sich sowohl für die Berechnung der CO_2 - wie auch der N_2O -Emission

genau die gleichen Parameter als sensitiv erweisen. Diese stammen überwiegend aus Prozessen, die die Zersetzung des organischen Kohlenstoffs abbilden, wie an den Parametern P_{DRF} , P_{krCVI} und P_{dBC} (Faktor für die C-Umsetzung, spezifische Umsatzrate für Kohlenstoff, der sehr leicht zersetzbaren organischen Substanz und dem Korrekturfaktor der SOC Bilanz) zu erkennen ist. Dieses Ergebnis war so nicht zu erwarten. Nachvollziehbar wäre es gewesen, wenn ein höherer Einfluss von m_{clay_N} , vg und F_{leak} (Adsorption von NH_4^+ an Tonminerale, NH_3 -Absorptionspotential der Pflanze und Auswaschungsfaktor) auf die N_2O -Emissionen bestanden hätte, da diese Faktoren die verfügbare Menge an mineralischem Stickstoff im Boden mitbestimmen.

5.1.4.5 Parameter der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse

Die Untersuchung der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse macht deutlich, dass die Parameter, die bezüglich der N_2O -Emissionen sensitiv wirken, entweder sowohl in die Berechnung der Nitrifikation als auch in die der Denitrifikation integriert sind (vgl. P_{b1} , P_{FpH} und P_{EFFNO}) oder nur der Nitrifikation (P_{aen2o} , P_{EEE} , $P_{micorGrowth}$ und P_{mno3}) zugeordnet werden können. Lediglich ein Parameter P_{ymn2o} (maximale Wachstumsrate der Denitrifizierer an N_2O) stammt alleinig aus der Kalkulation der Denitrifikationsprozesse. Diese Verteilung der Parameter lässt darauf schließen, dass in diesem Fall das Modell einen hohen Anteil an N_2O berechnet, welches aus der Nitrifikation stammt. Herrschen überwiegend aerobe Verhältnisse im Boden vor, so stammt das gebildete N_2O aus der Nitrifikation. Werden die Standortbedingungen dieser Referenzfläche (für die GAS wurde der Standort Arolsen ausgewählt) berücksichtigt (16 % Tonanteil im Boden, 670 mm Jahresniederschlag, keine Bodenverdichtung durch Bodenbearbeitung), so ist diese Modellreaktion nachvollziehbar. N_2O -Verluste aus Böden, die wenig anaerobe Bereiche ausbilden, müssen aus der Nitrifikation oder der Chemonitrifikation stammen. Ein weiteres Indiz dafür, dass die berechneten N_2O -Emissionen an diesem Standort aus der Nitrifikation stammen, zeigen Parameter der Bodenfeuchte (P_{PA1} , P_{PA2} , P_{factum} sowie P_K), die entweder gar keine oder nur eine sehr geringe Sensitivität bezüglich der N_2O -Emission, zeigen. Hätten diese Bodenfeuchtigkeitsfaktoren einen großen Einfluss, würde dieses auf eine Anaerobiose auf Grund hoher Wassergehalte im Boden hindeuten. Um jedoch diesen Standorteffekt bei der Bildung des N_2O sicher belegen zu können, müsste das gleiche Analyseverfahren auf Referenzstandorten mit stark zur Vernässung neigenden Böden durchgeführt werden. Solche Standortbedingungen lagen in dem zur Verfügung stehenden Pool an Standorten nicht vor.

Bei den Analysen hinsichtlich der Parametersensitivität der Prozesse von Nitrifikation und Denitrifikation, bezogen auf die CO₂-Emission, zeigt sich, dass die Parameter, die am stärksten die CO₂-Emissionen bestimmen, ebenso Einfluss auf die N₂O-Emissionen haben (*P_b1*, *P_EFFNO* und *P_ymn2o*). Bis auf den Parameter *P_EFFNO*, der die Effizienz sämtlicher Mikroorganismen beschreibt, sind die anderen Parameter nicht in die Berechnungen der Prozesse integriert, die zur CO₂-Bildung führen. Bei *P_ymn2o*, der Wachstumsrate der Denitrifizierer bei der Reduktion von N₂O, könnte noch dahingehend ein Zusammenhang bestehen, dass der anaerobe Bodenbereich sich weiter ausdehnt und die Denitrifikation dann bis zum Endprodukt N₂ ablaufen kann, wenn im Boden vermehrt CO₂ vorhanden ist (Flessa et al. 1995).

Bei den Faktoren *P_b1* und *P_b2*, die für die Emissionsrate von N₂O beim Bodenfrost verantwortlich sind, oder *P_phk2* und *P_phk3* (pH-Faktoren bei der Nitrit- und N₂O-Reduktion), ist der Zusammenhang bezogen auf die CO₂-Emission nicht erklärbar.

Auffällig ist weiterhin, dass sowohl bei der Berechnung der N₂O- als auch bei der Berechnung der CO₂-Emissionen kein sensitiver Parameter gefunden wurde, der den Einfluss der Bodentemperatur auf die untersuchten Prozesse zeigt. Obwohl die Temperatur als eine beeinflussende Größe für alle mikrobiologischen Umsatzprozesse gesehen wird und die Bodentemperatur durch DNDC detailliert berechnet werden kann, wird dieser Größe weniger Gewicht verliehen.

5.1.4.6 Betrachtung der wechselnden Sensitivitäten im Jahresverlauf

Die Darstellung aller Parameter aus den verschiedenen Modulen hat gezeigt, dass bei den sensitiven Parametern aus dem Bereich Bodentemperatur und Bodenfeuchtigkeit oft eine jahreszeitlich oder ereignisbezogen bedingte Sensitivität vorzufinden ist. Bei der überwiegenden Anzahl der Faktoren aus den Berechnungen der Umsatzprozesse ist dieses Verhalten nicht und bei den Parametern aus der Nitrifikations- und Denitrifikationsberechnung nur teilweise zu erkennen. Dieses mag daran liegen, dass die Prozesse von der Berechnung der Bodentemperatur und -feuchtigkeit hin zu den Umsatzprozessen und den Abläufen der Nitrifikation und Denitrifikation zunehmend komplexer werden. Die damit verbundene größer werdende Anzahl von Parametern und Variablen, die in diese Berechnungen mit eingehen, trägt dazu bei, dass einzelne Variablen einen schwächeren Einfluss auf das betrachtete Modellergebnis haben. Außerdem steigt mit zunehmender Zahl an Parametern die mögliche Anzahl von Parameterinteraktionen untereinander, so dass dadurch ebenfalls Einflüsse einer

Variablen auf eine bestimmte Zielgröße durch Interaktionen mit einer anderen Variablen eingeschränkt werden.

Warum allerdings Faktoren wie P_{b1} und P_{b2} (Emissionsrate von N_2O während Bodenfrost), die einen ganz deutlich eingegrenzten zeitlichen Aktivitätsbereich haben, über den gesamten Beobachtungszeitraum eine gleichbleibende Sensitivität aufzeigen, ist nicht zu erklären.

5.1.4.7 Kritische Betrachtung der verwendeten Methode

Kritisch muss das hier verwendete Untersuchungsdesign der GSA betrachtet werden. Insgesamt wurden über 235 Parameter getestet. Für jedes Modul wurde die gleiche Anzahl an Simulationsläufen (200 MC Simulationen) durchgeführt, auch wenn die Anzahl der zu testenden Parameter dabei sehr unterschiedlich war (11 im Bodentemperatur-, 57 im Bodenwasserhaushaltsmodul und 187 im Modul für die Umsatzprozesse und N_2O -Emissionsberechnung). Da alle Parameter bei den Ziehungen gleichzeitig berücksichtigt werden, ergeben sich mit höher werdender Anzahl an Variablen zunehmende Kombinationsmöglichkeiten. Um noch aussagekräftigere Ergebnisse zu erhalten, hätte die Anzahl der Ziehungen bei Erhöhung der zu untersuchenden Variablen deutlich erhöht werden müssen. Die Begrenzung auf 200 Simulationsläufe erfolgte aus technischen Gründen. Die Kapazität der verwendeten Programme erlaubte es nicht, dass mehr als 200 Jahresverläufe zu Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit oder Emissionen gleichzeitig betrachtet und ausgewertet werden konnten. Auch wenn eine höhere Anzahl von simulierten Datensätzen ein belastbareres Ergebnis geliefert hätte, zeigt die vorliegende Analyse dennoch das generelle Muster bezüglich der Sensitivität der getesteten Parameter.

Ein weiterer kritisch zu betrachtender Punkt ist die Auswahl des Grenzwertes, ab dem ein Parameter als sensitiv betrachtet wird oder nicht. Diese Entscheidung wird vom Modellierer getroffen. Sie unterliegt keinen Regeln und ist daher immer subjektiv. Da in diesem Fall die standardisierten Regressionskoeffizienten generell sehr geringe Werte aufwiesen, wurden die Parameter ausgewählt, die einen $\beta > 0,1$ zeigten. Ausnahme stellten hier die Parameter $P_{OutWater1}$ und $P_{OutWater2}$ dar. Für sie wurden in der GSA deutlich geringere Werte für den standardisierten Regressionskoeffizienten ermittelt. Der Grund, warum sie dennoch als sensitive Parameter berücksichtigt wurden, war ihre extrem starke Beeinflussung der Bodenfeuchtigkeit bei der one factor at a time Analyse.

Ebenso ist zu beachten, dass die Testung auf Sensitivität mit Hilfe einer multiplen linearen Regression durchgeführt wurde. Jedoch werden in komplexen, prozessorientierten Modellen, wie DNDC eines ist, ebenso nicht lineare Prozesse dargestellt. Befindet sich ein Parameter in einem solchen nicht linearen Berechnungsansatz, so kann dieser mit Hilfe eines solchen Verfahrens nicht präzise analysiert werden.

5.2 Unsicherheitsanalyse der DNDC Module Bodenklima, Mineralisation, Nitrifikation und Denitrifikation

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der durchgeführten Unsicherheitsanalyse der Module Bodenklima, Mineralisation, Nitrifikation und Denitrifikation präsentiert und diskutiert. Um die daraus resultierenden Unsicherheiten der Modellsimulationen für die Bodentemperatur, den Bodenwassergehalt sowie für die CO₂- und N₂O-Emissionen zu verdeutlichen, werden die Modellreaktionen auf die durchgeführte Monte Carlo Simulation dargestellt (Punktgraphen). Weiterhin wird der Einfluss der neu generierten Parameterkombinationen auf die in DNDC steuernden Größen Bodentemperatur, Bodenwassergehalt sowie Mineralisation gezeigt sowie deren Einfluss auf die simulierten CO₂- und N₂O-Emissionen.

5.2.1 Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse im Modul Bodenklima - Berechnung der Bodentemperatur

5.2.1.1 Punktgraphen für die Parameter aus der Berechnung der Bodentemperatur

Allen Parametereinstellungen aus der MC basierten Analyse der sensitiven Parameter $P_{K_{soil}}$, $P_{C_{ll}}$ und $P_{C_{soil}}$ für die Temperaturberechnung (Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität der Bodenschicht und Wärmekapazität des Bodens) wurde als Modellgütemaß die Nash-Sutcliffe-Effizienz E gegenübergestellt. Die Darstellung umfasst alle Referenzflächen, um mögliche standortbedingte Unterschiede sichtbar zu machen. Aus Abb. 13 ist zu entnehmen, dass alle Parameter des Bodentemperaturmoduls auf sämtlichen Standorten sehr hohe Gütemaße erreichen. Für die Nash-Sutcliffe-Effizienz werden Werte von $E = 0,75$ für den Standort Göttingen bis $E = 0,95$ für den Standort Arolsen erzielt. Auffällig ist, dass die Punktgraphen für alle hier dargestellten Parameter auf den Flächen in Göttingen, Gießen und Scheyern eine überwiegend gleichmäßige Verteilung guter Modellrealisationen ($E > 0,7$) über den gesamten Parameterraum zeigen. Für die Flächen in Arolsen und Petzenkirchen sind sehr gute ($E > 0,8$) und schlechtere Modellergebnisse ($E < 0,05$) über große Bereiche zu finden. Deutliche Optima bezüglich der in DNDC ursprünglich verwendeten Werte für $P_{K_{soil}}$ (10,0), $P_{C_{ll}}$ (0.5) und $P_{C_{soil}}$ (4,0) zeigten sich bei keiner der Untersuchungsflächen.

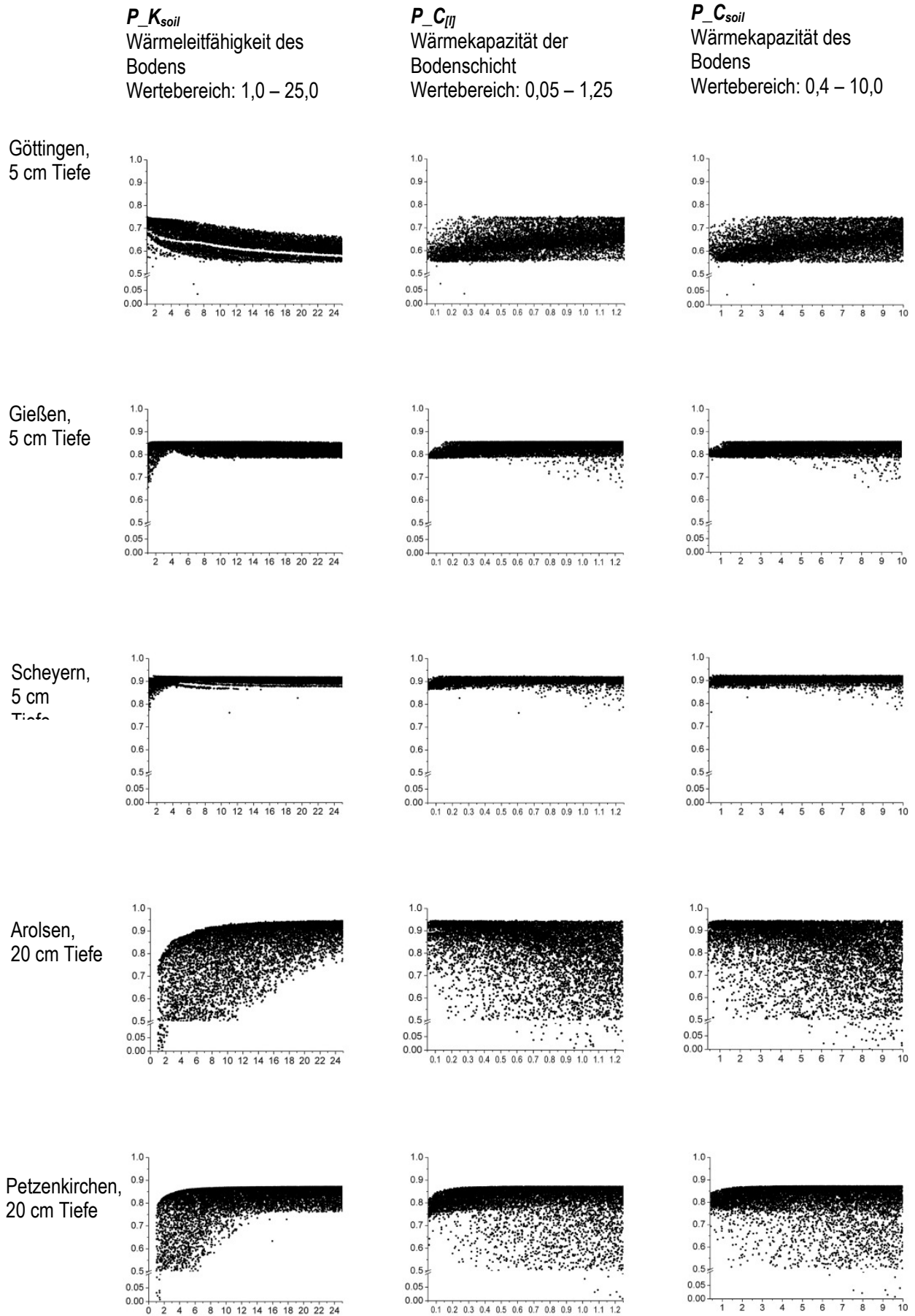


Abb. 13. Punktgraphen der sensitiven Parameter des Bodentemperaturmoduls. Für die Flächen in Göttingen, Gießen, Scheyern, Arolsen und Petzenkirchen. Abszisse = ausgewählte Wertebereich der jeweiligen Parameter. Ordinate = Nash-Sutcliffe-Effizienz E , ausgewählter Abschnitt: 0 -1,0.

Generell ließen sich jedoch klare Standortsunterschiede erkennen. Zum einen werden nicht auf allen Standorten mit den gleichen Parametern gleich gute Gütemaße erreicht (vgl. Gütemaße am Standort Göttingen mit denjenigen von Scheyern oder Arolsen). Zum anderen sind teilweise unterschiedliche Verteilungen derselben Parameter auf den verschiedenen Flächen (vgl. Parameter $P_{K_{soil}}$, Standort Göttingen mit denen in Arolsen oder Petzenkirchen) zu erkennen.

Wärmeleitfähigkeit des Bodens

Die Parameterverteilung für $P_{K_{soil}}$ (Wärmeleitfähigkeit des Bodens) ist für die einzelnen Standorte sehr unterschiedlich. Für die Untersuchungsfläche bei Göttingen konzentrieren sich die Modellläufe mit den höchsten Effizienzen bei Parameterwerten für $P_{K_{soil}}$ zwischen $1 < P_{K_{soil}} < 3$. Für die Standorte in Gießen und Scheyern hingegen können für $P_{K_{soil}} < 4$ lediglich Modellergebnisse mit geringeren Modellgütemaßen beobachtet werden. Eine Zunahme der Modellrealisationen mit hohen Effizienzkriterien in Verbindung mit höheren Parameterwerten zeigen die Flächen in Arolsen ($P_{K_{soil}} > 6$) und Petzenkirchen ($P_{K_{soil}} > 4$).

Wärmekapazität der Bodenschicht

Für den Parameter $P_{C_{ll}}$ (Wärmekapazität der Bodenschicht) zeigt sich die Tendenz, dass mit höheren Werten (jenseits des Ausgangsniveaus von 0,5) die Anzahl der Modellläufe mit geringeren Modelleffizienzen zunimmt. Auf dem Standort Göttingen scheint es, dass die Zahl von Modellrealisationen mit höheren Effizienzen bei Werten, die höher als der ursprüngliche Parameterwert (0,5) sind, zunimmt (vgl. Abb. 13, Göttingen). Ein Parameteroptimum ist auch hier nicht zu erkennen.

Wärmekapazität des Bodens

Gleiches Verhalten wie bei $P_{C_{ll}}$ zeigen die Punktgraphen für Parameter $P_{C_{soil}}$ (Wärmekapazität des Bodens). Auch hier ist mit Annäherung der Parameterwerte an die obere Grenze des Parameterbereiches eine Zunahme von schlechteren Simulationsergebnissen zu beobachten. Ansammlungen von Modellläufen mit guten bzw. sehr guten Gütemaßen um einen bestimmten Zahlenwert, so dass ein Optimum entsteht, sind hier ebenfalls nicht eindeutig lokalisierbar.

5.2.1.2 Darstellung der Parameterunsicherheit in der modellierten Bodentemperatur

Aus den 10.000 Parameterkombinationen der MC basierten Analyse aus der Berechnungen der Bodentemperatur wurden für die weiteren Auswertungen diejenigen Parameterwerte berücksichtigt, die jeweils hinter den Modellläufen mit den fünf besten Effizienzkriterien pro Referenzfläche standen. Dadurch kann dargestellt werden, inwieweit die Modellergebnisse variieren können und ob tendenziell eine Kalibrierbarkeit für diese Parameter besteht. Die Modellergebnisse aus den Ziehungen der MC Simulation werden dafür neben die der unveränderten Modellversion ($DNDC_{original}$) gestellt. Zur Bewertung der Modellergebnisse für die Bodentemperatur wird in erster Linie die Nash-Sutcliffe-Effizienz E herangezogen. Die graphischen Darstellungen berücksichtigen dagegen alle verwendeten Modelleffizienzen (E , d , R^2 und $RMSE$).

Wie aus der Betrachtung der Effizienzkriterien hervorgeht (Tab. 17, $DNDC_{original}$), erzielt die vom unveränderten DNDC Modell ($DNDC_{original}$) simulierte Bodentemperatur bereits sehr hohe Modellgütemaße. Eine Veränderung der Parameter bedingt hier nur eine sehr geringfügige Anhebung der Modellgüte.

Tab. 17. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der Bodentemperatur. Dargestellt sind für alle Untersuchungsflächen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte ($DNDC_{original}$), sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse ($DNDC_{UnsA}$) mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten (E = Nash-Sutcliffe-Effizienz; d = Factor of Agreement; R^2 = Bestimmtheitsmaß und $RMSE$ = Root Mean Square Error).

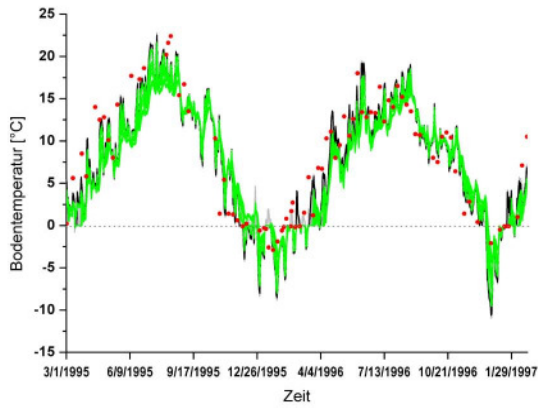
Modell- effizienz	Göttingen, 5 cm		Gießen, 5 cm		Scheyern, 5 cm		Arolsen, 20 cm		Petzenkirchen, 20 cm	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	0,68	0,70	0,83	0,86	0,91	0,92	0,89	0,95	0,86	0,87
d	0,92	0,92	0,95	0,96	0,98	0,98	0,97	0,99	0,97	0,97
R^2	0,74	0,74	0,88	0,91	0,91	0,92	0,92	0,98	0,94	0,93
RMSE	3,8	3,7	2,61	2,43	2,14	2,02	1,72	1,23	2,38	2,28

Bei der Betrachtung der simulierten Bodentemperatur im Jahresverlauf (Abb. 14) wird deutlich, dass das Modell generell den Temperaturverlauf über das Jahr gut darstellt. Bei näherer Betrachtung ist jedoch zu erkennen, dass DNDC die Temperatur um den Gefrierpunkt unterschätzt. Dieses Phänomen tritt besonders deutlich in den oberen Bodenschichten auf (vgl. Abb. 14, Standorte in Göttingen, Gießen und Scheyern in jeweils 5 cm Tiefe). Auf den Untersuchungsstandorten, bei denen die Bodentemperatur in 20 cm Tiefe berechnet wurde, sind ebenfalls Unterschätzungen zu beobachten, die jedoch weniger stark ausgeprägt sind (Abb. 14, Standorte Arolsen und Petzenkirchen). Weiterhin zeigt sich, dass die Übertragung der Parameterkombinationen, welche gute Modellrealisationen für die Temperatur in 5 cm Tiefe erbringen, in tieferen

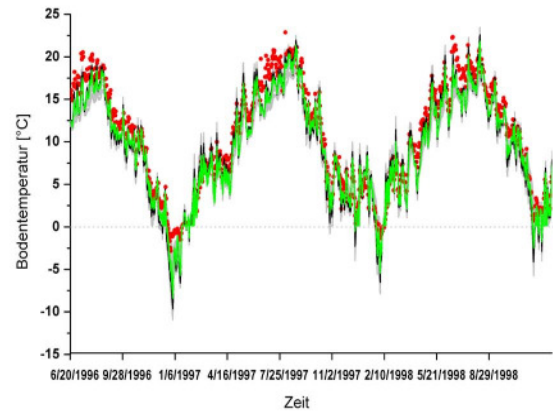
Bodenschichten nicht möglich ist. Diese Parameterkombinationen bedingen in tieferen Bodenschichten eine fehlerhafte Berechnung der Bodentemperatur, welche sich in einem zeitlichen Versatz sowie einer verringerten Amplitude der Temperatur äußert (Abb. 14, Standorte Arolsen und Petzenkirchen). Die Veränderung der Parameterwerte macht deutlich, wie schon bei der Betrachtung der Effizienzkriterien zu sehen ist, dass die Bodentemperatur nur minimal beeinflusst wird. Bei der Betrachtung über den gesamten Messzeitraum wird ersichtlich, dass durch die Variation der Parameterwerte eine generelle Verringerung der Temperaturamplitude in der oberen Bodenschicht (5 cm Tiefe) hervorgerufen wird. Dass heißt, im Vergleich zwischen der DNDC_{original}- und DNDC_{UnsA}-Version werden nun oberhalb des Gefrierpunktes geringere und darunter leicht höhere Temperaturen berechnet (vgl. Abb. 14, Göttingen, Gießen und Scheyern in 5 cm Bodentiefe). Auffällig ist weiterhin, dass durch diese Veränderung die Unterschätzung der Bodentemperatur um den Gefrierpunkt in den tieferen Bodenschichten sowie die Temperaturamplitude sogar verstärkt bzw. vergrößert wurde (Abb. 14, Arolsen und Petzenkirchen, 20 cm Tiefe).

Aus den dargestellten Temperaturverläufen ist weiterhin ersichtlich, dass die Parametersätze, die für eine Bodentiefe von 20 cm gute Ergebnisse liefern, problemlos auf die Berechnung der Bodentemperatur in geringeren Tiefen angewendet werden können, umgekehrt jedoch nicht (s.o.).

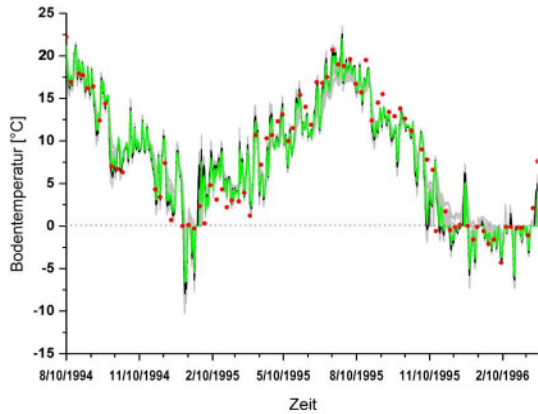
Göttingen, 5 cm Bodentiefe



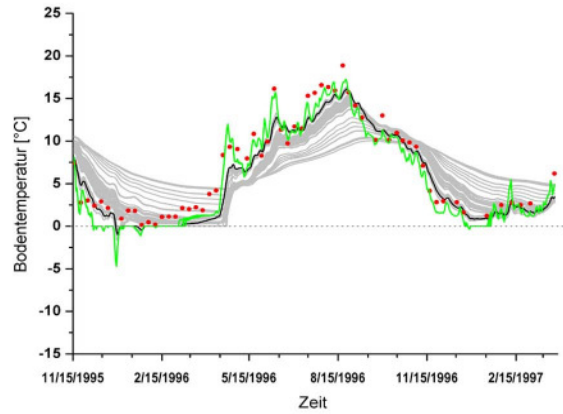
Gießen, 5 cm Bodentiefe



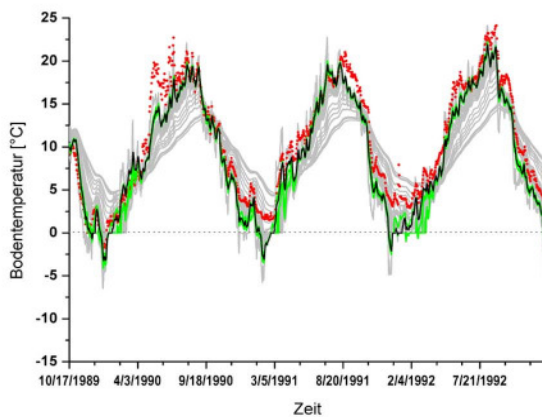
Scheyern, 5 cm Bodentiefe



Arolsen, 20 cm Bodentiefe



Petzenkirchen, 20 cm Bodentiefe



- Messung
- DNDC Simulationen, original
- DNDC Simulationen, UnsA, eigener Standort
- DNDC Simulationen, Kreuzvalidierung, andere Standorte

Abb. 14. Simulierte und gemessene Bodentemperatur für die Standorte Göttingen, Gießen und Scheyern in 5 cm Bodentiefe sowie für Arolsen und Petzenkirchen in 20 cm Bodentiefe. Dargestellt sind die Ergebnisse der Bodentemperaturberechnung von DNDC mit den ursprünglichen Parameterwerten (DNDC_{original}, schwarze Linie), denen aus der Unsicherheitsanalyse für den jeweiligen Standort (DNDC_{UnsA}, grüne Linien) sowie denen aus den Analysen der anderen Standorte (DNDC_{Kreuzvalidierung}, graue Linien). Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (rote Punkte).

5.2.1.3 Auswirkung der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern der Bodentemperaturberechnung auf die von DNDC simulierten CO₂-Emissionen

Neben der Zielgröße N₂O wurden zusätzlich die von DNDC berechneten CO₂-Emissionen mit in die Auswertungen aufgenommen. Dadurch sollte zum einen die Validität der Berechnungen der in DNDC dargestellten Umsatzprozesse überprüft werden und zum anderen getestet werden, inwieweit sich die Veränderungen eines der Modellteile auf die in DNDC dargestellten Mineralisationsprozesse auswirken. Durch den modularen und schrittweisen Aufbau von DNDC steuern die Simulationsergebnisse der Bodentemperatur die Prozesse der Mineralisation. Darüber hinaus stellen die Bodentemperatur und das von der Mineralisation gelieferte Substrat Steuergrößen für die N₂O-bildenden Prozesse der Nitrifikation und Denitrifikation dar. Die Betrachtung der berechneten CO₂-Emissionen bringt einen Aufschluss darüber, inwieweit Veränderungen in verschiedenen Modulen Auswirkungen auf nachgeschaltete Prozesse haben und ob diese Veränderungen sich im Modell fortpflanzen oder ggf. verstärkt werden. Von den fünf ausgewählten Standorten liegen für die Flächen in Göttingen, Scheyern und Arolsen Messungen von CO₂-Emissionen vor.

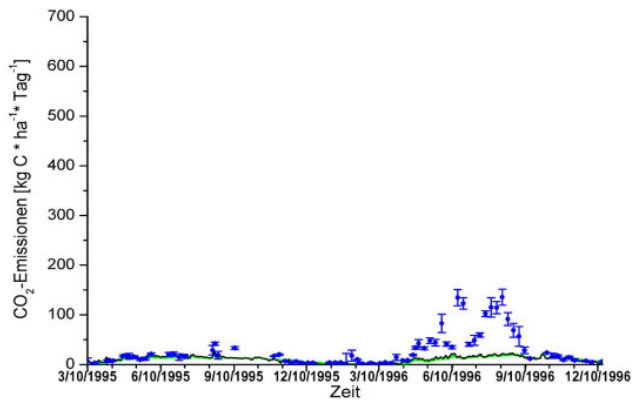
Werden die Modelleffizienzkriterien für die simulierten CO₂-Emissionen von DNDC betrachtet, so ist zu sehen, dass die Veränderungen bei der Temperaturberechnung kaum einen Einfluss auf die CO₂-Emissionen haben (Tab. 18).

Tab. 18. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der CO₂-Emissionen. Dargestellt sind für alle Untersuchungsflächen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte (DNDC_{original}) sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse (DNDC_{UnsA}) mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten. (*E* = Nash-Sutcliffe-Effizienz; *d* = Factor of Agreement; *R*² = Bestimmtheitsmaß und *RMSE* = Root Mean Square Error).

