

**Nitrifikation und Denitrifikation im Boden
in Abhängigkeit von Sauerstoff
und mikrobieller Aktivität**

**Entwicklung, Analyse, Parametrisierung
und Anwendung eines gekoppelten Simulationsmodells**

Institut für Umweltsystemforschung
Fachbereich Mathematik/Informatik
Universität Osnabrück



Dissertation
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

Ines S. Hotopp
Diplom-Systemwissenschaftlerin

September 2014

Zusammenfassung

Stickstoff ist ein wesentlicher Bestandteil chemischer Strukturen wie DNS, RNS und Proteinen, die das Leben der Organismen auf der Erde ermöglichen. Pflanzen nehmen den benötigten Stickstoff aus dem Boden auf. Er wird in die Photosyntheseprodukte eingebaut und fördert so das Wachstum. Der Gesamtstickstoffanteil im Boden ist stark abhängig von Klima, Vegetation, Bodenart und Landnutzung des jeweiligen Standortes. Die verschiedenen Stickstoffverbindungen (u.a. Ammonium, Nitrat, Nitrit, gasförmiger Stickstoff, und organischer Stickstoff) sind durch biogeochemische Prozesse miteinander verknüpft. Zusammen bilden diese Prozesse den Stickstoffkreislauf. In Grünlandböden gehören mikrobielle Nitrifikation und Denitrifikation zu den häufig vorkommenden Prozessen. Die Aktivität der Mikroorganismen und damit die Geschwindigkeit und Intensität, mit der die Transformationsprozesse ablaufen, sind stark abhängig von den vorliegenden Umweltbedingungen. Insbesondere der mikrobiell im Boden verfügbare Sauerstoff spielt hier eine bedeutende Rolle: Während er für die Nitrifikation notwendig ist, wird die Denitrifikation durch ihn gehemmt. Die Denitrifizierer dagegen können, müssen aber nicht Sauerstoff verwenden. Dadurch entsteht eine gekoppelte, nicht lineare Abhängigkeit der Prozesse vom Sauerstoffgehalt.

Der Sauerstoffgehalt im Boden schwankt durch natürliche Faktoren, wie Niederschlagsereignisse, aber ändert sich auch mit der Landnutzung. Die Übergänge zwischen aeroben und anaeroben Bedingungen sind dabei fließend, so dass eine strikte Trennung der beiden Prozesse in der Modellierung nicht sinnvoll ist.

In meiner Dissertation im Rahmen des Teilprojekts *InDiLaNi* im DFG Schwerpunktprogramm *Biodiversitätsexploratorien* entwickelte ich ein Simulationsmodell für eine gekoppelte Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik. Diese Dynamik ist abhängig vom Sauerstoffgehalt und den Abundanz der Nitrifizierer und Denitrifizierer. Das Modell brachte dabei Erkenntnisse über den Einfluss von Sauerstoff auf die Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik, diente jedoch nicht der Abschätzung von tatsächlichen Stickstoffkonzentrationen im Boden. Mittels eines rein aeroben und eines strikt anaeroben Sauerstoffszenarios wurde das Modell auf seine Gültigkeit überprüft. Aerobe Bedingungen führten zu einer Nitrifikationsdynamik und anaerobe Bedingungen zu einer Denitrifikationsdynamik. Ein transientes Szenario, welches unter Annahme eines niedrigen Sauerstoffgehaltes simuliert wurde, zeigte die Verknüpfung beider Prozesse. Eine Sen-

sitivitätsanalyse diente der Eingrenzung auf die Modellparameter, welche den größten Einfluss auf die Modelldynamik haben. Über einen Zeitraum von mehr als 1000 Stunden zeigte sich dabei, dass besonders die Wachstums- und Sterberaten der Nitrifizierer und Denitrifizierer Einfluss auf die Modelldynamik haben. Mit Hilfe experimenteller Daten sollten einige Modellparameter angepasst werden. Dies erwies sich als schwierig, da die Datengrundlage nicht zu einer automatisierten Parameteroptimierung ausreichte und so lediglich eine Anpassung per Hand erfolgen konnte. Dabei konnte mittels leichter Veränderungen der Umsatzgeschwindigkeiten der Teilprozesse die modellierte Dynamik dem experimentellen Verlauf angenähert werden.

Durch die Biodiversitätsexploratorien standen mir Zeitreihen für den Bodenwassergehalt und die Bodentemperatur zur Verfügung. Aus der Reihe für den Bodenwassergehalt konnte ich Sauerstoffgehalte berechnen und so Simulationen mit variablem Sauerstoffgehalt ausführen. Zusätzlich konnte ich den Einfluss von Temperatur und Bodenwassergehalt auf das mikrobielle Wachstum einbringen. Dabei zeigte sich, dass die Sauerstoffgehalte in den Böden im aeroben Bereich lagen, so dass vor allen Dingen eine Nitrifikationsdynamik zu beobachten war. Der Einfluss der Temperatur führte in den Simulationen zu einer leichten Verlangsamung der Prozesse, da sie immer etwas unter dem mikrobiellen Optimum lag. Weiterhin konnte ich mit Informationen aus den Biodiversitätsexploratorien Dünge- und Beweidungsereignisse modellieren. Durch den Eintrag von Ammonium und Nitrat durch Mineraldünger werden Transformationsprozesse angestoßen und es kommt es zu starken Veränderungen in den Stickstoffkonzentrationen im Boden. Durch Beweidung erfolgt ein Ammoniumeintrag über den gesamten Beweidungszeitraum. Diese externen Einträge erwiesen sich in der Modellierung als so stark, dass sie alle anderen, eventuell vorher ablaufenden Stickstoffumwandlungsprozesse überdeckten.

Abstract

Nitrogen is an essential component of all organisms. Among these are plants, which serve as nourishment for animals and humans. Terrestrial plants take in nitrogen through their roots and therefore out of the soil. The various nitrogen compounds are connected by different biogeochemical processes. Together they form the nitrogen cycle. The commonly occurring processes include microbial nitrification and denitrification. The activity of the microorganisms and thus the velocity and the intensity which drive the transformation processes depend on the present environmental conditions. In particular, the oxygen content available in the soil is an important factor: While nitrification depends on its availability, denitrification is inhibited by its presence. In contrast, denitrifiers can use oxygen but do not rely on it. Thereby, a coupled, non-linear relationship between processes and oxygen content is generated. The soil oxygen content varies due to natural factors but also changes according to the land use. The transition between aerobic and anaerobic conditions is fluid, thus a strict separation between the two processes during modeling is not sensible.

In my thesis within the context of the subproject *InDiLaNi* in the DFG priority program *Biodiversity Exploratories*, I developed a simulation model for the coupled nitrification-denitrification dynamic. This dynamic depends on the oxygen content and the abundances of nitrifiers and denitrifiers. The model provided knowledge on the influence of oxygen on the nitrification-denitrification dynamic, but did not serve to estimate actual nitrogen concentrations in soil. The model was validated using a strictly aerobic and a strictly anaerobic oxygen scenario. Aerobic conditions led to a nitrification dynamic, and anaerobic conditions led to a denitrification dynamic. A transient scenario that was conducted under low oxygen conditions displayed the combination of the two processes. A sensitivity analysis was conducted to narrow down the parameters to those that have the most influence on the model dynamic. Over a simulation time of 1000 hours, the growth and decay rates of nitrifiers and denitrifiers were most influential. Some model parameters were optimized using experimental data. This proved difficult because the data set did not suffice for actual parameter optimization, and thus only a manual adaptation took place. In doing so, I was able to approximate the experimental dynamic by making small changes in the parameter values of the transformation rates of the sub-processes.

The Biodiversity Exploratories enabled me to use time series for soil moisture content and soil temperature. I calculated a time series for the soil oxygen content using the soil moisture content and thus was able to simulate the model with a variable oxygen content. Additionally, I was able to introduce the influence of temperature and soil moisture content on microbial growth. It showed that the soil oxygen contents were in an aerobic range leading to a nitrification dynamic. The influence of the temperature led to a slight deceleration of the processes as the temperature stayed below the optimal microbial value the whole time. Furthermore, I was able to model fertilization and grazing events using information from the Biodiversity Exploratories. The input of ammonium and nitrate by mineral fertilizer initiated transformation processes, and the nitrogen concentrations within the soil changed drastically. Grazing led to an ammonium input over the whole grazing period. These external inputs were so strong that they covered all other underlying nitrogen transformation processes.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Der Stickstoffkreislauf im Boden	1
1.2	Ziel der Arbeit	5
2	Modelle und Experimente zum Stickstoffkreislauf in Böden	7
2.1	Die Modellierung des Stickstoffkreislaufs	7
2.2	Einfluss von Sauerstoff und Wassergehalt auf die Aktivität der Mikroorganismen und auf Nitrifikation und Denitrifikation	14
2.3	Auswertung von Experimenten zur Transformation von Stickstoffverbindungen im Boden	19
2.3.1	Biodiversitätsexploratorien	19
2.3.2	InDiLaNi	20
2.3.3	Auswahl der Bodenproben	21
2.3.4	Experimenteller Ansatz	22
2.3.5	Ergebnisse aus den Experimenten	23
2.3.5.1	Anfangsbedingungen	23
2.3.5.2	Dynamik der Stickstoffverbindungen	25
2.3.5.3	Massenbilanzen der Stickstoffverbindungen	26
3	Methoden	30
3.1	Modellentwicklung	30
3.1.1	Mikrobielle Biomasse	32
3.1.1.1	Denitrifizierende Mikroorganismen	33
3.1.1.2	Stickstoffquelle	34
3.1.1.3	Kohlenstoffquelle	35
3.1.2	Transformationsprozesse der Stickstoffverbindungen	36
3.1.2.1	Nitrifikation	36
3.1.2.2	Denitrifikation	36
3.1.3	Differentialgleichungen	37
3.1.4	Modellparameter	38
3.1.5	Modellgrenzen und Szenariendefinition	41

3.2	Sensitivitätsanalyse	42
3.3	Implementation	42
3.4	Parameteroptimierung	43
3.5	Zeitreihen	47
3.5.1	Sauerstoff	48
3.5.2	Wassergehalt	48
3.5.3	Temperatur	48
3.5.4	Düngung	49
4	Ergebnisse und Diskussion	53
4.1	Simulation	53
4.1.1	Ergebnisse	53
4.1.2	Diskussion	55
4.2	Sensitivitätsanalyse	59
4.2.1	Ergebnisse	59
4.2.2	Diskussion	63
4.3	Parameteroptimierung	66
4.3.1	Ergebnisse	66
4.3.2	Diskussion	70
4.4	Zeitreihen	73
4.4.1	Ergebnisse	73
4.4.1.1	Sauerstoff	73
4.4.1.2	Sauerstoff und Bodenwassergehalt	74
4.4.1.3	Sauerstoff und Temperatur	74
4.4.1.4	Düngung	76
4.4.1.5	Sauerstoff, Bodenfeuchte, Temperatur und Düngung	80
4.4.2	Diskussion	82
4.5	Modellvergleich	86
5	Schlussfolgerungen und Ausblick	91
	Danksagung	95
	Literatur	96
	Anhang	102
A	Experimente	102
A.1	Auswertung der Daten	102
A.1.1	Potentielle Denitrifikation	102

A.1.2	Gelöste Stickstoffkomponenten	103
A.1.3	Mikrobielle Biomasse	103
A.1.4	Genabundanzen	104
A.2	Ergebnisse aus den Experimenten	105
A.2.1	Anfangsbedingungen	105
A.2.2	Dynamik der Stickstoffverbindungen	107
A.2.3	Dynamik der DOC-Konzentrationen	109
A.3	Ergebnisse der Kontrollen	110
B	Parameteroptimierung	112
C	Zeitreihen	115
D	Programme	117
D.1	Nitrifikations-Denitrifikationsmodell	117
D.2	Sensitivitätsanalyse	122
D.2.1	Methodendefinitionen	122
D.2.2	Modelldefinition 1	129
D.2.3	Modelldefinition 2	134
D.2.4	CTV-Analyse 1	139
D.2.5	CTV-Analyse 2	142

Erklärung über die Eigenständigkeit der erbrachten wissenschaftlichen Leistung

147

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1	Der Stickstoffkreislauf im Boden mit Nitrifikation, Denitrifikation, Mineralisierung, Immobilisierung, Stickstofffixierung, anaerober Ammoniakoxidation und dissimilativer Nitrat-/Nitritreduktion (<i>modifiziert nach der Doktorarbeit von A. Focks [15]</i>).	2
Abb. 2.1	Sauerstoff- und Kohlenstoffdioxidgehalte in der Bodenluft in 30 und 90 cm Bodentiefe in einem sandigen Lehm (- - -) und einem schluffigen Ton (-) unter Apfelbäumen [5].	14
Abb. 2.2	Auswirkung von gelöstem Sauerstoff auf die Aktivität der Nitrifizierer und Denitrifizierer.	15
Abb. 2.3	Nitrifikation und Denitrifikation in Abhängigkeit vom im Bodenwasser gelösten Sauerstoff.	16
Abb. 2.4	Gelöster relativer Sauerstoffgehalt im Bodenwassers bei steigender Bodenfeuchte (in Prozent des Volumetrischen Wassergehalts VWC).	16
Abb. 2.5	Abhängigkeit von Nitrifikation und Denitrifikation von der Bodenfeuchte.	18
Abb. 2.6	Massenbilanz für Ammonium, Nitrat und Nitrit für 50% des WHK_{max} , mit und ohne Acetylen für die verfügbaren Standorte. Die Fehlerbalken stellen die maximalen Abweichungen der einzelnen Replikate dar.	28
Abb. 2.7	Massenbilanz für Nitrat und Nitrit (links) und Ammonium (rechts) für 80% des WHK_{max} , mit und ohne Acetylen für die verfügbaren Standorte.	29
Abb. 3.1	Modellstruktur des Nitrifikations-Denitrifikationsmodells: Rechtecke stellen die Zustandsgrößen dar, Ovale die konstanten Variablen.	32
Abb. 3.2	Einflussfaktor der Temperatur auf das Wachstum der Mikroorganismen.	49

Abb. 4.1	Simulierte Biomasse: (a) Denitrifizierer, (b) Ammoniakoxidierer und (c) Nitritoxidierer unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen im Bodenwasser für einen Simulationszeitraum von 1500 Stunden.	54
Abb. 4.2	Simulierte Stickstoffverbindungen: (a) Ammonium, (b) Nitrit, (c) Nitrat und (d) Distickstoffmonoxid unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen im Bodenwasser für einen Simulationszeitraum von 1500 Stunden. Legende wie in Abb. 4.1.	55
Abb. 4.3	Substanzkonzentrationen und mikrobielle Abundanzen für aufsteigende Sauerstoffgehalte (0 bis 100% mit einer Schrittweite von 0,2%).	56
Abb. 4.4	Vergleich der Simulationsergebnisse der Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit den Ergebnissen von Lefelaar und Wessel [36]	57
Abb. 4.5	Vergleich der Simulationsergebnisse der Ammonium- und Nitratkonzentrationen mit den Ergebnissen von Schauss et al. [51]	57
Abb. 4.6	Beitrag zur Varianz der Denitrifizierer (a, d, g), Ammoniakoxidierer (b, e, h) und Nitritoxidierer (c, f, i) unter aeroben (oben), transienten (mitte) und anaeroben (unten) Bedingungen. . . .	60
Abb. 4.7	Beitrag zur Varianz der Ammonium- (a, c, e) und Nitrit- (b, d, f) Konzentration unter aeroben (oben), transienten (mitte) und anaeroben (unten) Bedingungen.	61
Abb. 4.8	Beitrag zur Varianz der Nitrat- (a, c, e) und Distickstoffmonoxid- (b, d, f) Konzentration unter aeroben (oben), transienten (mitte) und anaeroben (unten) Bedingungen.	62
Abb. 4.9	Verlauf von Ammonium-, Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit per Hand optimierten Parameterwerten und den experimentellen Daten (x) mit den jeweiligen Maximal- und Minimalwerten für Standort AEG 02 Ansatz C.	67
Abb. 4.10	Verlauf von Ammonium-, Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit per Hand optimierten Parameterwerten und den experimentellen Daten (x) mit den jeweiligen Maximal- und Minimalwerten für Standort AEG 02 Ansatz B.	68
Abb. 4.11	Verlauf von Ammonium-, Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit per Hand optimierten Parameterwerten und den experimentellen Daten (x) mit den jeweiligen Maximal- und Minimalwerten für Standort AEG 15 Ansatz A.	69

Abb. 4.12	Verlauf von Ammonium-, Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit per Hand optimierten Parameterwerten und den experimentellen Daten (x) mit den jeweiligen Maximal- und Minimalwerten für Standort AEG 30 Ansatz D.	70
Abb. 4.13	Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse über einen Zeitraum von 6700 Stunden für den Sauerstoffgehalt von HEG 03.	73
Abb. 4.14	Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse für Sauerstoffgehalt und Bodenfeuchte von HEG 03.	74
Abb. 4.15	Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse in logarithmischer Darstellung über einen Zeitraum von 6700 Stunden für Sauerstoffgehalt und Bodentemperatur von HEG 03.	75
Abb. 4.16	Simulierte Biomasse: (a) Denitrifizierer, (b) Ammoniakoxidierer und (c) Nitritoxidierer unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen für einen Simulationszeitraum von 6700 Stunden mit zweimaliger Düngung von HEG 03.	77
Abb. 4.17	Simulierte Stickstoffverbindungen: (a) Ammonium, (b) Nitrit, (c) Nitrat und (d) Distickstoffmonoxid unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen für einen Simulationszeitraum von 6700 Stunden mit zweimaliger Düngung von HEG 03. Legende wie in Abb. 4.16.	78
Abb. 4.18	Simulierte Biomasse: (a) Denitrifizierer, (b) Ammoniakoxidierer und (c) Nitritoxidierer unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen für einen Simulationszeitraum von 6700 Stunden mit einmaliger Düngung und kurzzeitigem Viehbesatz von HEG 29.	79
Abb. 4.19	Simulierte Stickstoffverbindungen: (a) Ammonium, (b) Nitrit, (c) Nitrat und (d) Distickstoffmonoxid unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen für einen Simulationszeitraum von 6700 Stunden mit einmaliger Düngung und kurzzeitigem Viehbesatz von HEG 29. Legende wie in Abb. 4.18.	80
Abb. 4.20	Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse über einen Zeitraum von 6700 Stunden für Sauerstoffgehalt, Bodenfeuchte und Bodentemperatur von HEG 03.	81
Abb. 4.21	Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse über einen Zeitraum von 6700 Stunden für Sauerstoffgehalt, Bodenfeuchte und Bodentemperatur von HEG 29.	82

Abb. A.1	Mittlere Ammonium-, Nitrit- und Nitratkonzentrationen der Replikate mit maximalen Abweichungen zusammen mit der Kontrolle für die vier Standorte und die vier Ansätze (50% WHK_{max} +Acetylen, 50% WHK_{max} -Acetylen, 80% WHK_{max} +Acetylen, 80% WHK_{max} -Acetylen) bei Messzeitpunkt t_0 (= 0 h).	105
Abb. A.2	(a) Mittlere gelöste organische Kohlenstoffkonzentrationen, (b) mittlerer mikrobieller Kohlenstoff mit maximalen Abweichungen bei den Replikaten zusammen mit der Kontrolle und (c) Abundanzen der drei Gengruppen (Ammoniakoxidierer ($AOA+AOB$), Nitritreduzierer ($nirS+nirK$) und Distickstoffmonoxidreduzierer ($nosZ$)) der Kontrolle für die vier Standorte und die vier Ansätze beim Messzeitpunkt t_0 (= 0 h).	106
Abb. A.3	Verlauf der mittleren Ammoniumkonzentrationen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% des WHK_{max} (oben) und 80% des WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts).	107
Abb. A.4	Verlauf der mittleren Nitratkonzentrationen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% des WHK_{max} (oben) und 80% des WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts).	108
Abb. A.5	Verlauf der mittleren Nitritkonzentrationen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% des WHK_{max} (oben) und 80% des WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts).	108
Abb. A.6	Verlauf der mittleren Konzentrationen des gelösten organischer Kohlenstoffs (DOC) für die drei Standorte AEG 02, AEG 15 und AEG 30 bei 50% WHK_{max} (oben) und 80% WHK_{max} (unten) und mit (links) und ohne (rechts) Acetylenzugabe.	109

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1	Durchschnittliche Landnutzung von 2008 bis 2010 der Standorte der Bodenproben.	21
Tab. 2.2	Übersicht über die experimentellen Ansätze und die untersuchten Prozesse je Boden.	23
Tab. 2.3	Dynamik und Erklärung der NH_4^+ , NO_3^- und NO_2^- -Konzentrationen aus den Experimenten für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50 und 80% des WHK_{max}	26
Tab. 3.1	Überblick über die benötigten Kohlenstoff- und Stickstoffquellen sowie den Elektronenakzeptor von Ammoniakoxidierer, Nitritoxidierern und Denitrifizierern.	35
Tab. 3.2	Anfangswerte	38
Tab. 3.3	Modellparameter	39
Tab. 3.4	Parameterwerte	40
Tab. 3.5	Standortspezifische Parameter- und Anfangswerte aus den Experimenten. In F_{nit} sind die Werte für F_{AMO} und F_{NIR} zusammengefasst.	44
Tab. 3.6	Landnutzung für HEG 03 und HEG 29.	50
Tab. 3.7	Standorteigenschaften und Bewirtschaftung von HEG 03 und HEG 29	51
Tab. 4.1	Per Hand optimierte Parameterwerte für die Standorte AEG 02, AEG 15 und AEG 30 in den Ansätze A, B, C und D mit relativem Fehler(F_{rel}), Summe der gewichteten Fehlerquadrate (F_{wSSR}), quadriertem relativen Fehler (F_{srel}) und Fehlerfaktor(F_{FF}). Markiert sind in dunkelgrau die geringsten und in hellgrau die höchsten Fehlerwerte einer Fehlerdefinition für alle Standorte.	66
Tab. 4.2	NH_4^+ -Konzentrationen [$\mu g NH_4^+ - N/g$ Boden TG] in Kontrolle und Replikaten bei t_0 für 50% und 80% des WHK_{max} und ihre Differenz.	71

1. Einleitung

1.1. Der Stickstoffkreislauf im Boden

Stickstoff ist ein wesentlicher Bestandteil chemischer Strukturen wie DNS, RNS und Proteinen, die das Leben der Organismen auf der Erde ermöglichen [16]. Pflanzen nehmen den benötigten Stickstoff aus dem Boden auf. Er wird in die Photosyntheseprodukte eingebaut und fördert so das Wachstum. Der Gesamtstickstoffanteil im Boden ist stark abhängig von Klima, Vegetation, Bodenart und Landnutzung des jeweiligen Standortes. Der Großteil des Gesamtstickstoffs im Boden liegt im A-Horizont als organisch gebundener Stickstoff vor. Pflanzen können lediglich die anorganischen Stickstoffverbindungen Ammonium (NH_4^+) und Nitrat (NO_3^-) aufnehmen, die nur einen kleinen Teil des gesamten Stickstoffs bilden. Um das Pflanzenwachstum zu unterstützen, werden die meisten Böden in der Landwirtschaft gedüngt.

Dünger werden in organische, organo-mineralische und mineralische Dünger unterteilt. Organische Dünger sind Mist, Gülle und Jauche; mineralische Dünger bestehen aus einzelnen oder mehreren Nährstoffen (Stickstoff, Phosphor und Kalium). Mineralische Stickstoffdünger sind häufig aus Ammoniumnitrat, Ammoniumsulfat, Kaliumnitrat und Kalkammonsalpeter hergestellt. Auch organische Dünger enthalten hohe Konzentrationen an Stickstoff, Phosphor und Kalium.

