LEACHN

Autoren: J.L. Hutson und R.J. Wagenet

1 Überblick

Das Modell LEACHN ist das Stickstoff-Transportmodell aus der Reihe der LEACHM (Leaching Estimation And Chemistry Model) Transportmodelle (*Hutson & Wagenet* 1992). Neben dem Stickstoffmodell sind ein Modell zum Wassertransport in der ungesättigten Zone LEACHW, ein Modell zum Transport und Abbau von Pflanzenschutzmitteln LEACHP, ein Modell über das Transportverhalten verschiedener anorganischer Chemikalien in der Bodenlösung LEACHC, sowie ein Modell LEACHB zur Beschreibung der Populationsdynamik von Bodenmikroorganismen enthalten. Das Stickstoffmodell baut wie die anderen Modelle auf dem Wassertransportmodell auf. Es beschreibt die Wasser- und Stickstoffflüsse in der ungesättigten Bodenzone bis zum Grundwasserbereich und berücksichtigt dabei Stickstofftransformationsprozesse wie sie in Ackerböden unter Feldbedingungen vorkommen.

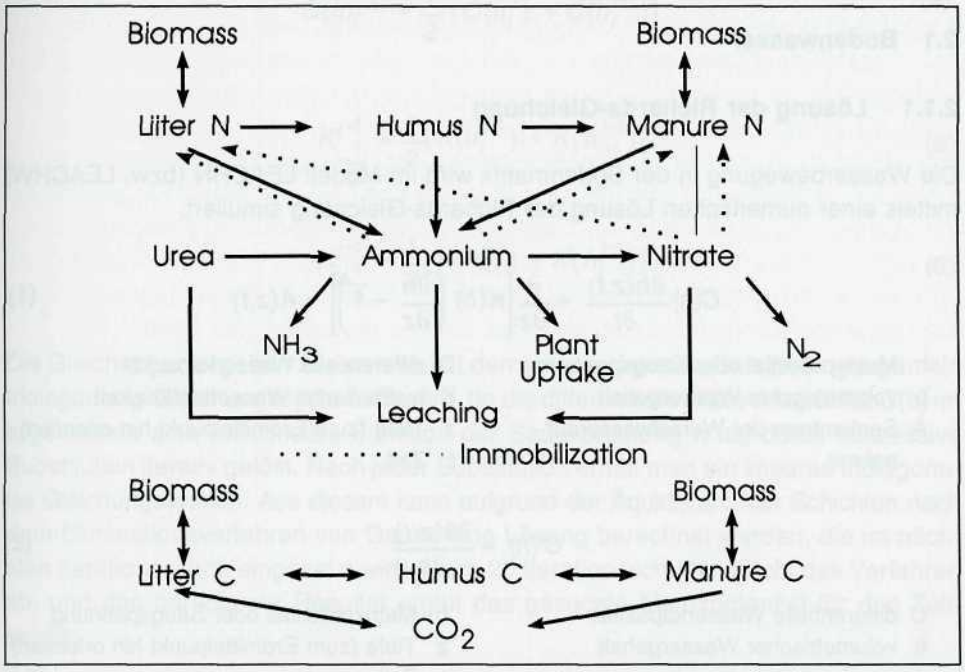

Abb. 1: N- und C-Kreislauf im Modell LEACHN (modifiziert nach *Johnsson et al.* 1987)

LEACHN ist als typisches Forschungsmodell konzipiert, das einfache Eingabeparameter benutzt und dessen Simulationsergebnisse sich leicht interpretieren lassen. Als deterministisches Modell, das Stoffflüsse eindimensional in vertikaler Richtung beschreibt und das ein, in hohem Maße räumlich und zeitlich variables, System simuliert, unterliegt es gewissen Einschränkungen. So können nur wiederholte Anwendungen des Modells mit unterschiedlichen Eingabedaten möglicher Feldbedingungen ein genaueres Bild der Variabilität des Wasser- und Stofftransports zeichnen. In diesem Sinne ist LEACHN auch für Managementzwecke einsetzbar. Es beschreibt die Flüsse und die Verteilung mineralischen Stickstoffs im Boden. Rückwirkungen des Wasser- und Stickstofftransports auf die Pflanzenentwicklung werden nicht modelliert, so daß auch keine Voraussagen über zu erwartende Ernteerträge möglich sind.

Der Dokumentation liegt die LEACHM-Version 3.0 vom Dezember 1992 zugrunde. In der neuesten Version 3.1 vom März 1993 wurde zusätzlich ein Kapazitätsmodell zum Wassertransport basierend auf *Addiscott* (1977) und *Nicholls et al.* (1982) aufgenommen.

2 Bodenwasser und Bodenwärme

2.1 Bodenwasser

2.1.1 Lösung der Richards-Gleichung

Die Wasserbewegung in der Bodenmatrix wird im Modell LEACHN (bzw. LEACHW) mittels einer numerischen Lösung der Richards-Gleichung simuliert.

$$C(h)\frac{\partial h(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[K(h)\left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1\right)\right] - A(z,t) \qquad (1)$$

h Matrixpotential oder Saugspannung
θ volumetrischer Wassergehalt
A Senkenterm der Wurzelwasseraufnahme
C differentielle Wasserkapazität
K hydraulische Wasserleitfähigkeit
z Tiefe (zum Erdmittelpunkt hin orientiert)
t Zeit

$$C(h) = \frac{\partial\theta(z,t)}{\partial h} \qquad (2)$$

C differentielle Wasserkapazität
θ volumetrischer Wassergehalt
h Matrixpotential oder Saugspannung
z Tiefe (zum Erdmittelpunkt hin orientiert)
t Zeit

Für die numerische Lösung, die auf der Methode der finiten Differenzen beruht, wird die Bodenmatrix vertikal in n äquidistante Schichten aufgeteilt. Dabei liegen der oberste und unterste Knotenpunkt der Diskretisierung als virtuelle Punkte außerhalb des betrachteten Bodenprofils. Sie werden für die Berechnung der Randbedingungen benötigt. Das resultierende Differenzenschema für den Zeitschritt Δt vom Zeitpunkt j-1 nach j und der räumlichen Schrittweite Δz von Knotenpunkt i-1 zu i folgt dem Crank-Nicolson Schema (i=2,...,n-1):

$$C(h)_i^{j-\frac{1}{2}} \frac{h_i^j - h_i^{j-1}}{\Delta t} = \frac{K_{i-\frac{1}{2}}^{j-1}}{2(\Delta z)^2} (h_{i-1}^{j-1} + h_{i-1}^j + h_i^{j-1} + h_i^j + 2\Delta z) - \frac{K_{i+\frac{1}{2}}^{j-1}}{2(\Delta z)^2} (h_i^{j-1} + h_i^j + h_{i+1}^{j-1} + h_{i+1}^j + 2\Delta z) \tag{3}$$

wobei

$$C(h)_i^{j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} [C(h_i^j) + C(h_i^{j-1})] \tag{4}$$

$$K_{i-\frac{1}{2}}^{j-1} = \frac{1}{2} [K(h_i^{j-1}) + K(h_{i-1}^{j-1})] \tag{5}$$

$$K_{i+\frac{1}{2}}^{j-1} = \frac{1}{2} [K(h_{i+1}^{j-1}) + K(h_i^{j-1})] \tag{6}$$

Die Gleichungen ergeben zusammen mit den entsprechenden Randbedingungen ein tridiagonales Gleichungssystem. Es wird, da die differentielle Wasserkapazität C(h) im allgemeinen eine nichtlineare Funktion der Saugspannung h ist, durch sukzessive Substitution iterativ gelöst. Nach jeder Substitution erhält man ein lineares tridiagonales Gleichungssystem. Aus diesem kann aufgrund der Äquidistanz der Schichten nach dem Eliminationsverfahren von Gauss eine Lösung berechnet werden, die im nächsten Iterationsschritt eingesetzt wird. Nach 20 Iterationsschritten bricht das Verfahren ab, und das berechnete Resultat ergibt das gesuchte Matrixpotential für den Zeitschritt.