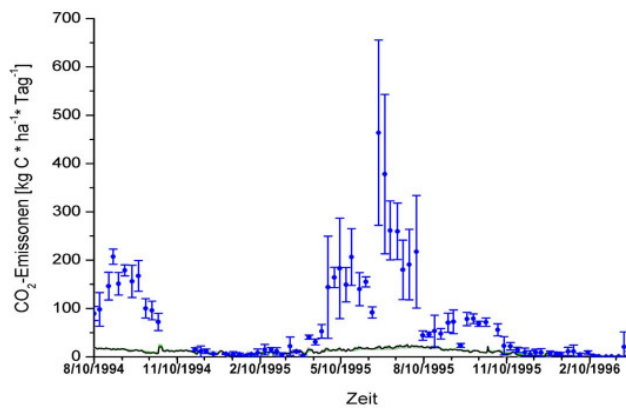
Modell-effizienz	Göttingen, CO ₂		Scheyern, CO ₂		Arolsen, CO ₂	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	0,03	-0,02	-0,40	-0,40	0,13	0,15
d	0,47	0,45	0,46	0,45	0,62	0,62
R ²	0,38	0,35	0,52	0,50	0,80	0,79
RMSE	32	33	107	107	26	26

Für alle Standorte ist eine leichte Abnahme der Modellgütemaße für die vorhergesagten CO₂-Emissionen zu beobachten. Gleiches zeigt sich in Abb. 15, die die gemessenen und simulierten CO₂-Emissionen der verschiedenen Standorte darstellt. Unabhängig von den vorgenommenen Veränderungen ist bei allen drei Standorten zu beobachten, dass beobachtete und simulierte CO₂-Emissionen stark voneinander abweichen.

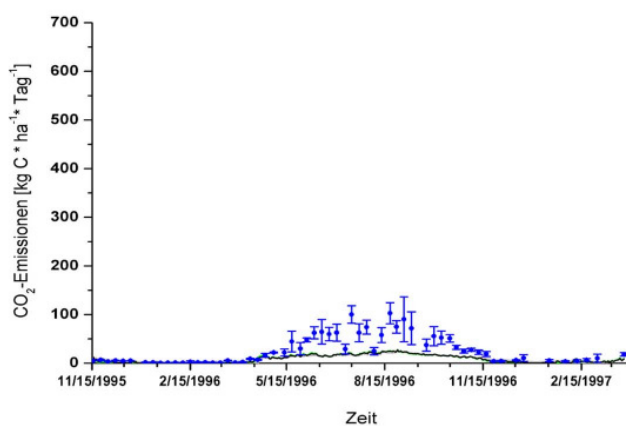
Göttingen



Scheyern



Arolsen



- Messung
- DNDC Simulationen, original
- DNDC Simulationen, UnsA, eigener Standort
- DNDC Simulationen, Kreuzvalidierung, andere Standorte

Abb. 15. Simulierte und gemessene CO_2 -Emissionen in täglicher Auflösung für die Standorte Göttingen, Scheyern und Arolsen. Die schwarzen Linien zeigen den simulierten CO_2 -Verlauf über den gesamten Untersuchungszeitraum, der mit den ursprünglichen Parameterwerten kalkuliert wurde ($\text{DNDC}_{\text{original}}$). Die grünen (eigener Standort, $\text{DNDC}_{\text{UnsA}}$) und grauen (andere Standorte, $\text{DNDC}_{\text{Kreuzvalidierung}}$) Kurven stellen die CO_2 -Verläufe dar, welche aus der Unsicherheitsanalyse resultieren. Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (blaue Punkte). Die blau eingezeichneten Balken stellen die Standardabweichungen der jeweiligen Messwerte dar.

Während sich in den Wintermonaten eine gute Übereinstimmung zeigt, werden in den übrigen Jahreszeiten die CO₂-Emissionen von DNDC deutlich unterschätzt. Aus Abb. 15 wird weiterhin deutlich, dass DNDC für alle drei Standorte, die sich in ihrer Bodenart, ihrem Kohlenstoffgehalt und in ihrer Bewirtschaftung voneinander unterscheiden, ein recht einheitliches CO₂-Emissionsmuster vorhersagt: In der Vegetationszeit werden laut Modellrechnung bis zu 25 kg C d⁻¹ ha⁻¹ emittiert. Die Messungen zeigen hingegen, dass auf den Untersuchungsflächen 10 bis 20fach höhere Emissionen ermittelt wurden (Abb. 15, Göttingen und Scheyern).

5.2.1.4 Auswirkung der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern der Bodentemperaturberechnung auf die von DNDC simulierten N₂O-Emissionen

Für vier der fünf Standorte, die für die Unsicherheitsanalysen des Bodentemperaturmoduls verwendet wurden, liegen Messungen zu Lachgasemissionen vor. Wie aus Tab. 19 zu entnehmen ist, hat die Verwendung der optimierten Parametersätze des Bodentemperaturmoduls einen deutlich negativen Einfluss auf die berechnete Lachgasemission. Für fast alle Flächen ist eine Verschlechterung der Modelleffizienzen zu beobachten (Tab. 19).

Tab. 19. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der N₂O-Emissionen. Dargestellt sind für die Untersuchungsflächen in Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte (DNDC_{original}) sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse (DNDC_{UnsA}) mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten. (E = Nash-Sutcliffe-Effizienz; d = Factor of Agreement; R^2 = Bestimmtheitsmaß und $RMSE$ = Root Mean Square Error).

Modell-effizienz	Göttingen, N ₂ O		Gießen, N ₂ O		Scheyern, N ₂ O		Arolsen, N ₂ O	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	0,23	-1,34	-1038	-871	-0,56	-3,04	-154	-297
D	0,80	0,69	0,001	0,001	0,59	0,53	0,11	0,08
R ²	0,42	0,44	0,003	0,003	0,15	0,22	0,04	0,04
RMSE	5,77	10,07	102	94	39	63	102	141

In Abb. 16 sind die von DNDC simulierten N₂O-Emissionen in täglicher Auflösung so wie die vorliegenden Messwerte für alle Standorte dargestellt. Dabei wird zunächst deutlich, dass die Messwerte für das emittierte N₂O stark schwanken und die einzelnen Messpunkte hohe Standardabweichungen aufzeigen (Abb. 16).

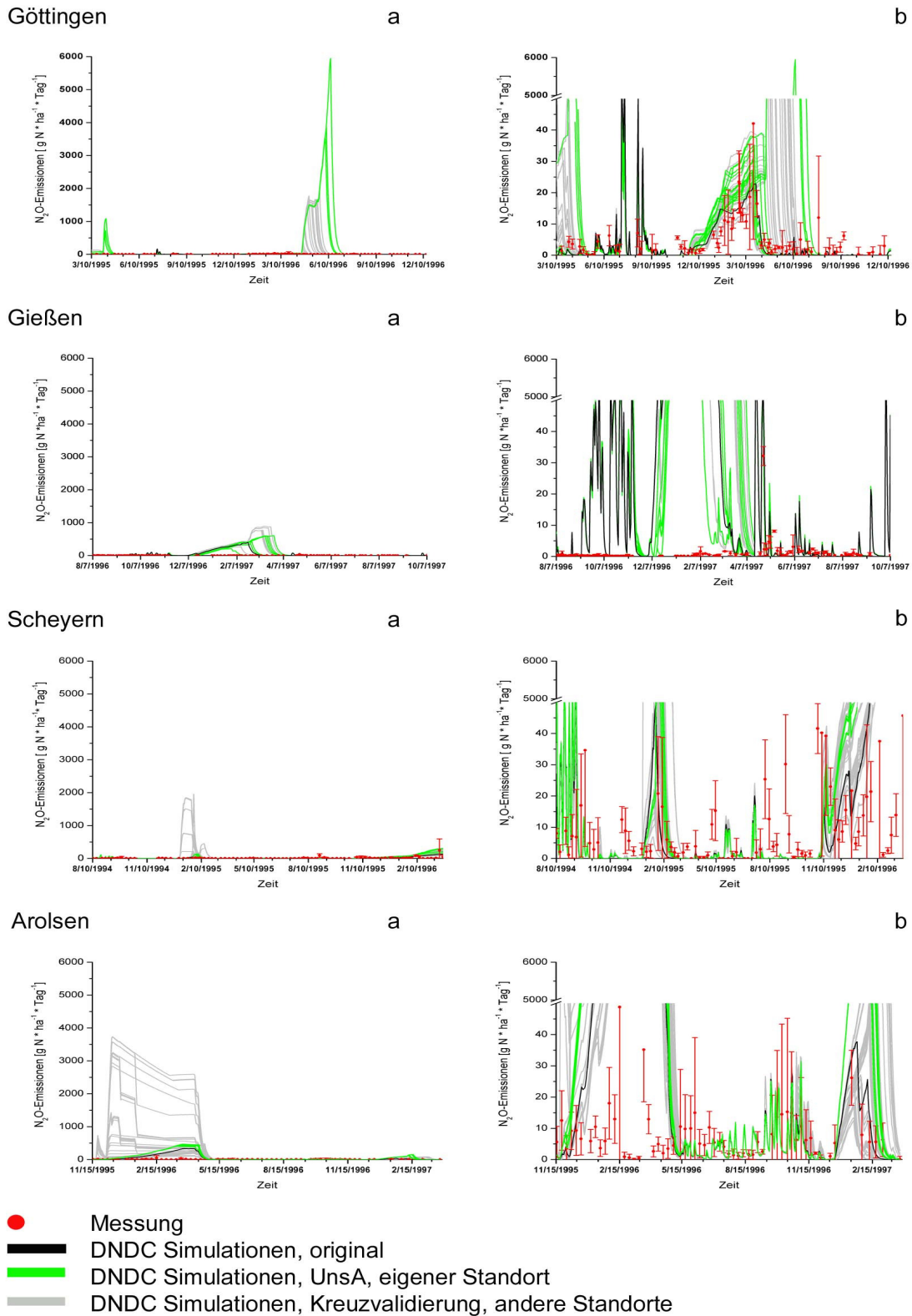


Abb. 16. Simulierte und gemessene N_2O -Emissionen in täglicher Auflösung für die Standorte Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen. Die Abbildung a eines jeden Standortes zeigt den vollständigen Emissionsverlauf. In Abbildung b wurden die Ordinate für eine detaillierte Darstellung unterbrochen. Die schwarze Linie zeigt den N_2O -Verlauf, der mit den ursprünglichen Parameterwerten kalkuliert wurde (DNDC_{Original}). Die grünen (eigener Standort, DNDC_{UnsA}) und grauen (andere Standorte, DNDC_{Kreuzvalidierung}) Kurven stellen die N_2O -Verläufe dar, welche aus der Unsicherheitsanalyse resultieren. Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (rote Punkte). Die roten Balken zeigen die Standardabweichung der jeweiligen Messung.

Auch weisen die jeweiligen Untersuchungsflächen deutliche Unterschiede in ihren Emissionsniveaus und -mustern auf (vgl. Abb. 16, Gießen mit Scheyern). Bei Betrachtung der modellierten Lachgasemissionen, verglichen mit den Messungen, ist erkennbar, dass die modifizierten Parameter in den Berechnungen der Bodentemperatur zu teilweise sehr starken Veränderungen der N_2O -Emissionsvorhersagen führen. Sind zuvor Übereinstimmungen zwischen berechneten und gemessenen N_2O -Emissionen zu beobachten, kommt es bei Variation der Parameter $P_{K_{soil}}$, $P_{C_{ll}}$ und $P_{C_{soil}}$ zu starken Überschätzungen. Gerade für den Standort in Göttingen (Abb. 16, Göttingen a & b) wird dieses besonders deutlich. Dort werden durch die Veränderungen der Parameterwerte im Zuge der durchgeführten Unsicherheitsanalyse die täglichen N_2O -Emissionen von wenigen $\text{g N}_2\text{O-N Tag}^{-1} \text{ ha}^{-1}$ auf fast $6000 \text{ g N}_2\text{O-N Tag}^{-1} \text{ ha}^{-1}$ angehoben und damit deutlich überschätzt (Abb. 16, Göttingen). Dabei werden die extremen N_2O -Emissionspeaks von DNDC überwiegend in den Wintermonaten und im Übergang zum Frühjahr simuliert.

Die Kreuzvalidierung macht außerdem deutlich, dass die Parameter nach der Variation ihrer Zahlenwerte deutliche Standortabhängigkeiten aufweisen. Werden diese Parameterwerte auf einen anderen Standort übertragen, verursachen sie dort besonders extreme Werte für die berechneten N_2O -Emissionen (vgl. Abb. 16, Standorte Gießen, Scheyern und Arolsen).

5.2.2 *Ergebnisdiskussion der Unsicherheitsanalyse bezüglich der Bodentemperaturberechnung*

5.2.2.1 *Punktgraphen*

Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse zeigen für die drei Parameter des Bodentemperaturmoduls keinen eingeschränkten Parameterwertebereich. Generell können sowohl sehr gute als auch schlechte Modellrealisationen mit Werten aus dem gesamten Parameterraum erzielt werden. Da alle Parameter gemeinsam verändert wurden, ist eine starke Interaktion unter den Parametern anzunehmen. Interaktionen von Parametern führen zu lokalen Minima und Maxima in der Parameterreaktionsoberfläche. Dadurch wird die Suche nach einem globalen Optimum (= einem Parametersatz, der die besten Modellrealisationen bedingt), eine der Voraussetzungen bei der Kalibrierungen, erschwert. Die gegenseitige Beeinflussung der Parameter bedingt letztendlich eine Gleichwertigkeit verschiedener Parametersätze. Dieses hat zur Folge, dass verschiedenste Werte und Parameterkombinationen ähnlich gute Ergebnisse liefern. Ein solches Verhalten kann bei mehrdimensionalen Analysen komplexer Modelle auftreten und wird als Equifinalität beschrieben (Beven & Binley 1992, Schulze et al. 1999, Zak & Beven 1999 und Beven & Freer 2001).

5.2.2.2 *Modellierte Bodentemperatur*

Wie aus der Darstellung der Unsicherheitsanalyse des Bodentemperaturmoduls (Abb. 14) deutlich wird, kann die Berechnung der Temperatur mit Hilfe eines mehrdimensionalen Kalibrierungsansatzes kaum verbessert werden. Die Veränderung der Parameterwerte bedingt lediglich eine geringfügige Verbesserung der Effizienzkriterien.

Die Parametervariationen in der Bodentemperaturberechnung in 5 cm Bodentiefe (Flächen in Göttingen, Gießen und Scheyern) führt zu einer Stauchung der Temperaturamplitude (Abb. 14). Dadurch wird die Bodentemperatur in den Sommermonaten unterschätzt. In den Wintermonaten kommt es dagegen zu weniger starken Unterschätzungen der Temperatur. Da zunächst Energie benötigt wird, um den Boden zu erwärmen, wird durch eine Erhöhung der Wärmekapazität die Temperaturamplitude gedämpft. Wird allerdings die Wärmeleitfähigkeit eines Bodens herabgesetzt, so kann es zu einem Wärmestau und einer Vergrößerung der Amplitude in den oberen Bodenschichten kommen. Da beide Größen bei der Regelung des Temperaturverlaufs im Boden eng miteinander verbunden sind, heben sich die hier hervorgerufenen Effekte teilweise wieder auf. Ein Indiz dafür ist die geringe Veränderung

des von DNDC simulierten Temperaturverlaufes im Boden. Für die Flächen, bei denen die Unsicherheitsanalyse des Bodentemperaturmoduls für tiefe Bodenschichten durchgeführt wurde, zeigte sich, dass eine Verbesserung der Modellrealisationen durch eine starke Erhöhung der Wärmekapazität und der Wärmeleitfähigkeit erzielt werden kann.

Beide Größen, Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit, sind von der Beschaffenheit des Bodens abhängig. Dabei nimmt der Wassergehalt des Bodens eine besondere Stellung ein, da Wasser zum einen eine sehr große spezifische Wärmekapazität und zum anderen auch eine hohe Wärmeleitfähigkeit aufweist (Scheffer 2002). Der Einfluss des Bodenwassergehaltes ist in der Berechnung der Bodentemperatur in DNDC berücksichtigt (vgl. Gl. 5.2). Unbefriedigende Simulationen des Temperaturverlaufes im Boden können daher auch durch einen falsch berechneten Wassersättigungsgrad des Bodens bedingt werden.

Die Unsicherheitsanalyse zeigt, dass durch eine Veränderung der Parameter sich die zuvor unterschätzten Bodentemperaturen unterhalb des Gefrierpunktes zwar leicht anheben ließen, allerdings immer noch deutlich zu geringe Temperaturen berechnet werden. Auch wenn das Temperaturniveau angehoben werden konnte, sind die Zeiträume, für die Bodentemperaturen unterhalb von 0° C simuliert werden, gleich geblieben. Die fehlerhafte Berechnung der Bodentemperatur während der Frost- und Auftauperioden konnte durch eine Veränderung der Parameter nicht behoben werden. Dieses ist ein Zeichen dafür, dass die Prozesse vom Modell nicht korrekt abgebildet werden. Eine eindeutige Identifizierung der dafür verantwortlichen Faktoren war nicht möglich, sollte aber für zukünftige Arbeiten mit DNDC angestrebt werden.

Weiterhin wird durch die nur eingeschränkte Übertragbarkeit der Parameter unterschiedlicher Bodenschichten (Optimierung der Temperatur in 5 cm Tiefe erbrachten in tieferen Bodenschichten einen zeitlichen Versatz der berechneten Temperatur) deutlich, dass sich das Modell durch ein Kalibrierungsverfahren an einen bestimmten Standort anpassen lässt. Jedoch ist dann das modifizierte Modell nicht mehr uneingeschränkt generalisierbar (vgl. Abb. 14).

Die entscheidende Rolle bei der Veränderung der Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität des Bodens spielen hier die anpassungsfähigen Parameter $P_{K_{soil}}$, $P_{C[i]}$ und $P_{C_{soil}}$, mit denen die spezifischen Leitfähigkeiten und Kapazitäten der unterschiedlichen Bodenbestandteile multipliziert werden. Da die Größen für die Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität von z.B. Tonmineralen oder Wasser

physikalische Konstanten sind, sollten diese Berechnungen ohne anpassungsfähige Faktoren auskommen und für jeden Standort Ergebnisse liefern, die nicht zusätzlich kalibrierungsbedürftig sind. Die in DNDC zusätzlich verwendeten Faktoren deuten darauf hin, dass dieser Prozess nicht hinreichend genau dargestellt ist. Zwar werden die Kapazitäten und Leitfähigkeiten der Wärme im Boden an Hand der Einzelleitfähigkeiten von mineralischen und organischen Bodenanteilen sowie dem Wassergehalt des Bodens berechnet. Allerdings wird beispielsweise bei dem mineralischen Anteil des Bodens nicht zwischen Ton- und Sandgehalt unterschieden. Diese Bodenbestandteile weisen jedoch deutliche Unterschiede in ihrer Wärmeleitfähigkeit auf (Scheffer 2002). Weiterhin wird in der Berechnung der Bodentemperatur die Lagerungsdichte sowie das Luftvolumen vernachlässigt. Luft zeichnet sich durch eine sehr geringe Wärmeleitfähigkeit und -kapazität aus und kann somit auch zu starken Temperatureffekten im Boden führen. Zum Beispiel können drainierte Böden starke Temperaturunterschiede im Tagesverlauf aufzeigen. Die eingestrahlte Energie wird auf Grund der geringen Wärmeleitfähigkeit schlecht in tiefere Bodenschichten weitergeleitet, so dass es dann zu einem Wärmestau in den oberen Bodenbereichen führen kann. Nachts kann diese Eigenschaft eine starke Abkühlung des Bodens bedingen (Bucher et al. 1981).

Ein weiteres Problem in DNDC, das die Abbildung der Bodentemperatur und auch andere Bodenfaktoren beeinflusst, ist die Tatsache, dass es nicht möglich ist, mit dem Modell eine Horizontierung des Bodenprofils darzustellen. Damit ist eine Darstellung der sich mit der Tiefe verändernden bodenphysikalischen Eigenschaften eines Bodens nicht möglich. Die modellinterne Einteilung in verschiedene Bodenschichten, für die dann jeweils individuell die ablaufenden Prozesse berechnet werden, ist nicht gleichzusetzen mit der am Standort vorkommenden Horizontierung des Bodens. In DNDC wird der Boden als eine homogene Einheit angesehen. Die sich mit der Tiefe ergebenden Änderungen der Bodenart, der organischen Anteile, der Lagerungsdichte und der Porenvolumina bleiben in DNDC unberücksichtigt. Diese Gleichförmigkeit bedingt Unschärfen bei der Berechnung des Temperaturprofils.

5.2.2.3 Auswirkungen auf die CO₂-Emissionen

Der Einfluss der veränderten Bodentemperatur auf die Mineralisation und die daraus resultierenden CO₂-Emissionen ist sehr gering. Auffällig ist, dass DNDC für alle drei Untersuchungsstandorte die CO₂-Emissionen in den Sommermonaten sehr stark unterschätzt. Um allerdings Aussagen darüber treffen zu können, warum das Modell nur so geringe Übereinstimmungen zu den gemessenen CO₂-Emissionen liefert, müssten

weitere Faktoren untersucht werden (bspw. die Verknüpfung/Einfluss der berechneten Bodentemperatur auf die Umsatzprozesse, Aufteilung der organischen Kohlenstoffpools etc.). Ein weiterer Aspekt, der in DNDC nicht berücksichtigt wird, ist der Einfluss von Frost-Tau-Prozessen auf die CO₂-Emission aus Böden. Kurganova et al. (2007) konnten in Laboruntersuchungen zeigen, dass die CO₂-Emissionen beim Auftauen des Bodens signifikant anstiegen, verglichen mit den emittierten Mengen an CO₂ vor dem Gefrieren des Bodens.

5.2.2.4 Auswirkungen auf die N₂O-Emissionen

Die Veränderung der Parameter des Bodentemperaturmoduls im Rahmen der Unsicherheitsanalyse hat auf die simulierten N₂O-Emissionen extreme Auswirkungen. Diese Modellreaktion auf eine verhältnismäßig kleine Änderung der absoluten Bodentemperatur ist schwer zu erklären, da keiner der veränderten Bodentemperaturparameter direkt in die Berechnungen der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse eingeht.

Es lässt sich folgendes Muster bei den Überschätzungen der N₂O-Emissionen erkennen: In den Zeiten, zu denen bereits mit den Parametersätzen von DNDC_{original} Extremwerte für die N₂O-Emissionen im Jahresverlauf modelliert werden, werden diese Extrema durch die bei der Unsicherheitsanalyse (DNDC_{UnsA}), generierten Parameter noch verstärken. Auf der Göttinger Fläche sind diese im Frühjahr und im Frühsommer zu beobachten. Für die übrigen Flächen wird die Emission von N₂O in den Zeiträumen, in denen Temperaturen unterhalb des Gefrierpunktes herrschen, schon vor den Modifikationen deutlich überschätzt. Eine Verstärkung dieses Effektes ist besonders deutlich für die simulierten N₂O-Emissionen der Kreuzvalidierungen zu beobachten (vgl. Abb. 16, Arolsen).

Für die extremen Überschätzungen der N₂O-Emissionen für den Göttinger Standort im Frühjahr und im Frühsommer nach der Unsicherheitsanalyse der Bodentemperaturparameter ist keine belastbare Begründung zu finden, da die Bodentemperatur durch die Änderungen der Parameterwerte in diesen Zeitspannen nur geringfügig (0,5 – 1 °C) herabgesetzt wird. Ein Erklärungsansatz könnte in die Richtung gehen, dass durch eine geringere Bodentemperatur die Abtrocknung des Bodens in DNDC reduziert wird und somit höhere Wassergehalte zu vermehrt anaeroben Bodenbereichen beitragen, in denen verstärkt Denitrifikationsprozesse ablaufen. Diese Vermutung müsste jedoch im Modell dahingehend untersucht werden, ob die simulierten

Bodenwassergehalte sowie die anaeroben Bodenbereiche mit sinkenden Temperaturen oberhalb des Gefrierpunktes ansteigen.

Dass hohe N₂O-Emissionen zu Zeiten, in denen der Boden gefriert und wieder auftaut, von DNDC berechnet werden, ist prinzipiell richtig. Gerade kurz aufeinanderfolgendes Tauen und Gefrieren der obersten Bodenschichten tragen zu einem hohen Anteil der jährlichen emittierten N₂O-Emissionen bei. Kurzfristige Temperaturanstiege nach Bodenfrostereignissen im Oberboden sowie ein großes Angebot an leicht zersetzbarer organischer Substanz soll eine hohe Aktivität der Mikroorganismenpopulationen bedingen (Sharma et al. 2006). Dabei werden auch solche Mikroorganismengruppen aktiv, die in der Lage sind, Stickstoff zu nitrifizieren und zu denitrifizieren. Dörsch et al. (2004) beobachteten eine Abnahme der mikrobiellen Biomasse durch Frostereignisse. Allerdings konnte nach dem Auftauen deren schnelle Regeneration beobachtet werden. Die so bedingten Emissionen sind i.d.R. nur von kurzer Dauer (Christensen & Tiedje 1990, Matzner & Borken 2008). Dabei können Emissionen auftreten, die bis zu 40 - 70 % der gesamten Jahresemission ausmachen (Flessa et al. 1995, Wagner-Riddle et al. 1997, Wagner-Riddle & Thurtell 1998, Flessa et al. 1998, Kammann et al. 1998, van Bochove & Jones 1999, Kaiser & Ruser 2000, Teepe et al. 2000, Ruser et al. 2001, Goossens et al. 2001, Müller et al. 2002 und Schauss 2006). Dass allerdings nicht überall das Phänomen starker N₂O-Emissionen während Frost-Tau-Wechsel auftreten, zeigten Untersuchungen von Sehy et al. (2003). Sie ermittelten in einem Zeitraum von Oktober bis März lediglich 10 – 20 % der N₂O-Jahresemission. Model (2003) konnte bei Messungen in verschiedenen Kulturen keine signifikante Erhöhung der N₂O-Emissionen während Frost-Tau-Zyklen feststellen.

Die bei den Frost-Tau-Zyklen auftretenden Emissionen resultieren aus der Kombination von physikalischen und biologischen Prozessen. Ausschlaggebend für die hohen Verluste an Lachgas im Winter sind offensichtlich hohe Gehalte an mineralischem Stickstoff und leicht löslichen Kohlenstoffverbindungen der Böden. Diese Anreicherung an Nährstoffen wird bedingt durch Bakterien (Skogland et al. 1988 und Teepe et al. 2001) sowie Feinwurzeln (Priemé & Christensen 2001), die durch das Gefrieren des Bodens absterben. Diese leicht verfügbaren Nährstoffe werden von derjenigen Mikroorganismenpopulation verwendet, die das Frostereignis überlebt hat.

Die Einarbeitung von Leguminosen oder das Ausbringen von organischem Dünger in der späten Jahreszeit können ebenfalls zu hohen Emissionen in darauffolgenden Frost-Tau-Zyklen führen (Wagner-Riddle & Thurtell 1998). Mørkved et al. (2006) konnten in Laboruntersuchungen einen engen Zusammenhang zwischen organischen

Kohlenstoffverbindungen, die aus gefrorenem Pflanzenmaterial (Zwischenfrüchte und Klee) gewonnen wurden, und N₂O-Emissionen nach Frost-Tau-Ereignissen zeigen. Andere Autoren beobachteten, dass Nährstoffe verfügbar werden, wenn Bodenaggregate durch Frostsprengung zerstört werden (Christensen & Christensen und 1991 van Bochove et al. 2000). Koponen et al. (2004) zeigten in Laborversuchen, dass nicht nur N₂O-Emissionspeaks während des Auftauprozesses zu verzeichnen waren, sondern auch beim Gefrieren des Bodens. Dabei wurden die stärksten Emissionen zwischen -0,4 °C und +2,5 °C beobachtet. Ebenso wird ein rein physikalischer Mechanismus diskutiert. Demnach wird das N₂O, das kurz nach Auftauen des Bodens emittiert, zuvor im frostfreien Unterboden produziert. Der gefrorene Oberboden wirkt wie eine Barriere und das im Unterboden gebildete N₂O kann diese nicht durchdringen. Es akkumuliert sich unterhalb dieser Frostsicht, bis durch Tauprozesse diese für Gase wieder durchlässig wird (Burton & Beauchamp 1994 und Teepe et al. 2004).

Basierend auf den zitierten Untersuchungsergebnissen wurden frostbedingte N₂O-Emissionen in das DNDC Modell vom Modellautor integriert. Die vorliegenden Untersuchungen zeigen jedoch, dass die Frost-Tau-Zyklen von DNDC nicht korrekt dargestellt werden können. Dazu wird in DNDC die Temperatur um den Gefrierpunkt – vor allem die Auftauprozesse – nicht hinreichend genau genug abgebildet. Dieses hängt u.a. damit zusammen, dass vom Modell die Temperatur um den Gefrierpunkt unterschätzt wird und somit Temperaturen unter 0 °C über einen längeren Zeitraum berechnet werden als sie in Wirklichkeit vorliegen. Die Überschätzung der emittierten N₂O-Menge in diesem Zeitraum resultiert daraus, dass im Modell eine sogenannte Frost-N₂O-Emission kalkuliert wird. Diese wird an Hand eines Ratenkoeffizienten (Parameter *P_b1* und *P_b2*, vgl. Kap. 5.1.1.4) berechnet, der dann initialisiert wird, wenn die Temperaturen im Boden unterhalb des Gefrierpunktes liegen. Die so berechnete Frost-N₂O-Emission setzt erst dann wieder aus, wenn die Temperaturen im Boden über 0 °C ansteigen. Wird durch das Modell für einen zu langen Zeitraum Bodenfrost berechnet, so bedingt dieser eine zu hohe Menge an emittiertem N₂O für diese Zeitspanne. Dieses wird noch auf Grund der relativ hoch angesetzten Frost-N₂O-Emissionsraten verstärkt.

Temperaturen, die deutlich unter dem Gefrierpunkt liegen (z.B. bei -10 °C), beeinflussen die Emissionsmengen des Frost-N₂O von DNDC nicht sonderlich. Zwar haben Untersuchungen ergeben, dass mikrobiologische Prozesse bis Temperaturen von -39 °C aktiv sind (Panikov et al. 2006) und N₂O-Emissionen bei Bodentemperaturen von bis zu -6 °C / -4 °C (Röver et al. 1998 und Koponen et al. 2004) nachgewiesen wurden, allerdings sind die Emissionsraten bei diesen Temperaturen sehr gering. Da DNDC

jedoch auch bei geringen Temperaturen im Boden noch hohe N-Emissionsraten berechnet, ist anzunehmen, dass auch dieser Prozess von DNDC nicht richtig wiedergegeben wird.

5.2.2.5 Übertragbarkeit veränderter Parameter auf andere Standorte bezüglich der Auswirkung auf die N₂O-Emissionen (Kreuzvalidierung)

Die extremen N₂O-Emissionen, die für den Standort in Arolsen simuliert wurden und auf den Parameterkombinationen anderer Standorte basieren, sind nicht mit den vom Modell simulierten Frost-N₂O-Emissionen zu begründen, das ausschließlich in Zeiten des Bodenfrostes initialisiert wird. Vielmehr zeigen sich hier die Auswirkungen von Überanpassungen des Bodentemperaturmoduls an bestimmte Standorte. Schon bei der Betrachtung der Bodentemperatur war zu erkennen, dass die veränderten und auf die jeweiligen Untersuchungsflächen angepassten Parameter nicht mehr auf andere Flächen übertragbar waren. Die eingesetzten Parameterkombinationen der anderen Untersuchungsflächen bzw. unterschiedlicher Bodentiefen bewirkten dort extreme Abweichungen bei der Bodentemperatur. Diese fehlerhaften Temperaturberechnungen haben sich dahingehend fortgepflanzt, dass nun für die N₂O-Emissionen absolut unrealistische Werte kalkuliert wurden.

5.2.3 Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse im Modul Bodenklima - Berechnung des Bodenwassergehalts

5.2.3.1 Punktgraphen für die Parameter aus der Berechnung des Bodenwassergehaltes

Mit den als sensitiv identifizierten Parametern des Bodenwassermoduls wurde in gleicher Weise verfahren wie mit denjenigen des Bodentemperaturmoduls. Hier wurden ebenfalls die Ergebnisse für den Bodenwassergehalt aller 10.000 generierten Parametersätze dem Effizienzkriterium nach Nash und Sutcliffe E gegenübergestellt. In 0 sind beispielhaft die Parameter $P_Outwater_2$ (Wasserabfluss pro Bodenschicht und Stunde), P_DBAR (Perkolationssvermögen des Bodenwassers) und P_tev_1 (Stündliche Evaporation / Bodenschicht) für alle Untersuchungsstandorte dargestellt.

