

# Simulation des Schwefel-Haushaltes von landwirtschaftlich genutzten Böden mit dem Modell SULFONIE

Matthias Willms<sup>a</sup>, Frank Eulenstein<sup>a</sup>, Janusz Olejnik<sup>b</sup>, Kurt Christian Kersebaum<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Institut für Landnutzungssysteme und Landschaftsökologie

<sup>c</sup> Institut für Landschaftssystemanalyse

Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF) e. V.

Eberswalder Straße 84, 15374 Müncheberg

<sup>b</sup> Institut für Agrarmeteorologie der landwirtschaftlichen Universität Poznan,  
60-660 Poznan, Polen

mwillms@zalf.de

feulenstein@zalf.de

ckersebaum@zalf.de

**Abstract:** Zur Abbildung der Schwefeldynamik in der durchwurzelten Zone des Bodens wurde das Simulationsmodell SULFONIE auf Basis des Modells HERMES entwickelt. Auf Basis der Landnutzungsdaten, der Bodendaten und der Wetterdaten berechnet das Modell SULFONIE die aktuelle Verdunstung, die Sickerwasserrate, die Mineralisation der organischen Substanz und die Verlagerung von Sulfatschwefel aus der wurzelbeeinflussten Zone. Zusätzlich wurde das Modell an den Messergebnissen einiger Profile validiert.

## 1 Methoden

Das Simulationsmodell SULFONIE wurde von Kersebaum entwickelt, um die Schwefeldynamik der durchwurzelten Zone in Ackerböden abzubilden. Dabei verwendet das Modell einige der zentralen Module aus dem Modell HERMES [Ke95]. Das Modell arbeitet mit einer zeitlichen Auflösung von einem Tag und 10 cm Tiefenabschnitten des Bodens. Es ist auf den Bereich der wurzelbeeinflussten Zone (max. 2 m) beschränkt. Kapillarer Aufstieg aus Schichten unterhalb von 2 m wird berücksichtigt.

Die Simulation beschränkt sich auf die Prozesse der Schwefelmineralisation, der Schwefelaufnahme und der Sulfatverlagerung mit dem Sickerwasser und berücksichtigt die Schwefeleinträge über Düngung und atmosphärische Deposition. Der Prozess der mikrobiell katalysierten Oxidation von Sulfiden bei anaeroben Bedingungen unter Nitratverbrauch wird hier für den Bereich der wurzelbeeinflussten Bodenzone als quantitativ unbedeutend bewertet und daher vernachlässigt.

Zusätzlich zum Modell HERMES berücksichtigt das Modell SULFONIE die Ausfällung von Schwefel in Form von Gips und dessen Lösung, wenn infolge von Austrocknung

und Wiederbefeuchtung des Bodens die jeweiligen Grenzwerte überschritten werden. Abweichend vom Modell HERMES wird der Ertrag nicht vom Modell dynamisch berechnet, sondern vorgegeben.

Das Modell operiert auf der Grundlage der kleinsten homogenen Flächen (Polygone), die sich aus dem Verschneiden verschiedener thematischer Karten ergeben, (z. B. Schläge und Böden). Die entstehenden Polygone und die ihnen zugeordneten Eigenschaften werden vom Modell sequenziell verarbeitet. Dabei werden über die einzelnen Attribute weitere zugeordnete Tabellen aufgerufen, die die notwendigen Parameterzuweisungen (z. B. Boden- und Pflanzenparameter) und Modelleingaben (Boden, Wetter, Landnutzung) enthalten. Alle Dateien werden im ASCII-Format verarbeitet. Folgende Daten werden vom Modell benötigt:

*Wetter:* Tagesdurchschnittstemperatur, Temperatur um 14.00 Uhr, Wasserdampfdruck-Sättigungsdefizit um 14.00 Uhr, Niederschlag. Die Wetterdaten müssen in täglicher Auflösung vorliegen. Aus ihnen wird die Verdunstung auf Tagesbasis nach Haude [Ha55] berechnet. *Boden:* Unterkante der Schicht (kleinste Einheit 10 cm),  $C_{org}$ -Gehalt, Bodenart, Steingehalt, Lagerungsdichte, das Verhältnis von  $C_{org}$  zu  $S_{org}$ . *Landnutzung:* angebaute Fruchtart, Düngung (mineralisch, organisch), Ertrag, evtl. Strohnutzung und Zwischenfrucht, Termine für Bestellung, Düngung und Ernte.