2.1.2 Obere Randbedingung

Die obere Randbedingung berücksichtigt zeitabhängig, je nach den vorgegebenen metereologischen Bedingungen die Infiltration in die Bodenmatrix mit und ohne überstauendem Wasser, die Verdunstung an der Bodenoberfläche und die Gleichgewichtssituation ohne Wasserfluß. Für z=0 gilt:

$$q(z,t) = \begin{cases} -(K\frac{\partial h}{\partial z} - K) = E - N & \text{und } h_{min} \leq h(z,t) \leq 0 \\ -(K\frac{\partial h}{\partial z} - K) < E - N & \text{und } h(z,t) = h_{min} \\ -(K\frac{\partial h}{\partial z} - K) > E - N & \text{und } h(z,t) = 0 \end{cases} \quad (7)$$

z Bodentiefe = 0
q Wasserfluß
h Matrixpotential
K hydraulische Leitfähigkeit
h_{min} minimales Matrixpotential, bei dem die Wasserverdunstung limitiert ist
E potentielle Evaporation
N Niederschlagsrate

Zunächst wird ermittelt, welcher der Fälle zum aktuellen Zeitpunkt vorliegt, um dann das zugehörige Matrixpotential und die hydraulische Leitfähigkeit der obersten Bodenschicht zu berechnen. Ist die vorgegebene Beregnungsrate kleiner als die, durch die aktuelle hydraulische Leitfähigkeit des Bodens bestimmte, maximal mögliche Infiltration, kommt es zu einer konstanten, der Beregnungsrate entsprechenden Infiltration. In diesem Fall wird die zum vorgegebenen Fluß gehörende Saugspannung der obersten Bodenschicht iterativ bestimmt. Für jedes Regen- bzw. Beregnungsereignis ergibt sich die Infiltrationsdauer aus der vorgegebenen Wassermenge und der Infiltrationsrate. Falls überstauendes Wasser auftritt, infiltriert die vorgegebene Wassermenge, bis sie versickert ist, oder das nächste Regenereignis eintritt.

2.1.3 Untere Randbedingung

Die untere Randbedingung kann bestimmt werden durch die Angabe der Höhe des Grundwasserspiegels,

$$h(z,t) = 0 \ , \quad z = z_{GW}(t) \quad (8)$$

h Matrixpotential
z_{GW} Höhe des Grundwasserspiegels als Abstand von der Bodenoberfläche

durch die Bedingung des freien Abfließens am unteren Rand,

$$\frac{\partial h}{\partial z} = 0 \ , \quad z = z_E \tag{9}$$

h Matrixpotential
z_E Länge des betrachteten Bodenprofils

oder durch die Bedingung, daß kein Fluß über den unteren Rand stattfindet.

$$\frac{\partial h}{\partial z} = 1 \ , \quad z = z_E \tag{10}$$

h Matrixpotential
z_E Länge des betrachteten Bodenprofils

2.1.4 Hydraulische Funktionen

Um das durch die Richards-Gleichung (1) berechnete Bodenmatrixpotential in Beziehung zum Bodenwassergehalt zu setzen, und um die differentielle Wasserkapazität C(h) und die hydraulische Leitfähigkeit K(h) in Abhängigkeit vom Matrixpotential berechnen zu können, benötigt man hydraulische Funktionen. Diese definieren eine funktionale Beziehungen zwischen dem Matrixpotential h, dem volumetrischen Wassergehalt θ sowie zwischen der hydraulischen Leitfähigkeit K und dem Matrixpotential h. Diese Beziehungen werden für jede der betrachteten Bodenschichten benötigt. LEACHM folgt der Beschreibung der hydraulischen Funktionen nach *Hutson & Cass* (1978). Für das Matrixpotential wird folgender Ausdruck gesetzt:

$$h(\theta) = \begin{cases} a\left(\dfrac{\theta}{\theta_{sat}}\right)^{-b} & \text{für } \theta_i \le \theta \le \theta_{sat} \\[2ex] a\left(1 - \dfrac{\theta}{\theta_{sat}}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\dfrac{\theta}{\theta_{sat}}\right)^{-b}\left(1 - \dfrac{\theta}{\theta_i}\right)^{-\frac{1}{2}} & \text{für } \theta < \theta_i \end{cases} \tag{11}$$

$$\theta_i = \frac{2b}{1 + 2b}\,\theta_{sat} \tag{12}$$

h Matrixpotential
θ volumetrischer Wassergehalt
a,b gefittete Konstanten
θ_{sat} Porosität, gleichgesetzt dem gesättigten vol. Wassergehalt

Die empirischen Konstanten a und b werden durch Anpassen der Kurve an gemessene Werte pro Bodenschicht ermittelt oder berechnen sich aus den Angaben über die Korngrößenverteilung aus sogenannten Pedotransferfunktionen.
Die hydraulische Leitfähigkeit ist nach *Campbell* (1974) durch

$$K(h) = K_{sat}\left(\frac{a}{h}\right)^{2+\frac{3}{b}} \tag{13}$$

K hydraulische Leitfähigkeit
h Matrixpotential
K_{sat} gesättigte hydraulische Leitfähigkeit
a,b empirische Konstanten aus Gleichung (11)

beschrieben. Dieser Ausdruck wird für Werte des Matrixpotentials von $h<h(\theta_l)$ verwendet. Sonst wird für entsprechenden Wassergehaltswerte die transformierte Gleichung (13) benutzt.

$$K(\theta) = K_{sat}\left(\frac{\theta}{\theta_{sat}}\right)^{2+\frac{3}{b}} \tag{14}$$

K hydraulische Leitfähigkeit
q volumetrischer Wassergehalt
q_{sat} Porosität, gleichgesetzt dem gesättigten vol. Wassergehalt
K_{sat} gesättigte hydraulische Leitfähigkeit
a,b empirische Konstanten aus Gleichung (11)

Um numerische Fehler bei der Berechnung der differentiellen Wasserkapazität zu vermeiden (Division durch Null), werden nur Wassergehaltswerte bis knapp unter dem gesättigten Wassergehalt zugelassen ($\theta \leq 0{,}9999\,\theta_{sat}$). Dabei wird angenommen, daß der gesättigte Wassergehalt mit der Porosität des Bodens identisch ist.

2.1.5 Potentielle Evapotranspiration

Die Berechnung der potentiellen Evapotranspiration folgt der Methode von *Childs & Hanks* (1975). Aus der Vorgabe der wöchentlichen Kesselverdunstung (PAN), die die Verdunstung an der Oberfläche eines offenen Gewässers angibt, und dem Kesselfaktor der betrachteten Pflanzenart (f_{PAN}) wird die tägliche potentielle Evapotranspiration (ET_{day}) berechnet:

$$ET_{day} = f_{PAN} \frac{PAN}{7} \tag{15}$$

ET_{day}	tägliche potentielle Evapotranspiration	f_{PAN}	Kesselfaktor
		PAN	wöchentliche Kesselverdunstung

Der Kesselfaktor (f_{PAN}) setzt die Kesselverdunstung in Beziehung zur Evapotranspiration eines Pflanzen-Lysimeters, das mit der betrachteten Kulturart bepflanzt ist und den gleichen metereologischen Bedingungen wie der Kessel ausgesetzt ist. Die potentielle tägliche Transpiration (T_{day}) ergibt sich durch Multiplikation der täglichen Evapotranspiration mit dem Pflanzenbedeckungsgrad (f_{PBG}):

$$T_{day} = f_{PBG}\, ET_{day} \tag{16}$$

T_{day}	tägliche potentielle Transpiration
f_{PBG}	Pflanzenbedeckungsgrad
ET_{day}	tägliche potentielle Evapotranspiration

Die potentielle tägliche Verdunstung an der Bodenoberfläche (E_{day}) berechnet sich als Differenz aus der potentiellen täglichen Evapotranspiration und der potentiellen täglichen Transpiration:

$$E_{day} = ET_{day} - T_{day} \tag{17}$$

E_{day}	tägliche potentielle Evaporation
ET_{day}	tägliche potentielle Evapotranspiration
T_{day}	tägliche potentielle Transpiration

Innerhalb eines Tages wird die tägliche potentielle Evapotranspiration auf 12 Stunden des Tages verteilt und zwar auf die Zeit von 30% des Tageszeitraums (7:12 Uhr) bis 80% (19:12 Uhr) nach:

$$ET_p = ET_{max} \sin[2\pi\,(t - 0{,}3)] \qquad \text{für } 0{,}3 \text{ Tag} \le t \le 0{,}8 \text{ Tag} \tag{18}$$