Wie aus 0 zu entnehmen ist, wurden durch die MC Simulation bei allen abgebildeten Parametern nur wenige Werte gezogen, deren Modellergebnisse zu einer Modelleffizienz von $E > 0$ führen. Bei vier von fünf Standorten liegt die Verteilung der Modellgütemaße zwischen $-4 < E < 0,3$ (0). Nur auf der Fläche in Göttingen sind die Effizienzkriterien bei den verschiedenen Parametern über einen weiteren Wertebereich verteilt ($-8 < E < 0,2$). Kein Parameter zeigt ein besonders ausgeprägtes Optimum guter Modellrealisationen bei einem bestimmten Wert. Ergebnisse, die viele schlechte und einige bessere Modelleffizienzen über den gesamten Wertebereich verteilt liefern, sind bei allen Parametern vorzufinden.

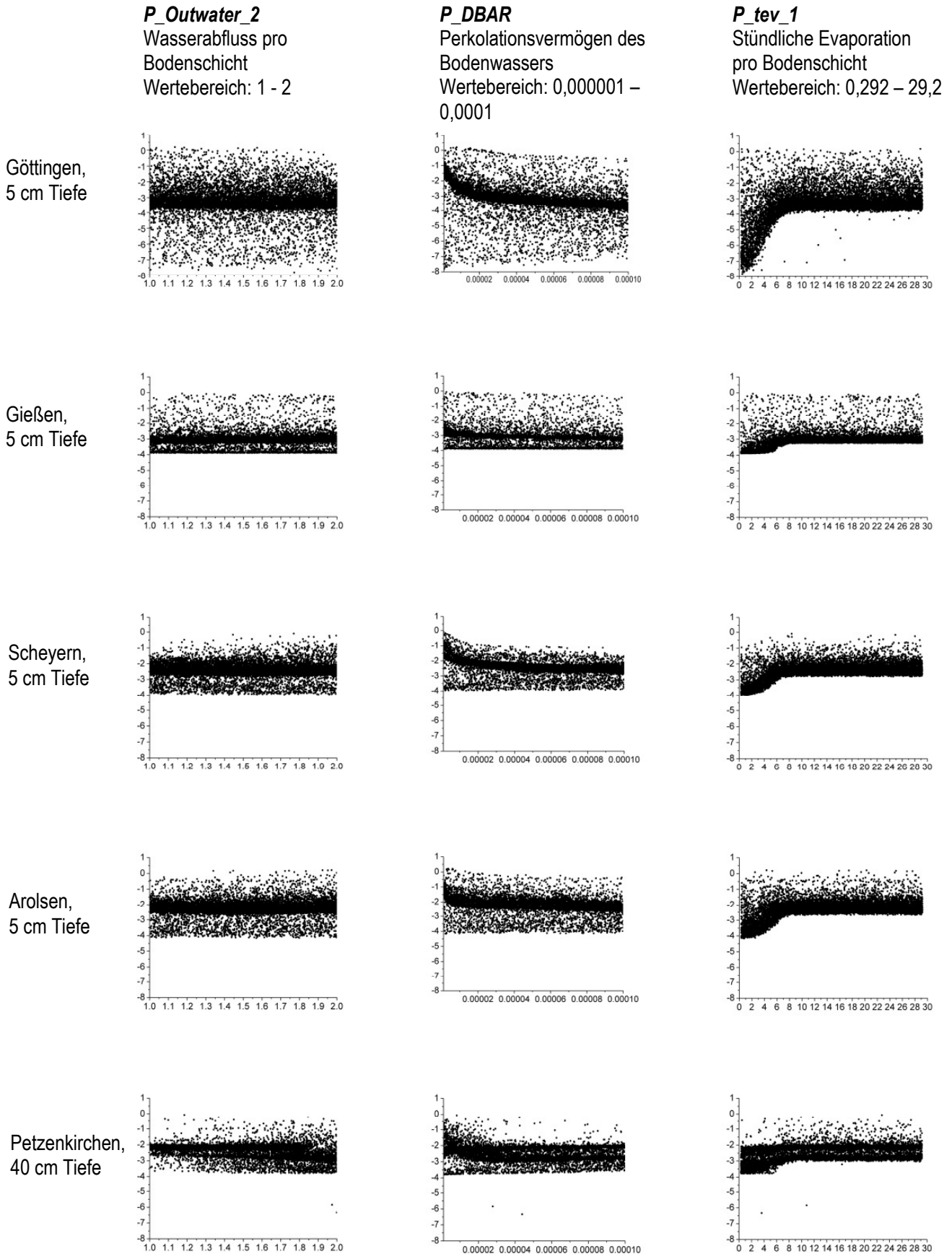


Abb. 17. Punktgraphen der sensitiven Parameter *P_Outwater_2*, *P_DBAR* und *P_tev_1* des Bodenwassermoduls. Für die Flächen in Göttingen, Gießen, Scheyern, Arolsen und Petzenkirchen. Den gezogenen Parameterwerten ist das Effizienzkriterium der Modellergebnisse nach Nash und Sutcliffe, *E*, gegenübergestellt worden. Abszisse = ausgewählte Wertebereich der jeweiligen Parameter. Ordinate = Nash-Sutcliffe-Effizienz *E*, ausgewählter Abschnitt: -8,0 – 1,0.

Wasserabfluss pro Bodenschicht und Stunde

Das zuvor beschriebene Verhalten zeigt sich deutlich bei dem Parameter $P_OutWater_2$ aus der Berechnung des stündlichen Wasserabflusses pro Bodenschicht. Für die Simulationen auf den Standorten Göttingen, Gießen und Arolsen sind sämtliche Effizienzkriterien über den gesamten Parameterraum verteilt. Eine leichte Tendenz, dass sich um einen bestimmten Parameterwert bessere Effizienzkriterien gruppieren, ist für die Untersuchungsflächen Scheyern und Petzenkirchen zu beobachten. Dort deutet sich an, dass mit Werten für $P_OutWater_2 > 1,4$ höhere Übereinstimmungen zwischen gemessenen und simulierten Bodenwassergehalten erzielt werden können.

Ähnliches kann auch für den Parameter $P_OutWater_1$ (Wasserabfluss pro Bodenschicht und Stunde) beobachtet werden. Dabei ist bei diesem Parameter für die Petzenkirchener Untersuchungsfläche eine leichte Akkumulation von besseren Effizienzkriterien für Parameterwerte $< 72,0$ zu sehen (vgl. Tab. 20).

Perkulationsvermögen des Bodenwassers

Für den Parameter P_DBAR aus der Berechnung des Perkulationsvermögens des Bodenwassers ist tendenziell ein Optimum in dem gewählten Parameterraum zu finden. Es liegen vermehrt höherwertige Effizienzkriterien bei Parameterwerten unterhalb des Ausgangswertes von 0,00001 vor (0 und Tab. 20). Dieses ist bei den Simulationsergebnissen aller verwendeten Referenzflächen zu sehen. Besonders ausgeprägt ist diese Akkumulation für die Versuchsfelder von Scheyern und Petzenkirchen.

Stündliche Evaporation pro Bodenschicht

Verglichen mit den abgebildeten Punktgraphen der übrigen Parameter verhält sich der Parameter aus der stündlichen Evaporationsberechnung einer Bodenschicht gegenläufig. Bei Parameter P_tev_1 ist deutlich zu erkennen, dass mit Werten < 3 die Anzahl der Modellergebnisse mit schlechteren Effizienzkriterien deutlich zunimmt. Die besten Modellrealisationen werden beim Originalwert (2,92) erzeugt, wobei eine deutliche Akkumulation vieler guter Modelleffizienzen fehlt. Allerdings sind höhere Simulationsergebnisse über den gesamten Parameterraum verteilt (0 und Tab. 20).

Tab. 20. Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse mit den sensitiven Parameter der Bodenwasserberechnung. Dargestellt ist inwieweit bei den Parametern auf einer der Untersuchungsflächen eine Ansammlung (hier Optimum) guter / besserer Modellrealisationen bei einem bestimmten Wert aus dem gewählten Werteraum vorzufinden ist.

Parameter	Berechnung	Wert	Wertebereich	Optimum
<i>P_DayPET_1</i>	tägliche potenzielle Evapotranspiration	0,015	0,0015 – 0,15	tendenziell < 0,015
<i>P_DayPET_2</i>	tägliche potenzielle Evapotranspiration	1,6	0,16 – 16,0	tendenziell < 0,16
<i>P_OutWater_1</i>	Wasserabfluss pro Bodenschicht & Stunde	72,0	7,0 – 72,0	tendenziell < 72,0; kein Optimum
<i>P_Outwater_2</i>	Wasserabfluss pro Bodenschicht & Stunde	1,4	1,0 – 2,0	tendenziell > 1,4; kein Optimum
<i>P_DBAR</i>	Perkolationsvermögen des Bodenwassers	0,00001	0,000001 – 0,0001	tendenziell < 0,00001
<i>P_tev_1</i>	stündliche Evaporation pro Bodenschicht	2,92	0,292 – 29,2	tendenziell + / - 2,92; kein Optimum
<i>P_tev_2</i>	stündliche Evaporation pro Bodenschicht	1,43	0,143 – 14,3	kein Optimum

5.2.3.2 Darstellung der Parameterunsicherheit der modellierten Bodenwassergehalte

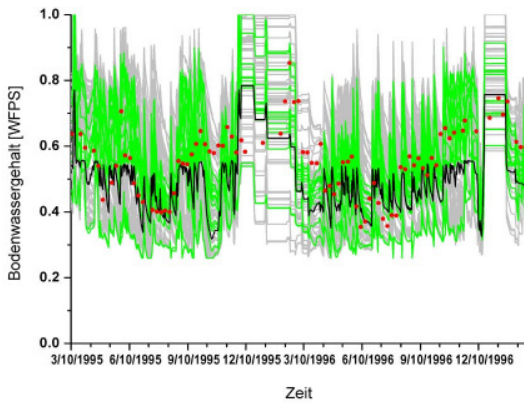
Um die Auswirkungen der veränderten Parameterwerte bei der Berechnung des Bodenwassers zu veranschaulichen, wurden aus den 10.000 durchgeführten Simulationsläufen der Unsicherheitsanalyse die fünf Parameterkombinationen pro Fläche und Gütemaß gewählt, deren Modellergebnisse die besten Effizienzkriterien erzielten. Die im Rahmen der Unsicherheitsanalyse veränderten Parameterwerte führt zu einer leichten Verbesserung der berechneten Bodenfeuchtigkeit in DNDC. Für die Standorte Göttingen und Arolsen können Effizienzen von $E = 0,2$ und $E = 0,29$ erreicht werden. Dabei wird deutlich, dass die Berechnung des Bodenwassers mit Hilfe der ursprünglichen Parameterwerte keine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Bodenwassergehalten erzielt. Alle Standorte zeigen für die Werte von $DNDC_{original}$ Effizienzen für den berechneten Bodenwassergehalt von $E < 0$, im besten Fall wird $E = - 0,18$ (vgl. Tab. 21, Göttingen) errechnet.

Tab. 21. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse des Bodenwassergehalts. Dargestellt sind für alle Untersuchungsflächen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte (original) sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse (UnsA) mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten. (E = Nash-Sutcliffe-Effizienz; d = Factor of Agreement; R^2 = Bestimmtheitsmaß und $RMSE$ = Root Mean Square Error).

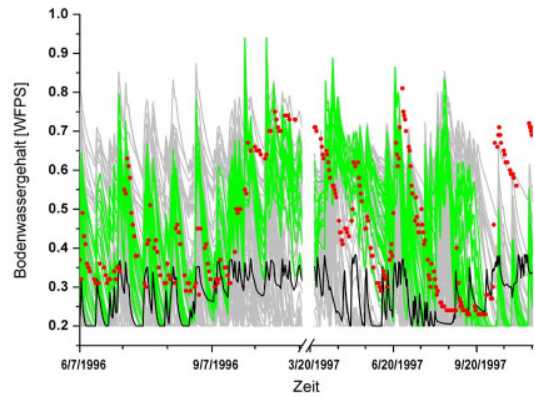
Modell- effizienz	Göttingen, 5 cm		Gießen, 5 cm		Scheyern, 5 cm		Arolsen, 5 cm		Petzenkirchen, 40 cm	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	-0,18	0,20	-1,94	-0,06	-1,65	-0,09	-1,08	0,29	-2,06	-0,07
D	0,69	0,69	0,48	0,57	0,43	0,38	0,51	0,68	0,45	0,77
R^2	0,31	0,24	0,17	0,11	0,01	0,12	0,21	0,32	0,00	0,36
RMSE	0,11	0,10	0,27	0,16	0,45	0,29	0,32	0,17	0,15	0,09

Aus der Darstellung der täglichen Bodenwassergehalte über den gesamten Messzeitraum ist deutlich zu erkennen, dass die ursprüngliche Modellversion von DNDC für vier der fünf Standorten eine generell zu geringe Bodenfeuchtigkeit simuliert (vgl. Abb. 18, Standorte Gießen, Scheyern, Arolsen und Petzenkirchen). Weiterhin ist ersichtlich, dass der jahreszeitliche Verlauf des Bodenwassergehaltes bzw. die Abtrocknung des Bodens und seine Wiedervernässung nicht korrekt abgebildet werden. Durch die Modifikation der Modellparameter in $DNDC_{UnsA}$ wird grundsätzlich die Simulation des Wassergehalts des Bodens verbessert. An den Standorten in Gießen und Petzenkirchen sind nach Durchführung der Unsicherheitsanalyse deutlich bessere Übereinstimmungen im Jahresverlauf zwischen gemessenen und simulierten Bodenwassergehalten zu beobachten.

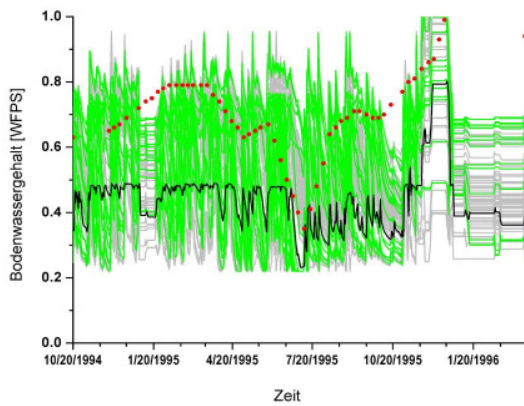
Göttingen, 5 cm Bodentiefe



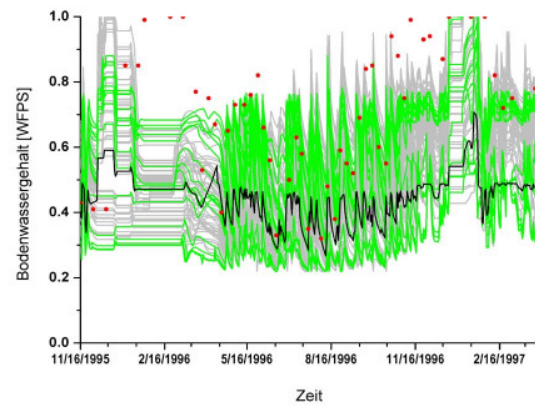
Gießen, 5 cm Bodentiefe



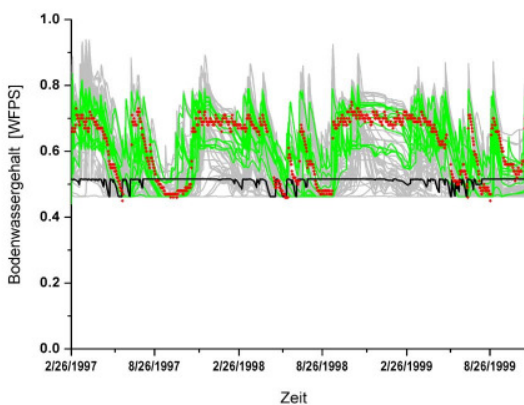
Scheyern, 5 cm Bodentiefe



Arolsen, 5 cm Bodentiefe



Petzenkirchen, 40 cm Bodentiefe



- Messung
- DNDC Simulationen, original
- DNDC Simulationen, UnsA, eigener Standort
- DNDC Simulationen, Kreuzvalidierung, andere Standorte

Abb. 18. Simulierte und gemessene Bodenwassergehalte für die Standorte Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen in 5 cm Bodentiefe sowie für Petzenkirchen in 40 cm Bodentiefe. Dargestellt sind die Ergebnisse der Bodenfeuchtheitsberechnung von DNDC mit den ursprünglichen Parameterwerten ($DNDC_{original}$, schwarze Linie), denen aus der Unsicherheitsanalyse für den jeweiligen Standort ($DNDC_{UnsA}$, grüne Linien) sowie denen aus den Analysen der anderen Standorte ($DNDC_{Kreuzvalidierung}$, graue Linien). Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (rote Punkte).

Neben diesen positiven Auswirkungen sind allerdings auch starke Überschätzungen der Bodenwassergehalte zu registrieren. Dieses macht sich besonders auf den Flächen in Göttingen und Scheyern bemerkbar. Bemerkenswert ist ebenfalls, dass der Bodenwassergehalt in den Wintermonaten bei den Standorten Göttingen, Scheyern und Arolsen sprunghaft ansteigt. Für diese Zeit werden höchste Wassergehalte auch für längere Zeiträume prognostiziert. Ebenso plötzlich wie der Anstieg des Bodenwassers ist dessen Abnahme auf deutlich geringere Gehalte, deren Niveaus ebenfalls über eine längere Zeit konstant bleiben, bevor wieder ein dynamischerer Verlauf der Bodenfeuchtigkeit simuliert wird (Abb. 18). Während sich in $DNDC_{original}$ die Bodenwassergehalte nur durch wenig Dynamik auszeichnen, ist in $DNDC_{UnSA}$ ein starker sowie sehr kurzfristiger Wechsel von hohen Wassergehalten auf niedrige - und umgekehrt - zu erkennen. Eine Dynamik solchen Ausmaßes ist in den Messungen nicht zu finden.

Die Übertragbarkeit der Parameter wurde analog zum Vorgehen beim Bodentemperaturmodul getestet, indem die für einen Standort ermittelten Parametersätze in einem Kreuzvergleich auch auf den anderen Standorten eingesetzt wurden. Hierbei zeigt sich, dass die Übertragung von veränderten Parametern eines Standortes auf andere Standorte auch bei der Berechnung des Bodenwassergehaltes zu starken Abweichungen führt (Abb. 18). Zwar wird die Dynamik von Vernässung und Abtrocknung des Bodens besser als bei der Paramatereinstellung der $DNDC_{original}$ Version wiedergegeben. Allerdings werden für alle Flächen mit den übertragenen Parametern deutliche Über- wie auch Unterschätzungen der Bodenfeuchtigkeit simuliert.

5.2.3.3 Auswirkungen der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern der Bodenwasserberechnung auf die von DNDC simulierten CO₂-Emissionen

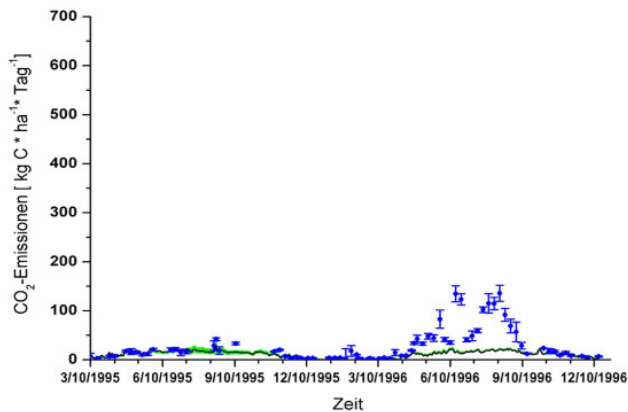
Die Veränderung der Parameter im Bodenwassermodul von DNDC_{UnsA} hat keinen nennenswerten Einfluss auf die simulierten CO₂-Emissionen (Tab. 22). Lediglich bei den Untersuchungsflächen in Scheyern und Arolsen ist ein leichter Anstieg des Factor of Agreement d und des Bestimmtheitsmaßes R^2 zu erkennen. Gleiches ist aus der Darstellung der CO₂-Emissionen in täglicher Auflösung ersichtlich (Abb. 19). Die Veränderung der Parameterwerte durch die Unsicherheitsanalyse bedingt auch hier wieder nur geringe Veränderungen bei den simulierten CO₂-Emissionen der verschiedenen Standorte. Auch zeichnen sich bei der Übertragung der angepassten Parameterwerte eines Standortes auf die anderen Standorte (Kreuzvalidierung) keine maßgeblichen Änderungen ab. Falls dadurch Veränderungen der berechneten CO₂-Emissionen bedingt werden, sind sie so gering, dass sie in der Abb. 19 von den Ergebnissen von DNDC_{original} (schwarze Linie) und DNDC_{UnsA} (grüne Linie) überdeckt werden.

Auch bei der Betrachtung der Auswirkung veränderter Parameterwerte der Bodenfeuchtigkeitsberechnung auf die CO₂-Emissionen wird ersichtlich, dass die beobachteten und simulierten CO₂-Emissionen generell stark voneinander abweichen (Abb. 19).

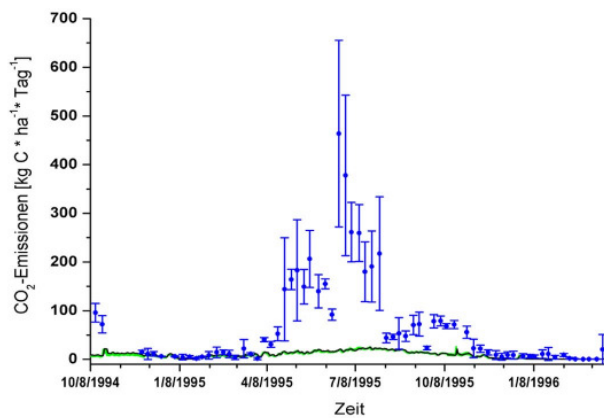
Tab. 22. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der CO₂-Emissionen nach Veränderungen im Bodenwassermodul. Dargestellt sind für die Untersuchungsflächen in Göttingen, Scheyern und Arolsen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte (original) sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse (UnsA) mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten. (E = Nash-Sutcliffe-Effizienz; d = Factor of Agreement; R^2 = Bestimmtheitsmaß und RMSE = Root Mean Square Error).

Modell-effizienz	Göttingen, CO ₂		Scheyern, CO ₂		Arolsen, CO ₂	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	0,03	0,03	-0,40	-0,40	0,13	0,17
d	0,47	0,47	0,45	0,46	0,62	0,63
R^2	0,38	0,38	0,52	0,55	0,80	0,80
RMSE	32	32	107	107	26	26

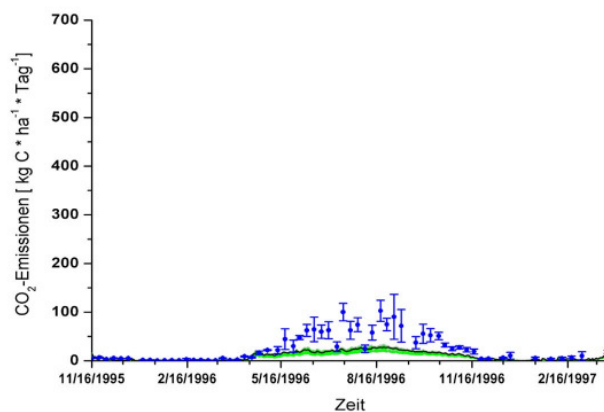
Göttingen



Scheyern



Arolsen



- Messung
- DNDC Simulationen, original
- DNDC Simulationen, UnsA, eigener Standort
- DNDC Simulationen, Kreuzvalidierung, andere Standorte

Abb. 19. Simulierte und gemessene CO₂-Emissionen in täglicher Auflösung für die Standorte Göttingen, Scheyern und Arolsen. Die schwarzen Linien zeigen den simulierten CO₂-Verlauf über den gesamten Untersuchungszeitraum, der mit den ursprünglichen Parameterwerten kalkuliert wurde (DNDC_{original}). Die grünen (eigener Standort, DNDC_{UnsA}) und grauen (andere Standorte, DNDC_{Kreuzvalidierung}) Kurven stellen die CO₂-Verläufe dar, welche aus der Unsicherheitsanalyse resultieren. Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (blaue Punkte). Die blau eingezeichneten Balken stellen die Standardabweichungen der jeweiligen Messwerte dar.

5.2.3.4 Auswirkungen der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern der Bodenwasserberechnung auf die von DNDC simulierten N₂O-Emissionen

Die Auswirkungen der variierten Parameter in der Bodenwasserberechnung auf die Lachgasemissionen fallen auf den einzelnen Untersuchungsflächen sehr verschieden aus. Zunächst aber zeigt ein Vergleich der Nash-Sutcliffe-Effizienzen E , dass bei fast allen Flächen schon vor den Veränderungen der Parameter im Bodenwassermodul keine hohen Übereinstimmungen zwischen gemessenen und simulierten N₂O-Emissionen vorzufinden sind (Tab. 23). Eine Ausnahme stellt dabei der Standort Göttingen dar. Die beste Modellvorhersage bzgl. der emittierten N₂O-Emission für diesen Untersuchungsstandort erreicht eine Effizienz von $E = 0,23$.

Durch die Veränderung der Parameter des Bodenfeuchtemoduls im Rahmen der Unsicherheitsanalyse kommt es teils zur Verschlechterung, teils zur Verbesserung der Modelleffizienzen. Für die Standorte in Göttingen und Scheyern weisen alle verwendeten Effizienzkriterien auf eine Verminderung der Übereinstimmung zwischen den gemessenen und simulierten N₂O-Emissionen hin. Für die Flächen in Gießen und Arolsen werden hingegen die Modellrealisationen der N₂O-Emissionen verbessert, wobei bei diesen beiden Fällen zu beachten ist, dass DNDC generell extrem abweichende N₂O-Emissionen - verglichen mit den gemessenen Emissionen - berechnet (Tab. 23).

Tab. 23. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der N₂O-Emissionen nach Veränderungen im Bodenwasserhaushaltsmodul. Dargestellt sind für die Untersuchungsflächen in Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte (original) sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse (UnsA) mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten. (E = Nash-Sutcliffe-Effizienz; d = Factor of Agreement; R^2 = Bestimmtheitsmaß und $RSME$ = Root Mean Square Error).

Modell-effizienz	Göttingen, N ₂ O		Gießen, N ₂ O		Scheyern, N ₂ O		Arolsen, N ₂ O	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	0,23	-4,37	-1038	-889	-0,56	-0,67	-154	-72
d	0,80	0,35	0,001	0,0001	0,59	0,46	0,11	0,16
R^2	0,42	0,05	0,003	0,003	0,15	0,05	0,04	0,04
$RSME$	5,77	15,24	102	95	39	40	102	70

Die Abbildung der täglichen simulierten N₂O-Emissionen, verglichen mit den Messungen, bestätigt die Darstellung der Modelleffizienzen. Für alle Flächen berechnet DNDC deutlich zu hohe N₂O-Emissionen mit teilweise extremen Emissionspeaks, die bei den Messungen nicht vorzufinden sind. Durch die Modifikation der Parameterwerte im Bodenwassermodul kommt es bei den Berechnungen der N₂O-Emissionen für die Flächen in Göttingen, Scheyern und teilweise in Arolsen zu verstärkten Lachgasemissionen.

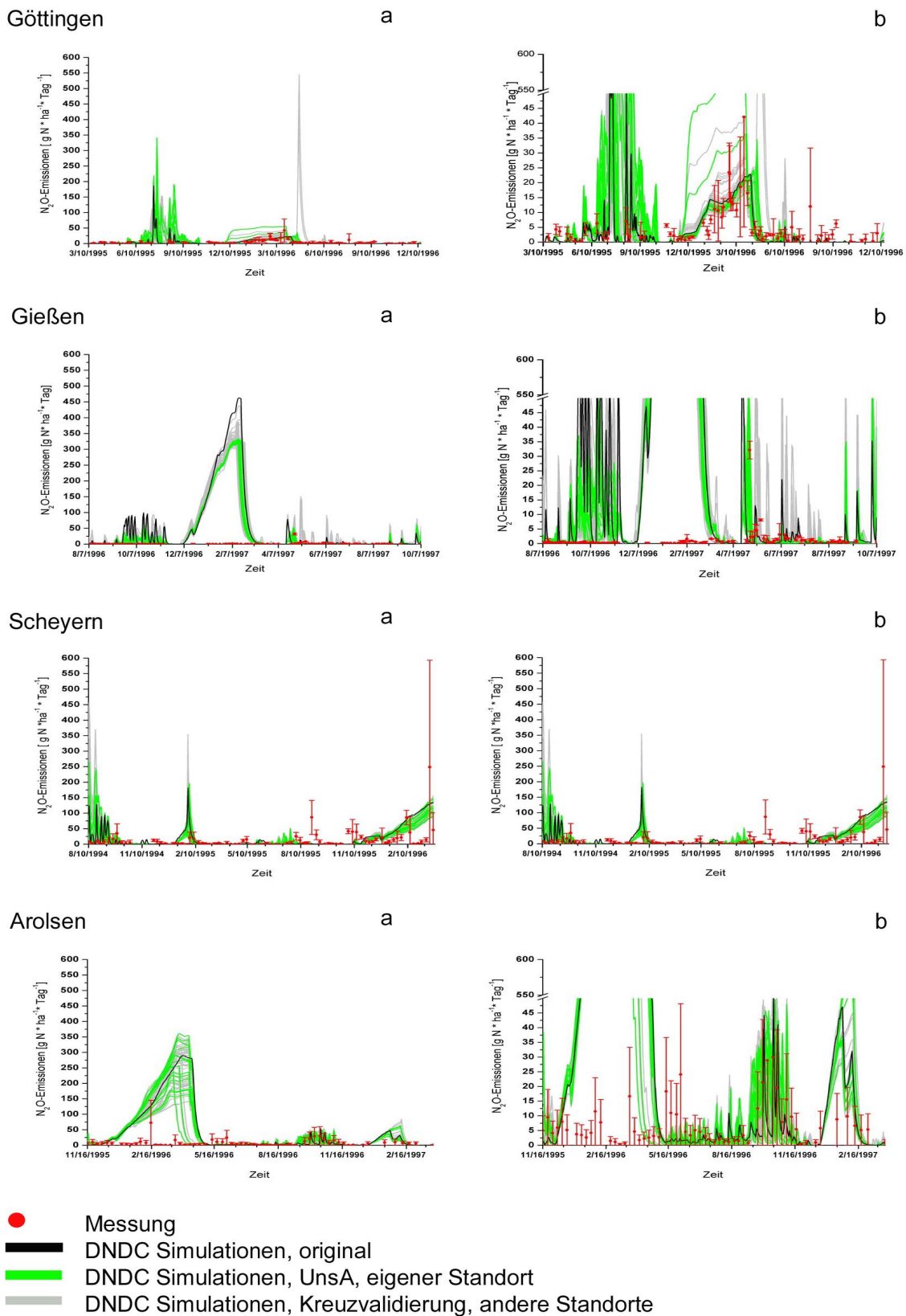


Abb. 20. Simulierte und gemessene N_2O -Emissionen in täglicher Auflösung für die Standorte Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen. Die Abbildung a eines jeden Standortes zeigt den vollständigen Emissionsverlauf. In Abbildung b wurde die Ordinate für eine detaillierte Darstellung unterbrochen. Die schwarze Line zeigt den N_2O -Verlauf, der mit den ursprünglichen Parameterwerten kalkuliert wurde ($\text{DNDC}_{\text{Original}}$). Die grünen (eigener Standort, $\text{DNDC}_{\text{UnsA}}$) und grauen (andere Standorte, $\text{DNDC}_{\text{Kreuzvalidierung}}$) Kurven stellen die N_2O -Verläufe dar, welche aus der Unsicherheitsanalyse resultieren. Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (rote Punkte). Die roten Balken zeigen die Standardabweichung der jeweiligen Messung.

Auf den Flächen in Göttingen, Scheyern und Arolsen werden durch die Variation der Parameter die Emissionen dahingehend verändert, dass die schon bestehenden extremen N_2O -Emissionspeaks deutlich verstärkt werden. Deutlich ist dieses für die Göttinger Fläche im Sommer und Herbst, für die Fläche in Scheyern im Herbst sowie bei dem Arolsener Standort im Herbst und Spätherbst zu beobachten (Abb. 20). Für die Referenzfläche in Gießen werden durch die neu generierten Parameterwerte von $\text{DNDC}_{\text{UnsA}}$ verminderte N_2O -Emissionen berechnet. Manche Parameterkombinationen bewirken auch für den Untersuchungsstandort in Arolsen eine Minderung der extremen N_2O -Emissionen im Winter und Frühjahr.