Die Intensität der Landnutzung von Grünlandböden beeinflusst die Menge des im Boden pflanzenverfügbaren Stickstoffs. Durch Düngung, regelmäßige Mahd und Viehbesatz ändert sich neben Ammonium- und Nitratkonzentrationen auch die Bodenstruktur. Durch Mahd wird Stickstoff entzogen, durch Düngung wird Stickstoff eingetragen und durch Viehbesatz wird Stickstoff sowohl entzogen als auch eingetragen. Mahd und Düngung erfolgen meist mit Hilfe schwerer landwirtschaftlicher Geräte, die den Boden verdichten. Auch durch Viehtritt kann es lokal zu Verdichtungen kommen, die zu einer schlechteren Sauerstoffversorgung führen. So verändert sich die Zusammensetzung der mikrobiellen Biomasse und es entsteht eine veränderte Dynamik in den Transformationsprozessen der Stickstoffverbindungen.

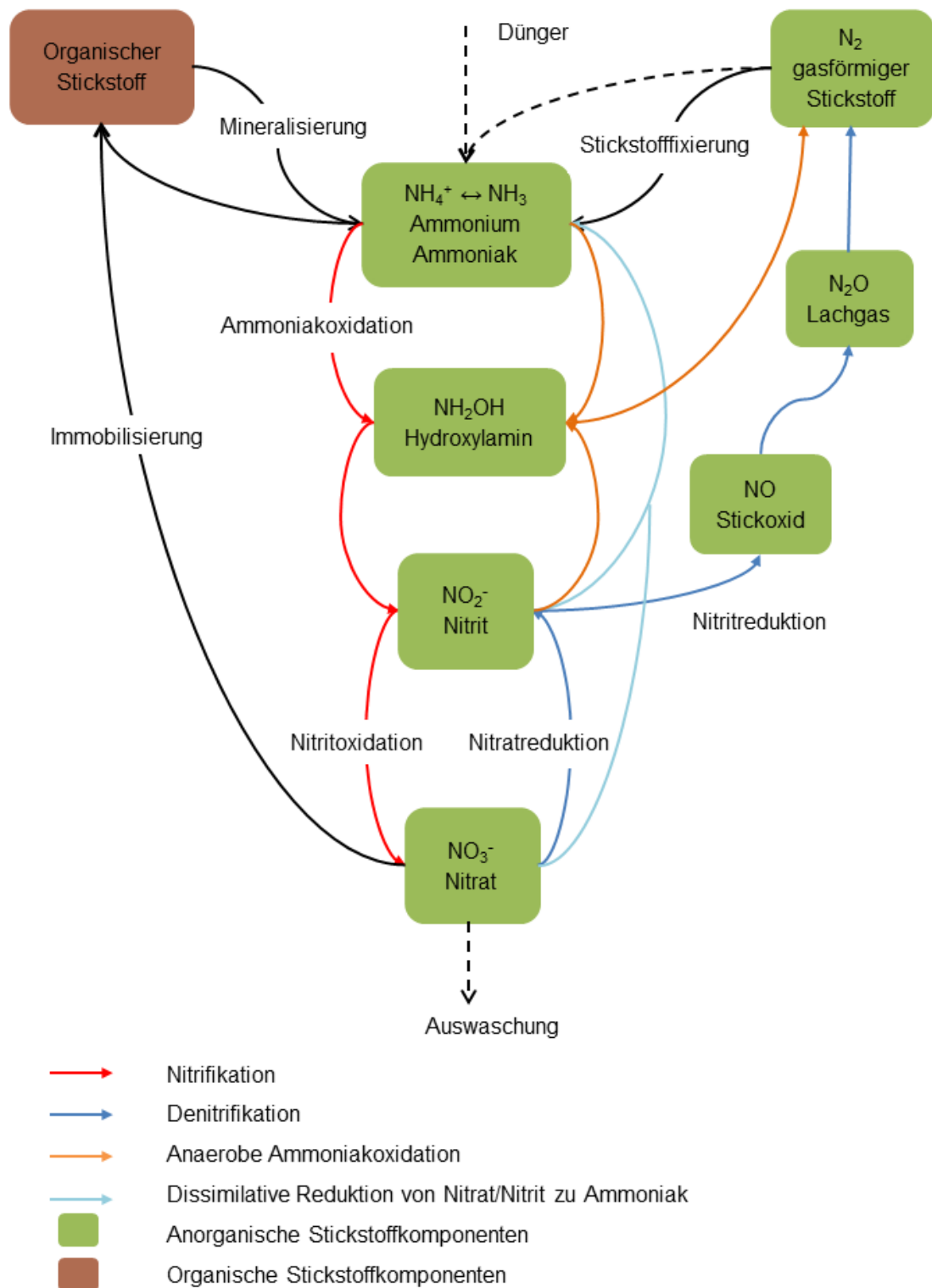


Abbildung 1.1.: Der Stickstoffkreislauf im Boden mit Nitrifikation, Denitrifikation, Mineralisierung, Immobilisierung, Stickstofffixierung, anaerober Ammoniakoxidation und dissimilativer Nitrat-/Nitritreduktion (modifiziert nach der Doktorarbeit von A. Focks [15]).

Die biogeochemischen Prozesse, welche die verschiedenen Stickstoffverbindungen ineinander umwandeln, sind eng miteinander verknüpft und bilden zusammen den Stickstoffkreislauf (Abb. 1.1). Vier von Bodenmikroorganismen ausgeführte Prozesse, Stickstofffixierung und -mineralisierung sowie Nitrifikation und Denitrifikation, finden typischerweise in Grünlandböden statt. Diese Prozesse sind stark abhängig von den vorliegenden Umweltbedingungen Temperatur, Feuchte und dem Gehalt anderer Ressourcen wie Sauerstoff und Kohlenstoff [60]. Insbesondere die Verfügbarkeit von Sauerstoff ist ein Faktor, der die Transformationsprozesse der Stickstoffverbindungen stark beeinflusst. Mikrobiell verfügbar ist hierbei nur der im Bodenwasser gelöste Sauerstoff. Die beiden Transformationsprozesse Nitrifikation und Denitrifikation reagieren unterschiedlich auf den Gehalt von Sauerstoff: Nitrifikation und Nitrifizierer sind zwingend auf ihn angewiesen, dagegen wird Denitrifikation durch Sauerstoff gehemmt und die Denitrifizierer können, aber müssen ihn nicht verwenden. Dadurch entsteht eine gekoppelte, nicht lineare Abhängigkeit der Prozesse vom Sauerstoffgehalt in Verbindung mit dem Bodenwasser. Auf den genauen Zusammenhang dieser beiden Faktoren wird in Kapitel 2.2 dieser Arbeit eingegangen.

Im Freiland kommen keine konstanten Sauerstoffbedingungen im Boden vor. Die Sauerstoffgehalte variieren aufgrund unterschiedlicher Faktoren. Die beiden wichtigsten sind dabei die Wetterbedingungen und die Landnutzung. Niederschlagsereignisse führen zu höherem Wasser- und damit niedrigerem Sauerstoffgehalt im Boden [26], da durch den hohen Wassergehalt die Bodenporen schlechter durchlüftet werden und die Diffusion von gasförmigem Sauerstoff in das Bodenwasser verlangsamt wird. Bodenfeuchte verdunstet bei warmem und trockenem Wetter, was wiederum zu einem höherem Sauerstoffgehalt im Boden infolge der besseren Durchlüftung führt. Trocknet der Boden stark aus, ist die Wassermenge, in welcher der Sauerstoff gelöst ist, so gering, dass wieder eine Sauerstofflimitierung entsteht. Landnutzung kann verschiedene Auswirkungen auf den Sauerstoffgehalt im Boden haben. Die Nutzung von schwerem landwirtschaftlichen Gerät oder das Gewicht von weidendem Vieh kann zu Bodenverdichtungen führen. Die Verdichtung hindert das Wasser am Versickern, was dazu führt, dass wesentlich schneller wassergesättigte und dadurch anaerobe Bedingungen im Boden auftreten. Eine weitere Konsequenz von Verdichtung ist ein vermindertes Porenvolumen des Bodens, was zu einer verringerten Sauerstoffkapazität führt [29]. Zusätzlich erhöht die Aufbringung von flüssigem Dünger den Wassergehalt und verringert damit den Sauerstoffgehalt. Dies wiederum führt zu verzögerter Nitrifikation und verstärkter Denitrifikation. Bewässerung erhöht die Wassermenge, die in den Boden gelangt. Dies kann, abhängig von der Intensität, die Bodenstruktur verändern und die Auswaschung von Mineralien und löslichem Material beschleunigen. Physikalische Bodeneigenschaften wie Permeabilität, Porengröße und -stärke bestimmen die Bodenstruktur und haben großen Einfluss auf

die Belüftung des Bodens [47]. Pflügen und die daraus resultierende Belüftung des Bodens für landwirtschaftliche Zwecke führen zu hohen Sauerstoffgehalten im Oberboden und so zu verstärkter Nitrifikation.

Durch Auflistung all dieser Faktoren wird offensichtlich, dass eine strikte Trennung von aeroben und anaeroben Bedingungen nicht realistisch ist. Es ist notwendig, Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse simultan unter sich ständig ändernden Sauerstoffbedingungen im Bodenwasser zu modellieren, anstatt nur konstante Werte für die Sauerstoffgehalte zu verwenden. Durch die Biodiversitätsexploratorien ergab sich die Möglichkeit, Zeitreihen für die genannten Umweltparameter an bestimmten Standorten zu erhalten und für das hier entwickelte Modell zu verwenden. Dadurch wurde es mir ermöglicht, ein realistisches Bild der Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik im Freiland zu simulieren.

1.2. Ziel der Arbeit

Das entwickelte Modell soll die Auswirkungen von Sauerstoff auf die gekoppelte Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik simulieren. Dafür war es nötig, ein neues Modell zu entwickeln, da existierende Modelle entweder auf einzelne Prozesse beschränkt oder großskalige Modelle sind, die den gesamten Stickstoffkreislauf, den Kohlenstoffkreislauf und viele äußere Faktoren beinhalten, für die es schwierig ist, verlässliche Daten zu bekommen. Eine Reduktion der großskaligen Modelle durch Ausschalten der nicht relevanten Prozesse gestaltet sich schwierig, da die einzelnen Prozesse miteinander verknüpft sind. Außerdem können äußere Faktoren nicht einfach ausgeschaltet werden. Eine Veränderung an einem bestehenden Modell in diesem Umfang wäre aufwändiger als die Entwicklung eines neuen Modells.

Das Modell soll dem wissenschaftlichen Erkenntnisgewinn dienen und ist das Modell kein Instrument für das Landnutzungsmanagement, da es keine Aussagen darüber treffen kann, wie hoch die tatsächlichen Stickstoffgehalte im Boden sind, wie viel Stickstoff ausgast und wie viel versickert. Die Aufnahme von Stickstoff in Pflanzen ist nicht im Modell enthalten. Das Modell kann also nicht dabei helfen, Aussagen darüber zu treffen, wie viel Dünger ausgebracht werden muss, um einen gewissen Ertrag zu erhalten oder um eine Überdüngung zu vermeiden. Das Modell untersucht vielmehr auf einer kleinen räumlichen Skala, wie sich der Sauerstoffgehalt des Porenwassers auf den gekoppelten Nitrifikations-Denitrifikationsprozess auswirkt. Die meisten äußeren Faktoren werden dazu außer Acht gelassen. Im Verlauf der Arbeit werden lediglich Wassergehalt und Temperatur ergänzt und auf ihren Einfluss untersucht. Das Modell soll allgemeine Aussagen über den Einfluss von Sauerstoff treffen. Ohne bodenspezifische Parametrisierung (Wassergehalt, Porenvolumen, Sauerstoffgehalt im Porenwasser) können genauere Aussagen nicht gemacht werden. Mit Hilfe des Modells kann jedoch der Bereich des Sauerstoffgehalts, in dem der Umschwung zwischen Nitrifikation und Denitrifikation auftritt, genauer untersucht werden und die Dynamik simuliert werden. Im Gegensatz zu einem experimentellen Ansatz ist dies mit einem Modell deutlich leichter, da der Übergangsbereich experimentell nicht einfach definiert und eingestellt werden kann. Mit Werten zu einem spezifischen Boden (Porenvolumen, Temperatur, Luftdruck) ist es auch möglich, das Modell zu kalibrieren, um den Übergangsbereich quantitativ genauer zu bestimmen. Da diese Werte nicht zur Verfügung standen, werden Simulationen mit niedrigem Sauerstoffgehalt (transiente Bedingungen), der in diesem Bereich des Umschwungs liegt, durchgeführt.

Ziel meiner Arbeit ist die Entwicklung eines Modells, das gekoppelte Nitrifikation und Denitrifikation betrachtet und dabei explizit den Einfluss von Sauerstoff einbezieht. Das Modell besteht aus einem System von Differentialgleichungen, die Nitrifikation

und Denitrifikation in Relation zu der mikrobiellen Biomasse abhängig von den Sauerstoffbedingungen im Bodenwasser beschreiben. Simulationsergebnisse für einen festgelegten Satz von Parameterwerten unter verschiedenen Sauerstoffgehalten werden vorgestellt. Außerdem werden mittels einer Sensitivitätsanalyse die einflussreichsten Parameter identifiziert, um eine spätere Parametrisierung zu erleichtern. Durch die Verwendung experimenteller Daten wird eine Parameteroptimierung durchgeführt. Mit der Anwendung von Zeitreihen aus den Biodiversitätsexploratorien wird das Modell auf realistische Bodensauerstoff- und Bodenfeuchtebedingungen angewendet.

2. Modelle und Experimente zum Stickstoffkreislauf in Böden

2.1. Die Modellierung des Stickstoffkreislaufs

Durch die mathematische Modellierung der verschiedenen Prozesse des Stickstoffkreislaufs wird die Funktion der mikrobiellen funktionellen Gruppen für die spezifischen Umwandlungsschritte und ihr Zusammenspiel sichtbar. Dies ermöglicht ein besseres Verständnis der komplexen Systemdynamik. Etablierte Modelle für Transformationsprozesse der Stickstoffverbindungen im Boden unterscheiden sich bezüglich ihrer Komplexität, mathematischen Form, der betrachteten Stickstoffverbindungen und mikrobiellen Biomasse [3].

Experimente zum fließenden Übergang zwischen Nitrifikation und Denitrifikation bei abnehmendem Sauerstoffgehalt [30] und Berichte über Denitrifikation bei niedrigem Sauerstoffgehalt [6] sowie experimentelle Hinweise auf simultane Nitrifikation und Denitrifikation [2] zeigen die Notwendigkeit, Nitrifikation und Denitrifikation nicht als einzelne, sondern als verknüpfte Prozesse zu betrachten. Bisher existierende Modelle sind jedoch häufig auf einen Prozess und damit eine Sauerstoffbedingung (aerob oder anaerob) beschränkt. Modelle, welche die Nitrifikation beschreiben, betrachten rein aerobe Bedingungen und untersuchen nur Prozesse, die unter diesen Sauerstoffbedingungen ablaufen [19, 17, 51]. Auf der anderen Seite haben Denitrifikationsmodelle ihren Fokus auf anaeroben Prozessen und deren Dynamik und vernachlässigen dabei alle Prozesse, die Sauerstoff benötigen [35, 8, 36].

Um Verständnis für die Interaktionen der verschiedenen Transformationsprozesse und die Auswirkungen von Sauerstoff besonders im Übergangsbereich zwischen rein aeroben und rein anaeroben Bedingungen zu erlangen, wird ein umfassenderes Modell benötigt, das gleichzeitige Nitrifikation und Denitrifikation in Abhängigkeit vom mikrobiell verfügbaren Sauerstoff betrachtet.

Nur wenige Untersuchungen erforschen jedoch bisher die gleichzeitige Nitrifikations- und Denitrifikationsdynamik im Boden. Existierende Modelle wie das MiCNiT-Modell [3] und Expert-N [56] beschreiben die Transformation von Stickstoffverbindungen unter

veränderlichen Sauerstoffbedingungen, benötigen für die Simulation jedoch eine große Anzahl von Parametern. Im Folgenden werde ich einige dieser Modelle vorstellen.

Das *MiCNit*-Modell [3] ist ein komplexes Modell zur Simulation mikrobieller Kohlenstoff- und Stickstoffumwandlung im Boden. Besonders die Modellierung der Emission von N-Spurengasen ist eine mögliche Anwendung. Das Modell ist eingebettet in eine Modellumgebung (MoBiLE), die Anfangsbedingungen und begleitende Ökosystemprozesse, so wie Stickstoffaufnahme durch Pflanzen, Streuabbau, Bodenwasser und Bodentemperatur durch etablierte Modellansätze zur Verfügung stellt. Das Modell berechnet explizit Dekomposition, die Dynamik der mikrobiellen Biomasse, Denitrifikation, autotrophe und heterotrophe Nitrifikation und wendet dabei das Konzept der mikrobiellen Aktivität und des Transports von Gasen und Lösungen zwischen anaeroben und aeroben Bodenfraktionen und durch das Bodenprofil an. Der Kohlenstoffkreislauf wird als Kohlenstoffumsetzung im Boden, angetrieben durch mikrobielles Wachstum und Metabolismus, beschrieben. Die Dekomposition von Pflanzenüberresten und Bodenhumus erfolgt mittels extrazellulärer Enzymaktivität der mikrobiellen Biomasse. Im Bodennitrogenkreislauf sind Immobilisierung, Mineralisierung und Umsatz von anorganischen und organischen Stickstoffformen verbunden mit dem Kohlenstoffumsatz enthalten. Die Denitrifikation wird als anaerobes mikrobielles Wachstum auf löslichem Kohlenstoff mit der Nutzung von oxidierten Stickstoffverbindungen als Elektronakzeptor, einschließlich der Simulation von Induktion und Repression der Denitrifikationsenzyme, beschrieben. Autotrophe und heterotrophe Nitrifikation werden einschließlich des Wachstums und der Aktivität der zugehörigen mikrobiellen funktionellen Gruppen modelliert. Chemodenitrifikation ist der temperatur- und pH-abhängige chemische Zerfall von Nitrit zu NO und Nitrat. Der Transfer und die Emission von gasförmigen Stickstoffverbindungen werden durch die Nutzung eines Bodengaskonzentrationsgradienten aus den Subroutinen für Denitrifikation und Nitrifikation und die Berechnung der eindimensionalen Diffusion realisiert. Der dynamische Wechsel des anaeroben Bodenvolumenanteils, der das Auftreten von Nitrifikation und/oder Denitrifikation in einer Bodenschicht steuert, wird durch eine modifizierte Version des anaeroben Ballons von Li et al. [38] simuliert. Der anaerobe (und aerobe) Volumenanteil wird aus dem bodenschichtspezifischen Sauerstoffgehalt abgeleitet. Der Sauerstoffgehalt hängt wiederum vom Sauerstoffverbrauch während der mikrobiellen und Pflanzenwurzelatmung und von der Nitrifikation als einen sauerstoffverbrauchenden Prozess ab. Außerdem wird Sauerstoffdiffusion betrachtet, welche basierend auf dem Porenvolumen und dem Wassergehalt in der Bodenmatrix berechnet wird.

Expert-N [56] ist ein Modell für die Simulation von Wasser-, Stickstoff- und Kohlenstoffdynamik im Boden-Pflanzen-Atmosphärensystem. Es besteht aus verschiedenen Komponenten, die verschiedene Ansätze beschreiben: Bodenwasserfluss, Bodenwärmtransport, Transformation von Bodenkohlenstoff- und Bodenstickstoffverbindungen, Ernteprozesse und Bodenmanagement. Jede Einheit besteht aus verschiedenen Untereinheiten, die wiederum unterschiedliche Algorithmen zur Auswahl enthalten, um die einzelnen Unterprozesse zu modellieren. Die Komplexität der Algorithmen reicht von funktionellen Ansätzen (häufig bei Managementmodellen benutzt) zu eher mechanistischen Ansätzen, die in naturwissenschaftlichen Modellen genutzt werden. Die Modellstruktur erlaubt es dem Benutzer, die Untereinheiten auszutauschen, so dass der Einfluss der verschiedenen Modellierungsansätze auf die Simulationsergebnisse komponentenweise analysiert werden kann. Diese Flexibilität erlaubt es dem Benutzer auch, ein komplettes Modell selber zu gestalten, das der Verfügbarkeit der Eingabedaten und dem Ziel der Untersuchung entspricht. Welche Daten eingegeben werden müssen, hängt vom ausgewählten Algorithmus ab. Umgekehrt bestimmen die eingegebenen Daten, welcher Algorithmus ausgeführt werden kann. Gemessene Zeitreihen für Bodenwasser und anorganische Stickstoffgehalte oder Erntedaten können in die Datenbank eingegeben und benutzt werden, um die Güte der Übereinstimmung der Simulationen zu bestimmen. Für die Kohlenstoff/Stickstoffeinheit des Modells kann zwischen den beiden Ansätzen LEACHN und CERES gewählt werden. CERES ist ein simplistisches Modell, bei dem der Stickstoffumsatz unabhängig vom Kohlenstoffumsatz simuliert wird. Beim Modell LEACHN wird die Stickstoffdynamik vom Kohlenstoffumsatz angetrieben. Der Einfluss von Sauerstoff wird indirekt entsprechend H.Johnsson et al. [27] durch den Bodenwassergehalt simuliert. Dabei wird die Denitrifikationsrate unterhalb einer Grenze unterdrückt. Der Boden ist nie mit Wasser gesättigt, so dass Nitrifikation immer auftritt. Der Bodenwassergehalt hat auch Einfluss auf die Nitrifikation, da es für die Nitrifikation einen optimalen Bereich gibt, außerhalb dessen der Umsatz beschränkt ist. Dies wird allerdings auf den Bodenwassergehalt selbst und nicht auf den Sauerstoff zurückgeführt. In beiden Modellen ist der organische Kohlenstoff des Bodens in drei bis sieben Pools unterschiedlicher Abbaubarkeit unterteilt. Die Mineralisation dieser Pools wird durch eine Kinetik erster Ordnung mit hohen Ratenkonstanten für die aktiven und niedrigen Ratenkonstanten für die ruhenden Kohlenstoffpools beschrieben. Der Stickstoffumsatz ist durch eine Reihe von Annahmen bezüglich der mikrobiellen Kohlenstoffnutzungseffizienz, der Humifizierungsrate und dem Stickstoffbedarf der Population der Mikroorganismen an den Kohlenstoffumsatz gekoppelt. Dies resultiert in einer Nettomineralisierung oder einer Nettoimmobilisierung des Stickstoffs. Für die unterschiedlichen Transformationen gibt es Untereinheiten für Mineralisierung, Nitrifikation, Denitrifikation und Harnstoffhydrolyse. Die mikrobielle Biomasse wird nicht modelliert und der

direkte Einfluss des Sauerstoffs getrennt vom Bodenwassergehalt nicht untersucht. Das Modell wird genutzt, um den Stickstoffumsatz in unterschiedlich geführten Kulturböden und die Emission von Distickstoffmonoxid aus verschiedenen Böden unterschiedlicher Landnutzung zu untersuchen.