ET_p potentielle Evapotranspiration

E_{max} maximale Evapotranspiration, die zur Tageszeit 0,55 Tag auftritt (= $ET_{day}\,\pi$)

Der Anteil f der während des Zeitraums $\Delta t = t_2 - t_1$ erfolgten Evapotranspiration ergibt sich dann aus:

$$f = \frac{\cos[2\pi(t_1 - 0{,}3)] - \cos[2\pi(t_2 - 0{,}3)]}{2} \tag{19}$$

Ebenso berechnet sich die potentielle Verdunstung (E_p) und die potentielle Transpiration (T_p) während des Zeitintervalls Δt aus:

$$E_p = f\,E_{day} \quad und \quad T_p = f\,T_{day} \tag{20}$$

E_p	potentielle Evaporation oder potentielle Verdunstung	f	Faktor für den Zeitraum Δt
		E_{day}	tägliche potentielle Evaporation
T_p	potentielle Transpiration	T_{day}	tägliche potentielle Transpiration

2.1.6 Wurzelwasseraufnahme

Der Senkenterm A(z,t) in der Richards-Gleichung (1), der die Wurzelwasseraufnahme beschreibt, wird nach *Nimah & Hanks* (1973) für die Tiefe i und im Zeitintervall von j-1 nach j berechnet:

$$A_i^{j-\frac{1}{2}} = \frac{\left[H_{root} + i\Delta z\,(1 + R_c) - h_i^{j-\frac{1}{2}}\right]\left[RDF_i^{j-\frac{1}{2}}\,K_i^{j-\frac{1}{2}}\right]}{\Delta z\,\Delta x} \tag{21}$$

$$h_i^{j-\frac{1}{2}} = \frac{h_i^j + h_i^{j-1}}{2} \tag{22}$$

$$RDF_i^{j-\frac{1}{2}} = \frac{RDF_i^j + RDF_i^{j-1}}{2} \tag{23}$$

$$K_i^{j-\frac{1}{2}} = \frac{K(h_i^j) + K(h_i^{j-1})}{2} \tag{24}$$

H_{root}	Wassersaugspannung in der Wurzel an der Wurzeloberfläche
1+Rc	Wurzelwiderstandsterm zum Wasserfluß im System Boden-Pflanze
$h_i^{j-1/2}$	Matrixpotential der i-ten Bodenschicht im Zeitintervall von j-1 nach j, berechnet aus den Matrixpotentialen h_i^j und h_i^{j-1} der i-ten Bodenschicht zu den Zeiten j und j-1
$RDF_i^{j-1/2}$	Wurzeldichte in der i-ten Bodenschicht im Zeitintervall von j-1 nach j
$K_i^{j-1/2}$	Wasserleitfähigkeit in der i-ten Bodenschicht im Zeitintervall von j-1 nach j
Δx	Entfernung zwischen Wurzel und Meßfühler zur Bestimmung des Wasserpotentials an der Wurzel (10 mm)
z	Tiefe (zum Erdmittelpunkt orientiert)

H_{root} wird iterativ so bestimmt, daß die Wassermenge, die über das Wurzelsystem während des Zeitintervalls aufgenommen wird, gleich der durch die potentielle Transpiration im Zeitintervall vorgegebenen Menge ist. Dabei muß H_{root} Werte im Bereich

zwischen 0 und -3000 kPa annehmen, und der Boden darf durch Transpiration nicht unter ein Matrixpotential von -1500 kPa austrocknen. In trockenen Böden kann daher die aktuelle Transpiration kleiner als die potentielle Transpiration sein.

2.2 Bodenwärme

Die Simulation des Wärmetransportes und der Temperaturverteilung im Boden folgt dem Ansatz von *Tillotson et al.* (1980). Grundlage der Simulation ist die Wärmeleitungsgleichung

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[K_h(\theta)\frac{\partial T}{\partial z}\right] \tag{25}$$

T	Bodentemperatur	$K_h(\theta)$	Wärmeleitfähigkeit des Bodens beim vol. Wassergehalt θ
C_p	gravimetrische Wärmekapazität des Bodens	ρ	Lagerungsdichte des Bodens

Für die volumetrische Wärmekapazität gilt:

$$\rho C_p = \rho_s C_s + \theta \rho_w C_w \tag{26}$$

ρC_p	volumetrische Wärmekapazität
ρ_s	Dichte der Bodensubstanz
C_s	gravimetrische Wärmekapazität der Bodensubstanz (= 840 J kg^{-1} °C^{-1})
ρ_w	Dichte des Wassers (= 1000 kg m^{-3})
C_w	gravimetrische Wärmekapazität des Wassers (= 4,2 kJ kg^{-1} °C^{-1})

Die Wärmeleitungsgleichung wird numerisch wie die Stofftransport-Gleichung gelöst. Die obere Randbedingung ergibt sich durch Interpolation aus der mittleren wöchentlichen Tagestemperatur und der mittleren wöchentlichen Temperaturamplitude. Die Temperatur an der Bodenoberfläche steigt von einem Tagesminimum um 6 Uhr linear auf ein Tagesmaximum um 14:24 Uhr (60% des Tages) an, sinkt dann bis 21 Uhr linear auf eine Temperatur, die um 30% des aktuellen Temperaturbereichs über der minimalen Temperatur liegt, ab. Diese minimale Temperatur wird durch lineares Absinken der Temperatur um 6 Uhr des nächsten Tages erreicht. Die untere Randbedingung wird durch Vorgabe eines Wärmereservoirs am unteren Profilende bestimmt. Dazu wird angenommen, daß die Mächtigkeit der untersten Bodenschicht virtuell auf 2 m vergrößert wird, und kein Wärmefluß an ihrem unteren Rand stattfindet. Dies führt zu einer hohen Wärmekapazität für die unterste Schicht und einem ausgeprägteren Temperaturverzug am unteren Rand.

3 Bodenstickstoff

3.1 Stickstofftransport

Der Stofftransport durch die Bodenmatrix wird durch vier Prozesse beschrieben:

- Molekulare Diffusion im Bodenwasser aufgrund eines Konzentrationsgradienten des Stoffes in der Bodenlösung,
- Diffusion in der Bodenluft aufgrund eines Konzentrationgradienten der gasförmigen Phase des Stoffes,
- Konvektion des Stoffes als Ergebnis des Transportes von Bodenwasser, in dem der Stoff gelöst ist,
- Konvektion des Stoffes in der Gas-Phase mit der Bewegung der Bodenluft, die durch Schwankungen des Luftdrucks, durch Bewässerung und Austrocknung, sowie durch Schwankungen des Grundwasserspiegels hervorgerufen wird.

Zusätzlich gibt es Quellen und Senken des jeweiligen Stoffes, die in der Massenbilanz berücksichtigt werden müssen. Unter der Annahme, daß sich die gasförmige, die gelöste und die an die Bodenmatrix gebundene Phase des Stoffes immer im unmittelbaren Gleichgewicht befinden, erhält man folgende allgemeine Stofftransportgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[(\theta + \rho K_d + \varepsilon K_H)c\right] = \frac{\partial}{\partial z}\left[\theta D(\theta,q)\frac{\partial c}{\partial z} - qc\right] + \Phi_c \qquad (27)$$

D	Dispersionskoeffizient	K_H	Henry-Konstante
θ	volumetrische Wassergehalt	ε	volumetrischer Anteil des luftgefüllten Porenraums
q	Wasserflußdichte		
Φ_c	Quellen-/ Senkenterme	c	Stoffkonzentration in der Bodenlösung
ρ	Lagerungsdichte des Bodens	z	Tiefe
K_d	Adsorptionskonstante	t	Zeit

wobei der Dispersionskoeffizient D(θ,q) durch folgende Gleichung gegeben ist:

$$\theta\ D(\theta,q) = D_{oL}\ \alpha_D \exp(\beta_D \theta) + \lambda\,|q| + D_{oG}\left(\frac{\varepsilon^{\frac{10}{3}}}{\theta_{sat}^2}\right) K_H \tag{28}$$

D_{oL}	molekularer Diffusionskoeffizient in der flüssigen Phase
D_{oG}	molekularer Diffusionskoeffizient in der gasförmigen Phase
α_D, β_D	empirische Konstanten
K_H	Henry-Konstante
θ_{sat}	Porosität, d.h. der volumetrische Anteil des Porenraums, gleichgesetzt dem gesättigten vol. Wassergehalt
ε	vol. Anteil des luftgefüllten Porenraums
λ	Dispersivität
θ	vol. Wassergehalt

Diese Transportgleichung wird zusammen mit den entsprechenden Randbedingungen numerisch durch ein finites Differenzenverfahren gelöst. Die benötigte Diskretisierung der Stofftransportgleichung folgt der Arbeit von *Bresler* (1973) bei Vernachlässigung der Terme zweiter Ordnung. Dabei wird die numerische Dispersion durch einen empirischen Ansatz korrigiert (*Hutson & Wagenet*, 1992). Der Konvektionsterm in Gleichung (27) wird unter Berücksichtigung der Richtung des Wasserflusses diskretisiert (*Hutson & Wagenet*, 1992).