Beim Kreuzvergleich der bei der Unsicherheitsanalyse generierten Parameterkombinationen ist nur für die N_2O -Emission auf den Flächen in Göttingen und Gießen eine Veränderung des ursprünglichen Emissionsmusters zu erkennen.

Insgesamt betrachtet bewirkt eine Veränderung der Parameter des Bodenwassermoduls einen weniger starken N_2O -Emissionsanstieg verglichen mit dem im Bodentemperaturmodul. Nach der Modifikation von Parametern im Bodentemperaturmodul werden Emissionsspitzen von bis zu $6000 \text{ g N}_2\text{O-N Tag}^{-1} \text{ ha}^{-1}$ simuliert. Die nach der Veränderung der Parameterwerte der Bodenwasserhaushaltsberechnung auftretenden Extremwerte liegen bei $550 \text{ g N}_2\text{O-N Tag}^{-1} \text{ ha}^{-1}$ (vgl. Abb. 16 und Abb. 20).

5.2.4 Ergebnisdiskussion der Unsicherheitsanalyse bezüglich der Bodenwassergehaltsberechnung

5.2.4.1 Punktgraphen

Die Punktgraphen der sensitiven Parameter aus den Bodenwassergehaltsberechnungen zeigen, dass bei vielen Parametern zwar Tendenzen, allerdings keine eindeutigen optimalen Wertebereiche gefunden werden können. Wie auch im Bodentemperaturmodul von DNDC, gibt es im Bodenwassermodul zahlreiche Parameterwerte und -kombinationen, die zu gleichwertigen Modellrealisationen führen. Somit tritt in diesem Fall ebenfalls das bereits beschriebene Phänomen der Equifinalität auf (Beven & Binley 1992, Schulze et al. 1999, Zak & Beven 1999 und Beven & Freer 2001).

5.2.4.2 Modellierte Bodenwassergehalte

Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse zeigen, dass auch nach einer Veränderung der Bodenfeuchtigkeitsparameter in DNDC nur geringe Übereinstimmungen zwischen den gemessenen und simulierten Werten bestehen. Für einige Flächen lagen relativ wenige Messdaten (Messungen in großen zeitlichen Abständen) der Bodenwassergehalte vor. Dieses kann einen negativen Effekt auf die Modelleffizienz ausüben, da u.a. dann Messfehler oder Extremwerte ein deutlich stärkeres Gewicht bei statistischen Auswerteverfahren erhalten. Wahrscheinlicher ist aber, dass DNDC prinzipiell Probleme bei der Simulation von Bodenwassergehalten hat. Durch die Veränderung der Parameter der Bodenfeuchtigkeitsberechnung kann der in DNDC kalkulierte Bodenwassergehalt generell erhöht werden. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der Wasserverlust, besonders beeinflusst durch die Parameter P_DayPET , $P_OutWater$ und P_DBAR (für die Flächen in Gießen, Scheyern und Arolsen), aus dem betrachteten Bodenbereich verringert wird.

Die teilweise sehr starken und kurzfristigen Schwankungen der Bodenfeuchtigkeit kann durch die Veränderung der Parameter im Rahmen der Unsicherheitsanalyse jedoch nicht aufgehoben werden. Daran zeigt sich, dass die Prozesse, die die Abtrocknung sowie den Wasserverlust des Bodens beschreiben, nicht korrekt dargestellt werden. Ein Beispiel dafür ist die Berechnung der potentiellen Evapotranspiration. In DNDC wird dafür der Ansatz von Thornthwaite (1948) verwendet (vgl. Gl. 5.4; Parameter P_DayPET_1 und P_DayPET_2). Im Vergleich zu anderen Verfahren, bspw. des wesentlich komplexeren Ansatzes nach Penman-Monteith, ist dieser Berechnungsansatz relativ einfach. Er basiert auf empirischen Beziehungen zwischen der potenziellen Evapotranspiration, der

Lufttemperatur und der Sonnenscheindauer. Die Gleichung beinhaltet verschiedene standortspezifische Parameter. Eine Anpassung dieser Parameter ist in DNDC jedoch nicht vorgesehen. Aus diesem Grund werden für die Berechnung der Evapotranspiration in DNDC generalisierte Werte vorgegeben, die allerdings nicht für jeden Standort akzeptable Ergebnisse liefern. So soll für Deutschland das Berechnungsverfahren der potenziellen Evapotranspiration nach Thornthwaite unrealistische Werte liefern (M. Schöniger & J. Dietrich 2008). Zudem wird dieses Berechnungsverfahren nur für eine großräumige Verwendung und für die Abschätzung der monatlichen Verdunstungshöhe empfohlen. In DNDC kommt es allerdings in einer deutlich höheren Auflösung – sowohl räumlich als auch zeitlich – zum Einsatz. DNDC ist ein eindimensionales Modell, welches überwiegend auf der Schlagskala angewendet wird. Viele Prozesse im Boden - dazu gehört auch die potentielle Evapotranspiration - werden stündlich berechnet. Der Grund, warum das Verfahren nach Thornthwaite für ein Modell Verwendung findet, das räumlich und zeitlich hochaufgelöst biologische Prozesse darstellt, lässt sich in der weiten Verbreitung und dem vergleichsweise geringen Datenanspruch für das Verfahren nach Thornthwaite vermuten.

Dieses Beispiel bringt das Dilemma von Modellen zum Ausdruck, die zum einen weit verbreitet und einfach anwendbar sein sollen, zum anderen den Anspruch für sich erheben, Prozesse möglichst genau abzubilden. Komplexere Prozesse und Berechnungsschritte fordern oft einen höheren Bedarf an Daten ein, die das Modell initialisieren. Durch einen hohen Bedarf spezieller Eingangsdaten wird jedoch die Anwendbarkeit eingeschränkt, da nicht jeder Anwender über die benötigten Messdaten oder Messinstrumente verfügt. Durch einen geringeren Aufwand an Eingangsdaten wird zwar zunächst die Anwendung und Handhabung des Modells erleichtert, jedoch trägt eine Vereinfachung der Prozessabbildung zu einer höheren Modellunsicherheit bei.

Auch wird für die Berechnung der Bodenfeuchtigkeit in DNDC wie für die der Bodentemperatur anpassungsfähige Faktoren und empirische Koeffizienten verwendet. Bei der Betrachtung der Ergebnisse der Kreuzvalidierung ist für die Bodenfeuchtigkeit ebenfalls deutlich zu erkennen, dass eine Integration solcher Faktoren nicht zur generellen Verbesserung der Modellergebnisse beiträgt. Die starken Abweichungen der Simulationsergebnisse nach der Unsicherheitsanalyse der Parameterwerte eines Standorts zeigen, dass damit lediglich eine Anpassung an einen bestimmten Standort bzw. Überanpassungen des Modells erzielt werden.

Ein ebenfalls zuvor für die Bodentemperatur diskutiertes Problem tritt auch wieder bei der Berechnung des Bodenwassergehaltes auf: die fehlende Möglichkeit, in DNDC für jeden Standort eine individuelle Bodenhorizontfolge und damit verbunden genau Angaben über die physikalische Bodeneigenschaften in das Modell zu integrieren. Denn diese Eigenschaften haben ebenfalls Einfluss auf die Wassermenge, die im Boden gehalten werden kann. Bleibt diese Einflussgröße im Boden bzw. mit zunehmender Bodentiefe unberücksichtigt, so sind Fehler in den Simulationsergebnissen unvermeidlich.

Das langanhaltende gleichbleibende und teilweise hohe Niveau des Bodenwassergehaltes in den Wintermonaten kann wie folgt erklärt werden: Bei Temperaturen unter 0 °C wird ein Gefrieren des Wassers im Boden berechnet. Es liegen, je nach berechneter Bodentemperatur, gefrorenes und nicht gefrorenes Wasser gleichzeitig in einer Bodenschicht vor. Bei der Betrachtung des gesamten Wassergehaltes im Boden werden diese beiden Pools addiert. Eine Überschreitung des wassergefüllten Porenvolumens ($WFPS > 1,0$) zeigt, dass hier anscheinend ein Fehler in der Berechnung vorliegt, der sich in den Wintermonaten offenbart.

Eine Auswirkung der Unterschätzung bei der Berechnung der Bodentemperatur um den Gefrierpunkt (vgl. Kap. 5.2.1.2) offenbart sich bei der Kalkulation der Bodenfeuchtigkeit. So wird bei den von DNDC fälschlich berechneten langanhaltenden Frostperioden ein vollständiges Gefrieren des Bodenwassers kalkuliert. Für diese Zeiträume kommt es im Modell zu einer Festsetzung der Bodenfeuchtigkeit auf ein bestimmtes Niveau, welches jedoch nicht die realen Verhältnisse im Boden widerspiegelt. Deutlich wird dieses, wenn in Abb. 18 die Modellergebnisse der Flächen in Göttingen, Scheyern und Arolsen mit dem Standort in Petzenkirchen verglichen werden. Für die Untersuchungsfläche in Petzenkirchen sind keine gleichbleibenden Bodenwassergehalte zu erkennen, auch nicht während der Frostperiode. Dies ist damit zu erklären, dass in 40 cm Bodentiefe ausschließlich Temperaturen oberhalb des Gefrierpunktes simuliert wurde und somit kein Bodeneis von DNDC kalkuliert werden musste.

5.2.4.3 Auswirkung auf die CO₂-Emissionen

Der Einfluss der veränderten Bodenwassergehalte in $DNDC_{UnsA}$ auf die Kohlenstoffumsätze ist wie im Fall der Bodentemperatur sehr gering. Die durch die Unsicherheitsanalyse bedingte Anhebung der Bodenwassergehalte hatte kaum zu einer Verstärkung der Umsatzprozesse und somit zu keiner stärkeren CO₂-Emission geführt. Zwar scheint es auf den ersten Blick überraschend, dass eine generelle Anhebung der

Bodenfeuchtigkeit nur geringe Auswirkungen auf die CO₂-Emissionen hat, da eine ausreichende Feuchtigkeit im Boden die mikrobielle Aktivität positiv beeinflusst. Jedoch haben verschiedene Untersuchungen zu bodenbürtigen CO₂-Emissionen gezeigt, dass eine Veränderung der CO₂-Emissionen erst bei extremen Bodenwassergehalten eintritt. Ruser et al. (2006) konnten in ihren Untersuchungen an ungestörten Bodensäulen aus landwirtschaftlich genutzten Flächen beobachten, dass unterschiedliche Bodenwassergehalte (40 %, 60 %, 70 % und 90 % WFPS) keine Veränderungen der CO₂-Emissionen hervorrufen. Gleiche Ergebnisse wurden bei Studien zu bodenbürtigen CO₂-Emissionen in Grasland- (Frank et al. 2002) und Waldökosystemen (Drewitt et al. 2002) beobachtet, was zeigt, dass anscheinend fast kein Zusammenhang zwischen der Bodenfeuchtigkeit und den CO₂-Emissionen vorliegt bzw. eine sehr weite Spannweite bzgl. der Bodenfeuchtigkeit besteht, in der optimale Bedingungen für heterotrophes Leben im Boden vorliegen (Ruser et al. 2006). Doran et al. (1990) fanden im überwiegenden Anteil der untersuchten Böden höchste Bodenrespirationsraten zwischen 40 % und 70 % WFPS. Bei Bodenwassergehalten unter 40 % WFPS kam es zur Reduktion der Respiration auf Grund von Wassermangel, bei Gehalten oberhalb von 70 % WFPS wurde die Verringerung der CO₂-Emissionen mit dem Mangel an Sauerstoff begründet. Yu et al. (2008) konnten bei Untersuchungen von Emissionen klimarelevanter Gase (N₂O, CH₄ und CO₂) in einer Hartholzauwe entlang eines hydrologischen Gradienten beobachten, dass die CO₂-Emissionen erst in anmoorigen Bereichen des Waldes deutlich abnahmen. Dort lagen zwar hohe organische Kohlenstoffgehalte im Boden vor, jedoch wurde die Bodenrespiration (CO₂-Produktion) durch fehlende aerobe Bedingungen gehemmt.

Da in DNDC die Bodenwassergehalte auch schon vor der generellen Anhebung durch die Unsicherheitsanalyse sich selten unterhalb von 40 % WFPS befanden und nach der Anhebung des Bodenwassers sich nicht permanent oberhalb von 70 % WFPS befinden, sind demnach Änderungen der CO₂-Emissionen nicht zu erwarten. Dieser Prozess ist in DNDC demnach korrekt abgebildet.

5.2.4.4 Auswirkung auf die N₂O-Emissionen

Die Veränderungen des Bodenwassergehalts durch die Unsicherheitsanalyse bedingen auch wieder starke Abweichungen der N₂O-Emissionen im Vergleich zur ursprünglichen Modellversion. Teilweise hemmt der angehobene Bodenwassergehalt die extremen und frostbedingten N₂O-Emissionen. Dies führt einerseits zur Berechnung von realistischeren Werten, andererseits kann es aber auch zu Unterschätzungen der kalkulierten N₂O-

Emissionen kommen. Ein solches Modellverhalten lässt sich damit erklären, dass höhere Mengen an Wasser die Wärmekapazität des Bodens heraufsetzen und der Boden dadurch langsamer auskühlt und gefriert. Somit wird die Zeitspanne verkürzt, in der der Boden gefroren ist und es wird weniger Bodenfrost bedingtes N_2O kalkuliert. In den übrigen Jahreszeiten werden dagegen die N_2O -Emissionen durch den angehobenen Wassergehalt im Boden auf manchen Untersuchungsflächen verstärkt. Dieser Prozess wird von DNDC im Prinzip richtig dargestellt. Untersuchungen zu N_2O -Emissionen hatten gezeigt, dass der Wassergehalt im Boden (Bodenfeuchtigkeit) mit zu den bedeutendsten Faktoren gehört, welche die N_2O -Produktion und Emission kontrollieren (Davidson 1991 sowie 1993, Ambus & Christensen 1994, Hatano & Sawamoto 1997, Smith et al. 1998, Dobbie et al. 1999, Akiyama et al. 2000, Skiba & Ball 2002, McTaggart et al. 2002).

DNDC zeigt allerdings auch hier Überschätzungen der N_2O -Emissionen. Dabei sieht es so aus, als ob eine mögliche Ursache dafür die teilweise kurzfristigen, überhöhten Bodenwassergehalte sein könnten, die durch die Veränderung der Parameter simuliert wurden. Dieses ist für die Untersuchungsflächen in Göttingen und Scheyern deutlich zu sehen. Für diese Standorte wurden nach der Unsicherheitsanalyse deutlich höhere Wassergehalte (> 80 % WFPS) berechnet, verglichen mit den Wassergehalten, die mit den ursprünglich verwendeten Parameterwerten (20 – 70 % WFPS) erzielt wurden (vgl. Abb. 18). Auf diesen beiden Flächen sind, im Vergleich zur unveränderten Modellversion, überhöhte N_2O -Emissionen zu finden, die nicht im Winter zu Zeiten des Bodenfrosts auftauchen (vgl. Abb. 20). Allerdings ist es fraglich, ob der so dargestellte Prozess richtig ist. Verschiedene Studien zeigen, dass die N_2O -Emission aus Böden nahe der Feldkapazität (bei ca. 60 % WFPS) am stärksten ist (Davidson 1991, Smith et al. 1997, Bouwman 1998, Vor et al. 2003 und Liu et al. 2007), wenn die Prozesse der Nitrifikation und Denitrifikation nebeneinander im Boden ablaufen können. Weitere Untersuchungen ergaben, dass höchste Mengen an emittiertem N_2O bei deutlich höheren Bodenwassergehalten (70 % - 85 % WFPS) beobachtet werden konnten (Clayton et al. 1997, Ruser et al. 1998, Dobbie et al. 1999, Ruser et al. 2006 und Ciarlo et al. 2007). In diesen Studien wurde als verantwortlicher Prozess allein die Denitrifikation identifiziert.

Extrem hohe Wassergehalte bedingen eine zunehmende Anaerobiose. Mit abnehmendem Sauerstoffgehalt sinkt die emittierte Menge an N_2O , da das vorliegende Nitrat zunehmend zu N_2 reduziert wird (Paul & Clark 1996, Ruser et al. 2006 und Yu et al. 2008). Auch konnte eine Aufnahme und Konsumption von N_2O in wassergesättigte Moorböden beobachtet werden (Yu et al. 2008). Wenn DNDC die Prozesse richtig

darstellen würde, müssten sich mit extrem hohen Bodenwassergehalten die berechneten N_2O -Emissionen ($> 85\%$ WFPS) zu Gunsten der N_2 -Produktion verringern und nicht erhöhen.

5.2.5 Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen des C-/N-Umsatzmoduls sowie des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls

Für diesen Teil der Untersuchungen des DNDC Modells wurden sämtliche sensitiven Parameter aus allen betrachteten Modulen in die MC basierten Unsicherheitsanalysen aufgenommen. Im Folgenden wird der Einfluss der dadurch veränderten Parameter auf die CO_2 - wie auch auf die N_2O -Emissionen in den abgebildeten C-/N-Umsatz- und N_2O -bildenden Prozessen dargestellt.

5.2.5.1 Punktgraphen für die Parameter aus der Berechnung des C-/N-Umsatzmoduls und des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls bezüglich der CO_2 -Emissionen

Auch für diese Module wurden alle sensitiven Parameter (bezogen auf die CO_2 -Emissionen) einer MC Simulation unterzogen und den gezogenen Parameterwerten die Nash-Sutcliffe-Effizienz E gegenübergestellt. Wie aus Tab. 24 zu entnehmen ist, wurden für 25 Parameter Punktgraphen erstellt, um zu überprüfen, welche Parameter einen besonders starken Einfluss auf die CO_2 -Emissionen und damit auch auf die C-Umsatzprozesse in DNDC ausüben. Da lediglich für die Standorte Göttingen, Scheyern und Arolsen Messungen von bodenbürtigen CO_2 -Emissionen vorlagen, beschränken sich die Betrachtungen auf die o.g. Standorte. Aus Tab. 24 ist ersichtlich, dass sich lediglich 4 von 25 Parametern (P_dBC , P_Fclay , P_RFMM und $P_dfactor$) durch eine Akkumulation höherer Effizienzkriterien in einem bestimmten Wertebereich hinsichtlich der CO_2 -Emissionen auszeichnen. Die übrigen Parameter zeigen eine überwiegend gleichförmige Verteilung der Modellrealisationen über den gesamten Parameterraum. Sämtliche Parameter, bei denen eine Kumulierung höherer Effizienzkriterien um einen bestimmten Wertebereich beobachtet werden kann, stammen aus dem Modul für die C-/N-Umsatzprozesse. Die zuvor als sensitiv identifizierten Parameter, die in den Nitrifikations- und Denitrifikationsmodulen lokalisiert sind, zeigen kein besonderes Verhalten bzgl. der CO_2 -Emissionen.

Tab. 24. Darstellung der für die Punktgraphen berücksichtigten Parameter aus dem C-/N-Umsatzmodul von DNDC, die für die Standorte Göttingen, Scheyern und Arolsen angefertigt wurden. Die grau hinterlegten Felder machen die Parameter und Flächen kenntlich, bei denen Einflüsse der veränderten Parameter auf die Modelleffizienzen beobachtet werden können.

Parameter	Göttingen	Scheyern	Arolsen
<i>P_DRF</i>			
<i>P_krcvl</i>			
<i>P_dBC</i>			
<i>P_maxClayN</i>			
<i>P_clayc</i>			
<i>P_Fclay</i>			
<i>P_cy</i>			
<i>P_Fleak</i>			
<i>P_doc</i>			
<i>P_RFMM</i>			
<i>P_dfactor</i>			
<i>P_vg</i>			

Im Folgenden werden die Punktgraphen der Parameter *P_DRF*, *P_dBC*, *P:Fclay*, *P_RFMM* und *P_dfactor* (C-Umsatzungsfaktor, Korrekturfaktor für die SOC-Bilanz, Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von Huminstoffen, Bodenfeuchtigkeitsfaktor und Humusumsetzungsfaktor) dargestellt. Der Parameter *P_DRF* ist stellvertretend für alle übrigen Parameter abgebildet, bei denen kein besonderes Verhalten beobachtet werden konnte.

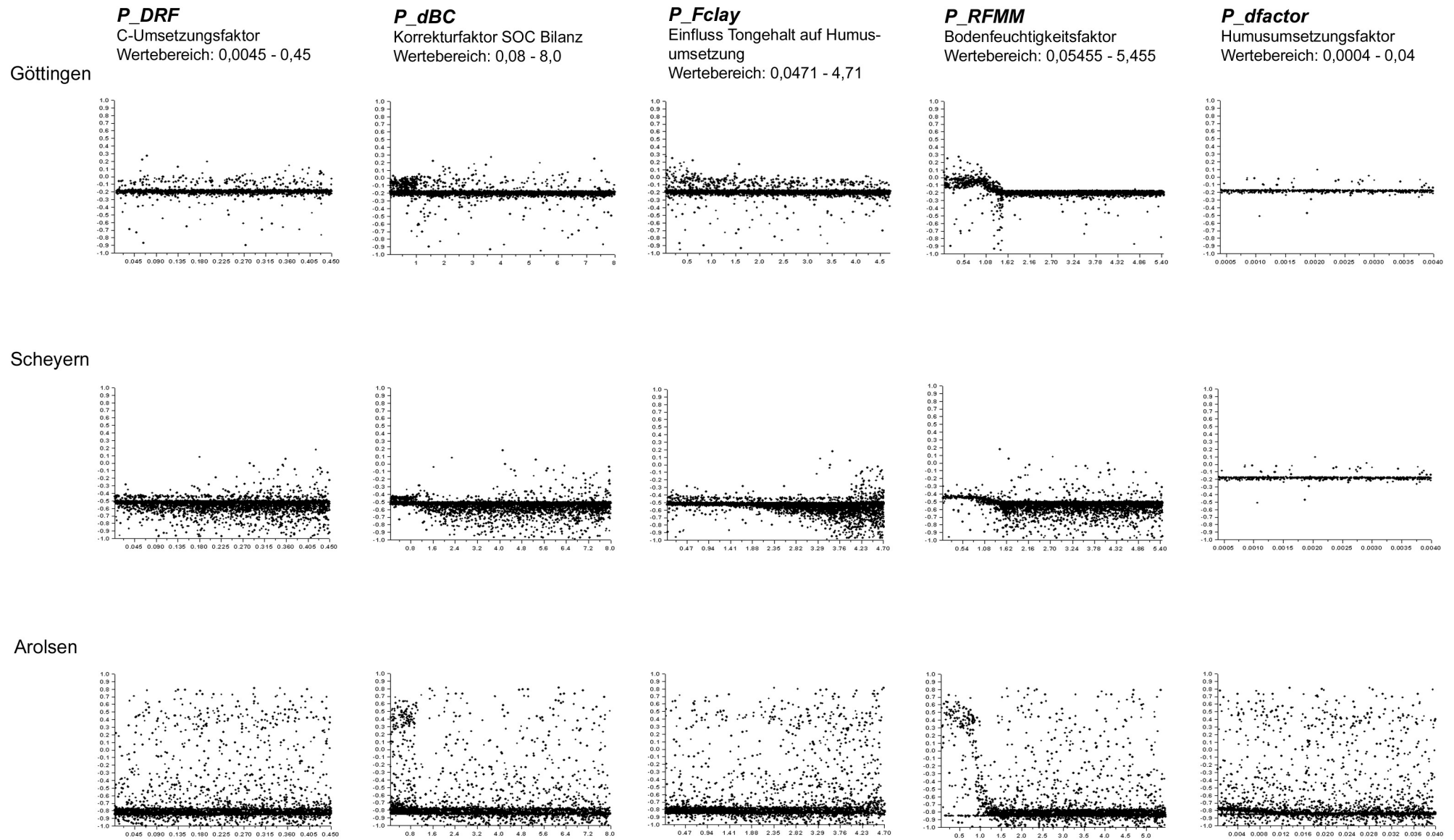


Abb. 21. Punktgraphen der Parameter P_{DRF} , P_{dBC} , P_{Fclay} , P_{RFMM} und $P_{dfactor}$ aus dem C-/N-Umsatzmodul für die Flächen in Göttingen, Scheyern und Arolsen. Den gezogenen Parameterwerten ist die Nash-Sutcliffe Effizienz E für die modellierten CO_2 -Emissionen gegenübergestellt. Abszisse = ausgewählte Wertebereich der jeweiligen Parameter. Ordinate = Nash-Sutcliffe-Effizienz E , ausgewählter Abschnitt: -1,0 – 1,0.

Bei der Betrachtung der Punktgraphen für die ausgewählten Parameter ist auffällig, dass die Effizienzkriterien für die überwiegende Zahl der Modellrealisationen sehr gering ausfallen. Für die meisten Modellergebnisse sämtlicher Parameter wird eine Effizienz erreicht, die auf den Untersuchungsflächen in Göttingen um eine Nash-Sutcliffe Effizienz von $E \sim -0,2$ liegt. Für die Scheyerner Flächen liegen diese zwischen $-0,5 < E < -0,2$. Verglichen mit den Standorten in Göttingen und Scheyern werden auf der Untersuchungsfläche in Arolsen Modellergebnisse kalkuliert, die hohe Übereinstimmungen mit den gemessenen Werten aufzeigen und Effizienzkriterien liefern, die bei $E = 0,9$ liegen. Andererseits zeigen die Punktgraphen, dass auf dieser Untersuchungsfläche eine große Spannweite bzgl. der Modellgütemaße vorliegt und die Mehrzahl der gezogenen Parameterwerte Modellergebnisse liefert, deren Effizienten zwischen $-0,9 < E < -0,7$ liegen (vgl. 0).

Korrekturfaktor der SOC-Bilanz

Für den Parameter P_dBC aus der Berechnung der SOC-Bilanz in DNDC ist eine Akkumulation von höheren Effizienzkriterien in dem Parameterwertebereich von 0,008 bis 0,8 zu finden (0). Dieses konnte bei den Simulationsergebnissen aller Referenzflächen beobachtet werden. Zwar werden bei Parameterwerten $>0,8$ teilweise deutlich bessere Effizienzkriterien erreicht, allerdings zeigt sich bei allen Flächen, dass in dem Bereich zwischen der Untergrenze des Wertebereiches und dem Originalwert von 0,8 deutlich weniger schlechte Modellergebnisse produziert werden, verglichen mit denen des restlichen Parameterraums.

Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung der Huminstoffe

Der Parameter P_Fclay , integriert in den Faktor, der den Einfluss des Tongehaltes auf die Umsetzung von Huminstoffen darstellt, zeigt kein einheitliches Muster auf den verschiedenen Untersuchungsflächen. Für die Göttinger Fläche werden für P_Fclay die besten Modellrealisationen mit Parameterwerten zwischen 0,047 und 0,5 gefunden. Die Fläche in Scheyern zeigt für diesen Parameter beste Modellergebnisse, bzw. Modellgütemaße zwischen den Werten 4,0 und 4,7. Der Originalwert für P_Fclay in DNDC ist 0,471. Gleichzeitig zeigt sich auf der Untersuchungsfläche in Scheyern, dass mit der Zunahme des Parameterwertes nicht nur vermehrt gute, sondern auch zunehmend schlechtere Modellergebnisse generiert werden. Am Standort Arolsen ist für

den Parameter P_{Fclay} eine relativ gleichmäßige Verteilung guter und schlechter Modellrealisationen über den gesamten Parameterraum zu beobachten (0).

Bodenfeuchtigkeitsfaktor

Bei Parameter P_{RFMM} aus der Kalkulation des Bodenfeuchtigkeitsfaktors ist bei allen Untersuchungsflächen eine deutliche Anhebung der Modelleffizienz bei Parameterwerten zwischen 0,05455 (Untergrenze Parameterraum) und 1,0 zu sehen. Der Ursprünglich in DNDC verwendet Wert für diesen Parameter liegt bei 0,5455. Steigen die eingesetzten Parameterwerte über den Wert von 1,0 bis 1,6, ist ein starker Abfall der Modelleffizienz zu beobachten.

Humusumsetzungsfaktor

Die Variation des Wertes von $P_{dfactor}$ verursacht lediglich Reaktionen auf der Untersuchungsfläche in Arolsen. Es ist zwar eine starke Streuung guter und schlechter Modellergebnisse über den gesamten Parameterbereich zu finden, allerdings zeigt sich in der Tendenz, dass zwischen den Werten für $P_{dfactor}$ von 0,0004 und 0,004 (Untergrenze Wertebereich bis Originalwert) bessere Modelleffizienzen erreicht werden.

5.2.5.2 *Auswirkung der Unsicherheitsanalyse mit den Parameter des Bodenklima-, C/N-Umsatz- und Nitrifikations-/Denitrifikationsmoduls auf die von DNDC simulierten CO₂-Emissionen*

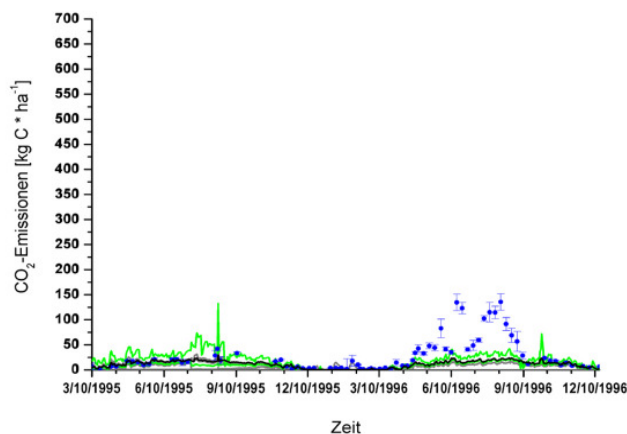
Die mittels der Unsicherheitsanalyse veränderten Parameterwerte der Module Bodenklima, C/N-Umsatz und Nitrifikation/Denitrifikation haben einen deutlichen Einfluss auf die Mineralisation bzw. die CO₂-Emissionen (Tab. 25 und Abb. 22). Es kommt dadurch überwiegend zu einer Optimierung der Effizienzkriterien für die simulierten CO₂-Emissionen (Tab. 25).

Tab. 25. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der CO₂-Emissionen nach Veränderungen im Bodenklima-, C/N-Umsatzmodul sowie in den Nitrifikations- und Denitrifikationsmodulen. Dargestellt sind für die Untersuchungsflächen in Göttingen, Scheyern und Arolsen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte (DNDC_{original}) sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse (DNDC_{UnsA}) mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten. (E = Nash-Sutcliffe-Effizienz; d = Factor of Agreement; R^2 = Bestimmtheitsmaß und $RMSE$ = Root Mean Square Error).

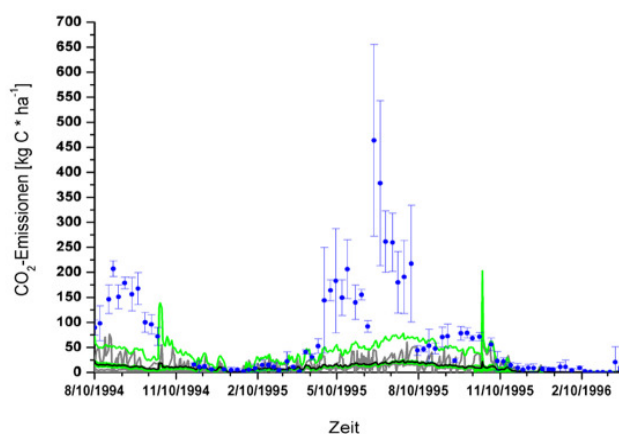
Modell- effizienz	Göttingen, CO ₂		Scheyern, CO ₂		Arolsen, CO ₂	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	0.03	0.29	-0.40	0.18	0,13	0.81
d	0.47	0.74	0.45	0.55	0,62	0.94
R ²	0.41	0.34	0.52	0.41	0,80	0.84
RMSE	32	28	107	82	26	12

Bei Betrachtung der täglichen CO₂-Emissionen zeigt sich allerdings, dass trotz einer Optimierung der Modellgütemaße immer noch deutliche Abweichungen zwischen gemessenen und simulierten Werten auftreten können (Abb. 22). Am Untersuchungsstandort Göttingen ist zu beobachten, dass es nach der Veränderung der Parameterwerte zu Überschätzungen der CO₂-Emissionen zu Beginn des Beobachtungszeitraumes kommt. Weiterhin werden kurzzeitige extreme CO₂-Emissionen im Spätsommer / Herbst simuliert, die in den Messreihen nicht zu beobachten sind. Bei der Kreuzvalidierung zeigt sich, dass Parameterkombinationen keine positiven Effekte auf die kalkulierten CO₂-Emissionen haben, wenn sie auf andere Standorte übertragen werden (Abb. 22).