Ecosys [19, 22, 43] ist ein Ökosystemmodell. Das Bodenmodell basiert auf sechs organischen Zuständen zwischen den sich Kohlenstoff (C), Stickstoff (N) und Phosphor (P) bewegen können: Festes organisches Material, lösliches organisches Material, sorbiertes organisches Material, Azetat, mikrobielle Gemeinschaften und mikrobielle Reststoffe. Jeder Zustand ist in zwei bis vier hierarchische Level biologischer Organisation aufgeteilt:

- Organischer Material-Mikrobenkomplex definiert durch das Substrat (tierischer Dünger, Pflanzenreste, partikuläres organisches Material oder Humus).
- Der mikrobielle funktionelle Typ innerhalb jedes Komplexes (obligat aerobe Bakterien, fakultativ anaerobe Denitrifizierer, Pilze, anaerobe Fermentierer und H_2 -produzierende Azetogene, acetotrophe Methanogene, hydrogenotrophe Methanogene und Methanotrophen, NH_4^+ - und NO_2^- -oxidierer und nicht-symbiotische Diazotrophen).
- Strukturelle oder kinetische Komponenten innerhalb jedes Substrats oder funktionellen Typs (z.B. Pflanzenrest \rightarrow Protein, lösliche Kohlenhydrate, Zellulose, Lignin; mikrobieller funktioneller Typ \rightarrow labil, stabil, lagerfähig).
- Elementare Fraktion innerhalb jeder strukturellen oder kinetischen Komponente (C, N, P).

Das Modell kann in einer, zwei oder drei Raumdimensionen genutzt werden, durch die Repräsentation aller Zustands- und Ratenvariablen in ihren West nach Ost, Nord nach Süd und vertikalen Positionen in einer komplexen Landschaft. Die biologischen Schlüsselprozesse (Mineralisierung, Immobilisierung, Nitrifikation, Denitrifikation, Wurzel- und Mykorrhizaaufnahme), welche die N_2O -Produktion kontrollieren, werden mit den physikalischen Schlüsselprozessen (Konvektion, Diffusion, Volatilisierung, Lösung), die den Transport von gasförmigen Reaktanten bestimmen, und Produkten dieser biologischen Prozesse gekoppelt. Die Simulation von Nitrifikation und Denitrifikation ist sensitiv abhängig von der luftgefüllten Bodenporosität, welche wiederum vom wassergefüllten Porenraum abhängt. *Ecosys* modelliert weiterhin den oberflächlichen Energieaustausch, unterirdischen Wärmetransport, vertikale und laterale Bewegung von Wasser und Lösungen und die Auswirkungen von Bodentemperatur auf mikrobielle Aktivität und

Gasaustausch. Die benötigten Eingabeparameter erfordern Informationen zu Standort, Topographie, Boden, Wetter, Boden- und Pflanzenmanagement. Das Modell hat aufgrund seiner Komplexität ein weites Feld an Einsatzmöglichkeiten, wie zum Beispiel die Modellierung topographischer Effekte borealer Schwarzfichtenwälder auf die Ökosystemproduktivität [22], die Ökosystemproduktivität von borealen Espenwäldern unter dem Einfluss von Trockenheit und Klimawandel [23] oder die Simulation zeitlicher Variabilität von Distickstoffmonoxidemissionen aus gedüngten, landwirtschaftlich genutzten Böden [43].

DNDC [37] ist ein von Niederschlagsereignissen gesteuertes, prozessorientiertes Simulationsmodell für die Emission von N_2O , Kohlenstoffdioxid und N_2 aus landwirtschaftlichen Böden. Es enthält drei Submodelle für die thermale Hydraulik, Dekomposition und Denitrifikation. Einfache Klimadaten führen zur Produktion von dynamischer Bodentemperatur und Bodenfeuchteprofilen und Verschiebungen von aerob-anaeroben Bedingungen. Zusätzliche Eingabeparameter bestimmen die Bodentextur, biochemische Prozesse und landwirtschaftliche Methoden. Zwischen den Niederschlagsereignissen dominieren Dekomposition von organischem Material und andere Oxidationsprozesse (einschließlich Nitrifikation), wodurch sich die Gehalte von organischem Gesamtkohlenstoff, löslichem Kohlenstoff und Nitrat fortwährend ändern. Während eines Niederschlagsereignisses werden durch Denitrifikation N_2O und N_2 produziert. Für das Denitrifikationsmodell wird das Modell von Leffelaar und Wessel [36] verwendet. Das Dekompositionsmodell ist nach Molina et al. [45] modelliert. Unter aeroben Bedingungen finden Dekomposition und andere Oxidationsprozesse, einschließlich Nitrifikation, statt. Mit der Dekomposition von Reststoffen, mikrobieller Biomasse und teilweise durch Humifikation und Adsorption stabilisiertem Material findet auch die Assimilation von anorganischem Kohlenstoff und Stickstoff in die mikrobielle Biomasse statt. Das Dekompositionsmodell beinhaltet drei aktive Kohlenstoffpools für die Dekompositionsabfolge. Während eines Niederschlagsereignisses stoppt die Dekomposition. Die Dekomposition erfolgt schichtenweise und gleichzeitig in allen drei Pools. Für das eindimensionale Bodenwärme- und Bodenfeuchteflussmodell wird der Boden in horizontale Schichten unterteilt, in denen gleichförmige Temperatur- und Feuchtebedingungen herrschen. Für jeden Zeitschritt werden die Wärme- und Wasserflüsse zwischen den Schichten bestimmt. Für den Wechsel zwischen Nitrifikation und Denitrifikation wird eine Grenze von 40% Bodenfeuchte festgelegt, oberhalb der Denitrifikation stattfindet. Gleichzeitige Nitrifikation und Denitrifikation gibt es nicht. Dieses Modell ist aufgrund dieser Annahme veraltet und wurde durch das deutlich komplexere Modell Pnet-N-DNDC [37, 38] ersetzt.

Pnet-N-DNDC [37, 38] ist ein prozessorientiertes Modell, um die Emissionen von N_2O und NO aus Waldböden vorherzusagen. Dazu wurden drei existierenden Modellen weitere Eigenschaften hinzugefügt. Mittels zweier Komponenten werden (1) die Auswirkungen von ökologischen Einflussfaktoren (z.B. Klima, Boden, Vegetation und anthropogene Aktivität) auf die Bodenparameter (z.B. Temperatur, Feuchte, pH, Redoxpotential und Substratkonzentrationen (NH_4^+ , NO_3^- , DOC)) und (2) die Auswirkungen der Bodenparameter auf die biochemischen oder geochemischen Reaktionen, welche NO - und N_2O -Produktion und Verbrauch bestimmen, simuliert. Die erste Komponente enthält drei Submodelle für die Modellierung des Bodenklimas, des Waldwachstums und die Umwandlung von organischem Bodenmaterial. Die zweite Komponente enthält zwei Submodelle für Nitrifikation (N) und Denitrifikation (DNDC). Für die Simulation von veränderlichen Sauerstoffbedingungen wird das Konzept des anaeroben Ballons verwendet. Es gliedert den Boden in aerobe und anaerobe Anteile, so dass Nitrifikation und Denitrifikation gleichzeitig möglich sind. Die Größe des Ballons wird durch den simulierten Partialdruck des Sauerstoffs bestimmt, der auf Grundlage der Sauerstoffdiffusion und der Verbrauchsraten im Boden berechnet wird. PnET ist ein Waldphysiologiemodell für die Vorhersage von Waldphotosynthese, Atmung, Produktion und Allokation von organischem Kohlenstoff und Laubproduktion. DNDC ist ein biogeochemisches Modell für den Boden, um Dekomposition und Denitrifikation im Boden vorherzusagen. Das Nitrifikationsmodell bestimmt die Wachstums- und Sterberaten der Nitrifizierer, die Nitrifikationsrate und die nitrifikationsinduzierte NO - und N_2O -Produktion. In der ersten Komponente wird der Einfluss der ökologischen Einflussfaktoren auf die Boden- und Umweltfaktoren durch die drei verknüpfte Untermodelle quantifiziert. Das Bodenklimamodell berechnet Bodentemperatur, -feuchte und Redoxpotentialprofile basierend auf täglichen Klimadaten, physikalischen Bodeneigenschaften, Bodenwasserstatus, thermohydraulischem Einfluss von Pflanzen und Bodenatmung. Das Waldwachstumsmodell simuliert Waldwachstum durch solare Einstrahlung, Temperatur, Wasserstress und Stickstoffstress und gibt Laubproduktion, Wasser- und Stickstoffbedarf und Wurzelatmung an das Bodenklima- oder Dekompositionsmodell weiter. Das Dekompositionsmodell simuliert die Substratkonzentrationen (z.B. DOC, NH_4^+ und NO_3^-) aufbauend auf Klima, Bodeneigenschaften und Managementmaßnahmen. In der zweiten Komponente wird der Einfluss der Bodenparameter auf Nitrifikation und Denitrifikation bestimmt.

Diese Modelle haben den Vorteil, komplexe Zusammenhänge, wie verschiedene Transformationsprozesse der Stickstoffverbindungen, unterschiedliche Kohlenstofffraktionen, Kopplung von Kohlenstoff- und Stickstoffkreislauf und den Einfluss von Umwelt- und Umgebungsfaktoren darstellen zu können. Dadurch können sie die Dynamik der Substratkonzentrationen realitätsnah simulieren. Allerdings ist dazu auch eine große Anzahl

von Eingabeparametern notwendig, die selten im benötigten Umfang und in ausreichender Qualität zur Verfügung stehen. Diese Modelle weisen durch die vielen betrachteten Prozesse und Einflussfaktoren einen hohen Komplexitätsgrad auf, so dass es nicht möglich ist, einzelne Prozesse und Faktoren herauszugreifen und ihr Zusammenwirken zu betrachten. Um den Einfluss von Sauerstoff auf die Nitrifikations- und Denitrifikationsdynamik erklären zu können, sind diese Modelle somit nicht geeignet. Dazu ist ein Modell notwendig, das sich auf diese beiden Prozesse und die damit verbundenen Substrate konzentriert und alle übrigen Einflussfaktoren ausblendet. Ein solches Modell wird in meiner Arbeit entwickelt und angewendet.

Die Parametrisierung eines Simulationsmodells ist häufig kritisch, da realistische Parameterwerte nur selten der Literatur entnommen werden können. Sie müssen daher in Experimenten bestimmt werden, die oftmals zeit- und arbeitsaufwändig sind. Außerdem sind die meisten Parameterwerte abhängig von den Umweltbedingungen, so dass gefundene Literaturwerte selten für die Parametrisierung eines Modells verwendbar sind. In diesem Zusammenhang sind Sensitivitätsanalysen ein Mittel, um die Anzahl der benötigten Parameterwerte beschränken zu können, indem diejenigen Parameter bestimmt werden, welche den größten Einfluss auf die Modelldynamik besitzen. Die Ergebnisse einer Sensitivitätsanalyse müssen für jedes Modell einzeln ausgeführt werden und sind selten übertragbar. Daher führe ich für das in meiner Arbeit entwickelte Nitrifikations-Denitrifikationsmodell eine eigene Sensitivitätsanalyse durch.

2.2. Einfluss von Sauerstoff und Wassergehalt auf die Aktivität der Mikroorganismen und auf Nitrifikation und Denitrifikation

Der Anteil des mikrobiell verfügbaren Sauerstoffs im Boden bestimmt maßgeblich den Umfang, in dem die jeweiligen Transformationen der Stickstoffverbindungen stattfinden [3]. Dieser Anteil ist jedoch für verschiedene Böden unterschiedlich und ändert sich mit der Bodentiefe und über das Jahr (Abb. 2.1). Daher ist es von Interesse, ein Modell zu betrachten, das variable Sauerstoffbedingungen abbilden kann. Zwar benötigen die Mikroorganismen nicht den in Abbildung 2.1 dargestellten Luftsauerstoff, sondern den im Bodenwasser gelösten Sauerstoff, aber diese beiden Größen hängen miteinander zusammen. Die Erläuterung folgt weiter unten in diesem Unterkapitel.

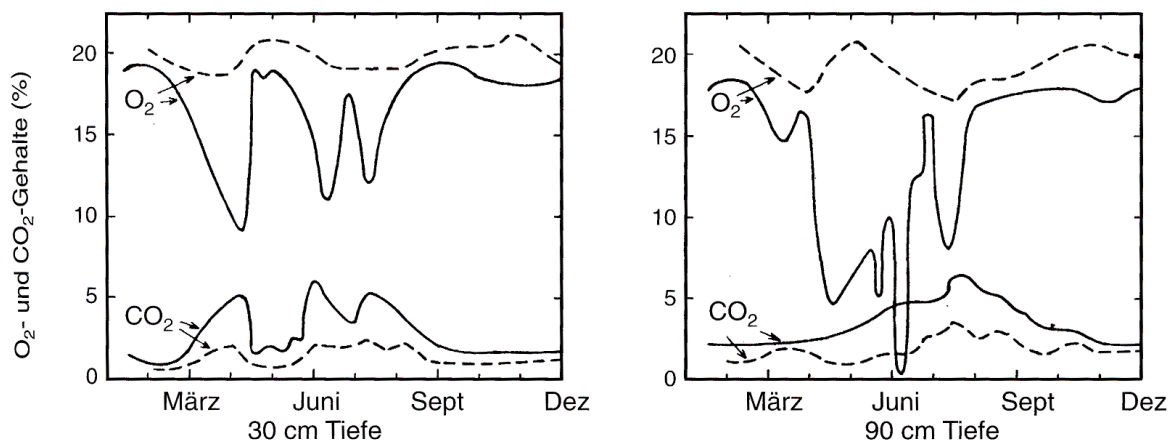


Abbildung 2.1.: Sauerstoff- und Kohlenstoffdioxidgehalte in der Bodenluft in 30 und 90 cm Bodentiefe in einem sandigen Lehm (- - -) und einem schluffigen Ton (-) unter Apfelbäumen [5].

Der Einfluss von Sauerstoff auf die Aktivität der nitrifizierenden und denitrifizierenden Mikroorganismen und auf die Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse muss dabei getrennt betrachtet werden, weil er sich unterschiedlich auswirkt. Das Wachstum der Mikroorganismen geht im Modell explizit nur in die Gleichungen für die nitrifizierenden und denitrifizierenden Mikroorganismen ein, während die Transformation der Stickstoffverbindungen getrennt davon durch Umsatzgeschwindigkeiten beschrieben wird.

Die nitrifizierenden Mikroorganismen (*Nitrifizierer*) benötigen den im Bodenwasser gelösten Sauerstoff zwingend und sind daher strikt aerob. Ohne Sauerstoff stellen sie ihr Wachstum ein. Mit steigendem Sauerstoffgehalt steigt auch ihre Aktivität an (Abb. 2.2).

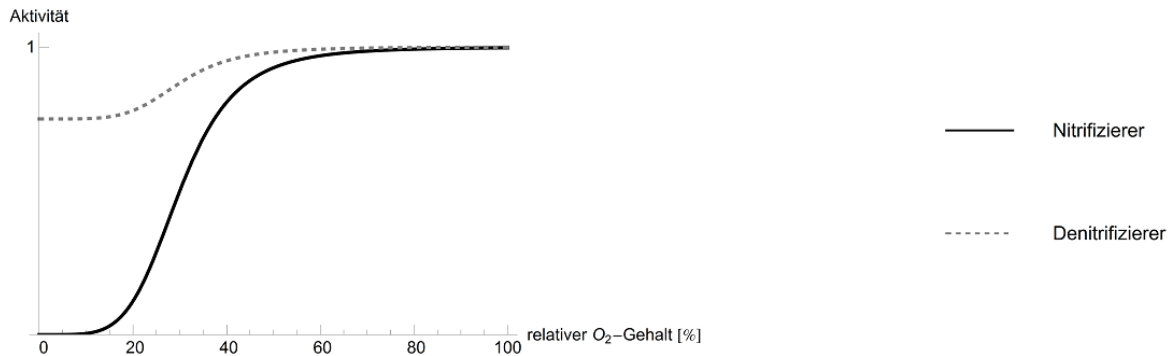


Abbildung 2.2.: Auswirkung von gelöstem Sauerstoff auf die Aktivität der Nitrifizierer und Denitrifizierer.

Die denitrifizierenden Mikroorganismen (*Denitrifizierer*) benötigen Sauerstoff nicht zwingend. Sie können auch unter anaeroben Bedingungen wachsen und sind daher fakultativ anaerob. Ist der gelöste Sauerstoff im Bodenwasser limitierend, können sie zu alternativen Elektronenakzeptoren (Nitrat, Nitrit und Distickstoffmonoxid) wechseln. Allerdings ist ihre Wachstumsrate unter aeroben Bedingungen optimal und so wird das Wachstum der Denitrifizierer unter anaeroben Bedingungen niemals so stark ausfallen wie unter aeroben Bedingungen (Abb. 2.2). Ich gebe den relativen Sauerstoffgehalt des Bodens in Prozent, bezogen auf den maximal im Bodenwasser gelösten Sauerstoffgehalt, an. Die tatsächliche Menge variiert abhängig von Standort, Temperatur, im Wasser gelösten Stoffen und Luftdruck. Im weiteren Verlauf der Arbeit beziehe ich mich mit der Formulierung "Sauerstoffgehalt" auf den im Bodenwasser gelösten, relativen Sauerstoffgehalt, der damit zugleich auch abhängig ist von der Menge des Bodenwassers. Der Gehalt bezeichnet hier die reine Menge an gelöstem Sauerstoff, bezogen auf einen festgelegten Bodenausschnitt (in diesem Fall Gramm Boden Trockengewicht), der den Mikroorganismen zur Verfügung steht.

Der Nitrifikationsprozess ist, wie auch die ausführenden Mikroorganismen, aerob. Damit er stattfindet, muss Sauerstoff vorhanden sein. Das Ausmaß, in dem nitrifiziert wird, steigt mit wachsendem Sauerstoffgehalt an (Abb. 2.3) [57]. Im Gegensatz dazu unterscheidet sich der Denitrifikationsprozess von den ausführenden Denitrifizierern, was den Sauerstoffbedarf betrifft.

Das in der Zelle befindliche Enzym zur Denitrifikation wird durch Sauerstoff gehemmt [42]. Daher ist die Denitrifikation ein rein anaerober Prozess. Das Ausmaß, in dem denitrifiziert wird, sinkt also mit steigendem Sauerstoffgehalt (Abb. 2.3).

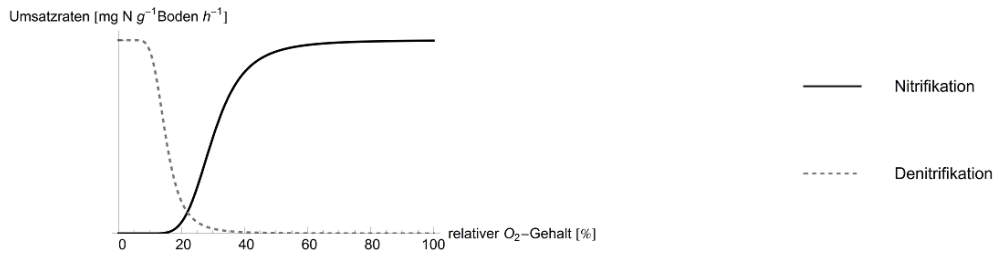


Abbildung 2.3.: Nitrifikation und Denitrifikation in Abhängigkeit vom im Bodenwasser gelösten Sauerstoff.

Wie oben erwähnt, verwenden die Mikroorganismen den im Bodenwasser gelösten Sauerstoff und nicht den Bodenluftsaauerstoff. Neben dem Sauerstoff selbst brauchen sie auch Wasser, um die darin gelösten Substanzen aufnehmen zu können und nicht auszutrocknen. Der Gehalt des im Bodenwasser gelösten Sauerstoffs hängt von der Bodenfeuchte ab (Abb. 2.4). Der Sauerstoffgehalt steigt zunächst linear mit der Menge des Bodenwassers bis zu einem Punkt, an dem durch die fehlende Durchlüftung der zu einem Großteil gefüllten Bodenporen die Nachlieferung von Sauerstoff durch Diffusion verlangsamt wird und schließlich fast ganz zum Erliegen kommt, so dass kein Sauerstoff mehr im Wasser gelöst ist.

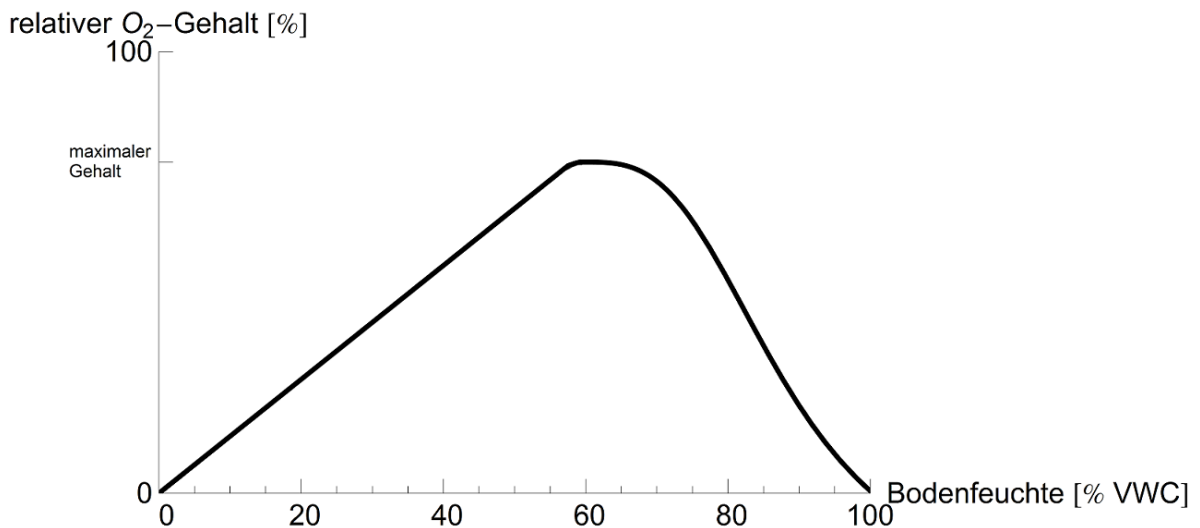


Abbildung 2.4.: Gelöster relativer Sauerstoffgehalt im Bodenwassers bei steigender Bodenfeuchte (in Prozent des Volumetrischen Wassergehalts VWC).

Bei einem wassergesättigten Boden ist das gesamte Porenvolumen mit Wasser gefüllt und es gibt keine Bodenluft mehr. Der im Wasser gelöste Sauerstoff ist schnell verbraucht und die Nachlieferung durch Diffusion vergleichsweise langsam, so dass innerhalb kurzer Zeit anaerobe Bedingungen vorliegen und in Folge dessen anaerobe Prozesse, in diesem Fall die Denitrifikation, ablaufen.

Befindet sich die Bodenfeuchte bei oder unterhalb der maximalen Wasserhaltekapazität, sind nur Klein- und Mittelporen wassergefüllt, die Grobporen aber luftgefüllt. Durch die Grobporen diffundiert schnell Sauerstoff in das Bodenwasser. Die Bedingungen sind optimal für aerobe mikrobielle Aktivität, wie die Nitrifikation.

Ist der Boden fast komplett ausgetrocknet und nahe beim Welkepunkt, sind lediglich noch die Feinporen mit Wasser gefüllt. Die mikrobielle Aktivität ist eingeschränkt, da nur wenige Mikroorganismen noch von genügend Wasser umgeben sind.