Im Modell LEACHN wird für die drei Stickstoffverbindungen Harnstoff ($(NH_2)_2CO$), Ammonium (NH_4^+), und Nitrat (NO_3^-) der Transport im und mit dem Bodenwasser berücksichtigt. Für jede der drei N-Verbindungen wird eine Transportgleichung nach (27) angesetzt und durch entsprechende Senkenterme (Φ_I) für jede Bodenschicht ergänzt (I = HS für Harnstoff, I = NH für Ammonium, und I = NO für Nitrat). Die Senkenterme koppeln die resultierenden Transportgleichungen.

3.1.1 Senkenterm für Harnstoff

Für den Harnstoff ergibt sich der Senkenterm (Φ_{HS}) pro Bodenschicht aus der Harnstoff-Hydrolyse:

$$\Phi_{HS} = -k_{HS}\ c_{HS}\ (\theta + \rho\ K_{d,HS})\ e_\theta\ e_T \tag{29}$$

Φ_{HS}	Senkenterm der Harnstoff-Hydrolyse	$K_{d,HS}$	Adsorptionskoeffizient des Harnstoffs
c_{HS}	Harnstoffkonzentration in der Bodenlösung	k_{HS}	Abbaurate für Harnstoff
e_θ	Reduktionsfunktion des Wassergehalts	θ	volumetrischer Wassergehalt
		ρ	Lagerungsdichte
		e_T	Reduktionsfunktion der Temperatur

3.1.2 Reduktionsfuntionen zum Wassergehalt und zur Temperatur

Die Reduktionsfunktionen des Wassergehaltes und der Temperatur beschreiben pro Bodenschicht die Wirkung der abiotischen Faktoren Wassergehalt und Temperatur auf die im wesentlichen durch mikrobielle Aktivität angetriebenen Stickstofftransformationsprozesse (*Johnsson et al.*, 1987).
Die Reduktionsfunktion des Wassergehalts fällt auf beiden Seiten eines optimalen Wassergehaltsniveaus bei sehr trockenen oder bei sehr nassen Böden ab:

$$e_\theta = \begin{cases} e_{sat} + (1 - e_{sat}) \dfrac{\theta_{sat} - \theta}{\theta_{sat} - \theta_h} & \text{für } \theta_h < \theta \le \theta_{sat} \\ 1 & \text{für } \theta_l \le \theta \le \theta_h \\ \dfrac{\max(\theta, \theta_w) - \theta_w}{\theta_l - \theta_w} & \text{für } \theta < \theta_l \end{cases} \tag{30}$$

e_θ Reduktionsfunktion des Wassergehalts
e_{sat} Reduktionsfaktor bei Wassersättigung
θ_{sat} Porosität, gleichgesetzt dem gesättigten vol. Wassergehalt
θ_w minimaler Wassergehalt, bei dem keine N-Transformationen mehr auftreten
θ_l unterer Wert des optimalen Wassergehaltsniveaus
θ_h oberer Wert des optimalen Wassergehaltsniveaus

Die Reduktionsfunktion e_T für Temperatureinflüsse auf die N-Transformationen ist durch eine Q_{10}-Temperaturfunktion gegeben. Der Q_{10}-Wert gibt den Faktor an, mit dem sich die N-Transformationsrate bei einer Erhöhung oder Erniedrigung der Temperatur um 10 °C ändert:

$$e_T = Q_{10}^{0,1(T-TB)}$$

T Temperatur
TB Basis-Temperatur, bei der die Ratenkonstanten der N-Transformationen gelten
Q_{10} Faktor

3.1.3 Quellen- und Senkenterme für Ammonium

Für Ammonium setzt sich der Quellen-/Senkenterm zusammen aus:

$$\Phi_{NH} = \Phi_{HS} + \Phi_{MinNH} - \Phi_{ImmNH} - \Phi_{Nit} - \Phi_{WNH} - \Phi_{Vol} \tag{32}$$

Φ_{NH} Quellen-/ Senkenterm für Ammonium
Φ_{HS} Quellen durch Harnstoff-Hydrolyse
Φ_{MinNH} Quellen durch Stickstoff-Mineralisierung aus frischer organischer Substanz, Humus und organischem Dünger (Gleichung (51))
Φ_{ImmNH} Senke durch Stickstoffimmobilisierung in frische organische Substanz durch Bodenmikroorganismen und Humusbildung (Gleichung (52))
Φ_{Nit} Senke durch Nitrifizierung
Φ_{WNH} Senke durch Ammonium-Aufnahme der Planzenwurzeln (Gleichung (63))
Φ_{Vol} Senke durch gasförmige Verluste aus der Volatilisierung von Ammoniak aus der obersten Bodenschicht

Dabei wird die Senke durch Nitrifizierung pro Bodenschicht mit Gleichung (33) beschrieben (*Rolston et al.* 1984).

$$\Phi_{Nit} = k_{Nit} \max \left\{ 0, \left[c_{NH} (\theta + \rho\ K_{d,NH}) - c_{NO} \frac{\theta}{r_{max}} \right] \right\} e_\theta\ e_T \tag{33}$$

Φ_{Nit} Senke durch Nitrifizierung
k_{Nit} Nirtrifikationsrate
c_{NH} Konzentration von Ammonium in der Bodenlösung
$K_{d,NH}$ Adsorptionskoeffizienten von Ammonium
c_{NO} Konzentration von NO_3 in der Bodenlösung
ρ Lagerungsdichte
r_{max} maximale Verhältnis von Nitrat zu Ammonium bei dem keine Nitrifizierung mehr auftritt
e_θ Reduktionsfunktion der Temperatur
e_θ Reduktionsfunktion des Wassergehalts

Für die oberste, 10 cm mächtige, Bodenschicht ist die Volatilisierung von Ammoniak durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\Phi_{Vol} = k_{Vol}\ c_{NH,1}\ \theta_1$$

Φ_{Vol} Senke durch Volatilisierung
k_{Vol} Volatilisierungrate
$c_{NH,1}$ Ammoniumkonzentration in der Bodenlösung der obersten Bodenschicht
θ_1 volumetrischer Wassergehalt der obersten Bodenschicht

Innerhalb eines Tages kann nicht mehr als die Hälfte des gelösten Ammoniums verflüchtigen.