Göttingen



Scheyern



Arolsen

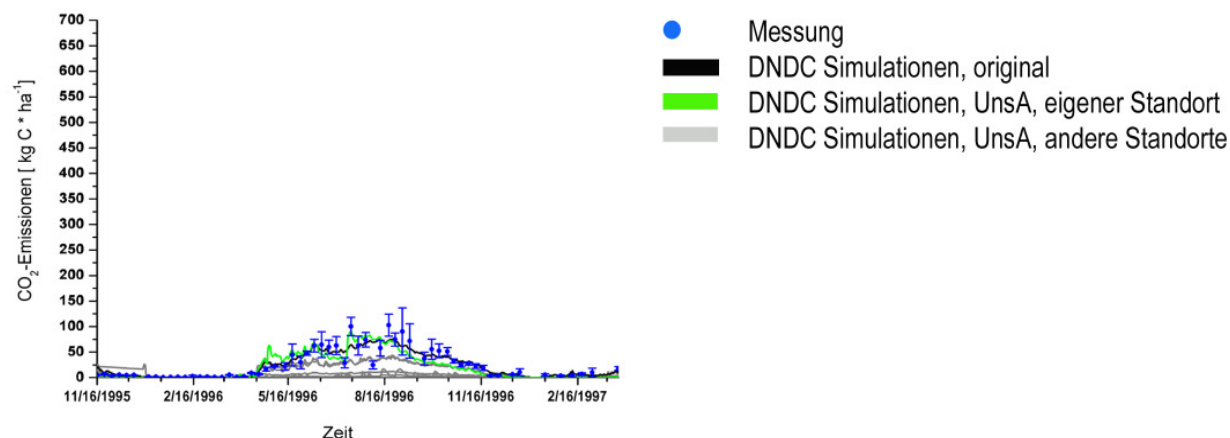


Abb. 22. Simulierte und gemessene CO_2 -Emissionen in täglicher Auflösung für die Standorte Göttingen, Scheyern und Arolsen. Die schwarzen Linien zeigen den simulierten CO_2 -Verlauf über den gesamten Untersuchungszeitraum, der mit den ursprünglichen Parameterwerten kalkuliert wurde ($\text{DNDC}_{\text{original}}$). Die grünen (eigener Standort, $\text{DNDC}_{\text{UnsA}}$) und grauen (andere Standorte, $\text{DNDC}_{\text{Kreuzvalidierung}}$) Kurven stellen die CO_2 -Verläufe dar, welche aus der Unsicherheitsanalyse resultieren. Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (blaue Punkte). Die blau eingezeichneten Balken stellen die Standardabweichungen der jeweiligen Messwerte dar.

Die stärkste Veränderung, welche auf der Unsicherheitsanalyse basiert, ist für den Standort Scheyern zu beobachten. Hier steigt die CO₂-Emission in den Sommermonaten des ersten Untersuchungsjahres deutlich an. Im zweiten Jahr ist ebenfalls eine Erhöhung der CO₂-Emissionen zu verzeichnen, jedoch erreichen die Simulationswerte nicht das Niveau der Messungen. Auffällig ist, dass nach der Unsicherheitsanalyse – jeweils im Herbst – plötzlich kurzzeitige hohe CO₂-Emissionen auftreten, die bei den gemessenen Emissionen in der Form nicht zu beobachten sind (Abb. 22, Scheyern). Parameterkombinationen, die auf den Standort in Scheyern übertragen wurden, bewirken dort eine Vorhersage der CO₂-Emissionen, die stark schwankt.

Widersprüche zeigen sich bei dem Vergleich der Nash-Sutcliffe-Effizienz und der graphischen Darstellung der simulierten CO₂-Emissionen am Standort Arolsen (Abb. 22, Arolsen). Nach der Unsicherheitsanalyse ist ein Anstieg von $E = 0,13$ (DNDC_{orig}) auf $E = 0,81$ (DNDC_{UnsA}) zu verzeichnen (vgl. Tab. 25). In der Darstellung der täglichen CO₂-Emissionen ist allerdings eine deutliche Verbesserung der simulierten CO₂-Emissionen nicht ersichtlich (Abb. 22, Arolsen). Die mit den generierten Parameterwerten berechneten CO₂-Emissionen schwanken um diejenigen CO₂-Emissionen, welche mit den originalen Parameterwerten berechnet wurden. Parameterkombinationen, die nach der Unsicherheitsanalyse von anderen Flächen auf den Arolsener Standort übertragen wurden, bedingen dort eine deutliche Unterschätzung der CO₂-Emissionen (Abb. 22, Arolsen), verglichen mit den gemessenen Werten, sowie mit den ursprünglichen Parametereinstellungen.

5.2.5.3 Punktgraphen für die Parameter aus der Berechnung des C-/N-Umsatzmoduls und des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls bezüglich der N₂O-Emissionen

Für die Untersuchung der Parameter des C-/N-Umsatzmoduls und des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls hinsichtlich ihres Einflusses auf die N₂O-Emissionen wurde bei der Erstellung der Punktgraphen auf gleiche Weise verfahren wie bei der Betrachtung der CO₂-Emissionen. Insgesamt wurden für 26 Parameter Punktgraphen erstellt.

Von den 26 Parametern stammen 12 Parameter aus dem C-/N-Umsatzmodul, die übrigen sind im Nitrifikations- und das Denitrifikationsmodul lokalisiert.

Im Folgenden wird ebenfalls eine Auswahl der zuvor erstellten Punktgraphen dargestellt, da die Majorität der überprüften Parameter keine besonderen Reaktionen hinsichtlich verbesserter Modellrealisationen zeigt. In Tab. 26 und Tab. 27 ist dargelegt, bei welchen Parametern tendenziell eine Akkumulation höherer Effizienzkriterien bei einem bestimmten Parameterwert nach der Unsicherheitsanalyse vorliegt. Nur bei zwei Parametern kann dies beobachtet werden: Im C-/N-Umsatzmodul ist es der Parameter *P_RFMM* (Bodenfeuchtefaktor) für die Standorte Göttingen, Gießen und Scheyern. Im Nitrifikations- und Denitrifikationsmodul ist bei Parameter *P_EEE* (Beitrag der Nitrifikationsrate zur N₂O-Produktion) eine leichte Akkumulation von Effizienzkriterien für den Versuchsstandort in Gießen zu erkennen.

Tab. 26. Darstellung der für die Punktgraphen berücksichtigten Parameter aus dem C-/N-Umsatzmodul von DNDC, die bezüglich der N₂O-Emissionen für die Standorte Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen angefertigt wurden. Die grau hinterlegten Felder machen die Parameter und Flächen kenntlich, bei denen Einflüsse der veränderten Parameter auf die Modelleffizienzen beobachtet werden können.

Parameter	Göttingen	Gießen	Scheyern	Arolsen
<i>P_dBC</i>				
<i>P_DRF</i>				
<i>P_krcvl</i>				
<i>P_max-ClayN</i>				
<i>P_clayc</i>				
<i>P_Fclay</i>				
<i>P_cy</i>				
<i>P_Fleak</i>				
<i>P_doc</i>				
<i>P_RFMM</i>				
<i>P_dfactor</i>				
<i>P_vg</i>				

Tab. 27. Darstellung der für die Punktgraphen berücksichtigten Parameter aus dem Nitrifikations- sowie aus dem Denitrifikationsmodul von DNDC, die bezüglich der N₂O-Emissionen für die Standorte Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen angefertigt wurden. Die grau hinterlegten Felder machen die Parameter und Flächen kenntlich, bei denen Einflüsse der veränderten Parameter auf die Modelleffizienzen beobachtet werden können.

Parameter	Göttingen	Gießen	Scheyern	Arolsen
<i>P_EEE</i>				
<i>P_b1</i>				
<i>P_FpH</i>				
<i>P_DocFrost</i>				
<i>P_aen2o</i>				
<i>P_b2</i>				
<i>P_EFFNO</i>				
<i>P_TE</i>				
<i>P_ymn2o</i>				
<i>P_micro-Growth</i>				
<i>P_aere</i>				
<i>P_mno3</i>				
<i>P_factm</i>				
<i>P_K</i>				

In 0 sind die Punktgraphen für die Parameter *P_aen2o*, *P_RFFM* und *P_EEE* dargestellt. Der Parameter *P_aen2o* (N₂O-Bildung bei der Nitrifikation) ist wieder stellvertretend für alle sensitiven Parameter abgebildet, bei denen keine besonderen Verhaltensweisen nach Veränderung der Parameterwerte durch die Unsicherheitsanalyse vorzufinden sind. Die Betrachtung sämtlicher Punktgraphen zeigt, dass alle Simulationsergebnisse hinsichtlich der N₂O-Emissionen sehr geringe Modellgütemaße erreichen. Für den Untersuchungsstandort in Göttingen wird für den Großteil der modellierten N₂O-Emissionen lediglich eine Nash-Sutcliffe-Effizienz von $E = -0,4$ erreicht. Für vereinzelte Parameterkombinationen können allerdings auch Werte bis zu einer Effizienz von $0,5 < E < 0,6$ ermittelt werden (0). Die Gütemaße der N₂O-Emissionen auf der Gießener Fläche schwanken um $E = -0,1$. Für die Versuchsfläche in Scheyern bewegt sich die Nash-Suttcliffe-Effizienz zwischen $-0,2$ und $0,1$. Die Berechnungen der N₂O-Emissionen für Arolsen ergeben Modelleffizienzen von $-0,9 < E < -0,1$ (0).

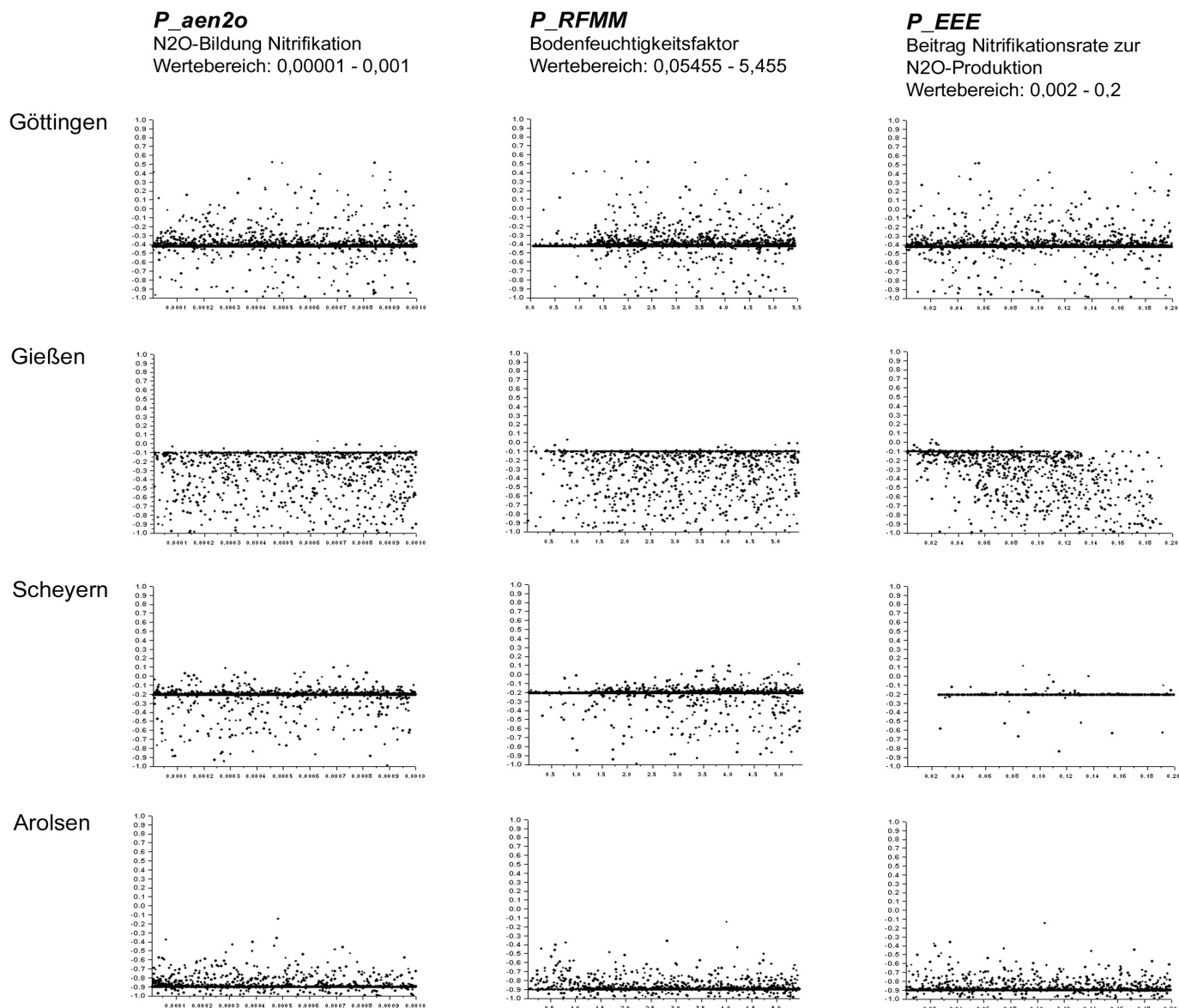


Abb. 23. Punktgraphen der Parameter *P_aen2o*, *P_RFMM* und *P_EEE* aus dem C-/N-Umsatzmodul sowie aus dem Nitrifikations- und dem Denitrifikationsmodul für die Flächen in Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen. Den gezogenen Parameterwerten ist das Effizienzkriterium nach Nash und Sutcliffe *E* für die modellierten N₂O-Emissionen gegenübergestellt worden. Abszisse = ausgewählte Wertebereich der jeweiligen Parameter. Ordinate = Nash-Sutcliffe-Effizienz *E*, ausgewählter Abschnitt: -1,0 – 1,0.

Feuchtigkeitsfaktor

Für den Parameter P_{RFMM} (Feuchtigkeitsfaktor aus dem C-/N-Umsatzmodul) lässt sich für die Versuchsfelder Göttingen, Gießen und Scheyern erkennen, dass in einem Wertebereich von 0,05455 bis 1,0 deutlich weniger akzeptable Simulationsergebnisse auftreten verglichen zu Parameterwerten $> 1,0$ (0). Hier zeigt sich, dass sich DNDC bei der Berechnung der N_2O -Emissionen gegenläufig verhält, verglichen mit den Berechnungen der CO_2 -Emissionen. Dort werden gerade mit Parameterwerten $P_{RFMM} < 1,0$ die höchsten Modelleffizienzen erreicht (vgl. 0 und 0).

Beitrag der Nitrifikationsrate zur N_2O -Produktion

Bei diesem Parameter kann einzig für die Gießener Untersuchungsfläche eine Reaktion auf veränderte Parameterwerte aus der Unsicherheitsanalyse festgestellt werden. Hier ist zu sehen, dass mit Werten aus dem oberen Parameterraum deutlich schlechtere Modelleffizienzen erreicht werden. Die besten Modellrealisationen können mit Parameterwerten zwischen 0,01 und 0,03 und damit nahe dem Originalwert (0,02) erzielt werden (0).

5.2.5.4 Auswirkungen der Unsicherheitsanalyse mit den Parametern des Bodenklima- und C-/N-Umsatzmoduls auf die von DNDC simulierten N_2O -Emissionen

Die veränderten Parameterkombinationen des C-/N-Umsatzmoduls von DNDC zeigen einen extremen Effekt bei den Berechnungen der N_2O -Emission. Wie aus Tab. 28 zu entnehmen ist, nehmen die Modellgütemaße für die N_2O -Emissionen durch die Veränderungen der Parameter bei der Unsicherheitsanalyse drastisch ab. Gerade auf den Untersuchungsflächen in Göttingen und Arolsen sinkt z.B. die Nash-Sutcliffe-Effizienz besonders stark. Für die Versuchsfelder in Scheyern können zwar auch Verringerungen bei den Modellgütemaßen beobachtet werden, allerdings sind dort die Auswirkungen der Unsicherheitsanalyse auf die vorhergesagten N_2O -Emissionen weniger dramatisch (Tab. 28).

Tab. 28. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der N₂O-Emissionen nach Veränderungen im Bodenklima- und C-/N-Umsatzmodul. Dargestellt sind für die Untersuchungsflächen in Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte (DNDC_{original}), sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse (DNDC_{UnsA}) mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten (E = Nash-Sutcliffe-Effizienz; d = Factor of Agreement; R^2 = Bestimmtheitsmaß und $RSME$ = Root Mean Square Error).

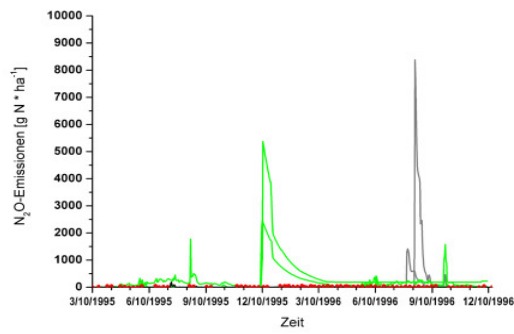
Modell-effizienz	Göttingen, N ₂ O		Scheyern, N ₂ O		Arolsen, N ₂ O	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	0,23	-400	-0,56	-0,21	-154	-10400
d	0,80	0,01	0,59	0,27	0,11	0,01
R ²	0,42	0,01	0,15	0,001	0,04	0,03
RSME	5,77	132	39	34	102	836

Die Darstellung der täglichen berechneten N₂O-Emissionen bestätigt die der Modelleffizienzen. Für die Untersuchungsstandorte in Göttingen und Arolsen berechnet DNDC deutlich zu hohe N₂O-Emissionen mit teilweise extremen Emissionsereignissen von bis zu 9500 g N₂O-N Tag⁻¹ ha⁻¹ (Abb. 24, Arolsen a). Messungen für den Standort in Scheyern zeigen dahingegen keine extremen Veränderungen der N₂O-Emissionen.

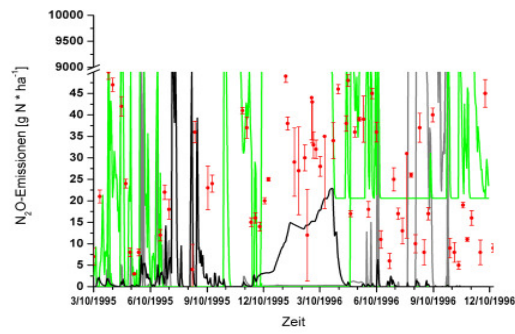
Wie auch schon zuvor bei den Unsicherheitsanalysen anderer Modellmodule (Bodentemperatur und des Bodenwassers, vgl. Abb. 16 und Abb. 20) von DNDC beobachtet werden konnte, treten diese extremen N₂O-Emissionsereignisse an den Zeitpunkten auf, für die das Modell auch schon mit den ursprünglich verwendeten Parameterwerten deutlich zu hohe N₂O-Emissionen berechnet. Für den Standort Göttingen sind diese Extrema in den Sommermonaten (Juli / August) sowie im Winter bis zum Frühjahr (Dezember-April) zu finden. Auf dem Standort Arolsen treten Überschätzungen im September und ebenso von Dezember bis April auf. Auch zeigt sich der zuvor beschriebene Effekt, der bei der Kreuzvalidierung auftritt. Es sind besonders starke Abweichung der vorhergesagten N₂O-Emissionen bei der Übertragung veränderter Parameterwerte auf andere Standorte zu beobachten (vgl. Abb. 24, Arolsen a).

Göttingen

a

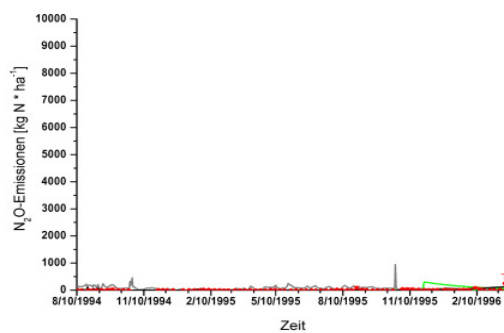


b

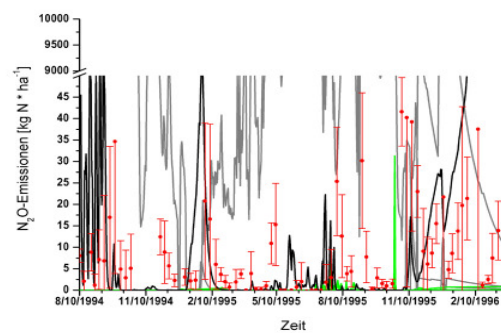


Scheyern

a

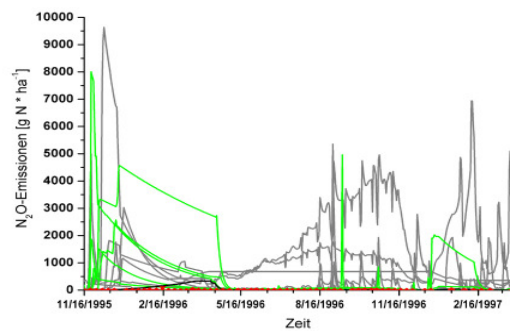


b

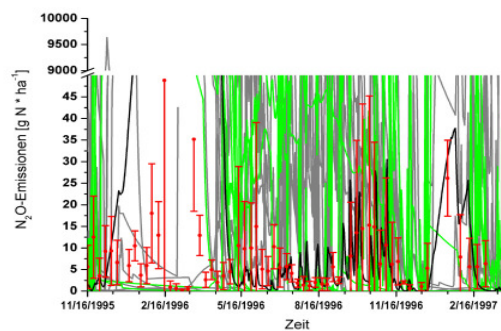


Arolsen

a



b



- Messung
- DNDC Simulationen, original
- DNDC Simulationen, UnsA, eigener Standort
- DNDC Simulationen, UnsA, andere Standorte

Abb. 24. Simulierte und gemessene N_2O -Emissionen in täglicher Auflösung für die Standorte Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen. Die Abbildung a eines jeden Standortes zeigt den vollständigen Emissionsverlauf. In Abbildung b wurde die Ordinate für eine detaillierte Darstellung unterbrochen. Die schwarze Linie zeigt den N_2O -Verlauf, der mit den ursprünglichen Parameterwerten kalkuliert wurde ($\text{DNDC}_{\text{Original}}$). Die grünen (eigener Standort, $\text{DNDC}_{\text{UnsA}}$) und grauen (andere Standorte, $\text{DNDC}_{\text{Kreuzvalidierung}}$) Kurven stellen die N_2O -Verläufe dar, welche aus der Unsicherheitsanalyse resultieren. Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (rote Punkte). Die roten Balken zeigen die Standardabweichung der jeweiligen Messung.

5.2.5.5 Auswirkungen Unsicherheitsanalyse mit den Parametern des Bodenklima-, C-/N-Umsatz- und des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls auf die von DNDC simulierten N₂O-Emissionen

Die Unsicherheitsanalyse der Parameter aller betrachteter Module hat einen positiven Effekt auf die Modellgütemaße der simulierten N₂O-Emissionen. Für alle untersuchten Flächen konnten deutliche Verbesserungen der Modellrealisationen beobachtet werden. Beispielsweise steigt die Nash-Sutcliffe-Effizienz für die Versuchsfläche in Göttingen von $E = 0,23$ auf $E = 0,52$, in Scheyern von $E = -0,56$ auf $E = 0,11$ sowie in Arolsen von $E = -154$ auf $E = -0,15$ an (Tab. 29). Auch wenn durch die Unsicherheitsanalyse die Modelleffizienz verbessert werden kann, ist dennoch ersichtlich, dass die Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung immer noch gering ist (Tab. 29, Gießen).

Tab. 29. Modellgütemaße für die Simulationsergebnisse der N₂O-Emissionen nach Veränderungen im Bodenklima, C-/N-Umsatz- und Nitrifikations-/Denitrifikationsmodul. Dargestellt sind für die Untersuchungsflächen in Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen die Modelleffizienzen der in DNDC ursprünglich verwendeten Zahlenwerte (original) sowie die Modelleffizienzen aus der Unsicherheitsanalyse (UnsA) der Module C-/N-Umsatz, Nitrifikation und Denitrifikation mit der höchsten Übereinstimmung zwischen simulierten und beobachteten Werten (E = Nash-Sutcliffe-Effizienz; d = Factor of Agreement; R^2 = Bestimmtheitsmaß und $RMSE$ = Root Mean Square Error).

Modell-effizienz	Göttingen, N ₂ O		Gießen, N ₂ O		Scheyern, N ₂ O		Arolsen, N ₂ O	
	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA	DNDC original	DNDC UnsA
E	0,23	0,52	-1038	0,03	-0,56	0,11	-154	-0,15
d	0,80	0,87	0,001	0,38	0,59	0,54	0,11	0,49
R ²	0,42	0,60	0,003	0,1	0,15	0,17	0,04	0,12
RMSE	6	5	102	3	39	29	102	9

Die Darstellung der N₂O-Emissionen in täglicher Auflösung zeigt teilweise ein gegensätzliches Bild, verglichen mit dem, was die Werte der Effizienzkriterien aus Tab. 29 darstellen. Die Abbildungen zeigen, dass sehr starke Abweichungen (Überschätzungen) der N₂O-Emission von DNDC berechnet werden (Abb. 25, Gießen). Neben solchen Extremen sind allerdings auch deutlich geringere Abweichungen von simulierten und gemessenen N₂O-Emissionen ersichtlich. Gerade für die Flächen in Göttingen und Arolsen werden nach Veränderung der Parameter von DNDC_{UnsA} deutlich geringere N₂O-Emissionen berechnet als mit denen von DNDC_{original}. Auch ist wiederum zu sehen, dass die extremen N₂O-Emissionen überwiegend zu den Zeitpunkten im Jahr auftreten, zu denen DNDC_{original} vor der Unsicherheitsanalyse die emittierten Mengen von N₂O ebenfalls überschätzt (Abb. 25, Göttingen, Gießen und Arolsen). Für die Fläche in Scheyern können teilweise andere Muster im Auftreten der extremen N₂O-Emissionen

erkannt werden (Abb. 25). Die Übertragung der Parametersätze auf die anderen Standorte (DNDC_{Kreuzvalidierung}) führt auch wieder zu deutlichen Abweichungen der Simulationsergebnisse für N₂O, verglichen mit denen, die auf an den Standort angepasste Parameterkombinationen basieren.

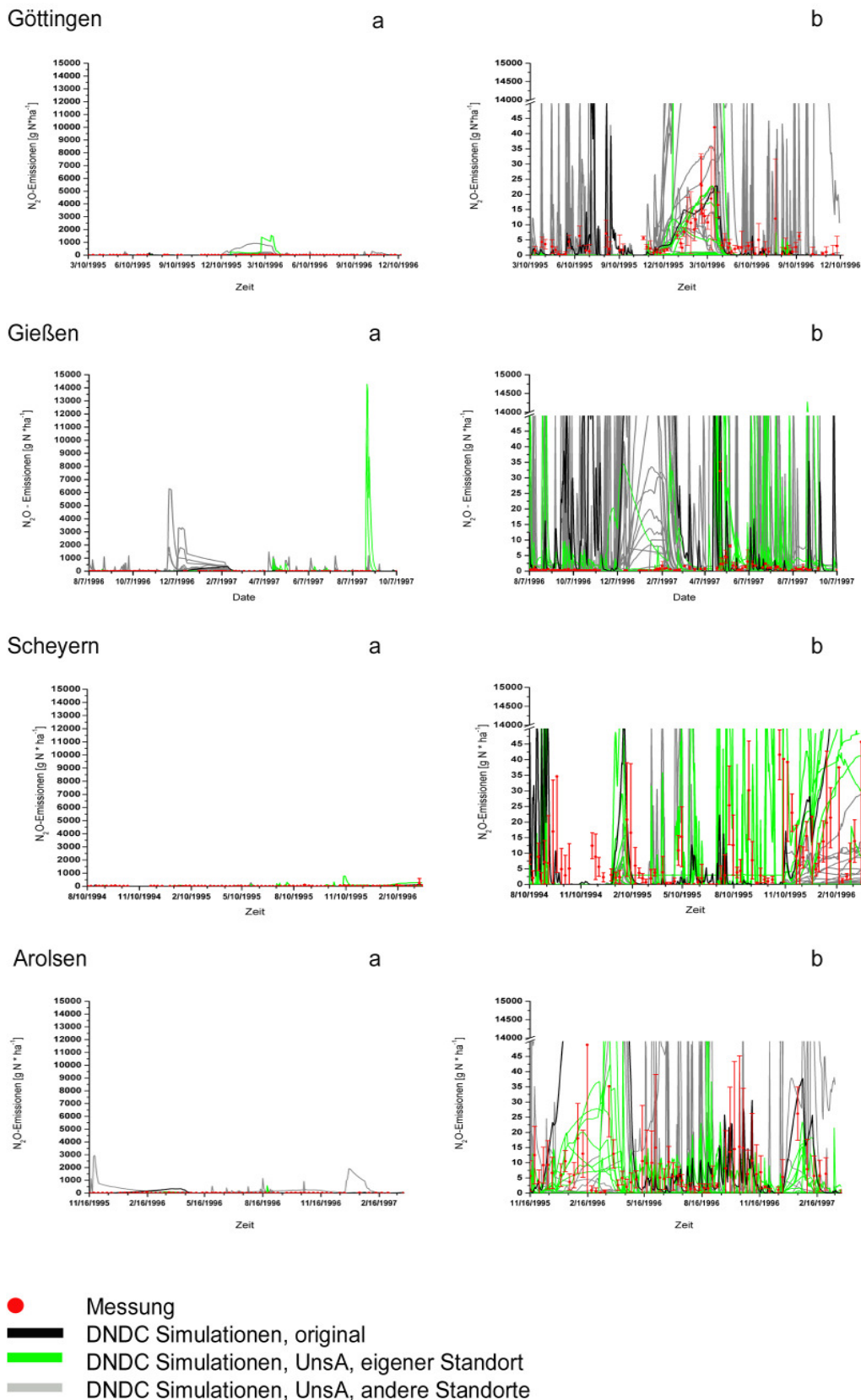


Abb. 25. Simulierte und gemessene N₂O-Emissionen in täglicher Auflösung für die Standorte Göttingen, Gießen, Scheyern und Arolsen. Die Abbildung a eines jeden Standortes zeigt den vollständigen Emissionsverlauf. In Abbildung b wurde die Ordinate für eine detaillierte Darstellung unterbrochen. Die schwarze Linie zeigt den N₂O-Verlauf, der mit den ursprünglichen Parameterwerten kalkuliert wurde (DNDC_{Original}). Die grünen (eigener Standort, DNDC_{UnsA}) und grauen (andere Standorte, DNDC_{Kreuzvalidierung}) Kurven stellen die N₂O-Verläufe dar, welche aus der Unsicherheitsanalyse resultieren. Als Referenz sind die Messungen auf den jeweiligen Flächen abgebildet (rote Punkte). Die roten Balken zeigen die Standardabweichung der jeweiligen Messung.

5.2.6 Ergebnisdiskussion der Unsicherheitsanalyse bezüglich der Module Bodenklima, C-/N-Umsatz, Nitrifikation und Denitrifikation

5.2.6.1 Punktgraphen

Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse zeigen für die Parameter der hier betrachteten Module nur wenige Akkumulationen besserer Modelleffizienzen in einem bestimmten Wertebereich, bezogen auf die simulierten CO₂- und N₂O-Emissionen. Ein solches Verhalten tritt lediglich bei 5 von insgesamt 51 getesteten Parametern auf. Die Überprüfung der Module macht wiederum offensichtlich, dass kein Parameter für sich den Anspruch erheben kann, die Modellergebnisse alleine signifikant zu beeinflussen. Da bei der Untersuchung dieser Modellmodule ebenfalls alle Parameter gemeinsam verändert worden sind, ist auch hier wieder von einer starken Interaktion unter den Parametern auszugehen, sowie eine sich daraus ergebene Equifinalität (siehe auch Kap. 5.2.2.1 und Kap. 5.2.4.1). Deutlich wird ebenfalls, dass mehrdimensionale Untersuchungen dieser Art zwar in der Lage sind, Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Parametern aufzuzeigen, allerdings sind keine genauen Aussagen über die Art und Qualität dieser Interaktionen möglich.