Bodenmikroorganismen siedeln aufgrund besserer Nährstoffverfügbarkeit und höherer Sicherheit vor eventuellen Räufern bevorzugt in den Mittel- und Feinporen des Bodens [53]. Mikrobielle Prozesse benötigen Wasser und das Wasser in den Bodensporen bestimmt die Belüftung und behindert die Gasdiffusion [18]. Allgemein gilt, dass die Denitrifikationsrate ab einem Porenwassergehalt von 60% ansteigt [9]. Die Nitrifikationsrate sinkt bei einem gewissen Gehalt, ab dem die Sauerstoffverfügbarkeit durch das Wasser verringert wird [18]. Die optimalen Verhältnisse für die Nitrifikation liegen bei einem Porenwassergehalt zwischen 40 und 60% [9].

Der Wassergehalt im Boden hängt ab von der Wasserversorgung durch Regen und Bewässerung, von dem Verlust durch Versickerung, Evaporation von der Bodenoberfläche, der Aufnahme und Transpiration durch Pflanzen und von der Kapazität des Bodens, Wasser zu speichern. Diese Faktoren wiederum hängen von der Topographie, der Bodentextur, dem Klima, dem Pflanzenwachstum und der Nutzung des Standortes ab [18]. Der Wassergehalt kann innerhalb einer Fläche variieren und ist normalerweise auch innerhalb des Bodenprofils unterschiedlich (Abb. 2.1).

Aus dem Zusammenhang zwischen Sauerstoffgehalt und Bodenfeuchte aus Abbildung 2.4 ergibt sich für Nitrifikation und Denitrifikation eine Abhängigkeit von der Bodenfeuchte (Abb. 2.5). Implizit ist darin die Abhängigkeit vom darin gelösten Sauerstoff enthalten.

Der genaue Verlauf der Kurven aus Abbildung 2.5 ist abhängig von der Sensitivität der Prozesse gegenüber der Sauerstofflimitierung (Nitrifikation) bzw. dem Sauerstoff selbst (Denitrifikation) und dem genauen Zusammenhang zwischen gelöstem Sauerstoff und Wassergehalt eines spezifischen Bodens. Dieser Zusammenhang ist abhängig von der jeweiligen Bodenstruktur. Je nachdem wie die Aufteilung des Bodens in Grob-, Mittel- und Feinporen ist, verläuft die Kurve anders. Bei einem Boden mit niedriger maximaler Wasserhaltekapazität kann davon ausgegangen werden, dass im Vergleich zu

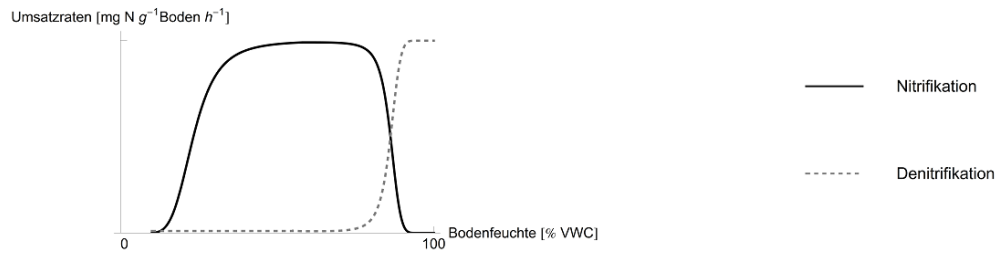


Abbildung 2.5.: Abhängigkeit von Nitrifikation und Denitrifikation von der Bodenfeuchte.

einem Boden mit hoher Wasserhaltekapazität viele Grobporen vorhanden sind. Auch ist davon auszugehen, dass die maximalen Umsatzraten für beide mikrobiellen Gruppen nicht gleich hoch sind. Da die maximale Höhe der Umsatzraten jedoch von vielen Faktoren abhängt, habe ich an dieser Stelle die Abbildung vereinfacht und sie für beide mikrobiellen Gruppen gleich dargestellt.

2.3. Auswertung von Experimenten zur Transformation von Stickstoffverbindungen im Boden

2.3.1. Biodiversitätsexploratorien

Die Biodiversitäts-Exploratorien sind ein von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziertes Verbundprojekt (DFG Schwerpunktprogramm 1374 - Bereich Infrastruktur). Drei Exploratorien (Schwäbische Alb, Hainich, Schorfheide-Chorin) dienen als offene Forschungsplattform für Wissenschaftler aus ganz Deutschland.

Untersucht werden dabei die Beziehungen zwischen der Biodiversität verschiedener Taxa und Ebenen, die Rolle von Landnutzung und Management für die Biodiversität und die Funktion der Biodiversität für Ökosystemprozesse [49].

Die Exploratorien stellen mit ihrer wissenschaftlichen Infrastruktur das notwendige Umfeld, um entscheidende Fragen zum Biodiversitätswandel zu bearbeiten und den Einfluss dieser Veränderungen auf Ökosystemprozesse abschätzen zu können [49].

Änderungen in der Landnutzung und deren Intensität wirken sich grundlegend auf die Biodiversität aus. Gegenwärtig verzeichnet die Biodiversität eine generelle Abnahme aufgrund anhaltender Veränderungen in der Landnutzung. Obwohl die Beziehungen zwischen Landnutzung und Biodiversität für einige Organismengruppen bereits gut untersucht wurden, besteht noch Forschungsbedarf. Weiterhin ist unbekannt, wie die Diversitäten einzelner Gruppen untereinander in Bezug stehen und ob sie und ihre jeweiligen genetischen Diversitäten ähnlich auf Landnutzungsänderungen reagieren. Für natürliche Systeme ist die funktionelle Bedeutung der Biodiversität immer noch unklar, da verschiedene Managementstrategien die Effekte überlagern. Ziel dieser Studie in realen Landschaften ist es, mit Hilfe der Kombination von Monitoring-Ansätzen und Messungen der funktionellen Diversität in Experimenten die Verbindungen zwischen Landschaftsveränderung, genetischer Diversität, Artendiversität, der Vielfalt an biologischen Interaktionen und den Ökosystemdienstleistungen zu untersuchen [49].

Der Aufbau der Biodiversitätsexploratorien ist an die Untersuchung in den drei Exploratorien angepasst. Jedes Exploratorium enthält eine große Zahl an Untersuchungsflächen, die sich in ihrer Untersuchungsintensität unterscheiden. Über ausgewählte Landschaftsbereiche wurde ein Raster mit insgesamt 1000 Flächen pro Exploratorium gelegt. In diesen wurden die Zahl und Häufigkeit von Pflanzenarten sowie Landnutzungstypen und -intensitäten dokumentiert. Zusätzlich wurden jeder Fläche Bodenproben entnommen und analysiert [49].

Nach der ersten Erfassung wurden insgesamt 100 dieser Flächen (je 50 vom Typ Wald

und Grünland pro Exploratorium) für eine intensivere Untersuchung ausgewählt. Diese repräsentieren den Gradienten der Landnutzungsintensität von weitgehend ungenutzten bis zu stark genutzten Ökosystemen. Diese Experimentierstandorte sind mit Geräten zur Messung von Boden- und Lufttemperatur sowie Bodenfeuchte ausgestattet.

2.3.2. InDiLaNi

Die vorliegende Arbeit entstand im Teilprojekt “Influence of different land use intensities on abundance, diversity and activity of nitrogen fixing microbes as well as ammonia oxidizing bacteria and archaea in grassland ecosystems“ (InDiLaNi) der Biodiversitätsexploratorien in Kooperation mit Prof. Dr. Michael Schloter vom Helmholtz-Zentrum München, Abteilung für Umweltgenomik. Im Rahmen des Projekts wurde der Einfluss von verschiedenen Landnutzungsintensitäten auf Abundanz, Diversität und Aktivität von stickstofffixierenden Mikroorganismen sowie ammoniakoxidierenden Bakterien und Archaeen in Grünlandökosystemen untersucht. Die Verbindungen zwischen oberirdischer (Pflanzen) und unterirdischer (Mikroorganismen) Diversität wurden mit größerer Genauigkeit untersucht, um die Rolle von verschiedenen Landnutzungsintensitäten in Grünlandökosystemen zu erkennen. Der Fokus wurde auf mikrobielle Gemeinschaften, welche die Stickstofffixierung und die Ammoniumoxidation durchführen, gelegt, da dies zwei zentrale Schritte im mikrobiellen Stickstoffkreislauf sind. Dabei wurde von der Hypothese ausgegangen, dass Struktur und Aktivität von Stickstofffixierern hauptsächlich durch die Pflanzendiversität gesteuert werden, während Abundanz und Umsatz von Ammoniumoxidierern hauptsächlich durch abiotische Bodenparameter wie Stickstoffverfügbarkeit, -qualität, pH-Wert im Boden und Bodenkompaktierung reguliert werden. Im Arbeitspaket 4 des Teilprojekts sollte die Landnutzungsintensität mit der Leistung mikrobieller Gemeinschaften im Rahmen des Nährstoffumsatzes im Boden verknüpft werden. Um das Verständnis für das Zusammenspiel zwischen Landnutzung und Biodiversität zu erhöhen, sollte ein mechanistischer Modellansatz entwickelt werden. In einem Vorgängerprojekt wurde ein mechanistisches Nitrifikationsmodell entwickelt, das die Dynamik der Ammonium- und Nitratkonzentrationen im Boden in Abhängigkeit von ammoniakoxidierenden Archaeen und Bakterien simuliert [51]. Darauf aufbauend entwickelte ich ein kombiniertes Nitrifikations-Denitrifikationsmodell unter Einbindung des Denitrifikationsmodells von Leffelaar und Wessel [36]. Im Rahmen der Biodiversitätsexploratorien und des Teilprojekts InDiLaNi wurden von der Abteilung Environmental Genomics (EGEN) am Helmholtz Zentrum in München Experimente durchgeführt, um Erkenntnisse über die Dynamik der Stickstoffkomponenten zwischen Nitrifikation und Denitrifikation und über die Dynamik der mikrobiellen Biomasse über einen Zeitraum von 144 Stunden zu gewinnen. Es wurde davon ausgegangen, dass in diesem Zeitraum

eine deutlich sichtbare Reaktion auf die anfängliche Ammoniumzugabe zu erkennen sein würde. Die Messwerte sollten für die Validierung und Parametrisierung des entwickelten Nitrifikations-Denitrifikationsmodells genutzt werden. Die Planung der Experimente erfolgte im Rahmen der Kooperation zwischen dem Institut für Umweltsystemforschung und dem Helmholtz Zentrum München gemeinsam. Die in dieser Arbeit verwendeten Daten wurden von Veronika Felber in ihrer Bachelorarbeit am Lehrstuhl Bodenkunde der Technischen Universität München unter Betreuung durch Barbara Stempfhuber und Prof. Dr. Michael Schloter erhoben [13].

2.3.3. Auswahl der Bodenproben

Die Bodenproben wurden im November 2011 im Exploratorium Schwäbische Alb genommen. Da zu dieser Jahreszeit die Erntesaison bereits vorüber ist, hatten Pflanzen keinen Einfluss auf Nitrifikation und Denitrifikation. Das Exploratorium liegt im Südwesten Deutschlands, umfasst etwa 422 km^2 und liegt in einer Höhe von 460 bis 860 m. Die durchschnittliche Temperatur liegt bei 6 bis 7°C bei einem jährlichen Niederschlag von 700 bis 1000 mm. Das Ausgangsgestein ist kalkhaltig mit Karsterscheinungen [14]. Die Bodenproben wurden an vier Standorten aus dem Ah-Horizont im Grünland entnommen, gesiebt (2 mm) und bei 4°C gelagert. Zwei Standorte wurden in der Vergangenheit extensiv und zwei Standorte intensiv bewirtschaftet. Die Grünlandflächen in der Schwäbischen Alb sind hauptsächlich Leptosole und Braunerden [14]. Die ausgewählten Standorte mit intensiver Landnutzungsintensität sind gedüngte Wiesen, während bei den extensiven Standorten nicht gedüngt wurde. Die vier ausgewählten Standorte waren AEG 02 (A = Alb, E = Experimentierstandort, G = Grünland), AEG 10, AEG 15 und AEG 30.

In Tabelle 2.1 wird die Nutzung der vier Standorte erläutert. AEG 02 wurde gedüngt und gemäht, aber hatte keinen Viehbesatz. AEG 10 wurde lediglich gemäht. AEG 15 wurde ebenfalls gedüngt und gemäht, die Düngung war allerdings geringer als bei AEG 02. AEG 30 wurde gemäht und als Weide für Schafe genutzt.

Tabelle 2.1.: Durchschnittliche Landnutzung von 2008 bis 2010 der Standorte der Bodenproben.

Standort	ØDüngung [kg N]	ØMahd [Häufigkeit pro Jahr]	ØVieh [Tiere pro Jahr]	Nutzungsart
AEG 02	225,5	3	0	Gedüngte Wiese
AEG 10	0	1	0	Ungedüngte Wiese
AEG 15	130,5	3	0	Gedüngte Wiese
AEG 30	0	0,4	119,1	Mähweide mit Schafen

Für das Modell nahm ich an, dass die Landnutzung über die Anfangsbedingungen wie Ammonium-, Nitrat- und Nitritkonzentrationen und Gehalt an gelöstem Kohlenstoff und das Verhältnis der drei mikrobiellen Gruppen zueinander definiert wird. Um diese Hypothese zu überprüfen, wurden für die Experimente vier unterschiedlich genutzte Grünlandböden ausgewählt. Die Auswahl erfolgte anhand des sogenannten LUI-Index (landuse intensity index). Der LUI-Index wurde im Rahmen der Biodiversitätsexploratorien speziell für Grünlandböden entwickelt [4]. Darin wird die Intensität von drei Komponenten auf einer Intervallskala erfasst und zusammengefasst: Düngung, Mahd und Beweidung. Durch den LUI-Index erhält man einen Wert, mit Hilfe dessen man die Landnutzung von verschiedenen Standorten beschreiben und vergleichen kann. Höhere Werte zeigen eine höhere Landnutzungsintensität an. Ein Defizit des LUI-Index liegt darin, dass die Art des Tierbestandes beim Parameter Beweidung nicht unterschieden wird. Es kann jedoch Einfluss haben, ob Rinder oder Schafe auf dem Grünland weiden. Auch die Art der Düngung wird nicht genauer unterschieden. Der etwaige Eintrag an Stickstoff durch den Tierbestand wird außer Acht gelassen. Des Weiteren geht die Anzahl der Mahd zwar ein, aber nicht, was mit dem Grünschnitt geschieht, ob er liegen bleibt oder abgefahren wird. Für das Befahren mit schwerem, landwirtschaftlichem Gerät gibt es keinen gesonderten Parameter, obwohl die dadurch verursachte Verdichtung einen wichtigen Effekt auf den Boden ausübt. Die Aussagekraft des LUI-Index erlaubt somit lediglich eine erste grobe Einteilung der Landnutzungsintensität.

2.3.4. Experimenteller Ansatz

Zu den Bodenproben der verschiedenen Standorte wurde Ammonium gegeben, um eine Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik anzustoßen, die dann über 144 Stunden mit Probenahmen nach 0, 24, 48 und 144 Stunden näher untersucht wurde. Für jeden Probenahmezeitpunkt gab es drei Replikate sowie eine Kontrolle, bei der keine zusätzliche Ammoniumgabe erfolgte.

Die vorliegenden Sauerstoffbedingungen im Boden bestimmen maßgeblich die Dynamik der Stickstoffverbindungen und auch der mikrobiellen Biomasse. Ammonium- und Nitritoxidierer benötigen Sauerstoff als Elektronendonator. Denitrifizierer verwenden Sauerstoff als Elektronenakzeptor, solange er in ausreichender Menge zur Verfügung steht. Zwar besteht für sie die Möglichkeit, bei Sauerstoffmangel oder anoxischen Bedingungen auf Stickstoffverbindungen auszuweichen, aber Sauerstoff wird bevorzugt verwendet. Die Denitrifikation selber wird von Sauerstoff gehemmt. Mittels des Wassergehalts des Bodens kann der Sauerstoffgehalt beeinflusst werden. Durch die Einstellung des Wassergehalts bezogen auf die maximale Wasserhaltekapazität (WHK_{max}) auf 50% bzw. 80% wurden zwei verschiedene Sauerstoffbedingungen im Boden eingestellt. Ae-

robe Bedingungen wurden durch 50% des WHK_{max} und anaerobe Bedingungen durch 80% des WHK_{max} simuliert. 50% bilden die optimale Sauerstoffversorgung der Mikroorganismen, besonders der Nitrifizierer. 80% sorgen für einen geringeren Sauerstoffgehalt im Porenwasser und fördern dadurch die Denitrifikation.

Für die Messung der Distickstoffmonoxidstehung während der Denitrifikation wurde in einem Ansatz Acetylen zur Hemmung der Transformation von Distickstoffmonoxid zu gasförmigen Stickstoff hinzugegeben. In einem zweiten Ansatz wurde auf diese Zugabe verzichtet. Dabei ist zu beachten, dass Acetylen auch die Nitrifikation beeinflussen kann und die Zugabe somit unerwünschte Nebeneffekte haben kann.

Um eine Reaktion der mikrobiellen Gemeinschaft einzuleiten, wurde Ammonium am Anfang des Versuchs zugegeben. Die anfängliche Zugabe betrug $3000 \mu\text{g } NH_4Cl$ pro Bodenprobe. Die Bodenproben hatten ein durchschnittliches Trockengewicht von 10 g. Daraus ergab sich eine rechnerische Ammoniumkonzentration von $78 \mu\text{g } NH_4^+ - N/\text{g}$ Boden TG, die den Bodenproben zugegeben wurde. Tabelle 2.2 erklärt zusammenfassend die verschiedenen Ansätze, die für das Experiment durchgeführt wurden.

Tabelle 2.2.: Übersicht über die experimentellen Ansätze und die untersuchten Prozesse je Boden.

Zugabe	Acetylzugabe	Wassergehalt	Untersuchte Prozesse
Ammonium	ja	50% WHK_{max}	Nitrifikation
		80% WHK_{max}	Denitrifikation
	nein	50% WHK_{max}	Nitrifikation
		80% WHK_{max}	Denitrifikation

2.3.5. Ergebnisse aus den Experimenten

2.3.5.1. Anfangsbedingungen

Da der LUI-Index nicht direkt in die Modellierung einging, sondern angenommen wurde, dass die Landnutzung über die Anfangsbedingungen wie Ammonium-, Nitrat- und Nitritkonzentrationen und Gehalt an gelöstem Kohlenstoff und das Verhältnis der drei mikrobiellen Gruppen zueinander definiert wurde, verglich ich in einem ersten Schritt diese Anfangsbedingungen für die vier Standorte. Dazu wurden die Daten aus Kontrollen und Replikaten des ersten Messzeitpunkt herangezogen. Die Kontrollen bei t_0 unterschieden sich von den Replikaten lediglich durch die Zugabe von Ammonium zu Beginn des Versuchs. Da allen Replikaten die gleiche Menge Ammonium hinzugefügt wurde, wurden Unterschiede zwischen den Standorten nicht verändert, sondern lediglich die Ammoniumkonzentration erhöht. Daher konnten beide Daten von Kontrollen und Replikaten für einen Vergleich der Standorte verwendet werden.

Leider waren nicht für alle Standorte alle Messungen verfügbar. Die hier verwendeten Ergebnisse der im Helmholtzzentrum München durchgeführten Experimente befinden sich im Anhang dieser Arbeit.

Die Betrachtung der verschiedenen Messwerte der drei Stickstoffverbindungen zum Zeitpunkt t_0 zeigte kaum Hinweise auf die unterschiedliche Landnutzung (Abb. A.1 im Anhang). Lediglich im Boden von Standort AEG 02 beim Ansatz mit 50% des WHK_{max} und mit Acetylen war der Ammoniumgehalt höher als in den übrigen Böden. Insgesamt ließ sich aus den Daten kein Unterschied beim anfänglichen Ammoniumgehalt zwischen den Standorten erkennen, den man mit der unterschiedlichen Landnutzungsintensität in Beziehung setzen könnte. Außerdem war trotz Ammoniumzugabe kein deutlicher Unterschied zwischen den Ammoniumkonzentrationen in Replikaten und Kontrolle zu erkennen.

Bei der Nitratkonzentration fiel auf, dass an Standort AEG 02 bei 80% des WHK_{max} die Konzentrationen deutlich geringer waren als bei 50% des WHK_{max} . Da die Böden bei dem entsprechenden Wassergehalt vorinkubiert waren, bietet eine bereits im Vorfeld stattgefundene Denitrifikation bei dem höherem Wassergehalt eine Erklärung für diesen Unterschied. Teile des Nitrats wurden möglicherweise schon während der Vorinkubation denitrifiziert.

Die Nitritkonzentrationen von AEG 02 waren für 50% des WHK_{max} höher als für 80%. Umgekehrt waren die Nitritkonzentrationen von AEG 30 für 50% des WHK_{max} geringer als für 80%.

Der DOC war bei dem einzigen als Weide genutzten Boden (AEG 30) am höchsten (Abb. A.2 (a) im Anhang). Der mikrobielle Kohlenstoff unterschied sich für die einzelnen Standorte nicht deutlich voneinander (Abb. A.2 (b) im Anhang).

Für die Analyse der Messungen der Genabundanzen (Abb. A.2 (c) im Anhang) standen jeweils nur ein Replikat und eine Kontrolle zur Verfügung. Da die Daten für den ersten Messzeitpunkt bei den Kontrollen vollständiger waren, nahm ich für einen Vergleich der Standorte diese Werte. Für den Ansatz mit einem Wassergehalt von 50% des WHK_{max} und mit Acetylenzugabe war für die Abundanzen des *AOA*-Gens eine Abstufung AEG 02 > AEG 15 > AEG 30 zu erkennen. Für AEG 10 fehlte die Messung. Auffällig waren die Abundanzen beim Ansatz mit 80% des WHK_{max} mit Acetylen der Standorte AEG 02 und AEG 10. Da die Messungen nur in einfacher Ausführung erfolgten, konnte keine Aussage über Abweichungen gemacht werden und damit kein Zusammenhang zwischen Landnutzung und Standorten hergestellt werden.