3.1.4 Quellen- und Senkenterme für Nitrat

Den Quellen- und Senkenterm für Nitrat erhält man aus:

$$\Phi_{NO} = \Phi_{Nit} - \Phi_{ImmNO} - \Phi_{WNO} - \Phi_{Den} \tag{35}$$

Φ_{NO} Quellen- und Senkenterm für Nitrat
Φ_{Nit} Quelle durch Nitrifizierung (Gleichung (33))
Φ_{ImmNO} Senke durch Immobilisierung (Gleichung (53))
Φ_{WNO} Senke durch Nitrat-Aufnahme der Planzenwurzeln
Φ_{Den} Nitratsenke durch Denitrifizierung (Gleichung (36))

Der Prozeß der Denitrifizierung wird dabei pro Bodenschicht durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\Phi_{Den} = k_{Den} \frac{c_{NO}^2}{c_{NO}+K_{NO}} \; e_{\theta,Den} \; e_T \tag{36}$$

k_{Den} Denitrifizierungsrate
Φ_{Den} Nitratsenke durch Denitrifizierung
c_{NO} Nitratkonzentration in der Bodenlösung
K_{NO} Halbsättigungskonstante oder Michaelis-Menten Konstante
$e_{\theta,Den}$ Reduktionsfunktion der Denitrifizierung zum Wassergehalt
e_T Reduktionsfunktion der Temperatur

Die Reduktionsfunktion der Denitrifizierung berechnet sich aus:

$$e_{\theta,Den} = \max\left\{0, \left(\frac{\theta - 0{,}6\,\theta_{sat}}{\theta_{sat} - 0{,}6\,\theta_{sat}}\right)^2\right\} \tag{37}$$

$e_{\theta,Den}$ Reduktionsfunktion der Denitrifizierung zum Wassergehalt
θ_{sat} Porosität, gleichgesetzt dem gesättigten vol. Wassergehalt

Durch die Denitrifizierung kann maximal 10% des aus frischer organischer Substanz, Humus und organischem Dünger verfügbaren Kohlenstoffs verbraucht werden. Die restlichen Senken (Φ_{ImmNO}) und (Φ_{WNO}) sind in den Abschnitten 3.2 und 4.2 erläutert.

3.2 Stickstoffmineralisierung und -immobilisierung

Nach dem Modellkonzept von *Johnsson et al.* (1987) unterscheidet LEACHN drei unterschiedliche Vorräte an organisch gebundenem N und entsprechend drei Quellen des für Bodenmikroorganismen verfügbaren Kohlenstoffs. Diese drei Vorräte an organischer Substanz bestehen aus

a) einem sich schnell umsetzenden Vorrat, der den Komplex aus frischer organischer Substanz und mikrobieller Biomasse darstellt (abgekürzt lit für engl. litter),
b) einem sich langsam umsetzenden Vorrat, der den Humus repräsentiert (abgekürzt Hum), und
c) einer Komponente, die sich aus organischen Düngern tierischer Herkunft ableitet, und sich in der chemischen Zusammensetzung wesentlich von Pflanzenrückständen, die zum Komplex frischer organischer Substanz zu rechnen sind, unterscheidet (abgekürzt man für engl. manure).

Zur Beschreibung der N-Mineralisierung und N-Immobilisierung in diesen drei Fraktionen organischer Substanz wird angenommen:

1) Der N-Bedarf für den internen Kohlenstoffkreislauf und die Humusbildung ist durch ein konstantes, für die abbauende mikrobielle Biomasse und den gebildeten Humus gleiches, C/N-Verhältnis bestimmt.
2) Es wird mit dem C-Abbau entsprechend dem aktuellen C/N-Verhältnis der abgebauten organischen Substanz Stickstoff freigesetzt.

Der Abbau von C aus frischer organischer Substanz wird durch eine Reaktion 1. Ordnung mit konstanter Mineralisierungsrate (k_{lit}) beschrieben, die durch die Reduktionsfunktionen e_θ und e_T an den aktuellen Wassergehalt und die Temperatur der betrachteten Bodenschicht angepaßt wird. Für die aus frischer organischer Substanz abgebaute Kohlenstoffkonzentration ($C_{lit,abg}$) gilt:

$$\frac{dC_{lit,abg}}{dt} = k_{lit}\ e_\theta\ e_T\ C_{lit} \tag{38}$$

$C_{lit,abg}$	aus frischer organischer Substanz abgebaute Kohlenstoffkonzentration
C_{lit}	Kohlenstoffkonzentration in fr. org. Substanz
k_{lit}	C-Mineralisierungsrate aus fr. org. Substanz
e_θ	Reduktionsfunktion des Wassergehalts
e_T	Reduktionsfunktion der Temperatur

Die Effektivitätskonstante (f_e) und die Humusbildungskonstante (f_h) bestimmen die Verteilung des abgebauten C in Humus, mikrobielle Biomasse und CO_2:

$$\frac{dC_{lit,CO_2}}{dt} = (1 - f_e)\ \frac{dC_{lit,abg}}{dt} \tag{39}$$

$$\frac{dC_{lit,Hum}}{dt} = f_e\ f_h\ \frac{dC_{lit,abg}}{dt} \tag{40}$$

$$\frac{dC_{lit,lit}}{dt} = f_e\ (1 - f_h)\ \frac{dC_{lit,abg}}{dt} \tag{41}$$

$C_{lit,abg}$ Konzentration des aus frischer organischer Substanz abgebauten Kohlenstoffs
$C_{lit,CO2}$ Konzentration des aus frischer organischer Substanz zu CO_2 abgebauten Kohlenstoffs
$C_{lit,Hum}$ Konzentration des aus frischer organischer Substanz abgebauten und im Humus immobilisierten Kohlenstoffs
$C_{lit,lit}$ Konzentration des aus frischer organischer Substanz abgebauten und in mikrobieller Biomasse immobilisierten Kohlenstoffs
f_e Effektivitätskonstante (Verhältnis von immobilen C und insgesamt abgebautem C)
f_h Humusbildungskonstante

Für die Kohlenstoffkonzentration aus der frischen organischen Substanz (C_{lit}) erhält man insgesamt:

$$\frac{dC_{lit}}{dt} = [-f_h f_e - (1 - f_e)]\ \frac{dC_{lit,abg}}{dt} = [-f_h f_e - (1 - f_e)]\ k_{lit}\ e_\theta\ e_T\ C_{lit} \tag{42}$$

Genauso ergibt sich für C des organischen Düngers (C_{man}):

$$\frac{dC_{man}}{dt} = [-f_h f_e - (1 - f_e)]\ k_{man}\ e_\theta\ e_T\ C_{man} \tag{43}$$

C_{lit} Kohlenstoffkonzentration in frischer org. Substanz
k_{lit} C-Mineralisierungsrate aus frischer org. Substanz
C_{man} Kohlenstoffkonzentration im organischen Dünger
k_{man} C-Mineralisierungsrate aus organischem Dünger
e_θ Reduktionsfunktion des Wassergehalts
e_T Reduktionsfunktion der Temperatur
f_e Effektivitätskonstante
f_h Humusbildungskonstante

Für die C-Konzentration im Humus (C_{Hum}) erhält man zusammen mit der Humusmineralisierung (Reaktion 1. Ordnung mit konstanter Rate k_{Hum})

$$\frac{dC_{Hum}}{dt} = f_h\, f_e\, (k_{lit}\, C_{lit} + k_{man}\, C_{man} - k_{Hum}\, C_{Hum}\,]\; e_\theta\; e_T \qquad (44)$$

C_{Hum}	Kohlenstoffkonzentration im Humus	k_{Hum}	Mineralisierungsrate von Humus
C_{man}	Kohlenstoffkonzentration im organischen Dünger	e_θ	Reduktionsfunktion des Wassergehalts
k_{man}	C-Mineralisierungsrate aus organischem Dünger	e_T	Reduktionsfunktion der Temperatur
		f_e	Effektivitätskonstante
		f_h	Humusbildungskonstante

und schließlich für die CO_2-Produktion, d.h. für die C-Konzentration des mineralisierten CO_2:

$$\frac{dC_{CO_2}}{dt} = (1 - f_e)\; (k_{lit}\, C_{lit} + k_{man}\, C_{man}\,)\; e_\theta\; e_T \qquad (45)$$

C_{CO2}	Kohlenstoffkonzentration des mineralisierten CO_2
C_{lit}	Kohlenstoffkonzentration in frischer org. Substanz
k_{lit}	C-Mineralisierungsrate aus frischer org. Substanz
C_{man}	Kohlenstoffkonzentration im organischen Dünger
k_{man}	C-Mineralisierungsrate aus organischem Dünger
e_θ	Reduktionsfunktion des Wassergehalts
e_T	Reduktionsfunktion der Temperatur
f_e	Effektivitätskonstante