5.2.6.2 CO₂-Emissionen

Die Veränderungen der Parameterwerte im C-/N-Umsatzmodul sowie in den Nitrifikations- und Denitrifikationsmodulen zeigen, dass durch eine Variation dieser Werte die CO₂-Emissionen generell erhöht werden können. In den hier behandelten Beispielen bedingt das Anheben der CO₂-Emissionen eine Verbesserung der Modelleffizienzen.

Hauptverantwortlich dafür scheinen dabei die Parameter aus der SOC-Bilanz, aus der Berechnung des Einflusses von Tongehalten im Boden auf die Umsetzung von Huminstoffen, aus der Kalkulation des Bodenfeuchtigkeitsfaktors sowie ein Humusumsetzungsfaktor zu sein. Alle diese Faktoren nehmen im Modell direkten Einfluss auf den Umsatz des Kohlenstoffs.

Ein weiterer Parameter, bei dem eine leichte Einflussnahme auf die Umsatzprozesse festgestellt werden kann, ist *P_clay*. Diese Variable ist in die Berechnung eines Faktors integriert, der den Einfluss des Tongehaltes bei der Umsetzung von Huminstoffen im Boden darstellt. Mit Hilfe dieser stark vereinfachten Abbildung wird in DNDC berücksichtigt, dass die Umsetzung von organischer Substanz und damit die emittierte Menge an CO₂ durch hohe Tongehalte im Boden verringert wird. Aus Teilchen der

Feinbodenfraktion können Mikroaggregate entstehen, deren Kern häufig aus humifiziertem organischen Materialien besteht. Die so eingeschlossene organische Substanz kann über Jahre stabilisiert werden (Haider 1999). Auch gelöste organische Kohlenstoffverbindungen (DOC) können dabei in Mikroporen der mineralischen und organischen Festphase eingekapselt werden (Scheffer 2002). Eine weitere Form der Stabilisierung sind organo-mineralische Bindungen, bei denen der Tonfraktion eine besondere Rolle zukommt. Der Zustand und das Verhalten des organischen Kohlenstoffs werden entscheidend von diesen Bindungen bestimmt (Huang & Schnitzer 1986). Nach Körschens et al. (1997) ist die Menge des inerten Kohlenstoffs von der Bodenart abhängig. Mit steigendem Feinanteil im Boden nimmt diese Kohlenstofffraktion zu.

Werden unter diesem Gesichtspunkt die Punktgraphen für den Parameter P_{Fclay} betrachtet, dann ist ersichtlich, dass für jeden Standort ein eigenes Verhalten ausgeprägt ist (vgl. 0, Göttingen, Scheyern und Arolsen). Ob diese verschiedenartige Reaktion der Parametervariation von P_{Fclay} auf Standortunterschiede zurückgeführt werden kann, ist allerdings fraglich, obwohl die verwendeten Untersuchungsflächen sich u.a. hinsichtlich ihrer Tongehalte unterscheiden. Der Versuchsstandort in Göttingen weist mit 30 % Tongehalt im Boden den tonigsten Boden auf. Mit einem Tongehalt von 18 % und 16 % unterscheiden sich dagegen die Standorte Scheyern und Arolsen nur geringfügig. Nach dem Berechnungsansatz in DNDC ist bei höheren Tongehalten im Boden eine geringere CO_2 -Emission zu erwarten als bei tonärmeren Böden. Um eine Anhebung der C-Umsätze und damit eine höhere CO_2 -Produktion zu erreichen, müsste der beschriebene Einfluss des Tones auf die Umsatzprozesse für tonhaltigere Böden stärker vermindert werden als bei Böden mit niedrigen Tongehalten.

Auf Grund der in DNDC implementierten Funktion (Gl. 5.14) wäre eine Akkumulation besserer Modelleffizienzen in höheren Parameterwertebereichen für tonreiche Böden zu erwarten. Bei Böden mit geringeren Tongehalten wären bei niedrigeren Werten für P_{Fclay} bessere Modellrealisationen notwendig, um eine Steigerung der CO_2 -Emissionen zu erlangen. Dieses ist aus den Punktgraphen jedoch nicht ersichtlich. Allerdings ist zu beachten, dass die vorliegenden Interaktionen zwischen den Parametern einfache Kausalaussagen über die Wirkung eines einzelnen Parameters erschweren.

Weiterhin wird bei der Betrachtung der in DNDC dargestellten Einflussnahme der Tongehalte auf die C-Mineralisation deutlich, dass nicht alle Feinanteile des Bodens bei

diesem Prozess berücksichtigt werden. Der Tongehalt im Boden spielt in DNDC eine große Rolle bei der Beschreibung verschiedener Prozesse. Allerdings haben diverse Untersuchungen gezeigt, dass neben Ton auch der Schluffanteil (v.a. die Feinschluffpartikel) eines Bodens verantwortlich für die Stabilisierung von Kohlenstoffverbindungen ist und damit für eine Anreicherung von organischen Kohlenstoffverbindungen sorgen kann (Körschens 1980, Kuntze et al. 1994, Galantini et al. 2004). Da diese Feinbodenfraktion unberücksichtigt bleibt, können an Standorten, die einen hohen Schluffanteil aufweisen, bei der Berechnung der C-Mineralisation sowie bei der Anreicherung von stabilen organischen Kohlenstoffverbindungen Abweichungen zu den im Boden real ablaufenden Prozessen auftreten. So wird der Einfluss der hohen Schluffanteile von über 50 % im Boden der Arolsener Untersuchungsflächen hinsichtlich der CO₂-Emissionen und anderer Prozesse in DNDC nicht berücksichtigt.

Ein weiterer Schwachpunkt von DNDC, der auch hier wieder auftritt, ist die im Modell vorausgesetzte Homogenität des Bodenprofils. Da über die gesamte Tiefe eine gleichbleibende Bodenart angenommen wird, verändert sich der Einfluss des Tongehaltes auf die C-Mineralisation im Bodenprofil nicht. Mögliche Tonanreicherungen im Bodenprofil, die u.a. einen verminderten C-Umsatz bewirken könnten, finden dadurch keine Berücksichtigung.

Den stärksten Einfluss der hier vorgestellten Parameter scheint der Parameter P_{RFMM} aus der Berechnung des Bodenfeuchtigkeitsfaktors ($RFMM$) zu haben. Bei ihm ist auf allen Flächen dieselbe Reaktion zu beobachten: Beste Modellrealisationen werden bei Parameterwerten unterhalb des ursprünglichen Wertes von 0,5455 erreicht. Die Verringerung des Parameterwertes bedingt eine Erhöhung des Bodenfeuchtigkeitsfaktors $RFMM$. Dadurch kommt es zu einem stärkeren Einfluss der Bodenfeuchtigkeit, die in sämtliche Berechnungen der C- und N-Umsatzprozesse in DNDC eingeht. Dementsprechend werden die berechneten Umsatzraten der verschiedenen C-Pools erhöht und folglich kommt es zu einer größeren von DNDC berechneten CO₂-Flussrate. Hervorzuheben ist, dass durch diese Veränderung des Parameterwertes die Bodenfeuchtigkeit an sich nicht angehoben, sondern lediglich ihr Einfluss stärker gewichtet wird.

Im Zusammenhang mit dem Bodenfeuchtigkeitsfaktor ($RFMM$) wird folgendes deutlich: Eine Anhebung des Bodenwassergehaltes hat nur eine geringfügige Auswirkung auf die C-Umsatzraten und die CO₂-Emissionen (vgl. Kap. 5.2.3), auch wenn in die Berechnung

des Bodenfeuchteitfaktors das tägliche wassergefüllte Porenvolumen einer Bodenschicht (*Day_WFPS [l]*) eingeht. Dies liegt u.a. daran, dass der Bodenfeuchteitfaktor mit einer Erhöhung des Bodenwassergehaltes nicht linear ansteigt. Es wird vielmehr eine Optimumskurve des vorhandenen Bodenwassers beschrieben. Der Wert von *RFMM* steigt bis zu einem wassergefüllten Porenvolumen von ca. 60 % an. Liegt ein höherer Wassergehalt im Boden vor, so sinkt der Wert des Bodenfeuchteitfaktors. Prinzipiell ist der Einfluss der Bodenfeuchteitigkeit auf die CO₂-Emissionen in DNDC richtig abgebildet. Der Umsatz von Kohlenstoff zu CO₂ läuft unter aeroben Bedingungen ab, extreme Wassergehalte im Boden wirken dann hemmend auf die Produktionsrate von CO₂ (Scheffer 2002).

Auch für den Parameter *P_dfactor* (aus der Berechnung eines Humusumsetzungsfaktors des passiven Humuspools, *dfactor*) ist eine leichter Veränderung der Modelleffizienzen zu finden (0, Arolsen). Dabei tritt der gleiche Mechanismus auf wie zuvor für den Bodenfeuchteitfaktor *RFMM* beschrieben wird. Durch die Verringerung des Parameterwertes (*P_dfactor*) wird der Einfluss des Humusumsetzungsfaktors (*dfactor*) erhöht. Dieser geht in die Berechnungen des Kohlenstoffumsatzes der verschiedenen Pools der schwer umsetzbaren organischen Substanz ein. Die dadurch angehobene Umsatzrate bedingt eine höhere CO₂-Emission.

Durch die Unsicherheitsanalyse der Parameterwerte des C-/N-Umsatzmoduls wird eine generelle Anhebung der CO₂-Emissionen verursacht. Dabei kommt es einerseits zu Modellüberschätzungen. Andererseits können die bestehenden Unterschätzungen der CO₂-Emissionen durch diese Anhebung immer noch nicht ausgeglichen werden. Dieses wird besonders deutlich bei den simulierten CO₂-Emissionen der Flächen Göttingen und Scheyern (Abb. 22). Durch eine Kalibrierung wäre es demnach nicht möglich, eine noch höhere Übereinstimmung von gemessenen und simulierten Werten zu erlangen. Ein solches Modellverhalten ist ein Zeichen dafür, dass Prozesse nicht ausreichend abgebildet werden.

5.2.6.3 N₂O-Emissionen bei Betrachtung der Module Bodenklima und C-/N-Umsatz

Die Veränderungen im Bodenklima- und C-/N-Umsatzmodul haben nicht nur Auswirkungen auf die emittierte Menge an CO₂, sondern bedingen ebenso einen Anstieg der N₂O-Emissionen. Eine Erhöhung der N₂O-Emissionen ist vom Prinzip aus nachvollziehbar: Mit Hilfe der Parameter, die die höchsten Modelleffizienzen für die berechnete CO₂-Emission erbringen, sind die Umsatzraten des organischen Kohlenstoffs

angehoben worden. Dadurch wird in DNDC vermehrt leicht verfügbarer organischer Kohlenstoff für die Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse bereitgestellt.

Die Produktion von N_2O in Böden ist eng mit dessen Gehalt an organischem Kohlenstoff verbunden (Sahrawat & Keeney 1986). Verschiedene Studien zeigen, dass Böden, die reich an organischen Kohlenstoff sind, höhere N_2O -Emissionen aufweisen (Duxbury et al. 1982, Robertson & Tiedje 1987, Mosier et al. 1991, Vinther 1992, Papen & Butterbach-Bahl 1999 und Bouwman et al. 2002a). In anderen Untersuchungen konnten steigende N_2O -Emissionen nach Ausbringung von organischem Material beobachtet werden (Dong et al. 2000, Wever et al. 2002 und Velthof et al. 2002). So zeigen Ding et al. (2007) einen Anstieg der N_2O -Emissionen aus intensiv bewirtschaftetem Dauergrünland, welches mit Gülle gedüngt wurde, im Vergleich zu Flächen, deren N-Versorgung allein mit mineralischen N-Düngern erfolgte. Unter anderem geht aus Studien von Ambus & Christenson (1994) hervor, dass die räumliche Variabilität der N_2O -Flüsse von den vorherrschenden organischen Kohlenstoffgehalten des Bodens abhängen. Im Gegensatz zu den zahlreichen Untersuchungen, die einen positiven Effekt des organischen Kohlenstoffgehalts im Boden auf die N_2O -Emissionen darstellen, wurde in Schottland eine Studie durchgeführt, die konträre Ergebnisse liefert. Diese zeigt, dass organisch gedüngt Flächen nach starken Niederschlagsereignissen geringere N_2O -Emissionen aufwiesen, als Flächen, die mit mineralischen N-Düngern behandelt wurden (Ball et al. 2004). Auch eine Versuchsreihe von Sanches-Martín et al. (2008) beschäftigt sich mit dem Einfluss des organischen Kohlenstoffs in Böden auf die Höhe der emittierten N_2O -Emissionen. Dabei stellen sie in Laborexperimenten mit zwei sich in ihrem C-Gehalt unterscheidenden Böden dar, dass bei Zugabe von leicht abbaubarer organischer Substanz mit gleichzeitiger Gabe von mineralischem Stickstoff, die N_2O -Emissionen in beiden Böden um 94 % (geringer C-Anteil) bzw. um 46 % (hoher C-Anteil) zurückgehen.

Ein weiterer Prozess, der zu einem Anstieg der N_2O -Emissionen führen kann, ist, dass zunehmende Respirationsraten zu einem höheren O_2 -Verbrauch beitragen können. Dieses verursacht wiederum eine Ausdehnung des anaeroben Bereiches im Boden, der für das Einsetzen der Denitrifikationsprozesse notwendig ist (Cannavo et al. 2003).

DNDC reagiert auf die Veränderungen im Bodenklima- und C- und N-Umsatzmodul mit einem teilweise extremen Anstieg der N_2O -Emissionen. Dieses Verhalten bringt nicht, wie bei den berechneten CO_2 -Emissionen, eine Verbesserung der Modellergebnisse mit sich, sondern führt zu einer drastisch schlechteren Modellrealisationen. Dabei treten

neben einer generellen Anhebung des emittierten N_2O -Gases auch neue Emissionsmuster im Jahresverlauf auf. Eine solche Modellantwort lässt darauf schließen, dass DNDC sehr sensibel auf hohe bzw. leicht verfügbare organische Kohlenstoffgehalte im Boden reagiert. Unter der Berücksichtigung, dass durch ein Anheben der Umsatzraten die berechneten CO_2 -Emissionen von DNDC eine bessere Übereinstimmung mit den gemessenen Werten aufweisen, ist zu vermuten, dass in DNDC der Einfluss der organischen Kohlenstoffpools auf die N_2O -Produktion nicht richtig abgebildet wird.

5.2.6.4 N_2O -Emissionen bei Betrachtung der Module Bodenklima, C-/N-Umsatz sowie Nitrifikation und Denitrifikation

Die Veränderung der Parameterwerte bei der Unsicherheitsanalyse des Nitrifikations- und Denitrifikationsmoduls, des C-/N-Umsatzmoduls sowie des Bodenklimamoduls haben verschiedene Effekte auf die N_2O -Emissionen. Zunächst kann aus den Ergebnissen entnommen werden, dass die Modellrealisationen hinsichtlich der N_2O -Emissionen verbessert werden können, verglichen zu den Modellläufen mit der Originalversion von DNDC.

Bei der Betrachtung welche und wie viele Parameter die N_2O -Emissionen beeinflussen, zeigt sich, dass es bei diesem Modul ebenfalls schwierig ist eine konkrete Aussage darüber zu treffen, welche Parameter die Berechnung der N_2O -Emissionen maßgeblich beeinflussen (Prinzip der Equifinalität vgl. Kap. 5.2.2.1, Kap. 5.2.4.1 und Kap. 5.2.2.1).

Bei dem Parameter P_{RFFM} ist in der Tendenz zu sehen, dass bessere Modellrealisationen erreicht werden, wenn Parameterwerte oberhalb des ursprünglich eingesetzten Wertes von 0,5455 gezogen werden (vgl. 0). Eine Erhöhung von diesem Wert bedingt eine Verringerung des gesamten Bodenfeuchtigkeitsfaktors $RFMM$. Da der Faktor $RFMM$ in sämtliche C- sowie N-Umsatzprozesse mit eingeht, werden durch die Reduzierung des Einflusses der Bodenfeuchtigkeit geringere C-Umsatzraten berechnet (vgl. Kap 5.2.6.2). Dieses hat zur Konsequenz, dass weniger Substrat für nitrifikatorische und denitrifikatorische Prozesse zur Verfügung steht. Da DNDC sehr sensibel bezüglich der vorhergesagten Werte von N_2O -Emissionen auf die Bereitstellung von organischem Kohlenstoff reagiert, ist dieser Effekt nach den Ergebnissen für das C-/N-Umsatzmodul, nachvollziehbar (s.o.).

Auch wenn durch die Unsicherheitsanalyse der Parameterwerte die Modelleffizienzen im Vergleich zu denen des unveränderten Modells angehoben werden können, weisen jedoch die täglichen N₂O-Emissionen immer noch teilweise sehr extreme Abweichungen auf. Eine mögliche Ursache dafür liegt sicherlich darin, dass DNDC viele Prozesse noch nicht richtig abbilden kann.

6 Schlussbetrachtung und Fazit

Das Ziel des DNDC Modells ist es, individuell für jeden Standort die gasförmigen C- und N-Emissionen berechnen zu können. Um dies zu erreichen, werden in DNDC die Umsatzprozesse im Boden prozessorientiert und zeitlich hoch aufgelöst dargestellt. Die Berücksichtigung verschiedenster Prozesse, die zur Entstehung von Treibhausgasen in Böden beitragen, soll eine möglichst genaue Vorhersage der Treibhausgasemissionen erzielen. Das Modell wurde von dem Entwickler in der Weise konzipiert, dass ein weites Anwendungsspektrum in den folgenden Bereichen besteht:

- geographisch – einsetzbar von den gemäßigten Breiten bis in die Subtropen,
- räumliche Ausdehnung – DNDC kann sowohl auf der Schlagebene als auch für die höherskalige Modellierung (durch die Kopplung an ein GIS) verwendet werden,
- zeitlich – die modellierten Ergebnisse werden sowohl als Jahressumme als auch in höherer Auflösung (Tagesschritten) von DNDC berechnet,
- landwirtschaftliches Management – verschiedenste Kulturen (Grünland, Ackerbau, Sonderkulturen oder Reis) und Managementmaßnahmen sind in dem Modell parametrisiert,
- anwenderfreundlich – DNDC hat nur einen geringen Anspruch an die Daten, welche die Modellberechnungen initialisieren und ist durch die Gestaltung seiner Eingabemasken überwiegend selbsterklärend; theoretisch ist das Modell neben der Anwendung in der Wissenschaft auch in der Praxis (z.B. durch landwirtschaftliche Berater) anwendbar.

In den bisherigen Arbeiten (65 Veröffentlichungen von 1992 an bis heute, Stand 2009), die mit DNDC durchgeführt wurden, spiegelt sich die vielseitige Einsetzbarkeit des Modells wider (s. dazu: <http://www.dnnc.sr.unh.edu/Pubs.html>). Als Beispiele für die breite Einsetzbarkeit von DNDC hinsichtlich der Berechnungen von N₂O-Emissionen aus landwirtschaftlichen Systemen seien folgende Arbeiten herausgegriffen:

Die Arbeit von Li et al. (2004) zeigt den Einsatz von DNDC für Reisanbausysteme in China. Neben Sensitivitätsanalysen liegt der Fokus dieser Arbeit auch auf der Erweiterung der Skalenebene, für die DNDC zur Modellierung von jährlichen N₂O-Emissionen eingesetzt wurde (Darstellung der N₂O-Emissionen für die Reisanbaugebiete

im südwestlichen China). Grant et al. (2004) setzt DNDC dazu ein, N₂O-Emissionen verschiedener Managementszenarien landwirtschaftlicher Systeme in Kanada zu berechnen. Ebenso wurde DNDC dazu verwendet, regionalisierte N-Treibhausgasinventuren für landwirtschaftliche Systeme in Europa zu quantifizieren (Butterbach-Bahl et al. 2004). Die zeitliche Auflösung der berechneten N₂O-Emissionen beläuft sich bei den genannten Arbeiten auf die Darstellung von emittierten Jahreswerten. Generell liefert DNDC bzgl. dieses Zeithorizontes gute Übereinstimmungen mit beobachteten N₂O-Jahresemissionen (vgl. dazu Neufeld et al. 2006).

Als letztes Beispiel sei die Untersuchung von Beheydt et al. (2007) genannt. In dieser Arbeit werden zum ersten Mal nicht nur jährliche N₂O-Emissionsraten betrachtet, die mittels des DNDC-Modells berechnet werden, sondern auch zeitlich höher aufgelöste Simulationsergebnisse. Nach Anpassung diverser Parameter zeigt DNDC zufriedenstellende Ergebnisse beim Vergleich von gemessenen mit simulierten N₂O-Emissionen (Emissionsverlauf), auch wenn die Autoren für einzelne Untersuchungsflächen systematische Über- oder Unterschätzungen der N₂O-Emissionen feststellen müssen.

In der vorliegenden Arbeit war es das Ziel, DNDC hinsichtlich der Prozessabbildung sowie seiner Prognosefähigkeit von bodenbürtigen N₂O-Emission in zeitlich hochaufgelöster Darstellung zu untersuchen.

Die dazu durchgeführten Analysen des DNDC Modells (Version 9.0) und seiner untersuchten Module (Bodenklima, C-/N-Umsatzprozesse sowie Nitrifikation und Denitrifikation) machen deutlich, dass sich in allen Modellmodulen das gleiche Muster wiederholt: Es werden viele verschiedene Prozesse oft sehr detailliert in hoher zeitlicher und tiefengestufte Auflösung dargestellt, jedoch erfolgt deren Abbildung im Modell teilweise wenig prozessorientiert. Dieses äußert sich u.a. in einer hohen Anzahl an empirisch abgeleiteten Koeffizienten (z.B. für die Darstellung von Emissionsraten aus der Nitrifikation und Denitrifikation, der Umsatzraten, durch die Integration von Temperatur- und pH-Faktoren oder eine ratenabhängige Frost-N₂O-Berechnung), sowie die Integration von anpassungsfähigen Faktoren, welche in diversen Rechenschritten der Verbesserung von Simulationsergebnissen dienen sollen (Berechnung der Wärmekapazität, der Wärmeleitfähigkeit und der Bodenwassergehalte). Gerade hochkomplexe Modelle, die einen hohen prozessorientierten Anspruch aufweisen und in

die eine große Anzahl von unabhängigen Variablen integriert sind, laufen Gefahr, überparametrisiert zu sein (Dieterle 2003). Anzeichen einer Überparametrisierung sind bei DNDC ersichtlich und bei den durchgeführten Kreuzvalidierungen deutlich zu erkennen. Nach der Übertragung der neu generierten Parameterwerte auf andere Standorte treten extreme Abweichungen sämtlicher untersuchter Zielgrößen (Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, CO₂- und N₂O-Emissionen) auf. Eine Generalisierbarkeit des so veränderten Modells ist nicht mehr gegeben. Mit zunehmender Zahl von empirisch ermittelten Koeffizienten, die in ein Modell integriert werden, treten weitere Effekte auf, die die Anwendung eines Modells beeinträchtigen: Je mehr Koeffizienten auf Untersuchungen und Messwerten basieren und als Darstellung eines Prozesses herangezogen werden, desto größer wird die Modellunsicherheit. Denn jeder gemessene Wert bzw. aus einer Messung abgeleitete Werte unterliegen einer natürlichen Variabilität sowie Messunsicherheiten (De Roo 1993 und Giertz 2004).

Kritisch ist zudem die Herkunft der anpassungsfähigen Faktoren zu sehen, über deren Herkunft die verfügbare Literatur zum DNDC Modell sowie die Modellbeschreibung von DNDC (DNDC Users Guide) keine Auskunft geben. Diese stammen vermutlich überwiegend aus eigenen, nicht veröffentlichten Untersuchungen. Somit ergeben sich Schwierigkeiten bei der Verwendung dieser Parameter bei z.B. Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen oder auch Kalibrierungsverfahren, die auf Monte Carlo Simulationen basieren.

Weiterhin ist kritisch anzumerken, dass in DNDC Annahmen zur Vereinfachung der Darstellung von Prozessen bzw. Systemen getroffen wurden, die sich gegenläufig zur Idee einer prozessorientierten Darstellung verhalten. Als Beispiel für die Vereinfachung von Systemen steht die Annahme im Modell, dass die Bodentextur auch mit zunehmender Profiltiefe als homogen angesehen wird, oder die Tatsache, dass N₂O-Emissionen bei Frost-Tau-Zyklen einfach durch den Einsatz eines Ratenkoeffizienten beschrieben werden können. Denn gerade die in DNDC beschriebenen Umsatzprozesse im Boden bauen auf den vorherrschenden abiotischen Faktoren wie Temperatur, Wassergehalt oder das Diffusionsvermögen von Gasen im Boden auf. Diese werden auf Grundlage von physikalischen Größen (Korngrößenverteilung, Lagerungsdichte etc.) berechnet. Ungenauigkeiten in der Berechnung dieser Faktoren können sich fortpflanzen und die Zielgrößen negativ beeinflussen.

Auch zeigen die in dieser Arbeit durchgeführten Analysen, dass die Vernetzung zwischen den abiotischen Faktoren und den Prozessen des C-/N-Umsatzes, der Nitrifikation und der Denitrifikation Unstimmigkeiten aufweisen. Dieses wird durch die teilweise extremen Reaktionen der modellierten N_2O -Emissionen deutlich, die in Folge von geringen Veränderungen der simulierten Bodentemperaturen oder Bodenwassergehalte berechnet werden. In dieser Hinsicht sollte DNDC einer genaueren Überprüfung unterzogen werden, da Fehler dieser Art die Modellergebnisse beeinträchtigen.

Die zuvor beschriebenen Reaktionen des Modells machen es nur sehr eingeschränkt möglich, mit DNDC Kalibrierungen durchzuführen, die ähnlich wie die hier durchgeführten Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen auf MC Simulationen basieren. Auch trägt die bei DNDC auftretende Equifinalität dazu bei, dass es bei einer Kalibrierung des Modells nicht möglich ist, einen Parametersatz zu generieren, der für sich in Anspruch nehmen kann, die besten Modellrealisationen zu erzeugen.

Deutlich wird ebenfalls, dass mehrdimensionale Untersuchungen dieser Art zwar in der Lage sind, Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen Parametern aufzuzeigen, allerdings sind keine genauen Aussagen über die Art und Qualität dieser Interaktionen möglich.

Die in dieser Arbeit durchgeführten Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen zeigen, dass ein so hochkomplexes Modell wie DNDC, in dem versucht wird, die auftretenden Prozesse im Boden möglichst umfassend zu beschreiben, an Grenzen stößt. Bei der Konzeption eines solchen Modells müssen teilweise gegenläufige Anforderungen umgesetzt werden. DNDC hat z.B. den Anspruch, möglichst vielseitig einsetzbar zu sein (unterschiedlichste Standorte und Kulturen und eine breite Anwendergruppe) und verlangt daher relativ wenige Informationen zur Initialisierung der Modellsimulationen. Dem gegenüber steht jedoch der Anspruch der prozessorientierten Darstellung sowie einer zeitlich hoch aufgelösten Ausgabe der Zielgrößen, die hinreichend genau ist, um auftretende Prozesse nachvollziehen zu können.

Darüber hinaus ergibt sich die Schwierigkeit, dass verschiedene Prozesse bis heute nicht mathematisch beschrieben werden können. Beispielsweise sind diverse Schritte der Nitrifikation und Denitrifikation nicht hinreichend bekannt. Auf Grund dieser Lücken im Systemverständnis muss bei der Modellierung dieser Vorgänge auf empirisch ermittelte Werte zurückgegriffen werden.

Daraus resultierend zeigt sich, dass es mit der getesteten DNDC-Version (9.0) nur vereinzelt gelingt, z.B. die N_2O -Emissionen in einer hohen zeitlichen Auflösung entsprechend den Messungen abzubilden (Abb. 26) bzw. es nicht möglich ist, die Prozesse richtig darzustellen.

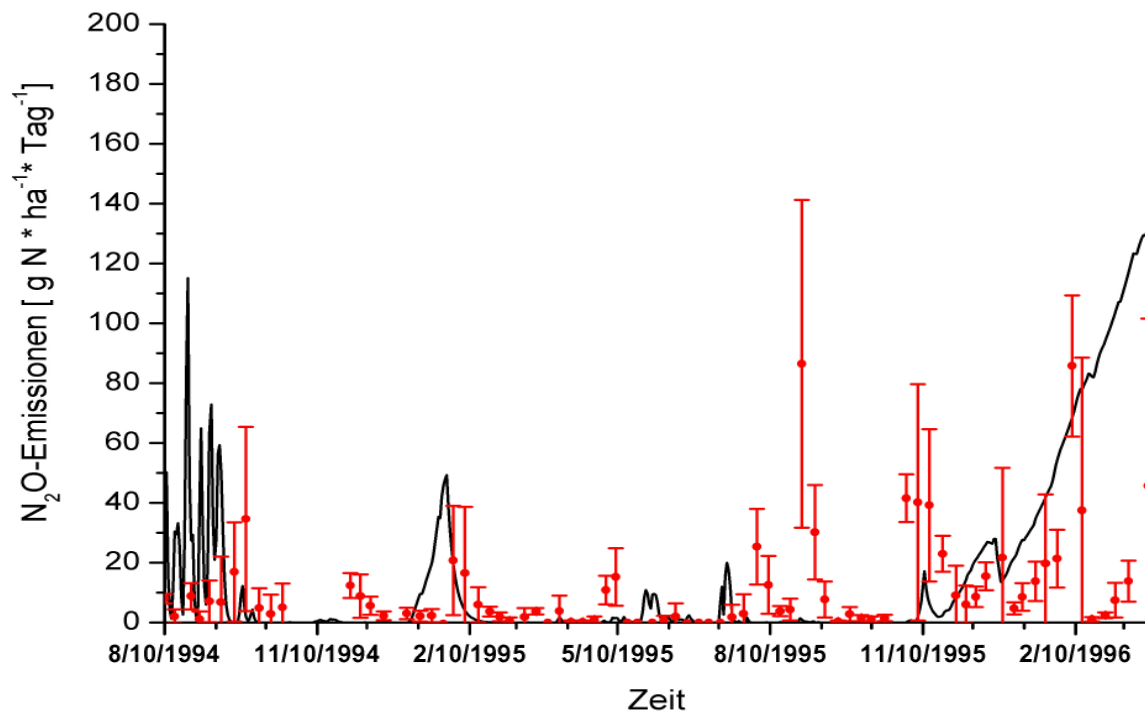


Abb. 26. Gemessene und modellierte (DNDCoriginal) N_2O -Emissionen für die Untersuchungsfläche in Scheyern in täglicher Auflösung. Rote Punkte zeigen die Messwerte, die Standardabweichungen werden als rote Balken und die mit DNDC simulierten Werte als schwarze durchgängige Linie dargestellt.

Wird dagegen die kumulierte N_2O -Emission über einen längeren Zeitraum (> 1 Jahr) betrachtet, so zeigt sich, dass DNDC durchaus in der Lage ist, an der Mehrheit der betrachteten Standorte Ergebnisse für die N_2O -Emissionen zu liefern, die mit den gemessenen Werten übereinstimmen bzw. sich im Rahmen der Messunsicherheiten befinden (Abb. 27) (vgl. dazu auch Neufeld et al. 2006).