2.3.5.2. Dynamik der Stickstoffverbindungen

Im Folgenden sind die Mittelwerte für die einzelnen Substanzkonzentrationen dargestellt (Abb. A.3 - A.5 im Anhang). Die Ergebnisse der Kontrollen befinden sich im Anhang. Die Ergebnisse der Experimente wurden in dieser Arbeit in Hinblick auf die erkennbare Dynamik dargestellt und sollten für die Parametrisierung des Modells genutzt werden. Unterschieden wurde dabei zwischen 50 und 80% der maximalen Wasserhaltekapazität (50% und 80% des WHK_{max}) und der Acetylenzugabe (mit und ohne Acetylen). Für 50% des WHK_{max} sind jeweils die Ergebnisse für die Standorte AEG 02, 15 und 30 und für 80% des WHK_{max} nur die Ergebnisse für AEG 02 und 30 abgebildet. Für AEG 10 lagen nicht genügend vollständige Messwerte vor, gleiches galt für AEG 15 bei 80% des WHK_{max} . Auch bei den drei übrigen Standorten fehlten teilweise Messwerte, so dass diese Dynamik nicht für alle Standorte überprüft werden konnte. Auf die Darstellung der Standardabweichungen bzw. der maximalen Abweichungen vom Mittelwert wurde an dieser Stelle aus Gründen der Übersichtlichkeit verzichtet. Im nachfolgenden Abschnitt zu den Ergebnissen der Parameteroptimierung, sind diese Abweichungen in den Abbildungen enthalten. Die Maximal- und Minimalwerte der jeweils drei Messungen pro Zeitpunkt lagen jedoch häufig weit auseinander, während die Messwerte der einzelnen Zeitpunkte oftmals nur geringe Abweichungen voneinander zeigten. Auch hier gilt, dass nicht für alle Messzeitpunkte für jeden Standort Werte zur Verfügung standen. Während unter den aeroben Bedingungen für AEG 02 und AEG 15 die Ammoniumkonzentrationen (Abb. A.3 im Anhang) abnahmen, stiegen sie für AEG 30 tendenziell leicht an. Unter anaeroben Bedingungen nahmen die Konzentrationen an beiden Standorten eher zu. Dabei gab es unter beiden Sauerstoffbedingungen keinen Unterschied zwischen den Ergebnissen mit und ohne Acetylenzugabe. Für 80% des WHK_{max} war dieses Verhalten zu erwarten gewesen, da Nitrifikation durch die Abwesenheit von Sauerstoff gehemmt wird und sich das Acetylen somit nicht auf diesen Prozess auswirkt. Bei 50% des WHK_{max} hätte ein Unterschied zwischen dem Ansatz mit und dem Ansatz ohne Acetylenzugabe auftreten können, da sich Acetylen auf die Nitrifikation auswirken kann. Dieser Einfluss konnte hier jedoch nicht beobachtet werden. Für aerobe Bedingungen (50% WHK_{max}) war im Verlauf der Nitratkonzentrationen (Abb. A.4 im Anhang) eine leichte Zunahme zu beobachten. Bei AEG 30 ging dieser Zunahme jedoch eine leichte Abnahme zwischen den Messpunkten nach 24 und 48 Stunden voraus, so dass netto die Konzentration etwa gleich blieb. Unter anaeroben Bedingungen nahm die Nitratkonzentration ab. Für AEG 30 war zwischen dem ersten und zweiten Messpunkt eine leichte Zunahme zu verzeichnen. Dies könnte durch kurzzeitige Nitrifikation erklärt werden. Bis der im Wasser gelöste Sauerstoff verbraucht ist, findet Nitrifikation statt und anschließend beginnt die Denitrifikation. Für AEG 02 fehlten

viele Messpunkte, so dass dieses Verhalten nur bei AEG 30 zu beobachten war. Die Nitritkonzentration (Abb. A.5 im Anhang) stieg unter beiden Sauerstoffbedingungen an, um im weiteren Verlauf wieder zu sinken. In Tabelle 2.3 ist die Dynamik für die einzelnen Standorte unter den beiden verschiedenen Sauerstoffbedingungen zusammen mit einer Erklärung für das jeweilige beobachtete Verhalten aufgeführt. Da es keinen sichtbaren Unterschied zwischen den Ergebnissen mit und ohne Acetylenzugabe gab, konnten die Ergebnisse zusammengefasst werden.

Tabelle 2.3.: Dynamik und Erklärung der NH_4^+ , NO_3^- und NO_2^- -Konzentrationen aus den Experimenten für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50 und 80% des WHK_{max} .

	WHK_{max}	AEG	Dynamik	Erklärung
NH_4^+	50	02, 15	Abnahme	Ammoniumoxidation
		30	Leichte Zunahme	Mineralisierung?
	80	02, 30	Leichte Zunahme	Mineralisierung/ Nitritammonifikation?
NO_3^-	50	02, 15, 30	Leichte Zunahme	Nitritoxidation
	80	02, 30	Abnahme	Nitratreduktion
NO_2^-	50	02, 15, 30	1. Zunahme 2. Abnahme	1. Ammoniumoxidation 2. Nitritoxidation
	80	02, 30	1. Zunahme 2. Abnahme	1. Nitratreduktion 2. Nitritreduktion

Der gelöste organische Kohlenstoff (DOC) diente als Kohlenstoffquelle für die Denitrifizierer. Der Verlauf der Substratdynamik zeigte einen deutlichen Rückgang über die Zeit (Abb. A.6 im Anhang). Neben den Denitrifizierern dezimierten auch andere heterotrophe Mikroorganismen in den Bodenproben den gelösten Kohlenstoff.

2.3.5.3. Massenbilanzen der Stickstoffverbindungen

Um die Plausibilität der Messdaten zu prüfen, fertigte ich Massenbilanzen an. Für einen Wassergehalt von 50% des WHK_{max} muss die Summe aus Ammonium, Nitrat und Nitrit über die Zeit konstant bleiben, da während der Nitrifikation kein Stickstoff verloren geht, sondern Ammonium über Nitrit in Nitrat umgewandelt wird. Für einen Wassergehalt von 80% des WHK_{max} ist eine geschlossene Massenbilanz nicht so einfach zu erstellen, da es während der Denitrifikation zur Umwandlung von Nitrit in Distickstoffmonoxid kommt, welches nicht gemessen werden konnte. Daher sollte die Summe aus Nitrat und Nitrit über die Zeit geringer werden. Die Ammoniumkonzentration sollte gleichzeitig ungefähr konstant bleiben, da der einzige Umwandlungsprozess, die Nitrifikation, durch den Sauerstoffmangel gehemmt wurde. Unstetigkeiten im zeitlichen Verlauf sind mit hoher Sicherheit auf Messfehler bzw. Messunsicherheiten zurückzuführen.

ren, so dass die Werte des entsprechenden Zeitpunkts kritisch zu beurteilen sind. Eine deutliche Diskrepanz zwischen erstem und letztem Messwert (außer bei 80% WHK_{max} $NO_3^- + NO_2^-$) deutet darauf hin, dass ein Eintrags- oder Verlustprozess nicht erfasst wurde.

In Abbildung 2.6 sind die Massenbilanzen für den Wassergehalt von 50% des WHK_{max} zu sehen. Für den Standort AEG 02 war ein Anstieg der aufsummierten Konzentrationen über die Zeit zu erkennen, während die übrigen Standorte etwa konstante Werte zeigten. Dieser Anstieg deutet auf einen zusätzlichen Eintragsprozess hin. Nach 24 Stunden war bei AEG 15 mit Acetylen ein leichter Einbruch zu verzeichnen ebenso bei AEG 30 ohne Acetylen. Dies weist eventuell auf Messfehler hin.

Abbildung 2.7 zeigt die Summen von Nitrat und Nitrit sowie die Ammoniumkonzentration über die Zeit für einen Wassergehalt von 80% des WHK_{max} . Die aufsummierten Nitrat- und Nitritkonzentrationen gingen über die Zeit zurück, was durch die Denitrifikation zu erklären ist. Der Ammoniumgehalt nahm bei beiden Standorten zu. Diese Dynamik ist nur durch einen zusätzlichen Eintragsprozess zu erklären. Bei 80% des WHK_{max} findet Denitrifikation statt, d.h. es gibt einen Austragsprozess, und es können nicht alle gemessenen Stickstoffverbindungen aufsummiert werden. Es kann Zufall sein, dass der Anstieg bei NH_4^+ in etwa dem entsprach, was bei der Summe aus NO_3^- und NO_2^- verschwand. Eine andere Erklärung ist, dass es keine Denitrifikation gab und NO_2^- wieder zu NH_4^+ umgewandelt wurde. Diese Möglichkeit ist jedoch extrem unwahrscheinlich da erhöhte Denitrifikationsraten gemessen wurden (nicht gezeigt). Man kann also davon ausgehen, dass definitiv denitrifiziert wurde.

Als zusätzliche Eintragsprozesse für Ammonium kommen Mineralisierung, Stickstofffixierung und dissimilative Reduktion von Nitrat und Nitrit zu Ammoniak in Frage (vgl. Abbildung 1.1). Mineralisierung ist die Umwandlung von organischem Stickstoff zu Ammonium und kann sowohl unter aeroben als auch unter anaeroben Bedingungen auftreten [12]. Brutto-Mineralisierungsraten für Weideland liegen bei 1,5 bis 3,5 mg N/(kg Boden TG d) [46]. Ohne Düngerzugabe sind diese Raten über einen Zeitraum von einer Woche gleichbleibend. Nach einer Düngung sind die Raten während der ersten zwei Tage erhöht gegenüber den folgenden fünf Tagen. Insgesamt sind die Mineralisierungsraten im Boden mit Dünger etwa viermal erhöht gegenüber denen im unbehandelten Boden. Im Vergleich dazu liegen die Brutto-Nitrifikationsraten je nach Bodenart, aber unabhängig von der Düngung, zwischen 2,2 und 7,9 mg N/(kg d) [54] und sind damit deutlich höher als die Mineralisierungsraten.

Bei der Stickstofffixierung wird gasförmiger Stickstoff wieder zu Ammoniak umgewandelt. Biologische Stickstofffixierung wird entweder durch frei- oder symbiotisch mit Pflanzen lebende Mikroorganismen durchgeführt. Da die Böden in den Experimenten

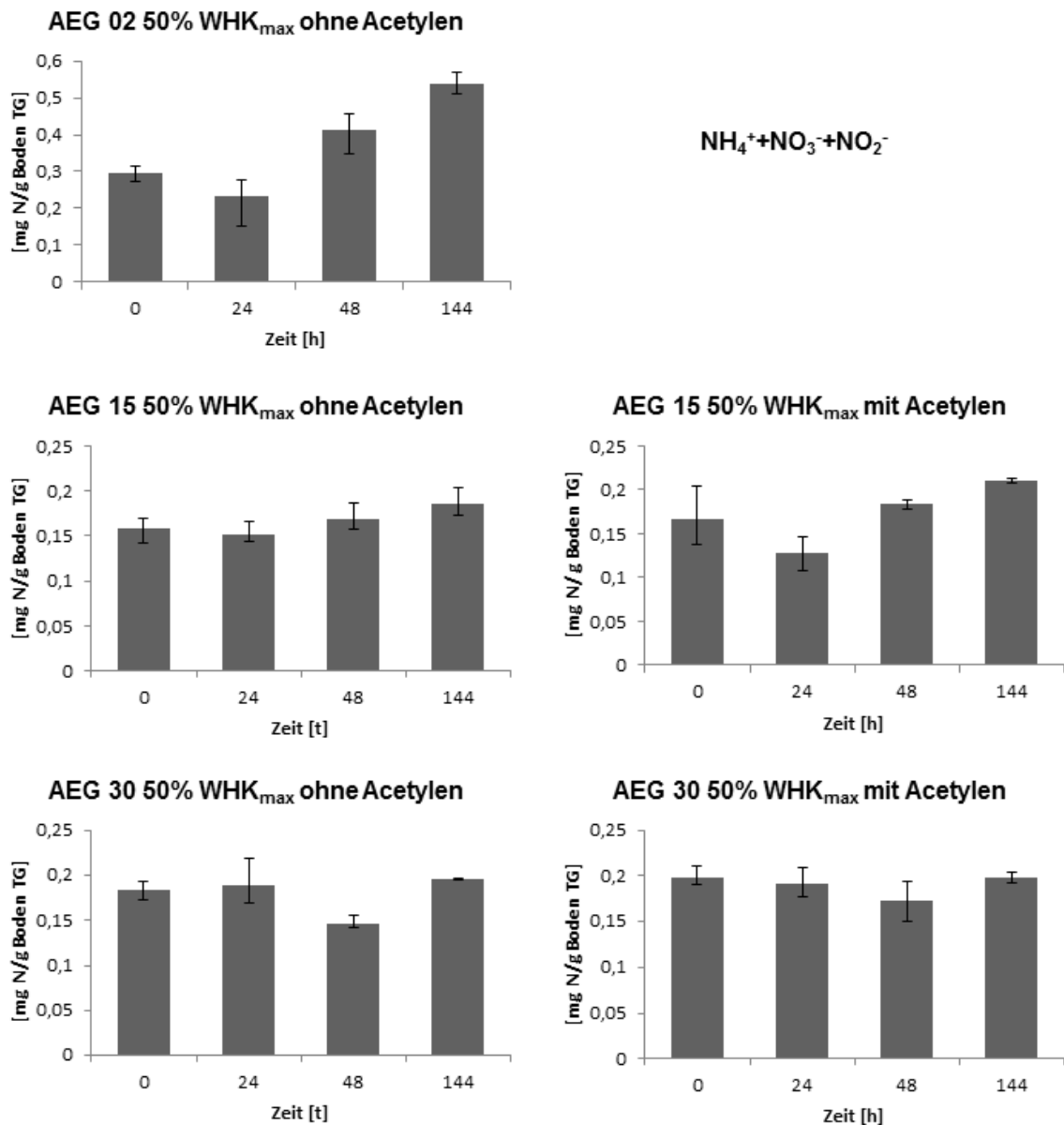


Abbildung 2.6.: Massenbilanz für Ammonium, Nitrat und Nitrit für 50% des WHK_{max} , mit und ohne Acetylen für die verfügbaren Standorte. Die Fehlerbalken stellen die maximalen Abweichungen der einzelnen Replikate dar.

keinen Bewuchs hatten, kommen nur freilebende Mikroorganismen in Frage. Das notwendige Enzym wird durch Sauerstoff gehemmt, jedoch sind einige Mikroorganismen in der Lage, zellintern anoxische Bedingungen herzustellen, so dass die äußeren Sauerstoffbedingungen keine Rolle spielen. Die Stickstofffixierung ist ein sehr energieaufwändiger Prozess und kommt daher nur zum Einsatz, wenn die Mikroorganismen keinen anderen Stickstoff zur Verfügung haben [40]. Da der zur Verfügung stehende Stickstoff jedoch für den Versuchszeitraum ausreichen sollte, kann dieser Eintragsprozess ausgeschlossen werden.

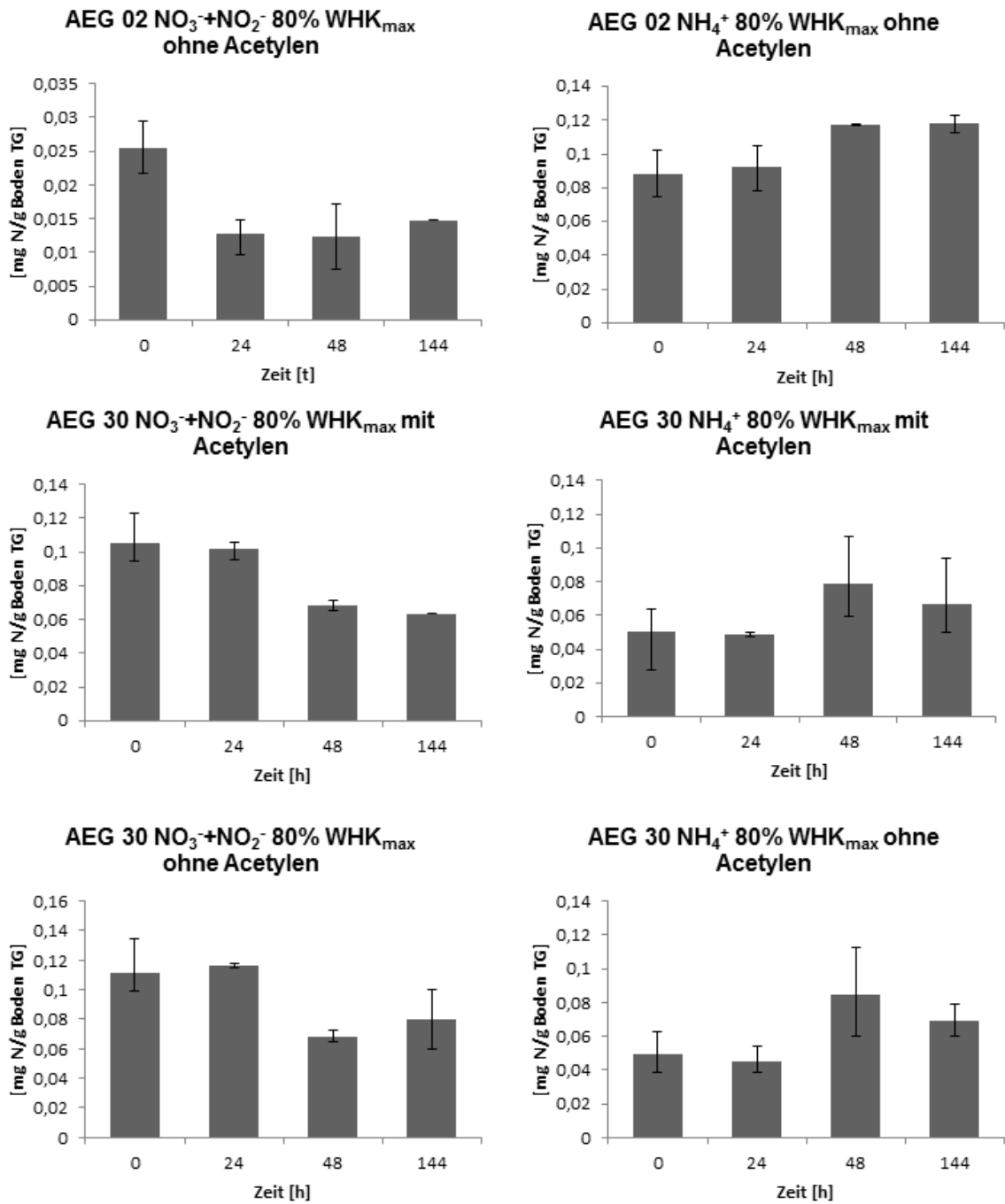


Abbildung 2.7.: Massenbilanz für Nitrat und Nitrit (links) und Ammonium (rechts) für 80% des WHK_{max} , mit und ohne Acetylen für die verfügbaren Standorte.

Die dissimilative Reduktion zu Ammoniak beschreibt die Reduktion von Nitrat und Nitrit zu Ammoniak. Der Prozess kommt normalerweise nur in anoxischen Umgebungen wie Reisfeldern oder Sedimenten vor [40].

3. Methoden

3.1. Modellentwicklung

Das gekoppelte Nitrifikations-Denitrifikationsmodell benutzt zwei bereits existierende Modellansätze als Teilmodelle für Nitrifikation und Denitrifikation. In beiden Modellen wird das lineare Wachstum der Mikroorganismen proportional zu den verfügbaren jeweiligen Stickstoffkomponenten mit einer Substratlimitierung in Form einer Monod-Kinetik beschrieben. Die Sterbeterme folgen einer Kinetik erster Ordnung. Die Transformation der Stickstoffverbindungen erfolgt proportional zu den Abundanzen der Mikroorganismen.

Für anaerobe Bedingungen wurde das Simulationsmodell von Leffelaar und Wessel [36] eingesetzt, das mikrobielle Atmung und Denitrifikation unter anaeroben Bedingungen im Boden beschreibt. Das Modell beinhaltet Wachstum und Erhalt der Biomasse abhängig von einer Kohlenstoffquelle und die Reduktion von Nitrat über Nitrit und Distickstoffmonoxid zu gasförmigem Stickstoff. Das mikrobielle Wachstum wird durch zwei Monod-Terme mit Kohlenstoff und den Stickstoffverbindungen (als Elektronenakzeptoren) als limitierende Faktoren berechnet. Das Modell betrachtet strikt anaerobe Bedingungen und beinhaltet nicht den Einfluss von Sauerstoff auf den Denitrifikationsprozess und die denitrifizierenden Mikroorganismen. Sauerstoff selbst wird jedoch als Zustandsgröße modelliert und von den Mikroorganismen dezimiert. Es wird angenommen, dass die Mikroorganismen alle vorhandenen Stickstoffverbindungen gleichermaßen für den Zellerhalt nutzen. Die jeweilige für den Zellerhalt verwendete Stickstoffverbindung, wird in die im Denitrifikationsprozess nachfolgende Verbindung umgewandelt. Dieses Verhalten ist keine realistische Darstellung des stattfindenden Prozesses, da für den Zellerhalt eher von einem Verbrauch der N-Verbindungen (N-Quelle) ausgegangen werden muss.

Schauss et al. [51] entwickelten ein Nitrifikationsmodell, das die Dynamik der ammoniakoxidierenden Archaeen und Bakterien sowie der Ammonium- und Nitratkonzentrationen im Boden simuliert. Dabei wird angenommen, dass das Wachstum der Biomasse einer Michaelis-Menten-Kinetik folgt und die Sterberate konstant ist. Die Konzentrationen der betrachteten Stickstoffverbindungen ändern sich in Übereinstimmung mit

der Abundanz der Mikroorganismen. Aerobe Bedingungen werden angenommen, aber Sauerstoff wird nicht explizit mitmodelliert.

Ich passte das Modell von Leffelaar und Wessel [36] an, indem ich Sauerstoff als hemmenden Faktor für die Denitrifikation und als fakultativen Elektronenakzeptor für die denitrifizierenden Mikroorganismen hinzufügte. Stickstoff, der für den Zellerhalt der Mikroorganismen benötigt wird, wird nun aus der verfügbaren Menge entfernt. Für die Nitrifikationsdynamik wurde das Modell von Schauss et al. [51] dahingehend abgeändert, dass Sauerstoff als notwendiger Faktor für die Nitrifikation und die nitrifizierenden Mikroorganismen eingeführt wurde. Die Unterscheidung zwischen Bakterien und Archaeen wurde als unnötig befunden. Zusätzlich zu den Ammoniakoxidierern fügte ich die Nitritoxidierer und auch Nitrit selbst in den Nitrifikationsprozess ein. Außerdem wurde ein zusätzlicher Term für den Zellerhalt der Nitrifizierer eingeführt. Mit diesen Modifikationen war es möglich, die beiden Modelle zu verbinden und gleichzeitige Nitrifikation und Denitrifikation zu simulieren.

Alle Zustandsgrößen und Parameter sind in Tabelle 3.3 erklärt. Abbildung 3.1 zeigt die Modellstruktur.

Insgesamt beinhaltet das Modell sieben Zustandsgrößen ($B_{den}(t)$, $B_{AMO}(t)$, $B_{NIR}(t)$, $NH_4^+(t)$, $NO_2^-(t)$, $NO_3^-(t)$ und $N_2O(t)$) und sieben Differentialgleichungen, um ihre zeitliche Dynamik zu beschreiben. Die drei funktionellen Gruppen mikrobieller Biomasse im Boden werden separat summarisch modelliert und als mikrobielle Kohlenstoffkonzentrationen ausgedrückt [mg C/g Boden TG]: die denitrifizierenden Mikroorganismen (B_{den}) und die ammoniak- (B_{AMO}) und nitritoxidierenden (B_{NIR}) Mikroorganismen. Zustandsgrößen für vier Stickstoffverbindungen, Ammonium (NH_4^+), Nitrit (NO_2^-), Nitrat (NO_3^-) und Distickstoffmonoxid (N_2O) werden als Stickstoffkonzentrationen im Boden betrachtet [mg N/g Boden TG].