Die N-Mineralisierung bzw. N-Immobilisierung durch den Abbau frischer organischer Substanz ist dann gegeben durch:

$$\frac{dN_{lit,NH}}{dt} = \left(\frac{N_{lit}}{C_{lit}} - \frac{f_e}{r_o}\right) \frac{dC_{lit,abg}}{dt} \qquad (46)$$

$C_{lit,abg}$	Konzentration des aus frischer organischer Substanz abgebauten Kohlenstoffs
$N_{lit,NH}$	N-Konzentration von NH_4 abgeb. aus frischer org. Subst.
N_{lit}/C_{lit}	aktuelles C/N-Verhältnis der frischer org. Subst.
f_e	Effektivitätskonstante des C-Abbaus
r_o	C/N-Verhältnis der abbauenden mikrobiellen Biomasse

Gleichung (46) bilanziert das zu Ammonium abgebaute N und das während des Abbaus in mikrobieller Biomasse oder im Humus festgelegte N entsprechend dem

C/N-Verhältnis. Das Umschalten zwischen Mineralisierung und Immobilisierung geschieht bei einem C/N-Verhältnis der frischen organischen Substanz von r_o/f_e. Analog ergibt sich bei der Humusbildung für die N-Konzentration des aus frischer organischer Substanz abgebauten und dem Humus zugeführten N ($N_{lit,Hum}$):

$$\frac{dN_{lit,Hum}}{dt} = \frac{f_e f_h}{r_o} \frac{dC_{lit,abg}}{dt} \tag{47}$$

$N_{lit,Hum}$	Konzentration des aus frischer organischer Substanz abgebauten und im Humus immobilisierten Stickstoffs
$C_{lit,abg}$	Konzentration des aus frischer organischer Substanz abgebauten Kohlenstoffs
f_e	Effektivitätskonstante des C-Abbaus
f_h	Humusbildungskonstante
r_o	C/N-Verhältnis der abbauenden mikrobiellen Biomasse

Für die einzelnen Fraktionen organischer Substanz erhält man so

$$\frac{dN_{lit}}{dt} = \left[-\frac{N_{lit}}{C_{lit}} + \frac{f_e}{r_o}(1 - f_h) \right] k_{lit}\, e_\theta\, e_T\, C_{lit} \tag{48}$$

$$\frac{dN_{Hum}}{dt} = \frac{f_e f_h}{r_o} [\, k_{lit}\, C_{lit} + k_{man}\, C_{man} - k_{Hum}\, N_{Hum} \,]\, e_\theta\, e_T \tag{49}$$

$$\frac{dN_{man}}{dt} = \left[-\frac{N_{man}}{C_{man}} + \frac{f_e}{r_o}(1 - f_h) \right] k_{man}\, e_\theta\, e_T\, C_{man} \tag{50}$$

N_{lit}	N-Konzentration in frischer org. Substanz	C_{lit}	C-Konzentration in frischer organischer Substanz
N_{man}	N-Konzentration in org. Dünger	k_{lit}	C-Mineralisierungsrate aus frischer org. Substanz
N_{Hum}	N-Konzentration im Humus	e_θ	Reduktionsfunktion des Wassergehaltes
k_{Hum}	Mineralisierungsrate von Humus	f_e	Effektivitätskonstante
C_{man}	C-Konzentration im organischen Dünger	f_h	Humusbildungskonstante
k_{man}	C-Mineralisierungsrate aus organischem Dünger	r_o	C/N-Verhältnis der abbauenden mikrobiellen Biomasse
e_T	Reduktionsfunktion der Temperatur		

Für die Quellen- bzw. Senkenterme der Transportgleichungen pro Bodenschicht ergibt sich schließlich:

$$\Phi_{Min,NH} = \{ k_{Hum} N_{Hum} + \max[0, q_{lit}]\, k_{lit} C_{lit} + \max[0, q_{man}]\, k_{man} C_{man} \}\, e_\theta\, e_T \quad (51)$$

$$\Phi_{Imm,NH} = \{ \min[0, q_{lit}]\, k_{lit} C_{lit} + \min[0, q_{man}]\, k_{man} C_{man} \}\, r_{NH}\, e_\theta\, e_T \quad (52)$$

$$\Phi_{Imm,NO} = \Phi_{Imm,NH} \frac{r_{NO}}{r_{NH}} \quad (53)$$

$\Phi_{Min,NH}$	Ammoniumquelle durch Mineralisierung	k_{lit}	C-Mineralisierungsrate aus fr. org. Substanz
$\Phi_{Imm,NH}$	Ammoniumsenke durch Immobilisierung	k_{Hum}	Mineralisierungsrate von Humus
$\Phi_{Imm,NO}$	Nitratsenke durch Immobilisierung	C_{man}	C-Konzentration im organischen Dünger
f_h	Humusbildungskonstante	C_{lit}	C-Konzentration in frischer organischer Substanz
r_{NH}	Verhältnis von Ammonium zu Ammonium und Nitrat	k_{man}	C-Mineralisierungsrate aus organischem Dünger
r_{NO}	Verhältnis von Nitrat zu Ammonium und Nitrat	e_θ	Reduktionsfunktion des Wassergehalts
N_{Hum}	N-Konzentration im Humus	e_T	Reduktionsfunktion der Temperatur

$$r_{NH} = \frac{(\theta + \rho K_{d,NH})\, c_{NH}}{(\theta + \rho K_{d,NH})\, c_{NH} + \theta\, c_{NO}} \quad (54)$$

$$r_{NO} = 1 - r_{NH} \quad (55)$$

$$q_{lit} = \frac{N_{lit}}{C_{lit}} - \frac{f_e}{r_o} \quad (56)$$

$$q_{man} = \frac{N_{man}}{C_{man}} - \frac{f_e}{r_o} \quad (57)$$

N_{lit}	N-Konzentration in frischer organischer Substanz	C_{lit}	C-Konzentration in frischer organischer Substanz
N_{man}	N-Konzentration in organischem Dünger	ρ	Lagerungsdichte
f_e	Effektivitätskonstante	c_{NH}	Ammoniumkonzentration in der Bodenlösung
θ	volumetrischer Wassergehalt	r_o	C/N-Verhältnis der abbauenden mikrobiellen Biomasse
$K_{d,NH}$	Adsorptionskoeffizient von Ammonium	c_{NO}	Nitratkonzentration in der Bodenlösung

4 Pflanze

4.1 Pflanzenwachstum

Die im Modell beschriebenen Wachstumsprozesse der Pflanzen werden durch sehr einfache Ansätze dargestellt. Es werden lediglich die für die Beschreibung der Transportprozesse notwendigen Parameter Pflanzenbedeckungsgrad und Wurzeldichte berechnet. Benötigt werden dazu Angaben über den Planzenbedeckungsgrad zur Reife sowie Angaben über die Zeitpunkte der Aussaat, der maximalen Wurzelentwicklung, der Reife und der Ernte. Die Wurzeldichteverteilung (RDF) wird als Funktion der Zeit und der Tiefe nach *Tillotson et al.* (1980) und *Davidson et al.* (1978) berechnet. Der Pflanzenbedeckungsgrad (f_{PBG}) bestimmt sich aus einer für Mais empirisch gewonnenen sigmoidalen Kurve (*Childs*, 1975):

$$f_{PBG} = \frac{f_{PBGR}}{1 + \exp\left(6 - \frac{12\, t_1}{t_2}\right)} \tag{58}$$

f_{PBG} Pflanzenbedeckungsgrad
f_{PBGR} Pflanzenbedeckungsgrad zur Reife
t_1 Zeitraum seit der Keimung
t_2 Zeitraum zwischen Keimung und Pflanzenreife

Der Pflanzenbedeckungsgrad wird im Modell nur zur Aufteilung der potentiellen Evapotranspiration in die potentielle Transpiration und die potentielle Verdunstung verwendet.

4.2 Stickstoffaufnahme durch die Pflanzenwurzel

Das Modell LEACHN stellt zwei verschiedene Modelle zur Simulation der Stickstoffaufnahme durch die Pflanze zur Verfügung. Das eine Modell basiert auf dem Ansatz von *Watts & Hanks* (1978). Das andere, schon in älteren Versionen verwendete, Modell beruht auf Konzepten von *Nye & Tinker* (1977) sowie *Warncke & Barber* (1973). Aus den Stickstoffaufnahmeraten der Wurzeln ergeben sich dann die Senken (Φ_{WNH}) und (Φ_{WNO}) der Ammonium- bzw. Nitrataufnahme durch die Pflanzen.