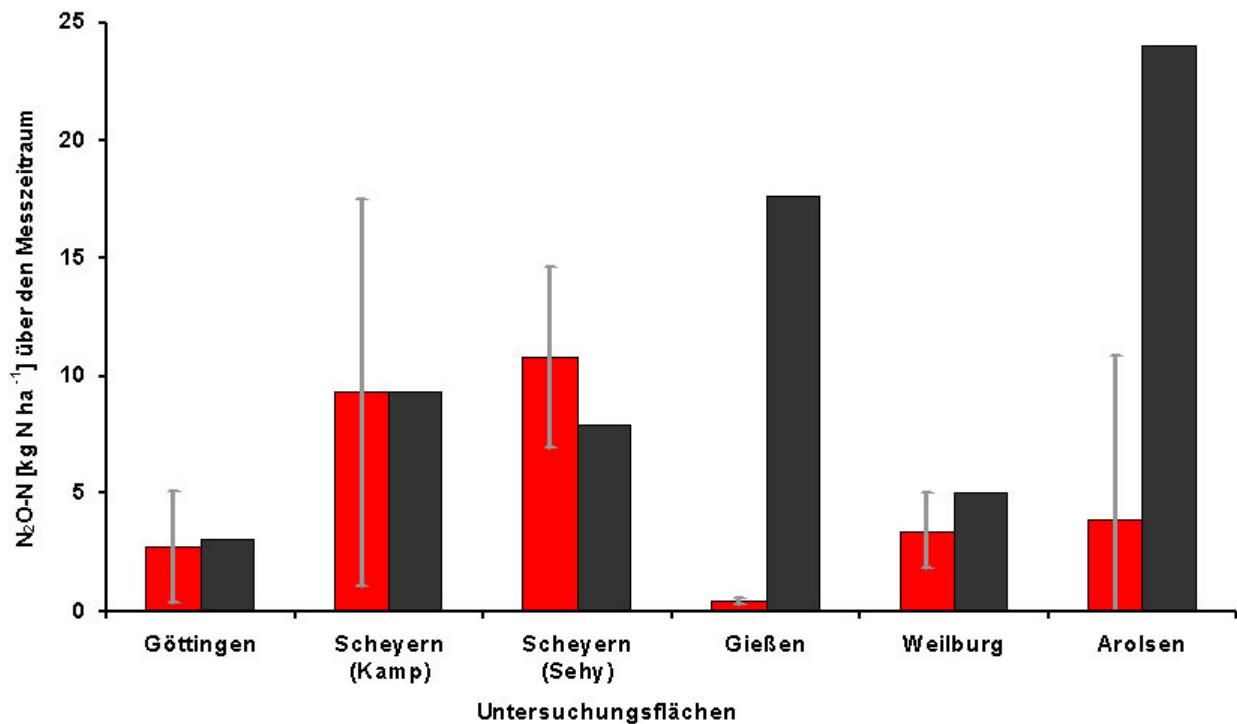


Abb. 27. Kumulierte gemessene und modellierte N_2O -Emissionen für Untersuchungsflächen in Göttingen, Scheyern, Gießen, Weilburg und Arolsen. Die Kumulation erfolgte über den jeweiligen Beobachtungszeitraum der einzelnen Flächen, welcher mindestens ein Jahr beträgt. Rote Balken zeigen die gemessenen N_2O -Emissionen, schwarze Balken stellen die von DNDC simulierten N_2O -Emissionen dar und die grauen Balken verdeutlichen die Standardabweichungen der N_2O -Messungen.

Offensichtlich werden die Gesamt- N_2O -Emissionen über einen längeren Zeitraum weniger von der zeitlichen Dynamik der verschiedenen beteiligten Parameter geprägt als vielmehr von den Standort prägenden Faktoren wie der Größe des N_{ges} -Pools und des C_{org} -Pools im Boden. Dieses zeigt, dass die Unsicherheit der Modellvorhersagen mit zunehmender zeitlicher Auflösung der Ergebnisse zunimmt.

Anzumerken ist allerdings auch, dass Modelle, die Prozesse in der Umwelt darstellen sollen, immer nur den Stand der aktuellen Kenntnis widerspiegeln können. Soll die Modellierung sicherere Modellvorhersagen treffen, so besteht weiterer Forschungsbedarf zur Klärung bisher nicht oder nur unzureichend bekannter Abläufe.

7 Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, das prozessorientierte biogeochemische Modell DNDC hinsichtlich seiner Vorhersagegenauigkeit und Prozessabbildung bzgl. seiner modellierten bodenbürtigen N₂O-Emissionen aus der Pflanzenproduktion zu überprüfen. DNDC hat in den vergangenen Jahren immer mehr Anwendung in Europa gefunden und wird neben anderen Modellen, die zur Abschätzung klimarelevanter Treibhausgase eingesetzt werden, als Alternative zum Berechnungsansatz der durch N-Düngung bedingten N₂O-Emissionen des IPCC diskutiert.

Um die Vorhersagegenauigkeit und die Prozessabbildung bzgl. der modellierten N₂O-Emissionen zu überprüfen, wurden mit den relevantesten Modellmodulen (Bodenklima mit Berechnung der Bodentemperatur und Bodenwassergehalt, C-/N-Umsatzprozesse sowie Nitrifikation und Denitrifikation) Sensitivitätsanalysen und daran anschließend Unsicherheitsanalysen durchgeführt. Für beide Analysen wurde eine Gleichverteilung der Parameterwerte angenommen, aus der im Rahmen einer Monte Carlo (MC) Simulation zufällig Zahlenwerte gezogen wurden. Um den Wertebereich für jeden Parameter einzugrenzen, wurde eine one factor at a time Analyse angewendet.

Um die Modellergebnisse sowie die der Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse statistisch auswerten zu können, sind Messungen zur Bodentemperatur, dem Bodenwassergehalt wie auch zu den Emissionen von CO₂ und N₂O als Referenz verwendet worden. Diese Messungen stammen aus Untersuchungen bzgl. N₂O- und CO₂-Emissionen und der Nitratverlagerungen aus landwirtschaftlichen Systemen. Die zur Verfügung stehenden Messreihen beinhalten Erhebungen über längere Zeiträume (mind. 1 Jahr) mit regelmäßigen Messintervallen (tägliche bis wöchentliche Messungen), so dass zum einen Informationen zu kumulierten Jahreswerten (N₂O- und CO₂-Emissionen) und zum anderen ebenso Messungen in höherer zeitlicher Auflösung vorliegen.

Messungen folgender Untersuchungsflächen sind für diese Arbeit verwendet worden:

- Göttingen (Messungen der Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, CO₂- und N₂O-Emissionen),
- Gießen (Messungen der Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit und N₂O-Emissionen),
- Arolsen (Messungen der Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, CO₂- und N₂O-Emissionen),

- Scheyern (Messungen der Bodentemperatur, Bodenfeuchtigkeit, CO₂- und N₂O-Emissionen),
- Petzenkirchen (Messungen der Bodentemperatur und Bodenfeuchtigkeit).

Zwei Standorte aus den zur Verfügung stehenden Referenzflächen wurden für die Sensitivitätsanalyse herangezogen (Gießen: Sensitivitätsanalysen für die Größen Bodentemperatur und Bodenfeuchtigkeit; Arolsen: Sensitivitätsanalysen für die Größen N₂O- und CO₂-Emissionen). Bei den Unsicherheitsanalysen wurde jeder Standort berücksichtigt. Die Zahl der Simulationsläufe belief sich für die Sensitivitätsanalyse auf 200. Bei der Unsicherheitsanalyse waren es 10.000 Modelldurchläufe.

Die Parameter, welche das Modellergebnis signifikant beeinflussen und damit als sensitiv eingestuft werden können, wurden an Hand des standardisierten Regressionskoeffizienten aus einer multiplen linearen Regression ermittelt. Aus insgesamt 235 überprüften Parametern erweisen sich 44 Parameter als sensitiv (Bodentemperatur: 3 Parameter; Bodenwassergehalt: 7 Parameter; C-/N-Umsatz sowie Nitrifikation und Denitrifikation: 34 Parameter). Diese wurden für die nachfolgende Unsicherheitsanalyse herangezogen.

Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse zeigen, dass für jeden untersuchten Parameter sowie für die gezogenen Parameterkombinationen eine Equifinalität vorliegt. Für keinen der Parameter ist es möglich, einen Wert bzw. einen Werteraum zu ermitteln, in dem eindeutig beste Modellrealisationen erzielt werden. Für jeden Parameter sind über den gesamten Wertebereich gute und schlechte Modellrealisationen zu verzeichnen. Die Arbeit an den Parametern im Bodentemperaturmodul zeigt, dass die Temperatur im Boden von DNDC bereits vor den in dieser Arbeit durchgeführten Analysen im Jahresverlauf gut modelliert wird, abgesehen von der zeitlich hoch aufgelösten Temperaturdarstellung um den Gefrierpunkt. Durch die durchgeführten Unsicherheitsanalysen konnte jedoch die Fehlberechnung der Temperatur im Boden um den Gefrierpunkt nicht behoben werden. Beim Bodenwassergehalt ist jedoch ein deutliches Verbesserungspotential zu erkennen, da das Modell die Bodenfeuchtigkeit zuvor deutlich unterschätzte. Anpassungen von Bodentemperatur und Bodenfeuchtigkeit haben überraschender Weise extreme Auswirkungen auf die N₂O-Emissionen zur Folge. Die Kohlenstoffumsatzprozesse bzw. die daraus resultierenden CO₂-Emissionen werden von den Anpassungen der abiotischen Bodenfaktoren hingegen wenig beeinflusst.

Nach der Durchführung der Unsicherheitsanalysen für das C-/N-Umsatzmodul und für die Nitrifikations- und Denitrifikationsmodule zeigen sich ebenfalls extreme Reaktionen der simulierten N_2O -Emissionen. Für die modellierten CO_2 -Emissionen sind dagegen weniger starke Effekte bzw. Auswirkungen zu erkennen, teilweise bewirken die durchgeführten Unsicherheitsanalysen sogar eine bessere Darstellung der berechneten CO_2 -Emissionen.

Für alle untersuchten Größen (Temperatur, Bodenwassergehalt, N_2O - und CO_2 -Emissionen) lässt sich jedoch bei den durchgeführten Kreuzvalidierungen konstatieren, dass die Parametereinstellung einer Fläche nicht auf andere Flächen übertragbar ist, ohne dass deutliche Abweichungen in den Simulationsergebnissen auftreten. Dieses Modellverhalten sowie die große Anzahl an empirischen Variablen lassen darauf schließen, dass das DNDC Modell in Teilen überparametrisiert ist.

Aus der Reaktion des Modells auf die durchgeführten Untersuchungen kann geschlossen werden, dass die vielen in DNDC berücksichtigten, teilweise detaillierten Prozesse nicht korrekt abgebildet werden. Zudem scheinen Mängel in der Verknüpfung von abiotischen Faktoren und den darauf basierenden Berechnungen der biologischen Prozesse vorzuliegen.

Die Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen des DNDC Modells verdeutlichen, dass es schwierig ist, dieses Modell zu kalibrieren, wenn die Kalibrierung auf einer MC Simulation basiert und eine große Anzahl von Parametern berücksichtigt werden muss.

Neben Vereinfachungen im Modell, die zu fehlerhaften Prozessabbildungen führen können, sind diverse Prozesse, die die N_2O -Bildung bei der Nitrifikation und Denitrifikation steuern, bisher noch nicht hinreichend bekannt. Aus dem Grund muss neben einer Überprüfung der dargestellten Prozesse im DNDC Modell und einer eindeutigen Definition der verwendeten empirischen Faktoren die Forschung bzgl. der N_2O -bildenden Prozesse im Boden weiter fortgeführt werden.

Aufgrund der befriedigenden Abbildung der N_2O -Emission über einen längeren Zeitraum (> 1 Jahr) auf mehreren Standorten erscheint das Modell trotz der Probleme bei zeitlich hochaufgelöster Prozessabbildung geeignet zu sein, um bestehende einfachere Ansätze (bspw. der Berechnungsansatz des IPCC) zu ersetzen, in denen Standorteigenschaften bisher nicht berücksichtigt werden.

8 Literatur

- Ambus P & Christenson S. 1994. Measurement of N₂O emission from a fertilized grassland: An analysis of spatial variability. *Journal of Geophysical Research* 99: 16549-16555.
- Anderson MG & Burt TP. 1995. Modelling Strategies. In: Anderson MG & Burt TP (Hrsg.). *Hydrological Forecasting*. Chichester. 1-14.
- Avalakki UK, Strong WM & Saffigna PG. 1995. Measurements of gaseous emissions from denitrification of applied nitrogen-15. II. Effects of temperature and added straw. *Australian Journal of Soil Research* 33: 89-99.
- Badioli M, Engel T, Klöcking B, Priesack E, Schaaf T, Sperr C & Wang E. 1994. Expert-N - Ein Baukasten zur Simulation der Stickstoffdynamik in Boden und Pflanze. Prototyp. Benutzerhandbuch. Lehrinheit für Ackerbau und Informatik im Pflanzenbau. TU München. Freising. 106 S.
- Ball BC, Campbell DJ, Douglas JT, Henshall K & O'Sullivan MF. 1997. Soil structural quality, compaction and land management. *European Journal of Soil Science* 48, Nr. 4: 593-601.
- Ball BC, Horgan GW & Parker JP. 2000. Short-range spatial variation of nitrous oxide fluxes in relation to compaction and straw residues. *European Journal of Soil Science* 51, Nr. 4: 607-616.
- Ball BC, Mc Taggart IP & Scott A. 2004. Mitigation of greenhouse gas emissions from soil under silage production by use of organic or slow release fertilizer. *Soil Use and Management* 20: 287-295.
- Barraclough D & Puri G. 1995. The use of 15N pool dilution and enrichment to separate the heterotrophic and autotrophic pathways of nitrification. *Soil Biology & Biochemistry* 27: 17-22.
- Behaydt D, Boeckx P, Sleutel S, Li C & Van Cleemput O. 2007. Validation of DNDC for 22 long-term N₂O field emission measurements. *Atmospheric Environment* 41: 6196-6211.
- Benckiser G, Eilts R, Linn A, Lorch HJ, Sumer E, Weiske A & Wenzhofer F. 1996. N₂O emissions from different cropping systems and from aerated, nitrifying and denitrifying tanks of a municipal waste water treatment plant. *Biology & Fertility of Soils* 23, Nr. 3: 257-265.
- Beven KJ & Binley AM. 1992. The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction. *Hydrology in Process* 6: 279-298.
- Beven KJ & Freer J. 2001. Equifinality, data assimilation, and uncertainty estimation in mechanistic modelling of complex environmental systems, *Journal of Hydrology* 249: 11-29.
- Beven KJ. 1995. Distributed models. In: Anderson MG & Burt TP (Hrsg.): *Hydrological Forecasting*. Chichester. 405-435.
- Beven KJ. 2002. *Rainfall-Runoff Modelling. The Primer*. Chichester.
- Beven KJ. 2006. A manifesto for the equifinality thesis. *Journal of Hydrology* 320: 18-36.
- Bock E, Koops HP & Harms H. 1996. Cell biology of nitrifying bacteria. In: Prosser JI (Hrsg.). *Nitrification*. IRL Press. Oxford. 17-38.
- Boeckx P & Van Cleemput O. 2001. Estimates of N₂O and CH₄ fluxes from agricultural lands in various regions in Europe. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 60: 35-47.
- Böttcher J. 1992. Stoffanlieferung an das Grundwasser bei Sandböden und Stoffumsetzungen in einem Lockersteins-Aquifer. Habilitationsschrift. Hannover. 118 S.

- Bouwman AF, Boumans LJM & Batjes NH. 2001. Global Estimates of Gaseous Emission of NH₃, NO and N₂O from Agricultural Land. Food and Agriculture Organisation. Rom. 57 S.
- Bouwman AF, Boumans LJM & Batjes NH. 2002a. Emissions of N₂O and NO from fertilised fields: Summary of available measurement data. *Global Biogeochemical Cycles* 16, Nr.4.; art. no. 1058.
- Bouwman AF. 1990. Exchange of greenhouse gases between terrestrial ecosystems and the atmosphere. 61-127 in Bouwman AF (Hrsg.). *Soils and the greenhouse effect*. John Wiley and sons Ltd. Chichester.
- Bouwman AF. 1998. Nitrogen oxides and tropical agriculture. *Nature* 392: 886-887.
- Bouwman RA, Boumans LJM & Batjes NH. 2002b. Modeling global annual N₂O and NO emissions from fertilized fields. *Global Biogeochemical Cycles* 16, Nr.4: doi:10.1029/2001GB001812. / art. no. 1080
- Brasseur, GP & Chatfield RB. 1991. The fate of biogenic trace gases in the atmosphere. In: Sharkey TD, Holland EA & Mooney HA. (Hrsg.). *Trace Gas Emissions by Plants*. San Diego. Academic Press. 1-27.
- Bremner JM & Blackmer AM. 1981. Terrestrial nitrification as a source of atmospheric nitrous oxide. In: Trudinger PA, Walter MR & Ralph RJ (Hrsg.) *Biochemistry of ancient and modern environments*. Australian Academy of Science. Canberra. 279-291.
- Bremner JM 1997. Sources of nitrous oxide in soils. *Nutrient Cycling Agroecosystems* 49: 7-16.
- Bucher GE, Lamb RJ & Bracken GK. 1981. Temperature profile in a raps field before and after harvest. *Canadian Journal of Soil Science* 61: 145 –156.
- Burton DL & Beauchamp EG. 1994. Profile nitrous oxide and carbon dioxide concentrations in a soil subject to freezing. *Soil Science Society of America Journal* 58: 115-122.
- Butterbach-Bahl K, Kesik M, Miehe P, Papen H & Li C. 2004. Quantifying the regional source strength of N-trace gases across agricultural and forest ecosystems with process based models. *Plant and Soil* 260: 311-329.
- Butterbach-Bahl K, Stange F, Papen H & Li C. 2001. Regional inventory of nitric oxide and nitrous oxide emissions for forest soils of Southeast Germany using the biogeochemical model PnET-N-DNDC. *Journal of Geophysical Research* 106: 34155-34166.
- Cannavo P, Richaume A. & Lajoie F. 2003. Fate of nitrogen and carbon in the vadose zone: In situ and laboratory measurements of seasonal variations in aerobic respiration and denitrifying activities. *Soil Biology and Biochemistry* 36: 463-478.
- Chatskikh D & Olesen JE. 2007. Soil tillage enhanced CO₂ and N₂O emissions from loamy sand soil under spring barley. *Soil & Tillage Research* 97: 5-18.
- Christensen S & Christensen BT. 1991. Organic matter available for denitrification in different soil fractions: effect of freeze/thaw cycles and straw disposal. *Journal of Soil Science* 42: 637-647.
- Christensen S & Tiedje JM. 1990. Brief and vigorous N₂O production by soil at spring thaw. *Journal of Soil Science* 41: 1-4.
- Conen F, Dobbie KE & Smith KA. 2000. Predicting N₂O emissions from agricultural land through related soil parameters. *Global Change Biology* 6: 417- 426.
- Crutzen P.; Mosier A; Smith K & Winiwater W. 2007. N₂O release from agro-biofuel production negates global warming reduction by replacing fossil fuels. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions (ACPD)* 7, Nr.4: 11191-11205.
- Crutzen PJ. 1981. Atmospheric chemical processes of the oxides of nitrogen, including nitrous oxide. 17-44. In: *Denitrification, nitrification and atmospheric N₂O*. Delwiche CC. (Hrsg.). John Wiley. New York.

- Davidson EA. 1991. Fluxes of nitrous oxide and nitric oxide from terrestrial ecosystems. 219-235. In: Microbial production and consumption of greenhouse gases: Methane, nitrogen oxides and halomethanes. Rogers JE & Whitman WB (Hrsg.): American Society of Microbiology. Washington, D.C.
- De Roo APJ. 1993. Modelling surface runoff and soil erosion in catchments using Geographical Information Systems. Validity and applicability of the "ANSWERS" model in two catchments in the loess area of South Limburg (The Netherlands) and one in Devon (UK). Netherlands Geographical Studies 157. Utrecht.
- Del Grosso SJ, Parton WJ, Mosier AR, Ojima DS, Kulmala AE & Phongpan S. 2000. General model for N₂O and N₂ gas emissions from soils due to denitrification. *Global Biogeochemical Cycles* 14: 1045-1060.
- Dendooven L & Anderson JM. 1994. Dynamics of reduction enzymes involved in the denitrification process in pasture soil. *Soil Biology & Biochemistry* 26: 1501-1506.
- Dieterle F. 2003. Multianalyte Quantifications by Means of Integration of Artificial Neural Networks. Genetic Algorithms and Chemometrics for Time-Resolved Analytical Data. <http://www.frank-dieterle.de/phd/index.html>.
- Ding W, Meng L, Cai Z & Han FX. 2007. Effects of long-term amendment of organic manure and nitrogen fertilizer on nitrous oxide emission in a sandy loam soil. *Journal of Environmental Sciences* 19: 185-193.
- Dong YS, Scharffe D, Domroes M, Qi YC & Zhang S. 2000. N₂O emissions from agricultural soils in the North China Plain: The effect of chemical fertilizer and organic manure. *Journal of Environmental Science* 12: 463-468.
- Dörsch P, Palojarvi A & Mommertz S. 2004. Overwintering greenhouse gas fluxes in two contrasting agricultural habitats. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 70: 117-133.
- Dubus IG & Brown CD. 2002. Sensitivity and first-step uncertainty analyses for the preferential flow model MACRO. *Journal of Environmental Quality* 31: 227-240.
- Dunne T & Leopold LB. 1998. *Water in Environmental Planning*. 15th Printing. Freeman WH. New York. 818 S.
- Duxbury JM, Bouldin DR, Terry RE & Tat RL. 1982. Emissions of nitrous oxide from soils. *Nature* 298. 462-464.
- Eichner MJ. 1990. Nitrous oxides emissions from fertilized soils: Summary of available data. *Journal of Environmental Quality* 19: 272-280.
- Enequete-Kommission "Schutz der Erdatmosphäre" des Deutschen Bundestages. 1992. *Klimaänderung gefährdet globale Entwicklung. Zukunft sichern – jetzt handeln*. Economica-Verlag, Bonn, 238 S.
- Engel TH & Priesack E. 1993. Expert-N - A building block system of nitrogen models as a resource for advice, research, water management and policy. In: Eijsackers HJP & Hamers T. (Hrsg.): *Integrated Soil and Sediment Research: A Basis for Proper Protection*. Kluwer Academic Publishers. 503-507.
- Firestone MK & Davidson EA. 1989. Microbiological basis of NO and N₂O production and consumption in soil. In: Exchange of trace gases between terrestrial ecosystems and the atmosphere. Andreae MO & Schimel DS (Hrsg.). Wiley. Chichester. 7-21.
- Firestone MK, Firestone RB & Tiedje JM. 1980. Nitrous oxide from soil denitrification – Factors controlling its biological production. *Science* 208: 749-751.
- Flessa H & Beese F. 1995. Effects of sugarbeet residues on soil redox potential and nitrous oxide emission. *Soil Science Society of America Journal* 59: 1044-1051.
- Flessa H, Beese F, Brumme R, Priesack E, Przemeczek E & Lay JP. 1998. Freisetzung und Verbrauch der Spurengase N₂O und CH₄ beim Anbau nachwachsender Rohstoffe. In: *Initiativen zum Umweltschutz* 11. DBU. Zeller Verlag. Osnabrück 1998. 133 S.

- Flessa H, Ruser R, Schilling R, Munch JC, Kaiser EA & Beese F. 2002. N₂O and CH₄ fluxes in potato fields: automated measurement, management effects and temporal variation. *Geoderma* 105, Nr. 3-4: 307-325.
- Folking SE, Mosier AR, Ojima DS, Li C, Parton WJ, Potter CS, Priesack E, Stenger E, Haberbosch C, Dörsch P, Flessa H & Smith KA. 1998. Comparison of N₂O emissions from soils at three temperate agricultural sites: Simulations of year-round measurements by four models. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 52: 77-105.
- Freibauer A & Kaltschmitt M. 2003. Controls and models for estimating direct nitrous oxide emissions from temperate and sub-boreal agricultural mineral soils in Europe. *Biogeochemistry* 63: 93-115.
- Freibauer A. 2003. Regionalised inventory of biogenic greenhouse gas emissions from European agriculture. *European Journal of Agronomy* 19: 135-160.
- Galantini JA, Senesi N, Brunetti G & Rosell R. 2004. Influence of texture on organic matter distribution and quality and nitrogen and sulphur status in semiarid Pampean grassland soils of Argentina. *Geoderma* 123: 143-152.
- Gauger T, Anshelm F, Schuster H, Erismann JW, Vermeulen AT, Draaijers GPJ, Bleeker A & Nagel HD. 2002. Mapping of ecosystem specific long-term trends in deposition loads and concentrations of air pollutants in Germany and their comparison with Critical Loads and Critical Levels. Final Report on behalf of Federal Environmental Agency (Umweltbundesamt), Berlin. BMU/UBA FE-No 299 42 210. Part 1: Deposition Loads 1990-1999. 207 S. & Part 2: Mapping Critical Levels Exceedances. 104 S.
- Giertz S. 2004. Analyse der hydrologischen Prozesse in den sub-humiden Tropen Westafrikas unter besonderer Berücksichtigung der Landnutzung am Beispiel des Aguima-Einzugsgebietes in Benin. Dissertation. Universität Bonn. 249 S.
- Goossens A, De Visscher A, Boeckx P & Van Cleemput O. 2001. Two-year field study on the emission of N₂O from coarse and middle-textured Belgian soils with different land use. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 60: 23-34.
- Graedel TE & Crutzen PJ. 1994. Chemie der Atmosphäre - Bedeutung für Klima und Umwelt. Heidelberg/Berlin. Spektrum. Akademischer Verlag.
- Granli T & Bøckman OC 1994. Nitrous oxide from agriculture. *Norwegian Journal of Agricultural Science Supplement* 12: 1-128.
- Grant B, Smith WN, Desjardins R, Lemke R & Li C. 2004. Estimated N₂O and CO₂ Emissions as influenced by agricultural practices in Canada. *Climatic Change* 65: 315-332.
- Grant RF & Pattey E. 1999. Mathematical modelling of nitrous oxide emissions from an agricultural field during spring thaw. *Global Biogeochemical Cycles* 13: 679-694.
- Grant RF & Pattey E. 2003. Modelling variability in N₂O emissions from fertilized agricultural fields. *Soil Biology & Biochemistry* 35: 225-243.
- Grant RF, Juma NG & McGill WB. 1993a. Simulation of carbon and nitrogen transformations in soils. I. Mineralization. *Soil Biology and Biochemistry* 25, Issue 10: 1317-1329.
- Grant RF, Nyborg M & Laidlaw J. 1993b. Evolution of nitrous oxide from soil: I. Model development. *Soil Science* 156: 259-265.
- Grant RF. 2001. A review of the Canadian ecosystem model ecosys. In: *Modeling Carbon and Nitrogen Dynamics for Soil Management*. Shaffer M. (Hrsg.) CRC Press. Boca Raton, FL. 173-264.
- Grant RF. 2008. Modellbeschreibung ECOSYS-Modell. <http://www.ecosys.rr.ualberta.ca>.
- Haider K. 1996. Biochemie des Bodens. Ferdinand Enke Verlag. 174 S.
- Haider K. 1999. Von der toten organische Substanz zum Humus. In: *Zeitschrift für Pflanzenernährung und Bodenkunde* 162: 363-71.

- Hansen J, Sato M, Ruedy R, Lo K, Lea DW & Medina-Elizade M. 2006. Global temperature change. PNAS. Vol 103, Nr. 39: 14288-14293.
- Hansen S, Jensen HE; Nielsen NE & Svendsen H. 1991. Simulation of nitrogen dynamics and biomass production in winter wheat using the Danish simulation model DAISY. Fertilizer Research 27: 245-259.
- Hansen S, Maehlum JE & Bakken LR. 1993. N₂O and CH₄ fluxes in soil influenced by fertilization and tractor traffic. Soil Biology and Biochemistry 25, Nr. 5: 621-630.
- Haynes RJ. 1986. Nitrification. In: Mineral nitrogen in the plant-soil system. Haynes RJ (Hrsg.). Academic Press. Orlando. USA. 127-165.
- Heinen M. 2006. Simplified denitrification models: Overview and properties. Geoderma 133. 444– 463.
- Hilton BR, Fixen PE, & Woodard HJ. 1994. Effects of Tillage, Nitrogen Placement and Wheel Compaction on Denitrification Rates in the Corn Cycle of a Corn Oats Rotation. Journal of Plant Nutrition 17, Nr. 8: 1341-1357.
- Huang PM & Schnitzer M. 1986. Interactions of soil minerals with natural organics and microbes. SSSA Publ. Inc., Madison. In: SCHULZ, E. (Hrsg.): Einfluss von Bodenart und langjährig differenzierter Düngung auf die Akkumulation und Stabilisierung organischer Bodensubstanz (OBS) in unterschiedlichen Bodenfraktionen. In: Archiv für Acker- und Pflanzenbau und Boden. Vol. 45:365-380.
- Hutchinson GL & Davidson EA. 1993. Process for production and consumption of gaseous nitrogen oxides in soil. Agricultural ecosystem effects on trace gases and global climate change. American Society of Agronomy. Special Publication Nr. 55: 79-93.
- Hutson JL & Wagenet RJ. 1992. LEACHM - Leaching Estimation And Chemistry Model: A process-based model for water and solute movement, transformations, plant uptake and chemical reactions in the unsaturated zone (Version 3.0). Department of Soil, Crop and Atmospheric Sciences, Cornell University: Ithaca, N.Y.
- Hynes RK & Knowles R. 1980. Denitrification, nitrogen fixation and nitrification in continuous flow laboratory soil columns. Canadian Journal of Soil Science 60: 355-363.
- IFA & FAO 2001. Global estimates of gaseous emissions of NH₃, NO and N₂O from agricultural land. International Fertilizer Industry Association, Food and Agricultural Organization of the United Nations. Rom.
- IPCC 2001. Third Assessment Report: Climate Change 2001. The Scientific Basis. Cambridge University Press, Cambridge.
- IPCC 2006 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories Volume 4: Agriculture, Forestry and Other Land Use. Chapter 11. N₂O Emissions from managed soils, and CO₂ Emissions from lime and urea application.
- IPCC 2006. National Greenhouse Gas Inventory Guidelines. Institute of Global Environmental Strategies (IGES), Kanagawa, Japan.
- IPCC 2007. Fourth Assessment Report: Climate Change 2007. Working Group I Report "The Physical Science Basis"
- Johnsson H; Bergström L; Jansson PE & Paustian K. 1987: Simulated nitrogen dynamics and losses in a layered agricultural soil. Agricultural, Ecosystems & Environment 18: 333-356.
- Jones CA & Kiniry JR. 1986. CERES-Maize. A simulation model of maize growth and development. Texas A&M University Press. 194 S.
- Junkunst HF, Freibauer A, Neufeldt H & Breth G. 2006. Review Article. Nitrous oxide emissions from agricultural land use in Germany – a synthesis of available annual field data. Journal of Plant Nutrition and Soil Science 169: 341-351.

- Kaiser EA & Ruser R. 2000. Nitrous oxide emissions from arable soils in Germany – An evaluation of six long-term field experiments. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science* 163: 249-259.
- Kaiser EA, Kohrs K & Kücke M. 1998a. Nitrous oxide release from arable soil: Importance of N-fertilization, crops and temporal variation. *Soil Biology & Biochemistry* 30, Nr. 12: 1553-1563.
- Kaiser EA, Kohrs K, Kücke M, Schnug E, Heinemeyer O & Munch JC. 1998b. Nitrous oxide release from arable soil: importance of perennial forage crops. *Biology & Fertility of Soils* 28: 36-43.
- Kammann C, Grünhage L, Müller C, Jacobi S & Jäger HJ. 1998. Seasonal variability and mitigation options of N₂O emissions from differently managed grasslands. *Environmental Pollution* 102: 179-186.
- Kammann C. 2001. Die Auswirkung steigender atmosphärischer CO₂-Konzentrationen auf die Flüsse der Klimaspurengase N₂O und CH₄ in einem Grünlandökosystem. Giessen. Dissertation. 224 S.
- Kamp T. 1998. Freiland- und Laboruntersuchungen zu N₂O Freisetzungen eines landwirtschaftlich genutzten Bodens unter definierten Temperaturbedingungen. FAM-Bericht 30: 15-20.
- Kersebaum KC. 2004. Habilitation. Unveröffentlicht. Zalf e.V.
- Kirkby MJ, Naden PS, Burt TP & Butcher DP. 1993. Model calibration and verification. In: Kirkby MJ, Naden PS, Burt TP & Butcher DP (Hrsg.): *Computer simulation in physical geography*. Chichester. 155-176.
- Köhler W, Schachtel G & Voleske P. 2007. *Biostatistik*. 4. aktualisierte und erweiterte Auflage. Springer. 329 S.
- Koponen HT, Flöjt L & Martikainen PJ. 2004. Nitrous oxide emissions from agricultural soils at low temperatures: a laboratory microcosm study. *Soil Biology & Biochemistry* 36. 757-766.
- Körschens M, Schulz E, Klimanek EM & Franko U. 1997. Die organische Bodensubstanz – Bedeutung, Definition, Bestimmung. *Archiv für Acker- und Pflanzenbau und Boden* 41: 427-433.
- Körschens M. 1980. Beziehung zwischen dem Feinanteil, C_t- und N_t- Gehalt des Bodens. *Archiv für Acker- und Pflanzenbau und Boden* 24: 585-592.
- Kroeze C & Mosier A. 2002. Progress in source strength estimates of nitrous oxide (N₂O). In: *Non-CO₂-Greenhouse Gases: Scientific Understanding, Control options and policy aspects*. Van Ham J, Baede APM, Guicherit R, Williams-Jacobse JGFM. (Hrsg.): *Proceedings of the Third International Symposium, Maastricht, The Netherlands*. 21.-23.01.2002. XXIX-XXXIV.
- Kroeze C, Dumont E & Seitzinger SP. 2005. New estimates of global emissions of N₂O from rivers and estuaries. *Environmental Science* 2: 159–165.
- Kroeze C, Mosier A & Bouwman L. 1999. Closing the N₂O budget: A retrospective analysis. *Global Biogeochemical Cycles* 13: 1–8.
- Kropff MJ & van Laar HH. 1993. *ORYZA1 - A basic model for irrigated low land rice production*. IRRI. Philippines– Wageningen.
- Kropff MJ, van Laar HH & Matthews RB. 1994. *ORYZA1: An ecophysiological model for irrigated rice production*. SARP Research Proceedings. AB-DLO/WAU and IRRI, Wageningen and Los Banos, 110 S.
- Kuntze H, Roeschmann G & Schwerdtfeger G. 1994. *Bodenkunde*. 5. Auflage. Stuttgart.
- Kurganova I, Teepe R & N Lofffield. 2007. Influence of freeze-thaw events on carbon dioxide emissions from soils at different moisture and land use. *Carbon Balance and Management* 2007. 2:2. doi: 10.1186/1750-0680-2-2.