## 2 Ergebnisse - Validierung

Für das Modell HERMES sind bezüglich der Sickerwassermenge wie auch der Stickstoff-Austräge zahlreiche Validierungen vorgenommen worden, z. B. [Mc95]. Aus diesem Grund wird hier die Sickerwassermenge nicht erneut hinterfragt. In diesem Beitrag soll vorgestellt werden, inwieweit die simulativ berechneten Sulfatschwefel-Mengen des Modells SULFONIE mit den unter Feldbedingungen gemessenen Werten übereinstimmen. Dazu werden alle 41 durchgeführten Bohrungen ausgewertet. Die Analysen auf Sulfatschwefel erfolgten in Bodenabschnitte zu 30 cm. Die Bodenproben sind in den Untersuchungsgebieten Mockritz bei Leipzig und Bramstedt bei Bremen genommen worden. Die Auswertung erfolgt nur bis zur Grenze des Grundwassers, da dort zusätzlich laterale Flüsse auftreten, die von dem Modell nicht abgebildet werden.

Eingangsdaten für die Simulations-Rechnungen sind die Landnutzungsdaten des jeweiligen Schlages sowie die Bodendaten der entsprechenden Bohrung. Die Simulations-Rechnungen werden für den Zeitabschnitt von 1977 bis 2001 durchgeführt. Da Bodenanalysen von 1977 nicht verfügbar waren, wurden die ersten 10 Jahre der Modellrechnung als numerischer Vorlauf verwendet und nicht ausgewertet. Testläufe des Modells haben ergeben, dass unter den gegebenen Standortbedingungen bei einem numerischen Vorlauf von 10 Jahren, die Sulfatschwefel-Mengen im Boden zu Beginn der Modellierung einen vernachlässigbaren Einfluss haben. Aus diesem Grund wird nur der Zeitabschnitt von 1986 bis 2000 ausgewertet.

Zur Validierung des Modelles wurden die Modellergebnisse den gemessenen Werten gegenübergestellt. Dafür wurde zunächst die gesamte Bodenschicht bis 2 m betrachtet.

In einem zweiten Schritt wurden für je 30 cm Abschnitt der Bohrungen die modellierten Werte mit den Analysen verglichen.

Der Korrelationskoeffizient von gemessenen und vom Modell berechneten Sulfatschwefel-Mengen in der gesamten Bodenschicht 0 – 2 m beträgt  $r^2 = 0,78$ . Dabei wird die Sulfatschwefel-Menge vom Modell leicht unterschätzt.

Werden für jede kartierte Flächeneinheit des Bodens (in Mockritz: Standorttyp, in Bramstedt: Bodentyp) zunächst Mittelwerte gebildet und für diese aggregierten Daten die gemessenen Sulfatschwefel-Mengen mit den simulativ berechneten verglichen, sinkt  $r^2$  zunächst auf 0,58. Wird jedoch das Niedermoor ausgegrenzt, so steigt der Korrelationskoeffizient auf 0,98. Dabei nähert sich die Regressionsgerade der 1 : 1-Geraden an.

Abbildung 1 zeigt die gemessenen und vom Modell berechneten Werte für jede 30-cm-Schicht. Die Steigung der Regressionsgeraden zeigt, dass das Modell die gemessenen Werte unterschätzt. Der Korrelationskoeffizient  $r^2$  liegt bei 0,65. Für Abbildung 2 wurden zunächst für jede kartierte Flächeneinheit des Bodens Mittelwerte je Schicht gebildet und erst dann der Korrelationskoeffizient berechnet. Bei diesem Vorgehen sinkt der Korrelationskoeffizient zunächst auf 0,50 ab. Nach Ausgrenzung der Niedermoore steigt  $r^2$  auf 0,98.