4.2.1 N-Aufnahme der Pflanze nach Watts und Hanks

Das Modell erlaubt, die N-Aufnahme verschiedener Pflanzenarten am selben Standort in zeitlicher Abfolge zu simulieren. Dazu wird für jede Pflanzenart die potentielle Gesamt-N-Aufnahme (GNA) während der betrachteten Vegetationsperiode als

Eingabe benötigt. Daraus wird die tägliche potentielle N-Aufnahme bestimmt. Es wird zunächst der relative Anteil der potentiellen N-Aufnahme (FTNU) an der potentiellen Gesamt-N-Aufnahme aus dem relativen Anteil der zur aktuellen Zeit schon abgelaufenen Vegetationsperiode (FGS) durch eine Regressionsbeziehung berechnet:

$$FGS = \frac{t + 1 - t_{beg}}{t_{end} - t_{beg}} \tag{59}$$

FGS Anteil der abgelaufenen Vegetationsperiode
t aktuelle Zeit
t_{beg} Zeitpunkt des Vegetationsbeginns der Pflanzenart
t_{end} Zeitpunkt des Vegetationsendes der Pflanzenart

$$FTNU = \begin{cases} 8{,}8878\, FGS^{3{,}78} & \text{für } 0 \leq FGS < 0{,}3 \\ 0{,}66\, FGS + 3{,}458\, FGS^2 - 0{,}93\, FGS^3 - 0{,}899\, FGS^4 & \text{für } 0{,}3 \leq FGS \leq 1{,}0 \end{cases} \tag{60}$$

Die potentielle tägliche N-Aufnahme (PTNA) ergibt sich dann aus der Differenz zwischen potentieller (FTNU) und aktueller N-Aufnahme (PLTN) bis zum aktuellen Zeitpunkt:

$$PTNA = FTNU - PLTN \tag{61}$$

PTNA *potentielle tägliche* N-Aufnahme
FTNU potentielle N-Aufnahme
PLTN aktuelle N-Aufnahme

Zum Ende der Vegetationsperiode (FGS > 0,7), wenn ein mögliches N-Defizit in den Pflanzen nicht mehr ausgeglichen werden kann, bestimmt sich die potentielle tägliche N-Aufnahme aus

$$PTNA = (FTNU - PLTN)\, \frac{1 - (FGS - 0{,}7)}{0{,}3} \tag{62}$$

PTNA potentielle tägliche N-Aufnahme
FTNU potentielle N-Aufnahme
PLTN aktuelle N-Aufnahme
FGS Anteil der abgelaufenen Vegetationsperiode

Die aktuelle tägliche NH_4-Aufnahmerate der Pflanzen errechnet sich aus:

$$\Phi_{WNH} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \min\left(\frac{1}{2}\,\theta\, c_{NH,i}\,,\ \frac{c_{NH,i}}{c_{NH,i} + c_{NO,i}}\,\frac{DN}{\Delta z}\right)}{\Delta t} \tag{63}$$

Φ_{WNH}	NH_4-Aufnahmerate der Pflanze	c_{NO}	Nitratkonzentration in der Bodenlösung
θ	volumetrischer Wassergehalt	n	Anzahl der durchwurzelten Schichten
c_{NH}	NH_4-Konzentration in der Bodenlösung	Δz	Schichtdicke
		Δt	Zeitintervall

mit

$$DN = \begin{cases} PTNA\,\dfrac{T_p}{T_{day}} & \text{für } T_{day} > 0 \\ 0 & \text{für } T_{day} = 0 \end{cases} \tag{64}$$

DN	N-Aufnahme mit der Transpiration
PTNA	potentielle tägliche N-Aufnahme
T_p	potentielle Transpiration
T_{day}	tägliche potentielle Transpiration

Die NO_3-Aufnahmerate errechnet sich analog. Die aktuelle tägliche N-Aufnahmerate der Pflanzen ermittelt sich schließlich als Summe der NH_4- und NO_3-Aufnahmerate.

4.2.2 N-Aufnahme der Pflanzen nach Nye, Tinker, Warncke und Barber

Hier wird die N-Aufnahme als Funktion der Wurzeldichte und der NH_4- bzw. NO_3-Konzentration in der Bodenlösung betrachtet. Nach *Nye &Tinker* (1977) berechnet sich die Nährstoff-Aufnahme über die Wurzeloberfläche nach

$$l = 2\,\alpha\, r\, c \tag{65}$$

l Aufnahmerate pro Einheitslänge der Wurzel
α Wurzelaufnahmekoeffizient
r mittlerer Wurzelradius
c Stoffkonzentration in der Bodenlösung

Innerhalb eines Konzentrationsbereiches von 10^{-2} bis 10^{-5} mol/l konnten *Warncke & Barber* (1973) für Mais die folgenden Regressionsgleichungen für die Wurzelaufnahmekoeffizienten α_{NH} und α_{NO} ableiten.

$$\log \alpha_{NH} = 6{,}81 - 0{,}63 \log c_{NH} - 116{,}8 \log c_{NO} \quad (66)$$

$$\log \alpha_{NO} = 6{,}80 - 0{,}61 \log c_{NO} - 127{,}1 \log c_{NH} \quad (67)$$

α_{NH} Wurzelaufnahmekoeffizient von Ammonium
α_{NO} Wurzelaufnahmekoeffizient von Nitrat
c_{NH} Ammoniumkonzentration in der Bodenlösung in mol/l
c_{NO} Nitratkonzentration in der Bodenlösung in mol/l

Die NH_4-Aufnahmerate pro Bodenschicht (und analog die NO_3- Aufnahmerate) ergibt sich damit aus:

$$\Phi_{WNH} = 2\ \pi\ r\ c_{NH}\ \alpha_{NH}\ L \quad (68)$$

Φ_{WNH} Ammoniumaufnahmerate der Pflanze pro Bodenschicht
α_{NH} Wurzelaufnahmekoeffizient von Ammonium
r mittlerer Wurzelradius
c_{NH} Ammmoniumkonzentration in der Bodenlösung
L Wurzellänge in der Bodenschicht

Der N-Entzug durch die Pflanzen aus einer Bodenschicht kann dabei die im Bodenwasser gelöste N-Menge aus NH_4 und NO_3 dieser Schicht nicht ausschöpfen. Weiterhin wird angenommen, daß die N-Aufnahme nur bei Transpiration d.h. mit dem Transpirationswasserfluß in die Pflanze auftritt.

5 Modellüberprüfung

Für das Modell zum Transport von Pflanzenschutzmitteln LEACHP wurden einige Modellüberprüfungen anhand von Feldversuchen durchgeführt (*Wagenet & Hutson* 1986, *Wagenet et al.* 1989, *Priesack* 1990). Diese Überprüfungen enthalten somit auch eine gewisse Überprüfung des Wasser- und Stofftransportkonzeptes, das dem Stickstofftransportmodell LEACHN zugrundeliegt. Eine explizite Modellüberprüfung von LEACHN anhand eines oder mehrerer dazu durchgeführter Feldversuche liegt nicht vor. Die Arbeit von *Hutson & Wagenet* (1991) stellt eine Zusammenfassung des Modells und eine Sensitivitätsanalyse zur Denitrifizierung und N-Mineralisierung vor.