Ammonium wurde als Zustandsgröße ausgewählt, obwohl das eigentliche Substrat für den ersten Schritt des Nitrifikationsprozesses Ammoniak ist [58]. Dies ist zulässig, da Ammoniak und Ammonium in einem pH-abhängigen Gleichgewicht im Boden existieren, entsprechend der Henderson-Hasselbalch-Gleichung:

$$\log \left(\frac{NH_3}{NH_4^+} \right) = pH - pK_a.$$

Der Anteil des neutralen Ammoniaks relativ zum Ammonium-N berechnet sich aus

$$f_{NH_3} = \frac{1}{1 + 10^{pK_a - pH}}.$$

Daher kann bei konstantem pH das Verhältnis von Ammonium zum gesamten Ammonium-N als konstant angenommen werden, so dass Ammonium als Maß für das verfügbare

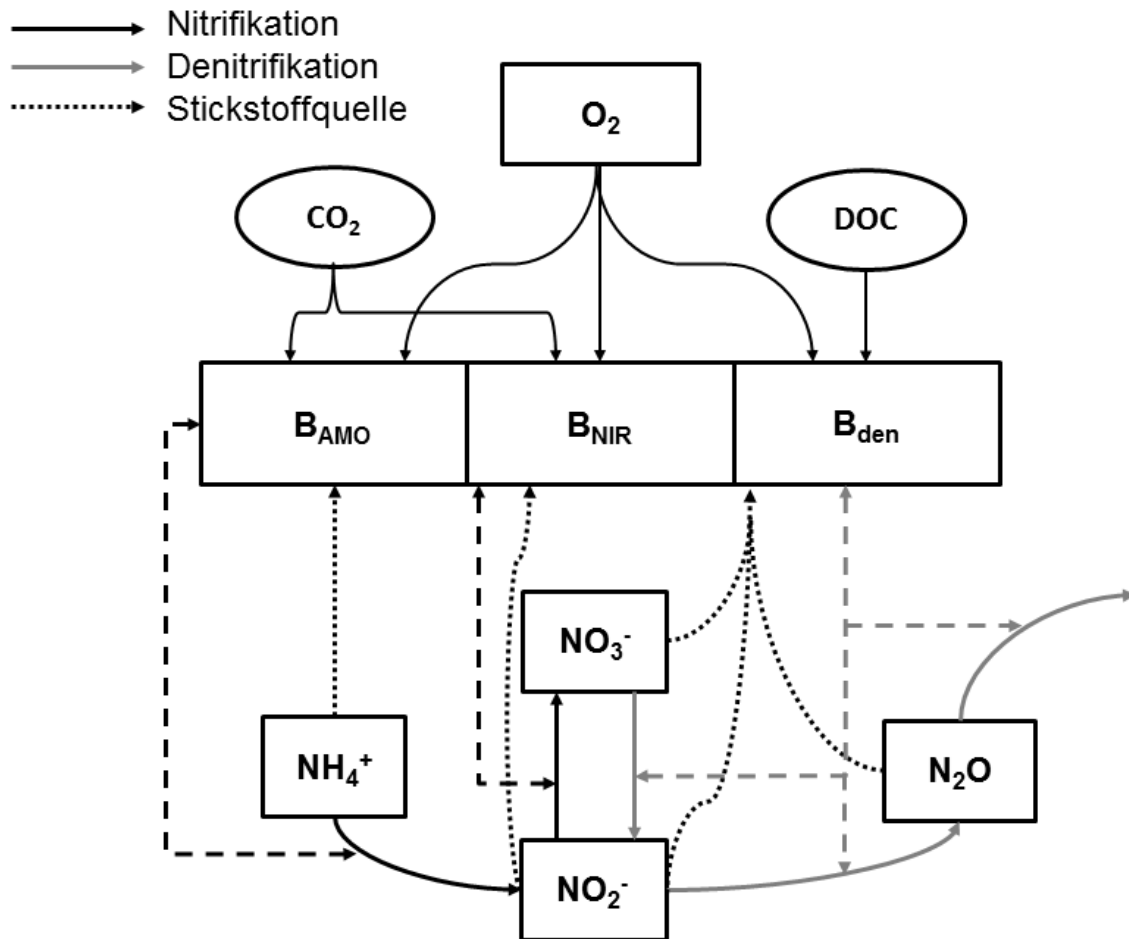


Abbildung 3.1.: Modellstruktur des Nitrifikations-Denitrifikationsmodells: Rechtecke stellen die Zustandsgrößen dar, Ovale die konstanten Variablen.

Ammoniak im Boden verwendet werden kann. Der pKa von Ammonium liegt bei 9,25, so dass bei einem pH-Wert von 7 weniger als ein Prozent des Ammoniumstickstoffs als Ammoniak vorliegen.

Stickstoffmonoxid (NO) wird nicht explizit als Zustandsgröße modelliert, da es ein Zwischenprodukt im Denitrifikationsprozess ist und schnell in Distickstoffmonoxid umgewandelt wird. Das Endprodukt des Denitrifikationsprozesses, gasförmiger Stickstoff, wird ebenfalls nicht als Zustandsgröße modelliert, da es in der Umwelt im Überfluss existiert und so die N_2 -Produktion durch die Denitrifikation keinen signifikanten Beitrag zur gesamten gasförmigen Stickstoffkonzentration hat.

3.1.1. Mikrobielle Biomasse

Die Gruppe der nitrifizierenden Mikroorganismen besteht im Modell aus den Ammoniakoxidierern und den Nitritoxidierern. Zu Beginn bilden sie jeweils 6% der gesam-

ten mikrobiellen Biomasse [44]. Ammoniakoxidierende Mikroorganismen wandeln Ammonium um zu Nitrit, welches von den Nitritoxidierern in Nitrat transformiert wird. Beide sind strikt aerobe und autotrophe Mikroorganismen. Kohlenstoffdioxid (CO_2) wird als Kohlenstoffquelle und Sauerstoff als Elektronenakzeptor benötigt. Als Elektronendonator und Stickstoffquelle werden jeweils Ammonium bzw. Nitrit genutzt. Die Wachstumsraten werden durch die Ammonium- bzw. Nitritkonzentrationen und den gelösten Sauerstoff limitiert. Beide Abhängigkeiten gehen als Monod-Kinetik mit den Halb-Sättigungskonstanten K_{nit} für Ammonium bzw. Nitrit und $K_{O_{nit}}$ für den Sauerstoff in die Wachstumsraten ein. Die Wachstumsraten werden durch die Gleichungen (3.1) und (3.2) beschrieben.

$$\mu_{AMO}(t) = \mu_{AMO}^{max} \cdot \frac{CO_2(t)}{K_C + CO_2(t)} \cdot \frac{NH_4^+(t)}{NH_4^+(t) + K_{nit}} \cdot \frac{O_2(t)}{K_{O_{nit}} + O_2(t)} \cdot \frac{NH_4^+(t)}{NH_4^+(t) + K_N} \quad (3.1)$$

$$\mu_{NIR}(t) = \mu_{NIR}^{max} \cdot \frac{CO_2(t)}{K_C + CO_2(t)} \cdot \frac{NO_2^-(t)}{NO_2^-(t) + K_{nit}} \cdot \frac{O_2(t)}{K_{O_{nit}} + O_2(t)} \cdot \frac{NO_2^-(t)}{NO_2^-(t) + K_N} \quad (3.2)$$

Die Nitrifizierer sterben mit einer Rate δ_{nit} .

Die Funktion für die Konzentration des gelösten Sauerstoffs bleibt undefiniert. Es besteht die Möglichkeit, eine beliebige zeitabhängige Funktion für den Konzentrationsverlauf oder eine Zeitreihe einzusetzen. Die Funktion muss dabei den Verlauf des Sauerstoffgehalts im Bodenwasser über die Zeit beschreiben.

3.1.1.1. Denitrifizierende Mikroorganismen

Die denitrifizierenden Mikroorganismen werden als fakultativ anaerobe Organismen modelliert. Mit anfangs 60% der gesamten mikrobiellen Biomasse bilden sie die größte der drei mikrobiellen Gruppen [44]. Unter aeroben Bedingungen bevorzugen sie Sauerstoff als Elektronenakzeptor, können aber zu Nitrat, Nitrit und Distickstoffmonoxid wechseln, sobald der Sauerstoff aufgebraucht ist und anaerobe Bedingungen vorherrschen. Das Wachstum mit Sauerstoff ist jedoch immer stärker als das mit den Stickstoffverbindungen als Elektronakzeptor. Die bekannte Abfolge der Elektronenakzeptoren wird im Modell durch die Parametrisierung der Effizienz der Elektronenakzeptoren wieder-

gegeben ($K_{den} > K_O, \mu_{denO_2}^{max} > \mu_{denN}^{max}$).

Denitrifizierer sind heterotroph und nutzen verfügbaren, gelösten Kohlenstoff als Kohlenstoffquelle und Elektronendonator. Nitrat, Nitrit und Distickstoffmonoxid stellen gemeinsam ihre Stickstoffquelle dar. Im Modell besteht die Rolle der Denitrifizierer im Stickstoffkreislauf in der Reduktion von Nitrat über Nitrit und Distickstoffmonoxid zu gasförmigem Stickstoff.

Das Wachstum der Denitrifizierer wird begrenzt durch die Konzentrationen der Stickstoffverbindungen NO_3^- , NO_2^- , N_2O zusammen mit dem verfügbaren Sauerstoff in Form einer Monod-Kinetik mit den Halb-Sättigungskonstanten K_{den} und K_O . Gleichzeitig wird das Wachstum auf den Stickstoffverbindungen bei nicht limitierendem Sauerstoff mit der Hemmkonstante H_{denBO} gehemmt. Daraus ergibt sich für die Denitrifizierer die Wachstumsrate aus Gleichung

$$\mu_{den}(t) = \left(\mu_{denO_2}^{max} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_O} + \mu_{denB}^{max} \cdot \frac{NO_3^-(t) + NO_2^-(t) + N_2O(t)}{K_{den} + NO_3^-(t) + NO_2^-(t) + N_2O(t)} \right) \cdot \frac{H_{denBO}}{O_2 + H_{denBO}} \cdot \frac{NO_3^-(t) + NO_2^-(t) + N_2O(t)}{K_N + NO_3^-(t) + NO_2^-(t) + N_2O(t)} \cdot \frac{DOC}{K_C + DOC} \quad (3.3)$$

Bei Leffelaar und Wessel [36] wird die Sterberate mit der Abundanz der Denitrifizierer multipliziert und ist gleich dem Produkt von Erhaltungskoeffizient und maximaler Wachstumsertrag. Hier werden die beiden Parameter vereinfachend zu einer Sterberate δ_{den} zusammengefasst.

3.1.1.2. Stickstoffquelle

In meinem Modell benötigen und verbrauchen alle drei mikrobiellen Gruppen Stickstoff für den Zellerhalt. Ammoniakoxidierer verwenden dazu Ammonium und die Nitritoxidierer benutzen Nitrit. Denitrifizierer verwenden sowohl Nitrat als auch Nitrit und Distickstoffmonoxid. Der Stickstoffverbrauch für den Zellerhalt wird als Verlustprozess für die jeweilige Stickstoffverbindung betrachtet. Die Erhaltungskoeffizienten $m_i(t)$ müssen durch die Multiplikation mit der relativen Anwesenheit der jeweiligen benötigten Stickstoffverbindung bzw. -verbindungen korrigiert werden (Gleichungen (3.4) bis (3.8)), um einen unrealistisch hohen Stickstoffverbrauch für den Zellerhalt zu verhindern [36]. Daraus ergeben sich die Erhaltungsraten $M_i(t)$ die folgenden Gleichungen:

$$M_{AMO}(t) = m_{AMO} \cdot \frac{NH_4^+(t)}{K_N + NH_4^+(t)} \quad (3.4)$$

$$M_{NIR}(t) = m_{NIR} \cdot \frac{NO_2^-(t)}{K_N + NO_2^-(t)} \quad (3.5)$$

$$M_{NO_3den}(t) = m_{NO_3den} \cdot \frac{NO_3^-(t)}{K_N + NO_3^-(t) + NO_2^-(t) + N_2O(t)} \quad (3.6)$$

$$M_{NO_2den}(t) = m_{NO_2den} \cdot \frac{NO_2^-(t)}{K_N + NO_3^-(t) + NO_2^-(t) + N_2O(t)} \quad (3.7)$$

$$M_{N_2Oden}(t) = m_{N_2Oden} \cdot \frac{N_2O(t)}{K_N + NO_3^-(t) + NO_2^-(t) + N_2O(t)} \quad (3.8)$$

3.1.1.3. Kohlenstoffquelle

Im Falle einer Kohlenstofflimitierung wird der Kohlenstoffverbrauch durch eine von Pirt [50] publizierte Gleichung für alle Mikroorganismen beschrieben:

$$C = \frac{C}{K_C + C} \text{ mit } C = DOC, CO_2.$$

Organischer Kohlenstoff (*DOC*) dient als Kohlenstoff- und Energiequelle für die Denitrifizierer, während die Nitrifizierer Kohlenstoffdioxid (*CO₂*) verwenden. Die Funktionen zur Beschreibung der Kohlenstoff- und Kohlenstoffdioxidkonzentrationen bleiben an dieser Stelle zunächst undefiniert. Es besteht die Möglichkeit eine beliebige zeitabhängige Funktion oder Zeitreihe einzusetzen.

Tabelle 3.1 gibt einen Überblick über die benötigten Substanzen der mikrobiellen Biomasse.

Tabelle 3.1.: Überblick über die benötigten Kohlenstoff- und Stickstoffquellen sowie den Elektronenakzeptor von Ammoniakoxidierer, Nitritoxidierern und Denitrifizierern.

	C-Quelle	N-Quelle	e⁻-Akzeptor
Ammoniakoxidierer	<i>CO₂</i>	<i>NH₄⁺</i>	<i>O₂</i>
Nitritoxidierer	<i>CO₂</i>	<i>NO₂⁻</i>	<i>O₂</i>
Denitrifizierer	<i>DOC</i>	<i>NO₃⁻, NO₂⁻, N₂O</i>	<i>O₂ oder NO₃⁻, NO₂⁻, N₂O</i>

3.1.2. Transformationsprozesse der Stickstoffverbindungen

3.1.2.1. Nitrifikation

Der Nitrifikationsweg besteht aus zwei Oxidationsprozessen: Ammoniumoxidation und Nitritoxidation. Die Ammoniumoxidation ist hierbei der ratenbestimmende Prozess [51]. Beide Prozesse werden unter aeroben Bedingungen von Ammoniak- bzw. Nitritoxidierern ausgeführt. Die Abhängigkeit der Umsatzgeschwindigkeit von den jeweiligen Stickstoffverbindungen folgt einer Monod-Kinetik mit der Halb-Sättigungskonstante K_{nit} . Der verfügbare, gelöste Sauerstoff ist ein limitierender Faktor für diese Prozesse und geht durch eine Monod-Kinetik mit der Halb-Sättigungskonstante K_{Onit} in die Wachstumsrate ein.

Daraus ergeben sich die folgenden relativen Umsatzgeschwindigkeiten (Gleichungen (3.9) und (3.10)) der Stickstoffverbindungen in mg Substrat pro Zeit:

$$v_{nitNH_4}(t) = v_{nitNH_4}^{max} \cdot \frac{NH_4^+(t)}{NH_4^+(t) + K_{nit}} \cdot \frac{O_2(t)}{K_{Onit} + O_2(t)} \quad (3.9)$$

$$v_{nitNO_2}(t) = v_{nitNO_2}^{max} \cdot \frac{NO_2^-(t)}{NO_2^-(t) + K_{nit}} \cdot \frac{O_2(t)}{K_{Onit} + O_2(t)} \quad (3.10)$$

Der Sauerstoffeinfluss auf die beiden Umsetzungsschritte ist nicht identisch, jedoch waren in der Literatur für die Halb-Sättigungskonstanten keine Parameterwerte vorhanden, die den Unterschied quantifizieren könnten.

3.1.2.2. Denitrifikation

Die Denitrifikation im vorgestellten Modell besteht aus drei Prozessen: Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidreduktion. Alle drei werden unter anaeroben Bedingungen von denitrifizierenden Mikroorganismen ausgeführt. Daher ist die Umsatzgeschwindigkeit der Substrate jeweils proportional zur Abundanz der Denitrifizierer. Die Umsatzgeschwindigkeit folgt einer Monod-Kinetik mit der Halb-Sättigungskonstante K_{den} . Die Umwandlung wird durch Sauerstoff mit der Hemmkonstante H_{denN} gehemmt. Auch hier gilt, dass der Sauerstoff die einzelnen Reduktionsschritte nicht gleichwertig hemmt, indem er die Aktivität und die Synthese des jeweiligen denitrifizierenden Enzyms unterdrückt [42], jedoch in der Literatur keine ausreichende Grundlage für die Quantifizierung unterschiedlicher Halb-Sättigungskonstanten gefunden werden konnte. Die Reduktion von Distickstoffmonoxid zu gasförmigem Stickstoff wird zusätzlich durch hohe Nitratkonzentrationen mit der Hemmkonstante H_{denNO_3} gehemmt.

Diese Annahmen führten zu Gleichungen (3.11) und (3.12) für die Nitrat- und Nitritreduktion.

$$v_{denNO_3}(t) = v_{denNO_3}^{max} \cdot \frac{NO_3^-(t)}{K_{den} + NO_3^-(t)} \cdot \frac{H_{denN}}{H_{denN} + O_2(t)}, \quad (3.11)$$

$$v_{denNO_2}(t) = v_{denNO_2}^{max} \cdot \frac{NO_2^-(t)}{K_{den} + NO_2^-(t)} \cdot \frac{H_{denN}}{H_{denN} + O_2(t)}, \quad (3.12)$$

Die Distickstoffmonoxidreduktion wird zusätzlich durch hohe Nitratkonzentrationen nach Gleichung (3.13) gehemmt.

$$v_{denN_2O}(t) = v_{denN_2O}^{max} \cdot \frac{N_2O(t)}{K_{den} + N_2O(t)} \cdot \frac{H_{denN}}{H_{denN} + O_2(t)} \cdot \frac{H_{denNO_3}}{NO_3^-(t) + H_{denNO_3}}. \quad (3.13)$$

3.1.3. Differentialgleichungen

Die Annahmen und Gleichungen (3.1) bis (3.13) aus den vorhergehenden Abschnitten führten zu dem folgenden Satz von sieben Differentialgleichungen (Gleichungen (3.14) bis (3.20)):

$$B'_{den}(t) = (\mu_{den}(t) - \delta_{den}) \cdot B_{den}(t), \quad (3.14)$$

$$B'_{AMO}(t) = (\mu_{AMO}(t) - \delta_{nit}) \cdot B_{AMO}(t), \quad (3.15)$$

$$B'_{NIR}(t) = (\mu_{NIR}(t) - \delta_{nit}) \cdot B_{NIR}(t), \quad (3.16)$$

$$NH_4^{+'}(t) = -(v_{nitNH_4}(t) + M_{AMO}(t)) \cdot B_{AMO}(t), \quad (3.17)$$

$$NO_3^{-'}(t) = v_{nitNO_2}(t) \cdot B_{NIR}(t) - (v_{denNO_3}(t) + M_{NO_3den}(t)) \cdot B_{den}(t), \quad (3.18)$$

$$\begin{aligned} NO_2^{-'}(t) = & (v_{denNO_3}(t) - v_{denNO_2}(t) - M_{NO_2den}(t)) \cdot B_{den}(t) \\ & + v_{nitNH_4}(t) \cdot B_{AMO}(t) - (v_{nitNO_2}(t) + M_{NIR}(t)) \cdot B_{NIR}(t), \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$N_2O'(t) = (v_{denNO_2}(t) - v_{denN_2O}(t) - M_{N_2Oden}(t)) \cdot B_{den}(t). \quad (3.20)$$

3.1.4. Modellparameter

Die komplette Liste der Parameter ist in Tabelle 3.3 zu finden. Werte für die Modellparameter der Denitrifikation wurden soweit verfügbar von Leffelaar und Wessel [36] übernommen und für die Nitrifikation von Schauss et al. [51]. Einige Parameter mussten aufgrund der Änderungen in den Gleichungen der neuen Modellstruktur angepasst werden. Durch diese Änderungen, die notwendig waren, um die beiden Modelle zu verknüpfen und Sauerstoff als Faktor mit einzufügen, wurden auch zusätzliche Parameter nötig, die in den beiden Arbeiten nicht beschrieben wurden. Die Werte für die zusätzlichen Parameter wurden, wenn möglich, aus der Literatur abgeleitet. Parameterwerte und Referenzen werden in Tabelle 3.4 gegeben. Die Anfangswerte für die Simulationen befinden sich in Tabelle 3.2.

Tabelle 3.2.: Anfangswerte

Modellgröße	Einheit	Modell
CO_2	mg C g^{-1} Boden TG	0,1
DOC	mg C g^{-1} Boden TG	$1 \cdot 10^{-3}$
O_2	[%]	0 - 100
B_{tot}	mg C g^{-1} Boden TG	0,1
NH_4^+	mg N g^{-1} Boden TG	0,1
NO_2^-	mg N g^{-1} Boden TG	0
NO_3^-	mg N g^{-1} Boden TG	0,1
N_2O	mg N g^{-1} Boden TG	0

Tabelle 3.3.: Modellparameter

Symbol	Bedeutung
$B_{den}, B_{AMO}, B_{NIR}$	Menge mikrobiellen Kohlenstoffs bezogen auf Denitrifizierer, Ammoniakoxidierer bzw. Nitritoxidierer
DOC	Funktion für die gelöste organische Kohlenstoffkonzentration
CO_2	Funktion für die Kohlenstoffdioxidkonzentration
O_2	Funktion für den gelösten Sauerstoffgehalt im Porenwasser
NH_4^+	Ammoniumkonzentration
NO_2^-	Nitritkonzentration
NO_3^-	Nitratkonzentration
N_2O	Distickstoffmonoxidkonzentration
t	Zeit
$F_{den}, F_{AMO}, F_{NIR}$	Anfänglicher Anteil der mikrobiellen Gruppen an der Gesamtbiomasse B_0
K_C	Halb-Sättigungskonstante bezogen auf die Kohlenstoff- und Kohlenstoffdioxidquellen
K_O	Halb-Sättigungskonstante für Sauerstoff als e^- -Akzeptor für die Denitrifizierer
K_N	Halb-Sättigungskonstante für die Stickstoffquelle
K_{den}	Halb-Sättigungskonstante für NO_3^- , NO_2^- und N_2O als e^- -Akzeptor für Denitrifizierer
K_{nit}	Halb-Sättigungskonstante bezogen auf Ammonium und Nitrit während Nitrifikation
K_{Onit}	Halb-Sättigungskonstante für Sauerstoff bei Nitrifikation für Nitrifizierer
H_{denBO}	Hemmkonstante von Sauerstoff auf Stickstoffaufnahme der Denitrifizierer
H_{denN}	Hemmkonstante von Sauerstoff auf Denitrifikation
H_{denNO_3}	Hemmkonstante von Nitrat auf Distickstoffoxidreduktion
$m_{denNO_3}, m_{denNO_2}, m_{denN_2O}$	Erhaltungskoeffizienten bezogen auf NO_3^- , NO_2^- und N_2O für Denitrifizierer
m_{AMO}, m_{NIR}	Erhaltungskoeffizienten bezogen auf NH_4^+ und NO_2^- für Nitrifizierer
$\delta_{nit}, \delta_{den}$	Sterberaten der Ammonium- und Nitritoxidierer und der Denitrifizierer
$\mu_{AMO}^{max}, \mu_{NIR}^{max}$	Maximale Wachstumsraten der Ammonium- und Nitritoxidierer
$\mu_{denO}^{max}, \mu_{denN}^{max}$	Maximale Wachstumsraten der Denitrifizierer bezogen auf O_2 bzw. NO_3^- , NO_2^- und N_2O
$v_{nitNH_4}^{max}, v_{nitNO_2}^{max}$	Maximale Umsatzgeschwindigkeiten von NH_4^+ und NO_2^- während Nitrifikation
$v_{denNO_3}^{max}, v_{denNO_2}^{max}, v_{denN_2O}^{max}$	Maximale Umsatzgeschwindigkeiten von NO_3^- , NO_2^- und N_2O während Denitrifikation

Tabelle 3.4.: Parameterwerte

Parameter	Einheit	Literatur	Modell	Referenzen
Anfängliche Anteile				
F_{den}	-	0,02-0,6	0,6	[36],[44]
F_{AMO}	-	0,06	0,06	[44]
F_{NIR}	-	0,06	0,06	[44]
Halbe Sättigungskonstanten				
K_C	mg C g^{-1} Boden TG	0,001-0,017	0,015	[34],[36]
K_O	[%]		0,002	
K_N	mg N g^{-1} Boden TG	0,02 · 10 ⁻³ – 0,012	0,01	[1],[34],[36],[38]
K_{den}	mg N g^{-1} Boden TG	0,02 · 10 ⁻³ – 0,012	0,02	[1],[34],[36],[38]
K_{nit}	[%]	0,0129	0,002	[51]
K_{Onit}	[%]		0,002	
Hemmkonstanten				
H_{denBO}	[%]		0,1	
H_{denN}	[%]		0,00-0,485	[25]
H_{denNO_3}	mg N g^{-1} Boden TG	3,58 · 10 ⁻³	3,58 · 10 ⁻³	[25]
Erhaltungskoeffizienten				
m_{denNO_3}	mg N mg^{-1} C h^{-1}	0,09-0,18	0,0018	[7],[36]
m_{denNO_2}	mg N mg^{-1} C h^{-1}	0,025-0,07	0,0007	[7],[36]
m_{denN_2O}	mg N mg^{-1} C h^{-1}	0,079-0,16	0,0016	[7],[36]
m_{AMO}	mg N mg^{-1} C h^{-1}		0,007	
m_{NIR}	mg N mg^{-1} C h^{-1}		0,007	
Sterberaten				
δ_{nit}	h^{-1}	0,000625- 0,042	0,625 · 10 ⁻³	[11],[28],[51]
δ_{den}	h^{-1}	0-0,042	0,15 · 10 ⁻³	[11],[36],[51]
Wachstumsraten				
μ_{AMO}^{max}	h^{-1}	0,01-0,28	0,01	[1],[28]
μ_{NIR}^{max}	h^{-1}	0,01-0,28	0,01	[1],[28]
μ_{denO}^{max}	h^{-1}	0,01-0,28	0,001	[1],[28]
μ_{denN}^{max}	h^{-1}	0,01-0,28	0,001	[1],[28]
Umsatzgeschwindigkeiten				
$v_{nitNH_4}^{max}$	mg N mg^{-1} C h^{-1}		0,02	
$v_{nitNO_2}^{max}$	mg N mg^{-1} C h^{-1}		0,04	
$v_{denNO_3}^{max}$	mg N mg^{-1} C h^{-1}	0,021-0,28	0,0058	[1],[36]
$v_{denNO_2}^{max}$	mg N mg^{-1} C h^{-1}	0,077-0,23	0,0093	[36]
$v_{denN_2O}^{max}$	mg N mg^{-1} C h^{-1}	0,11-2,27	0,012	[36]

3.1.5. Modellgrenzen und Szenariendefinition

Für die ersten Simulationen nahm ich konstante Bedingungen im Boden betreffend Temperatur, pH, Wassergehalt und verfügbaren Sauerstoff bzw. Redoxpotential an. Über Redoxpotential und verfügbaren Sauerstoff ist bekannt, dass sie positiv miteinander korrelieren, so dass im Modell kein getrennter Einfluss auf die Umwandlungsprozesse angenommen wird. Anaerobe Bedingungen, welche Denitrifikation induzieren, spiegeln ein Redoxpotential von 300 mV und aerobe Bedingungen ein Redoxpotential von 500 mV wieder [40].