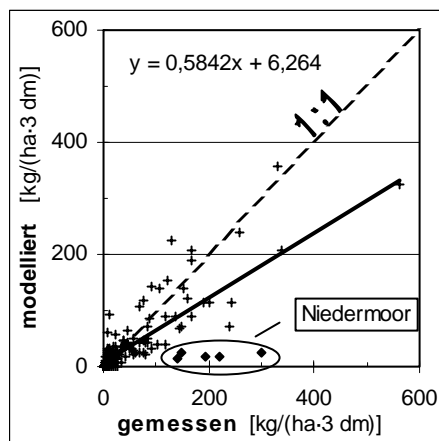


Abbildung 1: Sulfatschwefel-Mengen je 30 cm-Schicht

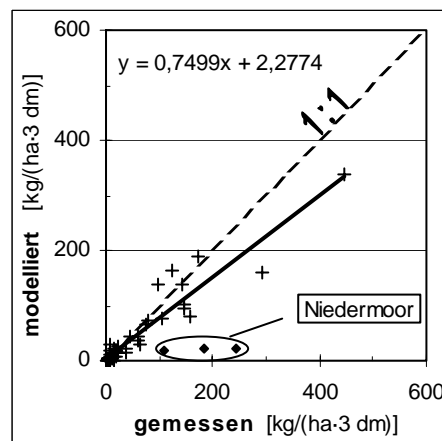


Abbildung 2: Sulfatschwefel-Mengen je 30 cm-Schicht, berechnet als Mittelwerte je Standorttyp bzw. Bodentyp, Niedermoor ausgegrenzt

### 3 Diskussion und Zusammenfassung

Generell zeigen gemessene und simulativ berechnete Werte eine gute Übereinstimmung. Für die beobachteten Abweichungen ist zunächst zu berücksichtigen, dass für diesen

Vergleich in der Praxis erhobene Landnutzungsdaten verwendet werden. Diese können bei der Düngung, der Ernte und den Terminen für Saat, Düngungen und Ernte Unsicherheiten aufweisen.

Die simulativ berechneten Sulfatschwefel-Mengen zeigen, dass über die pauschalen Unsicherheiten bei den Eingangsdaten hinaus, noch systematische Fehler vorliegen müssen. Diese verursachen in einigen Fällen eine zu geringe simulativ berechnete Sulfatschwefel-Menge. Dafür kommen folgende Ursachen in Frage:

- Im Untersuchungsgebiet Bramstedt wird die Sulfatschwefel-Menge im humosen Oberboden unterschätzt. Da dieser Effekt mit steigenden Humusgehalten größer wird, bildet in diesen Fällen das Modell die Mineralisation möglicherweise nicht richtig ab.
- Ebenfalls wird im Untersuchungsgebiet Bramstedt die Sulfatschwefel-Menge in den Mooren unterschätzt. Mögliche Ursachen sind Unsicherheiten bei den Eingangsdaten des Modells, der Bestimmung der Trockenrohdichte und Feldkapazität der Torfe zu vermuten.
- Im Untersuchungsgebiet Mockritz unterschätzt das Modell die Sulfatschwefel-Mengen im Unterboden der Auenböden. Dort tritt bei bindigen Böden ein Sulfatschwefel-Peak auf. Dieser wird vom Modell zwar nachgebildet, jedoch mit deutlich geringeren Mengen. Die größere Sulfatschwefel-Menge der Messwerte kann dabei aus der autotrophen Denitrifikation stammen, welche in diesem Gebiet nachgewiesen wurde. Dieser Vorgang wird vom Modell jedoch nicht abgebildet, da diese Bereiche aufgrund ihrer zeitweisen anaeroben Verhältnisse nicht zur Wurzelzone gehören. Weitere Validierungen des Modells sind von [Wi05] vorgenommen worden.

Generell konnte gezeigt werden, dass am Ende einer 25-jährigen Simulationsdauer eine gute Übereinstimmung zwischen gemessenen und simulativ berechneten Werten je 3-dm-Schicht besteht. Die Korrelationskoeffizienten liegen dabei zwischen  $r^2 = 0,65$  bis  $0,98$ . Das Modell neigt jedoch in einigen Fällen zu einer systematischen Unterschätzung des Sulfatschwefelgehaltes.

## Literaturverzeichnis

- [Ha55] Haude, W.: Zur Bestimmung der Verdunstung auf möglichst einfache Weise. - Mitt. Dt. Wetterd. 2 (11), Bad Kissingen (Dt. Wetterd.), 1955.
- [Ke95] Kersebaum, K. C.: Application of a simple management model to simulate water and nitrogen dynamics. Ecological modelling, 1995; 81: 145–156.
- [Mc95] McVoy, C. W.; Kersebaum, K. C.; Arning, M.; Kleeberg, P.; Othmer, H.; Schröder, U.: A data set from north Germany for the validation of agroecosystem models: documentation and evaluation. Ecological modelling, 1995; 81: 265–300.
- [Wi05] Willms, M.: Landwirtschaftliche Ursachen hoher Sulfatgehalte in gefördertem Trinkwasser, Bilanzierung und Modellierung des Schwefelhaushaltes am Beispiel von zwei überwiegend landwirtschaftlich genutzten Wassereinzugsgebieten, Diss., Fak. f. Agrarwissenschaften, Univ. Göttingen, 2005, 172 S.