6 Eingabe- und Ausgabedaten

6.1 Eingabedaten

Die benötigten Eingabegrößen werden von einem, durch den Anwender bereitzustellenden, ASCII-File vom Programm eingelesen. Anzugeben sind:

Simulationsgebiet
- Simulationszeitraum (Beginn und Ende der Simulation)
- Profiltiefe mit Bodenschichtdicke

Anfangswerte (pro Bodenschicht)
- Matrixpotential oder volumetrischer Wassergehalt
- Bodentemperatur
- Gesamtkonzentrationen von Harnstoff, Ammonium und Nitrat
- C- und N-Konzentrationen von frischer organischer Substanz, organischem Dünger und Humus

Parameter zum Wassertransport (pro Bodenschicht)
- Korngrößenverteilung und Auswahl einer Pedotransferfunktion
  oder
- Parameter der hydraulischen Funktionen (Lufteintrittswert, Campbell-Konstante, gesättigte hydraulische Leitfähigkeit)

Parameter zum Stofftransport
- molekulare Diffusionskoeffizienten (alle Stickstoff-Formen)
- Koeffizienten der Bresler-Gleichung
- Dispersivität
- K_d-Werte (Harnstoff, Ammonium)

Pflanzenparameter
- Matrixpotential des Welkepunktes
- Minimales und maximales Wurzelwasserpotential
- Widerstandswert zum Wasserfluß in der Wurzel
- Wurzeldichteverteilung bei Simulation mit konstanter Wurzeldichte
- Maximale Wurzeltiefe
- Pflanzenbedeckungsgrad zur Reife
- Pflanzen-Kessel-Faktor
- Maximales Verhältnis aktueller zu potentieller Evapotranspiration
- Potentielle N-Aufnahme
- Termine zu Aussaat, Saataufgang, Reife und Ernte

Parameter der Reduktionsfunktionen (Einfluß von Wassergehalt und Temperatur auf die N-Transformationsraten)

- Effizienz- und Humifizierungskoeffizient
- C/N-Verhältnis mikrobieller Biomasse und Humus
- Basis-Temperatur der Transformationsraten
- Q_{10}-Faktor
- oberer und unterer Wert des optimalen Wassergehaltsniveaus
- minimaler Wassergehalt für N-Transformationen
- Ratenreduktionsfaktor bei Wassersättigung (nicht Denitrifizierung)

N-Transformationsraten (Konstanten der Reaktionen 1. Ordnung)

- Harnstoff-Hydrolyserate
- Nitrifizierungsrate und limitierendes NO_3/NH_4-Verhältnis
- Denitrifizierungsrate mit Halbsättigungskonstante
- Mineralisierungsrate frischer organischer Substanz
- Mineralisierungsrate organischen Düngers
- Mineralisierungsrate von Humus
- Volatilisierungsrate von Ammoniak

Wetterdaten

- Regen- oder Beregnungsmenge (täglich)
- Regen- oder Beregnungsrate (pro Tag)
- Konzentrationen der N-Spezies im Regenwasser
- Evapotranspiration (wöchentlich)
- Tiefe des Grundwasserspiegels (wöchentlich)
- mittlere Temperatur (wöchentlich)
- mittlere Amplitude der Temperatur (wöchentlich)

Düngung (pro Bodenschicht)

- Datum und Aufwandmenge an Stickstoff (und Kohlenstoff) von Harnstoff, Ammonium, Nitrat, frischer organischer Substanz und organischem Dünger

6.2 Ausgabedaten

Die Datenausgabe erfolgt auf zwei Datenfiles. Der File mit der Extension ".OUT" enthält für die im Eingabefile anzugebenden Zeitintervalle bzw. Zeitpunkte:

- die hydraulischen Funktionen in tabellarischer Form
- eine zusammenfassende kumulative Massenbilanz aller betrachteten Stoffe im Bodenprofil
- Stoffkonzentrationen, Wassergehalte, Matrixpotentiale und Flüsse im Bodenprofil

- Angaben über Wachstum, Stoffaufnahme und Transpiration der Pflanzen

Der File mit der Extension ".SUM" enthält für drei Profilschichten, die durch die Angabe der Tiefen charakterisiert werden, folgende kumulative Angaben:

- Niederschlags- oder Beregnungsmenge
- aktuelle Evaporation
- aktuelle Transpiration
- aus der Profilschicht versickerte Wassermenge
- Pflanzenaufnahme von Ammonium
- Pflanzenaufnahme von Nitrat
- Volatilisierung von Ammoniak
- aus der Profilschicht versickerte Ammoniummenge
- Denitrifizierung
- aus der Profilschicht versickerte Nitratmenge
- Wasser- Harnstoff-, Ammonium- und Nitratflüsse über den unteren Rand der Profilschicht
- Wasser- Harnstoff-, Ammonium- und Nitratgehalte der Profilschicht

Die Ausgabe erfolgt für jeden der in der Eingabe bestimmten Zeitpunkte.

7 EDV-technische Umsetzung

Das Modell LEACHN ist in FORTRAN 77 geschrieben. Der Quellcode kann mit jedem ANSI-Standard Fortran Compiler auf verschiedensten Rechnersystemen implementiert werden. Für IBM-kompatible PCs kann der MS-Fortran-Compiler (Version 5.0) benutzt werden.

8 Literatur

Addiscott, T. (1977): A simple computer model for leaching in structured soils. Journal of Soil Science, 28, 554- 563.

Bresler, E (1973): Simultaneous transport of solutes and water under transient unsaturated flow conditions. Water Resources Research, 9, 975-986.

Campbell, G. (1974): A simple method for determining unsaturated conductivity from moisture retention data. Soil Science, 117, 311-314.

Childs, S.W. (1975): A model to predict the effect of salinity on crop growth. M.S. Thesis, Utah Univ., Logan, Utah.

Childs and Hanks (1975): Model of soil salinity effects on crop growth. Soil Science Society of America Proceedings, 39, 617-622.

Davidson, J.M., D.A. Graetz, P.S.C. Rao and H.M. Selim (1978): Simulations of nitrogen movement, transformation, and uptake in plant root zone. EPA-600/3-78-029.

Hutson, J.L. and A. Cass (1987): A retentivity function for use in soil-water simulation models. Journal Soil Science, 38, 105-113.

Hutson, J.L. and R.J. Wagenet (1991): Simulating nitrogen dynamics in soils using a deterministic model. Soil Use and Management, 7, 74-78.

Hutson, J.L. and R,J. Wagenet (1992): LEACHM: Leaching Estimation And Chemistry Model: A process-based model of water and solute movement, transformations, plant uptake and chemical reactions in the unsaturated zone. Version 3.0. Department of Soil, Crop and Atmospheric Sciences, Research Series No. 93-3, Cornell University, Ithaca, New York.

Johnsson, H., L. Bergstrom, P.-E. Jansson and K. Paustian (1987): Simulated nitrogen dynamics and losses in a layered agricultural soil. Agriculture, Ecosystems an Environment, 18, 333-356.

Nicholls, P.H., A. Walker and R.J. Baker (1982): Measurement and simulation of the movement and degradation of atrazine and metribuzin in a fallow soil. Pestic. Science, 13, 484-494.

Nimah, M.N. and R.J. Hanks (1973): Model for estimation of soil water, plant, and atmospheric interrelations: I. Description and sensitivity. Soil Science Society America Proceedings, 37, 522-527.

Nye, P.H. and P.B. Tinker (1977): Solute Movement in the Soil-Root System. Blackwells Scientific Publications, Oxford.

Priesack, E. (1990): Field Test of a Pesticide Transport Model. Proceedings 3rd Int. Workshop on Study on Pesticides Behaviour in Soils, Plants and Aquatic Systems. Neuherberg, 380-389.

Rolston, D.E., P.S.C. Rao, J.M. Davidson and R.E. Jessup (1984): Simulation of denitrification losses of nitrate fertilizer applied to uncropped, cropped and manure-amended field plots. Soil Science, 137, 270-279.

Tillotson, W.R., C.W. Robbins, R.J. Wagenet and R.J. Hanks (1980): Soil water, solute, and plant growth simulation. Bulletin 502. Utah State Agricultural Experiment Station, Logan, Utah, 53 p.

Wagenet, R.J. and J.L. Hutson (1986): Predicting the Fate of Nonvolatile Pesticides in the Unsaturated Zone. Journal Environment Quality, 15, 315-322.

Wagenet, R.J., J.L. Hutson and J.W. Biggar (1989): Simulating the Fate of a Volatile Pesticide in Unsaturated Soil: A Case Study with DBCP. Journal Environment Quality, 18, 78-84.

Warncke, D.D. and S.A. Barber (1973): Ammonium and nitrate uptake by corn (Zea mays L.) as influenced by NH4/NO3 ratio. Agronomy Journal, 65, 950-953.

Watts, D.G. and J.R. Hanks (1978): A soil-water-nitrogen model for irrigated corn on sandy soils. Soil Science Society America Journal, 42, 492-499.