- Lamers M, Ingwersen J & Streck T. 2007a. Modelling N₂O emission from a forest upland soil: A procedure for an automatic calibration of the biogeochemical model Forest-DNDC. *Ecological Modelling* 205: 52-58.
- Lamers M, Ingwersen J & Streck T. 2007b. Modelling nitrous oxide emission from waterlogged soils of a spruce forest ecosystem using the biogeochemical model Wetland-DNDC. *Biogeochemistry* 86: 287-299
- Leffelaar P & Wessel W. 1988. Denitrification in a homogeneous, closed system: experiment and simulation. *Soil Science* 146: 335–349.
- Legates D & McCabe G. 1999. Evaluating the use of „goodnes-of-fit“ measures in hydrologic and hydroclimatic model validation. *Water Resource Research* 35, Nr. 1: 233-341.
- Leik BCE. 2003. Emission von Ammoniak (NH₃) und Lachgas (N₂O) von landwirtschaftlich genutzten Böden in Abhängigkeit von produktionstechnischen Maßnahmen. Dissertation. Universität Hohenheim. 157 S.
- Lenhart T, Eckhardt K, Fohrer N & Frede HG. 2002. Comparison of two different approaches of sensitivity analysis. *Physical, Chemical & Earth Science* 27: 645-654.
- Li C, Aber JD, Stange F, Butterbach-Bahl K & Papen H. 2000. A process oriented model of N₂O and NO emissions from forest soils: 1. Model development. *Journal of Geophysical Research* 105: 4369-4384.
- Li C, Farahbakhshazad N, Jaynes DB, Dinnes DL, Salas W & McLaughlin D. 2006. Modeling nitrate leaching with a biogeochemical model modified based on observations in a row-crop field in Iowa. *Ecological Modelling* 196: 116–130.
- Li C, Folking S & Folking TA. 1992a. A model of nitrous oxide evolution from soil driven by rainfall events: 1. Model structure and sensitivity. *Journal of Geophysical Research* 97: 9759-9776.
- Li C, Folking S & Folking T.A. 1992b. A model of nitrous oxide evolution from soil driven by rainfall events: 2. Model application. *Journal of Geophysical Research* 97: 9777–9783.
- Li C, Folking S, Harriss RC & Terry RE. 1994. Modeling nitrous oxide emissions from agriculture: A Florida case study. *Chemosphere* 28: 1401–1415.
- Li C, Mosier A, Wassmann R, Cai Z, Zheng X, Huang Y, Tsuruta H, Boonjawat J & Lantin R. 2004. Modeling greenhouse gas emissions from rice-based production systems: Sensitivity and upscaling. *Global Biogeochemical Cycles* 18. doi:10.1029/2003GB002045.
- Li C. 2000. Modeling trace gas emissions from agricultural ecosystems. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 58: 259-276.
- Li C. 2007. User's Guide for the DNDC Model (Version 9.1). 2007. Institute for the Study of Earth, Oceans and Space. University of New Hampshire. USA. S. 61. <http://www.dndc.sr.unh.edu/model/GuideDNDC91.pdf>
- Malinowsky P & Ottow JCG. 1985. Ökologische Bedingungen der Denitrifikation bei Pilzen. *Landwirtschaftliche Forschung* 38: 30-34.
- Matzner E & Borken W. 2008. Do freeze-thaw events enhance C and N losses from soils of different ecosystems? A review. *European Journal of Soil Science*. 59: 274-284.
- McCuen RH. 1973. The role of sensitivity analysis in hydrologic modelling. *Journal of Hydrology*: 18. 37-53.
- McKenney DJ, Lazar C & Findley WI. 1990. Kinetics of the nitrite to nitric oxide reaction in peat. *Soil Science Society of American Journal* 54: 106-112.
- Model A. 2003. Spurengasflüsse (N₂O, CH₄, CO₂) in Anbausystemen des Ökologischen Landbaus. Halle-Wittenberg. Dissertation.

- Mørkved PT, Dörsch P, Henriksen TM & Bakken LR. 2006. N₂O emissions and product ratios of nitrification and denitrification affected by freezing and thawing. *Soil Biology & Biochemistry* 38: 3411-3420.
- Mosier A, Kroeze C, Nevison C, Oenema O, Seitzinger S & Van Cleemput O. 1998. Closing the global N₂O budget: N₂O emissions through the agricultural nitrogen cycle. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 52: 225-248.
- Mosier A, Schimel D, Valentine D, Bronson K & Parton W. 1991. Methane and nitrous oxide fluxes in native, fertilized and cultivated grasslands. *Nature* 350: 330-332.
- Motz I. 2003. Einfluß von Bodenbearbeitung, Düngung und Fruchtfolge auf die Lachgasemissionen aus Ackerflächen. Forschungsbericht Agrartechnik 410. Dissertation Universität Hohenheim. 140 S.
- Muleta MK & Nicklow JW. 2005. Sensitivity and uncertainty analysis coupled with automatic calibration for a distributed watershed model. *Journal of Hydrology* 306: 127-145, doi:10.1016/j.jhydrol.2004.09.005.
- Müller C, Martin M, Stevens RJ, Laughlin RJ, Kammann C, Ottow JCG & Jäger HJ. 2002. Processes leading to N₂O emissions in grassland soil during freezing and thawing. *Soil Biology & Biochemistry* 34: 1325-1331.
- Nash JE & Sutcliffe JV. 1970. River flow forecasting through conceptual models. Part I – A discussion of principles. *Journal of Hydrology* 10: 282-290.
- Nearing MA, Deer-Ascought L & Anderson JM. 1990. Sensitivity of the WEPP hillslope version soil erosion model. *Transactions of the American Association of Agricultural Engineers* 33: 839-349.
- Nevison CD, Butler JH & Elkins JW. 2003. Global distribution of N₂O and the N₂O/AOU yield in the subsurface ocean. *Global Biogeochemical Cycles* 17, Nr.4: doi:10.1029/2003GB002068.
- Nevison CD, Lueker T & Weiss RF. 2004. Quantifying the nitrous oxide source from coastal upwelling. *Global Biogeochemical Cycles* 18: doi:10.1029/2003GB002110.
- Nicolardot B & Molina JAE. 1994. C and N fluxes between pools of soil organic matter: model calibration with long-term field experimental data. *Soil Biology and Biochemistry* 26: 245-251.
- Novoa R & Tejeda HR. 2006. Evaluation of the N₂O emissions from N in plant residues as affected by environmental and management factors. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 75, Nr. 1-3: 29-46.
- Olivier JGJ, Bouwman AF, Van Der Hoek KW & Berdowski JJM. 1998. Global air emission inventories for anthropogenic sources of NO_x, NH₃ and N₂O in 1990. *Environmental Pollution* 102, Nr.1: 135-148.
- Olivier JGJ, Pulles T & van Aardenne JA. 2006. Part III: Greenhouse gas emissions: 1. Shares and trends in greenhouse gas emissions; 2. Sources and Methods; Greenhouse gas emissions for 1990, 1995 and 2000. In *CO₂ emissions from fuel combustion 1971-2004*, 2006 Edition, pp. III.1-III.41. International Energy Agency (IEA), Paris. ISBN 92-64-10891-2 (paper) 92-64-02766-1 (CD ROM) (2006).
- Olivier JGJ, Van Aardenne JA, Dentener F, Pagliari V, Ganzeveld LN & Peters JAHW. 2005. Recent trends in global greenhouse gas emissions: regional trends 1970-2000 and spatial distribution of key sources in 2000. *Environmental Science* 2, Nr. 2-3 : 81-99. DOI: 10.1080/15693430500400345.
- Oreskes N, Shrader-Frechette K & Belitz K. 1994. Verification, validation and confirmation of numerical models in the earth sciences. *Science* 263: 641-646.
- Palma RM, Rimolo M, Saubidet MI & Conti ME. 1997. Influence of tillage system on denitrification in maize-cropped soils. *Biology & Fertility of Soils* 25: 142-145.

- Panikov NS, Flanagan PW, Oechel WC, Mastepanov MA & Christensen TR. 2006. Microbial activity in soils frozen to below -39°C . *Soil Biology & Biochemistry* 38: 785–794.
- Papen HB & Butterbach-Bahl K. 1999. Three years continuous record of nitrogen trace gas fluxes from untreated and limed soil of a N-saturated spruce and beech forest ecosystem in Germany: 1. N_2O emissions. *Journal of Geophysical Research* 104: 18487-18503.
- Parton WJ, Hartman M, Ojima D & Schimel D. 1998. DAYCENT and its land surface submodel: description and testing. *Global and Planetary Change* 19: 35-48.
- Parton WJ, Holland EA, Del Grosso SJ, Hartman MD, Martin RE, Mosier AR, Ojima DS & Schimel DS. 2001. Generalized model for NO_x and N_2O emissions from soils. *Journal of Geophysical Research-Atmospheres* 106: 17403-17420.
- Parton WJ, Mosier AR, Ojima DS, Valentine DW, Schimel DS, Weier K & Kulmala AE. 1996. Generalized model for N_2 and N_2O production from nitrification and denitrification. *Global Biogeochemical Cycles* 10: 401-412.
- Parton WJ, Schimel DS, Cole CV & Ojima DS. 1987. Analysis of factors controlling soil organic matter levels in Great Plains grasslands. *Soil Science Society of America Journal* 51:1173-1179
- Parton WJ, Stewart JWB & Cole CV. 1988. Dynamics of C, N, P and S in grassland soils: A model. *Biogeochemistry* 5: 109-131.
- Paul EA. & Clark FE. 1996. *Soil microbiology and biochemistry*. San Diego. California. Academic Press: 340 S.
- Penning de Vries FWT, Jansen DM, Ten Berge HFM & Bakema A. 1989. *Simulation of Ecophysiological Processes of Growth in Several Annual Crops*. Pudoc. Wageningen.
- Pennington PJ & Ellis RC. 1993. Autotrophic and heterotrophic nitrification in acidic forest and native grassland soils. *Soil Biology & Biochemistry* 25: 1399-1408.
- Pohlert T, Breuer L, Huisman JA & Frede HG. 2007. Integration of a detailed biogeochemical model into SWAT for improved nitrogen predictions - Model development, sensitivity, and GLUE analysis . *Ecological Modelling* 203: 215-228.
- Pohlert T. 2006. *Modellierung des Stickstoffhaushaltes für den Gewässerschutz mittelgroßer Flusseinzugsgebiete*. Kumulativ-Dissertation. Universität Gießen. 113 S.
- Postma D. 1990. Kinetics of nitrate reduction by detrital Fe(II)-silicates. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 54: 903-908.
- Potter CS, Matson PA, Vitousek PM & Davidson EA. 1996. Process modeling of controls on nitrogen trace gas emissions from soils world-wide. *Journal of Geophysical Research* 101: 1361-1377.
- Potter CS, Randerson JT, Field CB, Matson PA, Vitousek PM, Mooney HA & Klooney SA. 1993. Terrestrial ecosystem production: A process model based on global satellite and surface data. *Global Biogeochemical Cycles* 7: 811-841.
- Potter CS, Riley RH & Klooster SA. 1997. Simulation modelling of nitrogen trace gas emissions along an age gradient of tropical forest soils. *Ecological Modelling* 97: 179-196.
- Priemé A & Christensen S. 2001. Natural perturbations, drying-wetting and freezing-thawing cycles, and the emission of nitrous oxide, carbon dioxide and methane from farmed organic soils. *Soil Biology & Biochemistry* 33: 2083-2091.
- Refsgaard JC, van der Sluijs JP, Hojberg AL & Vanrolleghem PA. 2007. Uncertainty in the environmental modelling process - A framework and guidance. *Environmental Modelling & Software* 22: 1543-1556.
- Richards L. 1931. Capillary conduction of liquids through porous media. *Physics* 1: 318–333.

- Ritchie JT, Alocilja EC, Singh U & Uehara G. 1987. IBSNAT and CERES - Rice model. Weather and Rice, Proceedings of the International Workshop on the Impact of Weather Parameters on Growth and Yield of Rice, 7–10 April 1986. International Rice Research Institute, Manila, Philippines: 271-281.
- Ritchie JT, Godwin DC & Otter-Nache S. 1988. CERES-Wheat. A Simulation Model of Wheat Growth and Development, Texas A&M Univ. Press. College Station. TX
- Ritchie JT. 1991. Wheat phasic development. In: Hanks J & Ritchie JT (Hrsg.): Modelling Plant and Soil Systems. Agronomy Monograph 31. ASA-CSSA-SSSA. Madison. WI. USA: 31-54.
- Roberston GP, Paul EA & Harwood RR. 2000. Greenhouse gases in intensive agriculture. Contributions of individual gases to the radiative forcing of the atmosphere. *Science* 289: 1922-1925.
- Robertson GP & Tiedje JM. 1987. Nitrous oxide sources in aerobic soils: nitrification, denitrification and other biological processes. *Soil Biology & Biochemistry* 19: 187-193.
- Robertson GP. 1989. Nitrification and denitrification in humid tropical ecosystems: Potential controls on nitrogen retention. In: Mineral nutrients in tropical forests and savanna ecosystems. Procter J. (Hrsg.): Blackwell Scientific Publications. Oxford: 55-68
- Robertson GP. 1993. Fluxes of nitrous oxide and other nitrogen trace gases from intensively managed landscapes: a global climate change. In: American Society of Agronomy, Crop Science Society of America. Harper LA, Mosier AR, Duxbury JM & Rolston DE. (Hrsg.). Soil Science Society of America, Madison.
- Röver M, Heinemeyer O & Kaiser EA. 1998. Microbial induced nitrous oxide emissions from an arable soil during winter. *Soil Biology & Biochemistry* 30: 1859-1865.
- Ruser R, Flessa H, Schilling R, Beese F & Munch JC. 2001. Effect of crop-specific field management and N fertilization on N₂O emissions from a fine-loamy soil. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 59: 177-191.
- Ruser R, Flessa H, Schilling R, Steindl H & Beese F. 1998. Effects of soil compaction and fertilization on N₂O and CH₄ fluxes in potato fields. *Soil Science Society of America Journal* 62: 1587-1595.
- Ruz-Jerez BE, White RE & Ball PR. 1994. Long-term measurement of denitrification in three contrasting pastures grazed by sheep. *Soil Biology & Biochemistry* 26, Nr.1: 29-39.
- Rykiel EJ. Jr. 1996. Testing ecological models: The meaning of validation. *Ecological Modelling* 90: 229-244.
- Rypdahl K. 2002. Can we get rid of uncertainties in GHG inventories? In: Non-CO₂-Greenhouse Gases: Scientific Understanding, Control options and policy aspects. Van Ham J, Baede APM, Guicherit R, Williams-Jacobsen JGFM. (Hrsg.). Proceedings of the Third International Symposium. Maastricht. The Netherlands. 21.-23.01.2002, XXXIV-XXXVI.
- Sahrawat KL & Keeney DR. 1986. Nitrous oxide emission from soils. *Advanced Soil Science* 4: 103-147.
- Saltelli A, Chan K & Scott EM. 2004. Sensitivity Analysis. Weinheim. Germany. (Wiley – VCH Verlag GmbH). 447 S.
- Sánchez-Martín L, Vallejo A, Dick J & Skiba U. 2008. The influence of soluble carbon and fertilizer nitrogen on nitric oxide and nitrous oxide emissions from two contrasting agricultural soils. *Soil Biology & Biochemistry* 40: 142-151.
- Schauss C. 2006. Impact of Fermented Organic Fertilizers on in-situ Trace Gas Fluxes and on Soil Bacterial Denitrifying Communities in Organic Agriculture. Gießen. Dissertation. 178 S.

- Scheffer F. 2002. Lehrbuch der Bodenkunde / Scheffer/Schachtschabel. - 15. Auflage. Heidelberg.
- Schlegel HG. 1992. Allgemeine Mikrobiologie. 7. überarbeitete Auflage. Thieme Verlag. Stuttgart.
- Schmädeke F. 1998. Lachgas- und Methanflüsse eines Gley-Auenbodens unter dem Einfluß einer Rapsfruchtfolge und in Abhängigkeit von der N-Düngung. Göttingen. Dissertation. 139 S.
- Schmidt U. 1998. Einfluß von Bewirtschaftungsmaßnahmen und Umweltfaktoren auf Lachgas (N₂O)-Emissionen aus landwirtschaftlich genutzten Lößböden. Dissertation. In: Hohenheimer Bodenkundliche Hefte. Fischer WR, Kandeler E, Kaupenjohann M & Stahr K (Hrsg.). Heft 45: 154 S.
- Schöniger M. & Dietrich J. 2008. Hydrologie. <http://www.hydroskript.de/html/index.html?page=/html/hykp0505.html>. Letzer Zugriff: 16.10.2008.
- Schönwiese CH. 1996. Naturwissenschaftliche Grundlagen – Klima und Treibhauseffekt. In: Klimapolitik. Brauch HG. (Hrsg.): 1. Auflage Springer-Verlag. 3-20.
- Schröder A. 2000. WEPP, EUROEM, E-2D: Results of applications at the plot scale. In: Soil Erosion – Application of physical base models. Schmidt J. (Hrsg.). Berlin: 199-250.
- Schulze, Beven K & Huwe B. 1999. Equifinality and the problem of robust calibration in nitrogen budget simulations. *Soil Science Society of America Journal* 63: 1934-1941.
- Schürer E. 2001. Lachgas- und Methanemissionen nach der Ausbringung von Gülle auf Grünland im Allgäu. Dissertation. Universität Hohenheim. 172 S.
- Sehy U, Ruser R & Munch JC. 2003. Nitrous oxide fluxes from maize fields: relationships to yield, site-specific fertilization, and soil conditions. *Agriculture, Ecosystems & Environment* 99: 97-111.
- Seiler W & Conrad R. 1981. Mikrobielle Bildung von N₂O (Distickstoffoxid) aus Mineräldüngern - ein Umweltproblem?. *Forum Mikrobiologie* 6: 322-328.
- Sharma S, Szele Z, Schilling R, Munch JC & M Schloter. 2006. Influence of freeze-thaw stress on the structure and function of microbial communities and denitrifying populations in soil. *Applied and Environmental Microbiology* 72: 2148-2154.
- Sieber A & Uhlenbrook S. 2005. Sensitivity analysis of a distributed catchment model to verify the model structure. *Journal of Hydrology* 310: 216-235.
- Skiba U, Smith KA & Fowler D. 1993. Nitrification and denitrification as sources of nitric oxide and nitrous oxide in a sandy loam soil. *Soil Biology & Biochemistry* 25, Nr. 11: 1527-1536.
- Skogland T, Lomeland S & Goksöyr J. 1988. Respiratory burst after freezing and thawing of soil: experiments with soil bacteria. *Soil Biology & Biochemistry* 20: 851-856.
- Smith KA & Dobbie KE. 2002. Another look at N₂O emission factors for agricultural soils, and implication for inventory calculation. In: Non-CO₂ greenhouse gases: Scientific understanding, control options and policy aspects. Van Ham J, Baede APM, Guicherit R & Williams-Jacobse JGFM (Hrsg.): 245-250.
- Smith KA, McTaggart IP & Tsuruta H. 1997. Emissions of N₂O and NO associated with nitrogen fertilization in intensive agriculture, and the potential of mitigation. *Soil Use Management* 13: 296-304.
- Spear RC & Hornberger GM. 1980. Eutrophication in Peel Inlet. 2. Identification of critical uncertainties via Generalised Sensitivity Analysis. *Water Research* 14: 43-49.
- Staley TE, Caskey WH & Boyer DG. 1990. Soil Denitrification and Nitrification Potentials during Growing Season relative to Tillage. *Soil Science Society of America Journal* 54: 1602-1608.
- Stange CF. 2001. Entwicklung und Anwendung eines prozessorientierten Modells zur Beschreibung der N₂O- und NO-Emissionen aus Böden temperater Wälder.

- Dissertation. In: Schriftenreihe Fraunhofer Institut Atmosphärische Umweltforschung. Seiler W. (Hsg.). Band 69: 143 S.
- Stehfest E & Bouwman AF. 2006. N₂O and NO emission from agricultural fields and soils under natural vegetation: summarizing available measurement data and modelling of global annual emissions. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 74, Nr. 3: 207-228.
- Stehfest E, Heistermann M, Priess JA, Ojima DS & Alcamo J. 2005. Simulation of global crop production with the Ecosystem model Daycent. *Ecological Modelling* 209, Issues 2-4: 203-219.
- Stehfest E. 2005. Modelling of global crop production and resulting N₂O emissions. Dissertation. Universität Kassel. 144 S.
- Stenger R, Priesack E, Barkle G & Sperr C. 1999. Expert-N. A tool for simulating nitrogen and carbon dynamics in the soil-plant-atmosphere system. In: *NZ Land Treatment Systems*. Tomer M, Robinson M & Gielen G. (Hrsg.). New Plymouth. New Zealand: 19-28.
- Teepe R, Brumme R & Beese F. 2000. Nitrous oxide emissions from frozen soils under agricultural, fallow and forest land. *Soil Biology & Biochemistry* 32: 1807-1810.
- Teepe R, Brumme R & Beese F. 2001. Nitrous oxide emissions from soil during freezing and thawing periods. *Soil Biology & Biochemistry* 33: 1269 – 1275.
- Teepe R, Vor A, Flessa F & Ludwig B. 2004. Emissions of N₂O from soils during cycles of freezing and thawing and the effects of soilwater, texture and duration of freezing. *European Journal of Soil Science* 55: 357–365.
- Thorntwaite CW. 1948. An approach toward a rational classification of climate. - *The Geographical Review* 38, Nr.1: 55-94.
- Tonitto C, David MB, Drinkwater LE & Li C. 2007. Application of the DNDC model to tile-drained Illinois agroecosystems: Model calibration, validation, and uncertainty analysis. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 78: 65-81.
- Tortoso AC & Hutchinson GL. 1990. Contribution of autotrophic and heterotrophic nitrifiers to soil NO and N₂O emissions. *Applied Environmental Microbiology* 56, Nr. 6: 1799-1805.
- U.S. Environmental Protection Agency. 1989. Policy options for stabilizing global climate. In: Draft report to Congress. Lashof DA & Tirpak DA. (Hrsg.). USEPA Office of Policy. Planning and Evaluation. Washington, DC: 20 S.
- Van Aardenne JA, Dentener FJ, Olivier JGJ, Klein Goldewijk CGM & Lelieveld J. 2001. A 1×1 resolution data set of historical anthropogenic trace gas emissions for the period 1890–1990. *Global Biogeochemical Cycles* 15: 909-928.
- Van Bochove E & Jones GH. 1999. The influence of winter and spring thaw on N₂O emissions from soils. In: *Reducing nitrous oxide emissions from agroecosystems*. Desjardins RL, Keng JC & Haugen-Kozyra K (Hrsg.). International N₂O Workshop. March 3-5. Banff. Alberta. Kanada: 155-160.
- Van Bochove E, Prevost D & Pelletier F. 2000. Effects of freeze-thaw and soil structure on nitrous oxide produced in a clay soil. *Soil Science Society of America Journal* 64, Nr. 5: 1638-1643.
- Van Kessel C, Pennock DJ, & Farrell RE. 1993. Seasonal variations in denitrification and nitrous oxide evolution at the landscape scale. *Soil Science Society of America Journal* 57: 988-995.
- Van Laar HH, Goudriaan J & van Keulen H. 1992. Simulation of crop growth for potential and water-limited production situations, as applied to spring wheat. *Simulation Reports* 27: 72 S.
- Velthof GL & Oenema O. 1995. Nitrous oxide fluxes from grassland in the Netherlands: II. Effects of soil type, nitrogen fertilizer application and grazing. *European Journal of Soil Science* 46: 541-549.

- Velthof GL, Kuikman PJ & Oenema O. 2002. Nitrous oxide emission from soils amended with crop residues. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 62: 249-261.
- Velthof GL, van Groenigen JW, Gebauer G, Pietrzak S, Jarvis SC, Pinto M, Corre W & Oenema O. 2000. Temporal stability of spatial patterns of nitrous oxide fluxes from sloping grassland. *Journal of Environmental Quality* 29, Nr. 5: 1397-1407.
- Venterea RT & Rolston DE. 2000. Mechanisms and kinetics of nitric and nitrous oxide production during nitrification in agricultural soil. *Global Change Biology* 6: 303-316.
- Vinther FP. 1992. Measured and simulated denitrification activity in a cropped sandy and loamy soil. *Biology & Fertilisation of Soils* 14: 43-48.
- Vogel T, Huang K, Zhang R & van Genuchten MT. 1996. The HYDRUS code for simulating one-dimensional water flow, solute transport, and heat movement in variably-saturated media. Version 5. Research report 140, US Salinity Laboratory, ARS USDA, Riverside CA, USA.
- Wagner-Riddle C & Thurtell GW. 1998. Nitrous oxide emissions from agricultural fields during winter and spring thaw as affected by management practices. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 52: 151-163.
- Wagner-Riddle C, Thurtell GW, Kidd GK, Beauchamp EG & Sweetman R. 1997. Estimates of Nitrous Oxide Emissions from Agricultural Fields over 28 months. *Canadian Journal of Soil Science* 77: 135-144.
- Weiske A, Benckiser G & Ottow JCG. 2001. Effect of the new nitrification inhibitor DMPP in comparison to DCD on nitrous oxide (N₂O) emissions and methane (CH₄) oxidation during 3 years of repeated applications in field experiments. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 60: 57-64.
- Weiske A, Benckiser G & Ottow JCG. 2001. Effect of the new nitrification inhibitor DMPP in comparison to DCD on nitrous oxide (N₂O) emissions and methane (CH₄) oxidation during 3 years of repeated applications in field experiments. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 60: 57-64.
- Wever H, Mussen S & Merckx R. 2002: Dynamics of trace gas production following compost and NO₃⁻ amendments to soil at different initial TOC/NO₃⁻ ratios. *Soil Biology & Biochemistry* 34: 1583-1591.
- Williams EJ, Hutchinson GL & Fehsenfeld FC. 1992. NO_x and N₂O emissions from soil. *Global Biogeochemical Cycles* 6: 351-388.
- Willmot CJ. 1981. On the validation of models. *Physical Geography* 2: 184-194.
- Zak SK & Beven KJ. 1999. Equifinality, sensitivity and predictive uncertainty in the estimation of critical loads. *Science of the Total Environment* 236: 191-214.
- Zhang Y, Li C, Zhou X & Moore B. 2002. A simulation model linking crop growth and soil biogeochemistry for sustainable agriculture. *Ecological Modelling* 151, Nr. 1: 75-108.

9 Anhang auf CD-ROM

Diese Dissertation wäre ohne die Unterstützung verschiedenster Menschen, bei denen ich mich an dieser Stelle bedanken möchte, nicht möglich gewesen.

Mein Dank gilt Herrn Professor Dr. Hans-Georg Frede für die Betreuung der Dissertation und für die von Vertrauen und Freiheit bestimmte Arbeitsatmosphäre am Institut für Landschaftsökologie und Ressourcenmanagement. Herrn Professor Dr. Peter Felix-Henningsen danke ich für die freundliche Übernahme des Zweitgutachtens.

Für die aufschlussreichen Diskussionen und Tipps bei der Durchführung und Erstellung dieser Arbeit sowie die kritische Durchsicht des Manuskriptes möchte ich mich ganz herzlich bei Dr. Lutz Breuer bedanken. Dr. Kellie Vaché danke ich für die programmiertechnische Unterstützung. Dr. Martin Bach sei gedankt, dass er mich dazu motiviert hat mich diesem Thema anzunehmen.

Herzlichen Dank auch an Dr. Changsheng Li für die vertrauensvolle Überlassung des DNDC-Quellcodes, die Hilfestellung bei der Arbeit am Modell und für seine Betreuung während meines Forschungsaufenthaltes in Durham an der University of New Hampshire, NH, USA.

Dank an die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), die diesen bilateralen Forschungsaufenthalt in den USA durch ihre Förderung ermöglicht hat.

Vielen Dank an Dr. Hermann Jungkunst für das Überlassen von N₂O-Daten sowie für den anregenden Austausch bzgl. der Arbeiten am DNDC Modell. Ebenso sei Dr. Henry Neufeldt für die Übermittlung ganzer N₂O-Emissionsdatensätze gedankt. Für die Nutzungserlaubnis von Messdaten, ohne die ich die Arbeit in der Form nicht hätte durchführen können, sei Professor Dr. Dr. h.c. Hans-Jürgen Jäger, Dr. Claudia Kammann, Dr. Rainer Brumme, Dr. Frank Schmädeke, Dr. Robert Teepe, Dr. Thomas Kamp und Ing. Franz Feichtinger gedankt.

Dank auch an Professor Dr. Klaus Butterbach-Bahl und an seine Kollegen und Doktoranden am IMK-IFU des Karlsruher Institut für Technologie in Garmisch-Partenkirchen für die Starthilfe und den Austausch bei den Arbeiten am DNDC Modell.

Herzlichen Dank an Kathrin Schneider, Julia Eyring und Stefan Reichenberger mit denen ich im Laufe der Zeit ein Büro teilen durfte und die wesentlich zu einem sehr angenehmen Büroklima beigetragen haben.

Bei allen anderen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern im Institut für Landschaftsökologie und Ressourcenmanagement möchte ich mich für das sehr gute Arbeitsklima bedanken. Es war schön hier zu arbeiten und so manches vermisse ich jetzt schon.

Meine Promotion wurde im Rahmen des Stipendenschwerpunktes „Indikatoren für eine nachhaltige Landnutzung“ der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU) angefertigt. Für die Vergabe des Promotionsstipendiums an meine Person sei an dieser Stelle der DBU gedankt.

Meinen Eltern Inge und Friedhelm Szyska danke ich für die immerwährende Unterstützung während meines Studiums und der Promotionszeit.

Bei meinem Partner Wolfgang Reiher möchte ich mich von Herzen für den Rückhalt, seine Unnachgiebigkeit (wenn es um wissenschaftliche Fragestellungen geht) und für sein entgegengebrachtes Verständnis bedanken.

Ich erkläre: Ich habe die vorgelegte Dissertation selbständig und ohne unerlaubte fremde Hilfe und nur mit den Hilfen angefertigt, die ich in der Dissertation angegeben habe. Alle Textstellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten Schriften entnommen sind, und alle Angaben, die auf mündlichen Auskünften beruhen, sind als solche kenntlich gemacht. Bei den von mir durchgeführten und in der Dissertation erwähnten Untersuchungen habe ich die Grundsätze guter wissenschaftlicher Praxis, wie sie in der „Satzung der Justus-Liebig-Universität Gießen zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis“ niedergelegt sind, eingehalten.“

Gießen, den 12. Februar 2009

Brigitta Margarete Szyska