Drei Szenarien wurden definiert, um die Auswirkungen von verschiedenen, statischen Sauerstoffbedingungen im Boden auf die Dynamik der Stickstofftransformationen zu untersuchen. Mittels der Simulation mit rein aeroben und rein anaeroben Bedingungen kann das Modell validiert und mit den Modellen für die getrennten Prozesse verglichen werden, da mit diesen Sauerstoffgehalten die qualitativ gleichen Ergebnisse erzielt werden müssen, wie sie isolierte Nitrifikations- und Denitrifikationsmodelle liefern. Die Modellläufe wurden zunächst für aerobe (100% O_2 -Gehalt) und anaerobe (0% O_2 -Gehalt) Bedingungen durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Simulationen können direkt mit den Ergebnissen der Einzelmodelle verglichen werden, um die korrekte Implementierung der Teilmodelle zu prüfen. Das Szenario mit niedrigem Sauerstoffgehalt (15% O_2 -Gehalt, auch als transiente Bedingungen bezeichnet) repräsentiert einen Bereich, indem beide Prozesse - Nitrifikation und Denitrifikation - gleichzeitig stattfinden. Dieses Szenario gibt die Bedingungen in einem nicht gesättigten Boden mit einem Bodenfeuchtegehalt wieder, der zu eingeschränkter Sauerstoffverfügbarkeit führt. Alle weiteren Parameter wurden wie in Tabelle 3.4 beschrieben verwendet.

Die Anfangsbedingungen für Nitrit und Distickstoffmonoxid wurden auf null gesetzt, Ammonium und Nitrat hatten dagegen Anfangskonzentrationen größer null.

Organischer Kohlenstoff (*DOC*) und Kohlenstoffdioxid (CO_2) wurden als im Überfluss vorhanden angenommen und stellten somit nicht-limitierende unspezifische Kohlenstoffquellen dar. Der verfügbare Sauerstoff wurde zunächst ebenfalls nicht als dynamische Zustandsgröße berücksichtigt, sondern in der Form eines konstanten Kontrollparameters.

3.2. Sensitivitätsanalyse

Um diejenigen Modellparameter zu identifizieren, die den größten Einfluss auf die Varianz des Modells haben, wurde für aerobe ($O_2 = 100\%$), transiente ($O_2 = 15\%$) und anaerobe ($O_2 = 0\%$) Bedingungen eine Sensitivitätsanalyse mit 31 Modellparametern durchgeführt.

1000 Parametersätze wurden mittels eines Monte-Carlo-Ansatz mit dem Latin Hypercube-Stichprobenverfahren generiert, um die Variation in den Modellergebnissen zu betrachten. Die stochastischen Parameter wurden als gleichverteilt angenommen, da es durch den Mangel an ausreichenden Daten nicht möglich war, alternative statistische Verteilungen aus der Literatur abzuleiten. Die minimalen und maximalen Werte der Gleichverteilung wurden entweder in Einklang mit dem aus den Literaturwerten abgeleiteten Intervall (Tabelle 3.4) bestimmt oder als 50% über und unter dem Wert für die Simulationen abgeschätzt [31, 41]. Für jeden Parameter wurde eine Korrelationsanalyse basierend auf den Ergebnissen der Monte Carlo-Simulationen durchgeführt. Der Beitrag jedes Parameters zu der Varianz jeder Zustandsgröße über die Zeit wurde bestimmt. Alle Parameter mit einem Beitrag von mehr als 10% an der Varianz an mehr als 10 der 150 Beobachtungszeitpunkte (bei einem Simulationszeitraum von 1500 Stunden wurde alle 10 Stunden ein Beobachtungszeitpunkt gesetzt) wurden als einflussreich betrachtet. Für jede Zustandsgröße wurden diese einflussreichen Parameter ausgewählt und ihr Beitrag zur Varianz (Contribution to Variance, CTV) getrennt für sechs Zeitpunkte (10, 100, 200, 500, 700 und 900 Stunden) berechnet.

Für die CTV-Analyse wurde zunächst eine Rangtransformation mit den stochastischen Parametern für die sechs spezifizierten Zeitpunkte berechnet und anschließend eine Rangkorrelation mit dem Spearman Rangkorrelationskoeffizienten, ein nichtparametrisches Maß für die statistische Abhängigkeit zwischen zwei Variablen, berechnet [24]. Mit den resultierenden Daten wurde der Beitrag der Parameter zu der Varianz jeder Zustandsgröße berechnet.

3.3. Implementation

Das Differentialgleichungssystem wurde numerisch mit der *Mathematica* (Version 8.0, Wolfram) Routine *NDSolve* gelöst. Die Sensitivitätsanalyse wurde mit Hilfe in *Mathematica* implementierter Funktionen durchgeführt. Der Quellcode befindet sich im Anhang.

3.4. Parameteroptimierung

Die Parameteroptimierung des Modells mit den experimentellen Daten führte ich per Hand durch, da für die Anwendung eines Optimierungsprogramms die Datengrundlage zu dünn war. Vier Messzeitpunkte, von denen einer den Anfangswert stellt, sind nicht ausreichend, um eine Dynamik zu erkennen. Für bessere Ergebnisse müssten experimentelle Daten sowohl über einen längeren Zeitraum (zehn Tage) als auch in einer höheren zeitlichen Auflösung (eine Messung mindestens alle 24 Stunden) zur Verfügung stehen. Außerdem führten die unterschiedlichen Größenordnungen der Ammonium- und Nitratkonzentrationen gegenüber der Nitratkonzentration zu Schwierigkeiten bei der Wahl einer für alle drei Zustandsgrößen passenden Fehlerfunktion. Daher optimierte ich die Ammonium-, Nitrit- und Nitratkonzentrationen per Hand nach visuellen Gesichtspunkten.

Ich unterschied für die Bodenstandorte AEG 02, AEG 15 und AEG 30 zwischen vier Ansätzen:

- A: Wassergehalt = 50% des WHK_{max} mit Acetylenzugabe (AEG 02, AEG 15, AEG 30)
- B: Wassergehalt = 50% des WHK_{max} ohne Acetylenzugabe (AEG 02, AEG 15, AEG 30)
- C: Wassergehalt = 80% des WHK_{max} mit Acetylenzugabe (AEG 02, AEG 30)
- D: Wassergehalt = 80% des WHK_{max} ohne Acetylenzugabe (AEG 02, AEG 30)

Jeder dieser Ansätze wurde mit den standort- und ansatzspezifischen Startwerten (Ammonium-, Nitrat und Nitritkonzentrationen, mikrobieller Kohlenstoff, gelöster organischer Kohlenstoff, Anteile von Denitrifizierern, Ammoniakoxidierern und Nitritoxidierer) optimiert.

Der Standort AEG 10 musste komplett ausgeschlossen werden, da die Ammonium- und Nitratkonzentrationen an den ersten beiden Messzeitpunkten unterhalb der Bestimmungsgrenze lagen. Für AEG 15 bei 80% des WHK_{max} galt dies ebenso, so dass für den höheren Wassergehalt zwei Standorte ausgeschlossen werden mussten.

Für die Optimierung wurde der organische Kohlenstoff DOC als Funktion der Zeit in Einklang mit den experimentellen Daten zum DOC implementiert, da die Konzentration im Laufe des Versuchs deutlich zurückging und eine Limitierung nicht ausgeschlossen werden konnte. Mit dieser Vorgehensweise konnte vermieden werden, dass der Kohlenstoff als Zustandsgröße modelliert werden musste, die von den Denitrifizierern konsumiert wird und aus absterbender Biomasse entsteht.

Die vorhandenen Daten schränkten die Optimierung und die Güte der Ergebnisse ein.

Mit lediglich vier Messzeitpunkten wurde nur eine sehr ungenaue Dynamik vorgegeben. Mir standen mit Ammonium-, Nitrat- und Nitritkonzentration nur Daten zu drei der sieben Zustandsgrößen zur Verfügung. Für die Genabundanzen gab es lediglich Einfachmessungen, die keine erkennbare Dynamik aufwiesen. Um Veränderungen in den Abundanzen zu erkennen, reicht eine Zeitreihe über 144 Stunden nicht aus.

Daher wurden diese Messungen nur für die Bestimmung der anfänglichen Anteile der Denitrifizierer und Nitrifizierer (F_{den} , F_{AMO} , F_{NIR}) verwendet:

$$F_{den} = \frac{\sum \text{denitrifizierende Gene bei } t_0}{\sum \text{denitrifizierende Gene bei } t_0 + \sum \text{nitrifizierende Gene bei } t_0}$$

Die Berechnung für $F_{AMO} = F_{NIR}$ erfolgte analog zu F_{den} . B_0 wurde aus den Daten zum mikrobiellen Kohlenstoff C_{mic} bei t_0 gewonnen. F_{den} , F_{AMO} , F_{NIR} , $DOC(0)$, B_0 , $NH_4^+(0)$, $NO_3^-(0)$, $NO_2^-(0)$ wurden spezifisch für jeden Standort und Ansatz angegeben (Tabelle 3.5).

Tabelle 3.5.: Standortspezifische Parameter- und Anfangswerte aus den Experimenten. In F_{nit} sind die Werte für F_{AMO} und F_{NIR} zusammengefasst.

	O_2 [%]	$v_{denN_2O}^{max}$ [s^{-1}]	$NH_4^+(0)$ [mg N/ g Boden TG]	$NO_3^-(t)$ [mg N/ g Boden TG]	$NO_2^-(t)$ [mg N/ g Boden TG]	B_0 [mg C/ g Boden TG]	F_{den} g [-]	F_{Nit} [-]	
AEG 02	A	100	0	0,178	0,128	0,0055	2,834	0,362	0,638
	B	100	0,03	0,128	0,141	0,0258	2,966	0,338	0,662
	C	0	0	0,092	0,021	0,0001	2,181	0,443	0,557
	D	0	0,03	0,088	0,025	0,0009	2,603	0,476	0,524
AEG 15	A	100	0	0,099	0,067	0,0007	2,401	0,523	0,477
	B	100	0,03	0,099	0,053	0,0054	2,435	0,438	0,562
AEG 30	A	100	0	0,071	0,124	0,0022	1,592	0,790	0,210
	B	100	0,03	0,057	0,125	0,0020	1,610	0,715	0,285
	C	0	0	0,050	0,096	0,0095	1,894	0,806	0,194
	D	0	0,03	0,049	0,099	0,0128	1,539	0,866	0,134

Da nur Messwerte für Ammonium, Nitrat und Nitrit vorlagen, war es sinnvoll Parameter zu optimieren, die Einfluss auf diese Zustandsgrößen haben oder von diesen direkt beeinflusst werden. Die Umsatzgeschwindigkeiten $v_{denNO_3}^{max}$, $v_{NO_2}^{denmax}$, $v_{nitNH_4}^{max}$, $v_{nitNO_2}^{max}$ bestimmen für einen Zeitraum von knapp 150 Stunden die Dynamik von Ammonium, Nitrat- und Nitritkonzentrationen. $v_{denN_2O}^{max}$ konnte nicht in die Optimierung einbezogen werden, da weder für die N_2O - noch für die N_2 -Konzentration Daten vorhanden waren. Die mikrobiellen Wachstums- und Sterberaten wurden auf null gesetzt, da innerhalb von sieben Tagen keine signifikante Zunahme der Biomasse durch Wachstum zu erwarten

ist.

In den Experimenten war erkennbar, dass Ammonium durch Mineralisierung entstand. In meinem Modell ist ein solcher Prozess nicht enthalten. Daher fügte ich für die Optimierung den Parameter *min* ein, der konstant Ammonium zufügt. Natürlich verläuft die Mineralisierung nicht konstant, aber für den kurzen Untersuchungszeitraum von 144 Stunden konnte dies angenommen werden, da die Mineralisierung ein eher langsamer Prozess ist.

Per Hand passte ich die Konzentrationsverläufe von Nitrat und Nitrit den Daten aus den Experimenten für die drei Standorte und jeweiligen Ansätze an. Die Ammoniumdynamik versuchte ich dann durch Anpassung der Mineralisierungsrate zu treffen. Ich ging dabei nach rein visueller Abschätzung vor.

Für die Auswertung zog ich vier verschiedene Fehlerdefinitionen heran. Der Fehler wurde für die jeweilige Konzentration (NH_4^+ , NO_3^- , NO_2^-) an einem Zeitpunkt (0, 24, 48, 144 h) berechnet und die Fehler der drei Substanzkonzentrationen anschließend addiert. Die aufsummierten Fehler der vier Zeitpunkte wurden dann wiederum addiert.

Da die Nitratkonzentrationen teilweise deutlich höher ausfielen als die Ammonium- und besonders die Nitritkonzentrationen, musste bei der Wahl des Fehlers darauf geachtet werden, dass diese Unterschiede in der Größenordnung keinen Einfluss haben. Daher erschien die Wahl des relativen Fehlers [52] sinnvoll.

Ob die Abweichung des Modellwerts (x_M) vom Datenwert (x_D) nach oben oder unten erfolgte, war für mich nicht ausschlaggebend und da der aufsummierte relative Fehler außerdem durch einen vorzeichenbehafteten Einzelfehler bei der Addition der Einzelwerte verfälscht werden würde, wählte ich den Betrag der Differenz (Gl. 3.21).

$$F_{rel} = \sum_{t=0,24,48,144h} \sum_{i=NH_4^+,NO_3^-,NO_2^-} \frac{|x_M^i(t) - x_D^i(t)|}{x_D^i(t)} \quad (3.21)$$

Nachteil des relativen Fehlers ist jedoch, dass eine Abweichung des Modellwerts vom Datenwert nach unten nicht den gleichen Fehlerwert ergibt, wie eine betragsgleiche Abweichung nach oben. Außerdem ergeben sich Schwierigkeiten, wenn der Datenwert null ist.

Eine weitere häufig genutzte Fehlerfunktion ist die Summe der gewichten Fehlerquadrate (Gl. 3.22) [52].

$$F_{wSSR} = \sum_{t=0,24,48,144h} \sum_{i=NH_4^+,NO_3^-,NO_2^-} \frac{(x_M^i(t) - x_D^i(t))^2}{x_D^i(t)} \quad (3.22)$$

Auch diese Fehlerdefinition hat den Nachteil, dass Abweichungen nach oben und unten nicht gleich gewichtet werden und Probleme bei Datenwerten auftreten, die null sind.

Außerdem werden durch die einfache Wichtung Unterschiede in den Größenordnungen zwischen zwei Zustandsgrößen nicht ausgeglichen.

Um diesen Nachteil auszugleichen, kann der Nenner ebenfalls quadriert werden, so dass man einen quadrierten relativen Fehler berechnet (Gl. 3.23).

$$F_{srel} = \sum_{t=0,24,48,144h} \sum_{i=NH_4^+,NO_3^-,NO_2^-} \frac{(x_M^i(t) - x_D^i(t))^2}{(x_D^i(t))^2} \quad (3.23)$$

Durch die Quadrierung erhalten große Abweichungen einen höheren Fehlerwert und kleine Abweichungen einen kleineren als ohne die Quadrierung. Allerdings wird so auch die Problematik der unterschiedlichen Bewertung von Abweichungen nach oben und unten verstärkt.

Für die Bewertung der Parameteroptimierung wurde ein Fehler benötigt, der relativ zur Größenordnung der einzelnen Substanz ist, so dass Unterschiede zwischen den Substanzen keinen Einfluss haben und der Abweichungen nach oben und unten gleich bewertet. Allerdings dürfen große relative Abweichungen bei sehr geringen absoluten Fehlern nicht zu stark bewertet werden.

Der Fehlerfaktor (Gl. 3.24) ist in der Lage, die oben genannten Aufgaben zu erfüllen: Der Fehler wird relativ berechnet, so dass Unterschiede in den Größenordnungen der Substanzen keine Rolle spielen. Abweichungen des Modellwerts vom Datenwert nach oben und nach unten werden gleich bewertet.

$$F_{FF} = \sum_{t=0,24,48,144h} \sum_{i=NH_4^+,NO_3^-,NO_2^-} \left(10^{\left| \log \frac{x_M^i(t)}{x_D^i(t)} \right|} - 1 \right) \quad (3.24)$$

Jedoch kann der Fehler bei sehr kleinen absoluten Abweichungen sehr groß werden. Abhilfe kann eine Schranke für Modell- und Datenwert schaffen, unterhalb derer der Fehler auf einen geringen Wert gesetzt wird.

3.5. Zeitreihen

Eine Wiese ist kein geschlossenes System. So gib es weitere Eintrags- und Verlustprozesse, die in meinem Modell keine Beachtung finden. Nitrat, Nitrit und Ammonium versickern mit dem Bodenwasser in tiefere Bodenschichten, Distickstoffmonoxid gast aus dem Boden aus. Stickstoff wird durch Pflanzen aufgenommen und durch Mahd und Fraß entfernt. In meiner Arbeit konzentrierte ich mich auf die Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse, daher fanden all diese Prozesse keinen Eingang in mein Modell.

Die Anwendung von Zeitreihen auf das Modell ermöglichte die Simulation realistischer Bedingungen, ohne die jeweiligen Größen explizit zu modellieren. Sauerstoffzeitreihen ließen die Simulation mit dynamischem Sauerstoffgehalt zu und auch Zeitreihen für Wassergehalt und Temperaturen im Boden konnten in mein Modell mit einbezogen werden.

Innerhalb der Biodiversitätsexploratorien wurde für ausgewählte Standorte alle zehn Minuten die Bodenfeuchte (SMC) in 10 bis 20 cm Tiefe und die Bodentemperatur in derselben Tiefe gemessen. Der Messzeitraum variierte dabei zwischen den einzelnen Standorten, alle Messungen befanden sich aber zwischen Anfang 2008 und Anfang 2013, teilweise mit längerfristigen Unterbrechungen. Die Daten stammen aus den Klimadaten des Projekts Instrumentation von Falk Hänsel, Thomas Nauss und Spaska Forteva von der Philipps-Universität in Marburg (ID 14046, Version 1.0.57).

Aus diesen Zeitreihen wurden möglichst vollständige Messungen für Grünlandstandorte ausgewählt. Verwendet wurden schließlich die beiden Standorte HEG 03 und HEG 29. Die Zeitreihen beginnen am 08.09.2010 und enden am 05.07.2011 (dies entspricht einem Zeitraum von etwas mehr als 6500 Stunden). Für die Bodentemperatur wurde die Zeitreihe von HEG 03 gewählt, da sich die Werte und die Dynamik in beiden Standorten sehr stark glichen. Für die Bodenfeuchte wurden die Werte der jeweiligen Standorte verwendet.

Düngung kann nicht als eine Zeitreihe im eigentlichen Sinne bezeichnet werden. Legt man aber ein Datum für den Beginn der Simulationszeit fest, ist es möglich, die Düngezeitpunkte in das Modell eingehen zu lassen. Um Simulationsläufe für einen längeren Zeitraum durchführen können, wurde ein zusätzlicher konstanter Ammoniuminput zur Gleichung für die Ammoniumkonzentration hinzugefügt. Ohne diesen zusätzlichen Term wurde unter nicht strikt anaeroben Bedingungen sämtliches Ammonium umgewandelt, so dass nach etwa 1000 Stunden die Konzentration auf null sank. Dies hatte das Aussterben der Nitrifizierer zur Folge. Nach 1000 Stunden kam die Nitrifikation also zum Stillstand, was nicht den realen Umständen entspricht. Um ein komplettes Aussterben der Nitrifizierer zu verhindern, fügte ich einen zusätzlichen unspezifischen, konstanten Ammoniumeintrag ($NH4Input = 0,0005 \text{ mg N } g^{-1} \text{ Boden TG } h^{-1}$) hinzu. Dies führte

dazu, dass die Nitrifizierer mit geringer Abundanz überleben konnten. Literaturwerte für Brutto-Mineralisierungsraten liegen bei $0,0191 \cdot 10^{-3}$ bis $0,0001 \text{ mg N } g^{-1} \text{ Boden TG } h^{-1}$ [54, 10]; Nettoraten bei bis zu $0,02110 \cdot 10^{-3} \text{ mg N } g^{-1} \text{ Boden TG } h^{-1}$ [62]. Damit liegt der von mir gewählte Wert etwas über den Literaturwerten. Jedoch sind in dieser Rate nicht nur Einträge aus Mineralisierung, sondern auch aus Stickstofffixierung oder anderen Stickstoffquellen enthalten.

3.5.1. Sauerstoff

Eine realistischere Ausprägung des Sauerstoffgehalts des Bodenwassers als konstante Werte, wie in den vorhergegangenen Simulationen verwendet, konnte durch die Interpolation von Zeitreihen erreicht werden. In den Biodiversitätsexploratorien wurden zwar keine Werte für den Sauerstoffgehalt im Boden gemessen, aber gemäß der in Kapitel 2.2 beschriebenen Umrechnung der Bodenwassergehalte in Werte für den Sauerstoffgehalt konnte eine Zeitreihe erstellt werden. Anfänglich wurde wie in den vorhergegangenen Simulationen ein Ammonium- und Nitratinput von jeweils $0,1 \text{ mg N/ g Boden TG}$ angenommen.

3.5.2. Wassergehalt

Da wie in Kapitel 2.2 erwähnt gleichzeitig auch die Bodenfeuchte selbst eine Rolle für das Wachstum der Mikroorganismen spielt, wurde in einem zweiten Schritt die Auswirkung der Bodenfeuchte an das Wachstum der Mikroorganismen gekoppelt. Der Einfluss der Bodenfeuchte auf die Nitrifizierer wurde durch Multiplikation des unten stehenden Terms an die Wachstumsrate der Mikroorganismen berechnet. $BF(t)$ ist hierbei die Bodenfeuchte in Abhängigkeit von der Zeit, K stellt die Halb-Sättigungskonstante dar und n bestimmt die Steigung.

$$\text{Einfluss}BF(t) = \frac{BF(t)^n}{K^n + BF(t)^n}$$

Anfänglich wurde wie in den vorhergegangenen Simulationen ein Ammonium- und Nitratinput von jeweils $0,1 \text{ mg N/ g Boden TG}$ angenommen.

3.5.3. Temperatur

Bei der Betrachtung eines Zeitraums von mehr als einem Jahr musste auch die Temperatur mit einbezogen werden. Zwischen den Sommer- und Wintermonaten gibt es in diesem Bereich deutliche Schwankungen. Für psychrotolerante Mikroorganismen liegt die optimale Temperatur zwischen 20 und 30°C . Temperaturen unter null und über

40°C lassen das Wachstum stagnieren. In dieser Temperaturklasse liegt ein Großteil der im Boden lebenden Bakterien und Archaeen [40].

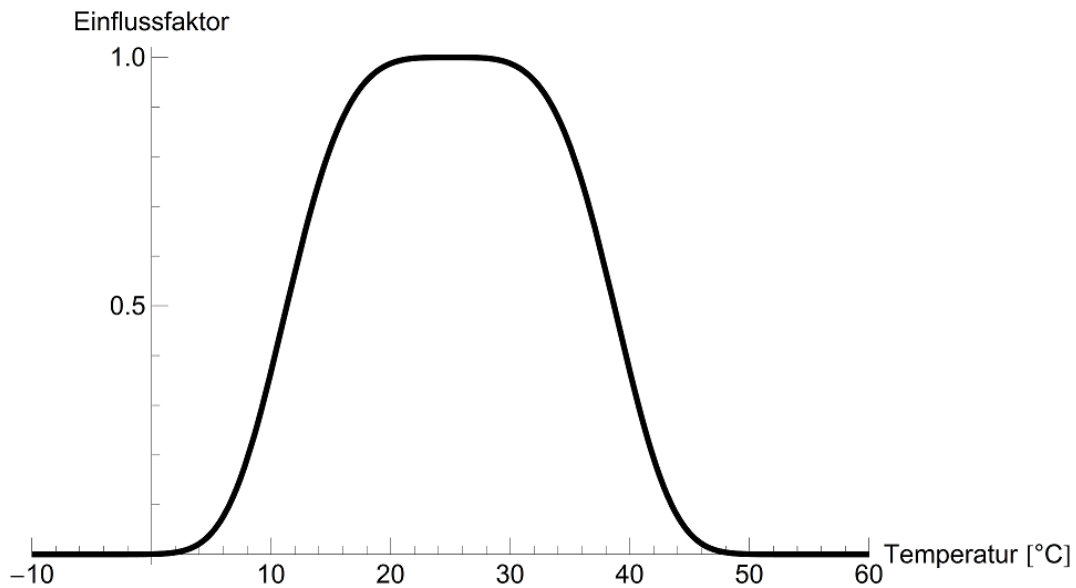


Abbildung 3.2.: Einflussfaktor der Temperatur auf das Wachstum der Mikroorganismen.

Der Einfluss der Temperatur auf die Aktivität der Mikroorganismen konnte, so wie auch der Einfluss der Bodenfeuchte, mit Hilfe eines selbst entwickelten empirischen Terms, der den Einfluss der Beschreibung in Madigan et al. [40] entsprechend wiedergibt und der an die Wachstumsraten multipliziert wird, ausgedrückt werden. T_{opt} entspricht der optimalen Temperatur für das mikrobielle Wachstum (in °C) und $T(t)$ der aktuellen Temperatur in °Celsius, b bestimmt die Breite der Kurve und n die Steigung.

$$EinflussTemp(t) = e^{-\frac{(T(t)-T_{opt})^n}{b^n}}$$

Anfänglich wurde wie in den vorhergegangenen Simulationen ein Ammonium- und Nitratinput von jeweils 0,1 mg N/ g Boden TG angenommen.

3.5.4. Düngung

Der externe Eintrag bzw. die Entnahme von Stickstoff ist nur schwer quantifizierbar. Man kann dabei drei Fälle unterscheiden:

- Eintrag durch Düngung
- Eintrag und Entzug durch Viehbesatz
- Eintrag und Entzug durch Mahd

Sonja Gockel und W.W. Weisser von der Universität Jena vom lokalen Management der Biodiversitätsexploratorien haben Daten zur Landgröße, Nutzungsart, Nutzungsintensität, Entwässerung, Bewässerung, Beweidung, Schnitten, Mahd, Ertrag, Düngung, Pflegemaßnahmen und Nutzungshintergrund des Standorts zusammengetragen (GL_survey_all_exploratories_availableInfo, ID 5120, Version 1.98.46).

Um in Unterkapitel 4.4.1.5 die Düngung mit den Zeitreihen für Bodenfeuchte und -temperatur verbinden zu können, verwendete ich auch hier die Standorte HEG 03 und HEG 29.

HEG 03 ist eine Wiese, die zwei Mal im Jahr gedüngt (ohne Angabe über die Zeitpunkte) und drei Mal gemäht wurde. Beweidet wurde die Fläche wenig. HEG 29 wurde in einer Mischform sowohl als Weide als auch als Wiese genutzt. Über die Häufigkeit der Düngung und den Zeitpunkt gibt es keine Angaben. Da die Fläche auch als Weide genutzt wurde, nahm ich eine einmalige Düngung an. Ein bis zwei Mal im Jahr wurde die Fläche gemäht und teilweise durch Mutterkühe beweidet (Tabelle 3.6). Die Dün-

Tabelle 3.6.: Landnutzung für HEG 03 und HEG 29.

Standort	Düngungsintensität	Häufigkeit der Mahd	Beweidungsintensität
HEG 03	122,4	3	13
HEG 29	54,6	1,4	50,75

gung von landwirtschaftlich genutzten Flächen geschieht im optimalen Fall drei bis vier Wochen vor Beginn der Vegetationsperiode. Dies ist in Deutschland in der Regel im März. Auch in den Biodiversitätsexploratorien erfolgte eine Düngung auf den jeweiligen Flächen, sofern angegeben, im März und gegebenenfalls im Juni.

Für die Düngung sind für viele Standorte Informationen über Häufigkeit, Zeitpunkt, Düngemittel und Zusammensetzung verfügbar (Tabelle 3.7). Da für HEG 29 keine Angaben über die Zeitpunkte und Häufigkeit der Düngung vorhanden sind, ging ich aufgrund der gedüngten Stickstoffmenge von einer einmaligen Düngung Ende März aus. Die Angaben aus den Exploratorien bezogen sich auf die genutzte Fläche und nicht auf das Gewicht des Bodens, wie ich es in meinem Modell benutzte. Daher war eine Umrechnung der Flächenangaben in Gewicht notwendig.

Ich ging von einer Bodentiefe von 10 cm aus (Messung von Bodenfeuchte und Temperatur in 10 cm Tiefe, Bodenprobe für die Experimente aus dem Oberboden).

Angenommen wurde eine Lagerungsdichte von 1,5 g pro cm^3 (1500 kg/ m^3).

Eine Fläche von 1 ha (10000 m^2) hat damit ein Volumen von 1000 cm^3 (bei 10 cm Tiefe), was einem Trockengewicht von 1500 t Boden entspricht. Bei einer Düngung mit x kg N pro ha Boden ergibt sich eine Konzentration von x kg N pro 1500 t Boden oder x mg N pro 1500 kg Boden.

Tabelle 3.7.: Standorteigenschaften und Bewirtschaftung von HEG 03 und HEG 29

Standort	HEG 03	HEG 29
Jahr	2006	2008
Fläche [ha]	19,83	8,38
Nutzungsart	Wiese	Mischform
Großvieheinheiten	-	42
Tage mit Beweidung	-	14
Anzahl Düngung	2	<i>keine Angabe</i>
Zeitpunkt der Düngung	8.4. und 26.6.	<i>keine Angabe</i>
Menge Stickstoff [kg]	100 (70+30)	27
Düngemittel	KAS	KAS

Beide Standorte wurden mit Kalkammonsalpeter (KAS) gedüngt. KAS-Dünger besteht zu 76% aus NH_4NO_3 und zu 24% aus $CaCO_3$. Da der Dünger zu 50% aus Ammonium und zu 50% aus Nitrat besteht ergeben sich Einträge von $0,5 \times mg NH_4^+ - N$ bzw. $NO_3^- - N$ pro 1500 kg Boden.

HEG 03 hat eine Fläche von 19,83 ha und wird zweimal gedüngt, einmal mit 70 kg Stickstoff und ein zweites Mal mit 30 kg Stickstoff. Daraus ergeben sich Konzentrationen von $0,0012 mg NH_4^+ - N$ pro g Boden für die erste Düngung und $0,0005 mg NH_4^+ - N$ pro g Boden für die zweite Düngung. Die Konzentrationen für Nitrat sind entsprechend ebenfalls $0,0012 mg NO_3^- - N$ pro g Boden für die erste Düngung und $0,0005 mg NO_3^- - N$ pro g Boden für die zweite Düngung. HEG 29 hat eine Fläche von 8,38 ha. Diese Fläche wird einmal im Jahr mit 27 kg Stickstoff gedüngt und zusätzlich 14 Tage lang beweidet. Für die Düngung ergibt sich ein Ammoniumeintrag von $0,0011 mg NH_4^+ - N$ pro g Boden und ebenfalls $0,0011 mg NO_3^- - N$ pro g Boden Nitratreintrag.

Auch durch den Viehbesatz wird Stickstoff eingetragen. Dieser wird allerdings vorher durch die Beweidung dem System entzogen. Die Aufnahme von Nitrat und Ammonium durch Pflanzen und der Entzug von Stickstoff aus dem System durch Mahd oder Beweidung wurden in meinem Modell nicht dargestellt. Der Eintrag von Ammonium durch den Viehbesatz dagegen betraf den modellierten Nitrifikationsprozess direkt. Daher betrachtete ich an dieser Stelle nur den Eintrag von Stickstoff durch Viehbesatz ohne auf den gleichzeitigen Entzug durch die Beweidung einzugehen.

Für die Beweidung der Flächen in den Biodiversitätsexploratorien gibt es für HEG 29 Informationen über den Zeitraum, die Anzahl der Tiere und ihre Art, so wie die Umrechnung in Großvieheinheiten (Tabelle 3.7).

Durch den Kot der Tiere wird etwa $0,04 kg N$ pro Tier und Tag eingetragen, durch Harn $0,09 kg N$ pro Tier und Tag [61]. Für die 42 Großvieheinheiten, die für HEG 29 angegeben sind, ergibt sich daraus ein Eintrag von $5,46 kg N$ pro Tag auf der Fläche

des Standortes. Ich nahm an, dass der Eintrag in erster Linie in Form von Ammonium geschieht. Daraus ergibt sich eine Eintragsrate von $0,00018 \text{ mg } NH_4^+ - N$ pro g Boden für die 14 Tage der Beweidung. Die Verteilung der Ausscheidungen des Viehs auf der Weidefläche ist nicht gleichmäßig über die gesamte Fläche verteilt. Da aber die Verteilung nur schwer abgeschätzt werden kann und mein Modell keinen räumlichen Bezug hat, ging ich für die Modellierung von einer gleichmäßigen räumlichen Verteilung über die Gesamtfläche aus.

Der zusätzliche Ammoniumeintrag durch Düngung in HEG 03 folgt einer angenäherten Dirac-Funktion:

$$NH4Eintrag(t) = \frac{N_{Düngung1}}{a \cdot \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\left(\frac{t-t_1}{a}\right)^2} + \frac{N_{Düngung2}}{a \cdot \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\left(\frac{t-t_2}{a}\right)^2}$$

Dies entspricht einer Dirac-Funktion mit geringer Standardabweichung a . Die direkte Anwendung der Dirac-Funktion war in Kombination mit *NDSolve* in der verwendeten Mathematica-Version 8 nicht möglich. $N_{Düngung1}$ und $N_{Düngung2}$ entsprechen den jeweiligen Ammoniumzugaben und t_1 und t_2 den beiden Düngezeitpunkten. Für den zusätzlichen Nitratreintrag sieht die Gleichung entsprechend aus.

Für den zusätzlichen Ammoniumeintrag durch einmalige Düngung und durch den 14-tägigen Viehbesatz in HEG 29 gilt die folgende Gleichung:

$$NH4Eintrag(t) = \frac{N_{Düngung1}}{a \cdot \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\left(\frac{t-t_1}{a}\right)^2} + \begin{cases} N_{Ausscheidungen}, & \text{für } t_2 \geq t \geq t_1 + 14 \cdot 24h \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für den Nitratreintrag gilt:

$$NO3Eintrag(t) = \frac{N_{Düngung1}}{a \cdot \sqrt{\pi}} \cdot e^{-\left(\frac{t-t_1}{a}\right)^2}.$$

4. Ergebnisse und Diskussion

4.1. Simulation

4.1.1. Ergebnisse

Die Modellläufe wurden mit der Parametrisierung aus Tabelle 3.4 für aerobe (100% O_2 -Gehalt), transiente (15% O_2 -Gehalt) und anaerobe (0% O_2 -Gehalt) Bedingungen durchgeführt. Die Simulationsergebnisse sind in den Abbildungen 4.1 und 4.2 dargestellt.

In den Simulationen führten anaerobe Bedingungen für alle Mikroorganismen zu insgesamt niedrigerem Wachstum als aerobe Bedingungen (Abb. 4.1), da die Wachstumsraten unter anaeroben Bedingungen für die Nitrifizierer null und für die Denitrifizierer kleiner waren als unter aeroben Bedingungen. Die Abundanz der Denitrifizierer wuchs unter aeroben und transienten Bedingungen zunächst an, erreichten ein lokales Maximum und sanken anschließend wieder. Unter aeroben Bedingungen wurde das Maximum früher erreicht (nach etwa 800 Stunden) und war höher. Das Maximum bei transienten Bedingungen wurde erst nach 1000 Stunden erreicht. Anaerobe Bedingungen führten zu einem Maximum nach etwa 750 Stunden, danach nahm die Abundanz der Denitrifizierer wieder ab. Die Abundanz blieb jedoch insgesamt deutlich niedriger als unter aeroben und transienten Bedingungen, da die Denitrifizierer mit Sauerstoff als Elektronenakzeptor aufgrund des höheren Redoxpotentials [40] immer besser wachsen als mit einem alternativen Akzeptor einer Stickstoffverbindung (Abb. 4.1 a). Unter anaeroben Bedingungen nahm die Abundanz der Nitrifizierer kontinuierlich ab (Abb. 4.1 b und c). Unter aeroben und transienten Bedingungen wuchs die Zahl der Ammoniakoxidierer stark an bis zu einem Maximum nach etwa 800 Stunden unter aeroben und nach etwa 1000 Stunden unter transienten Bedingungen. Das aerobe Maximum fiel dabei deutlich höher aus als die maximale Abundanz unter transienten Bedingungen (Abb. 4.2 b). Die Abundanz der Nitritoxidierer nahm ebenso wie die der Ammoniakoxidierer unter aeroben und transienten Bedingungen für etwa 900 Stunden zu und anschließend wieder ab. Der höhere Sauerstoffgehalt führte auch hier zu einem höheren Maximum. Allerdings blieb die Abundanz der Nitritoxidierer insgesamt auf einem deutlich niedrigerem Niveau als die der Ammoniakoxidierer (Abb. 4.2 c).

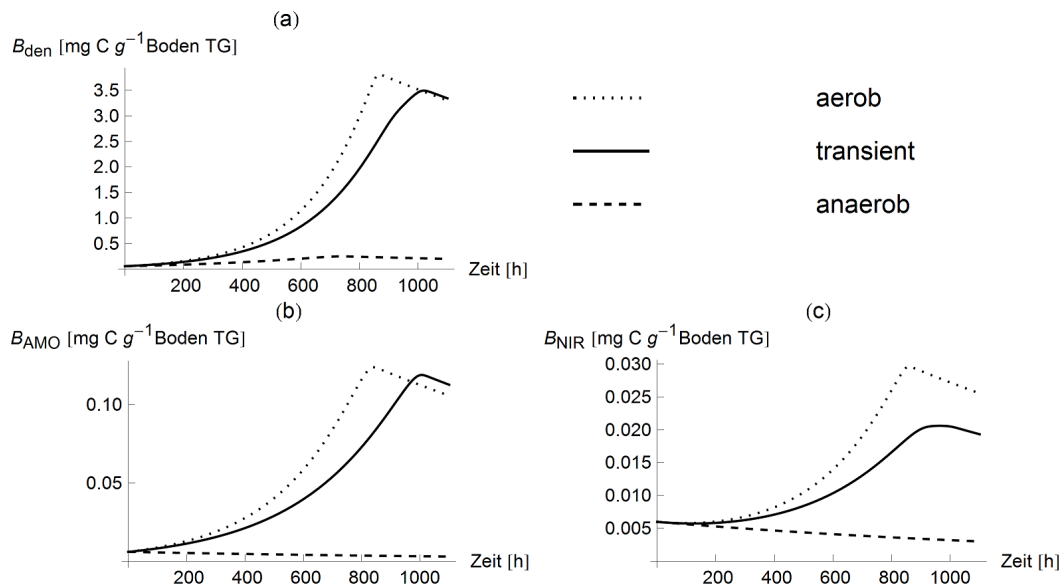


Abbildung 4.1.: Simulierte Biomasse: (a) Denitrifizierer, (b) Ammoniakoxidierer und (c) Nitritoxidierer unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen im Bodenwasser für einen Simulationszeitraum von 1500 Stunden.

Die Simulationsergebnisse für die Ammoniumkonzentration (Abb. 4.2 a) zeigten unter aeroben und transienten Bedingungen eine Abnahme durch die Nitrifikation. War Sauerstoff vorhanden, wurden die Ammoniakoxidierer aktiv und wandelten Ammonium in Nitrit um. Je mehr Sauerstoff dabei vorhanden war, desto schneller erfolgte die Abnahme. Unter anaeroben Bedingungen wurde die Nitrifikation gehemmt und so kaum Ammonium abgebaut. Die Nitritkonzentration stieg unter anaeroben Bedingungen durch die Umwandlung von Nitrat zu Nitrit während der Denitrifikation zunächst stark an und nahm anschließend wieder ab, sobald Nitrit weiter zu Distickstoffmonoxid umgewandelt wurde. Unter aeroben und transienten Bedingungen wurde Nitrit während der Nitrifikation durch Ammoniumoxidation produziert und durch Nitritoxidation abgebaut. Dadurch ergaben sich zunächst ein Anstieg bis zu einem Maximum nach etwa 800 bzw. 900 Stunden und anschließend ein Rückgang (Abb. 4.2 b).

Durch Denitrifikation wurde Nitrat unter anaerober Bedingungen zu Nitrit reduziert (Abb. 4.2 c). Zusätzlich zur Denitrifikation wurde Nitrat unter allen Sauerstoffbedingungen als Stickstoffquelle für die Denitrifizierer verbraucht. Daher war der Rückgang unter anaeroben Bedingungen am schnellsten.

Die simulierten Distickstoffmonoxidkonzentrationen nahmen unter anaeroben Bedingungen während der Denitrifikation zu und nach etwa 600 Stunden wieder ab (Abb. 4.2 d). Die produzierte Menge war unter aeroben und transienten Bedingungen deutlich geringer.

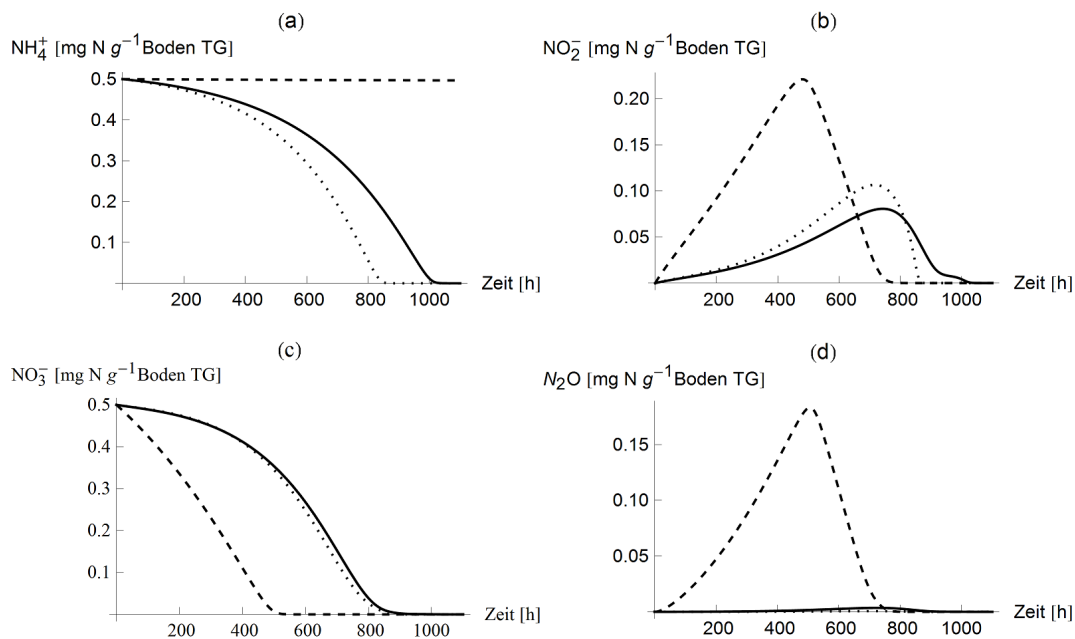


Abbildung 4.2.: Simulierte Stickstoffverbindungen: (a) Ammonium, (b) Nitrit, (c) Nitrat und (d) Distickstoffmonoxid unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen im Bodenwasser für einen Simulationszeitraum von 1500 Stunden. Legende wie in Abb. 4.1.

4.1.2. Diskussion

Die Modellszenarien in dieser Arbeit wurden für konstante Sauerstoffbedingungen durchgeführt, um die grundlegenden Merkmale meines Modells herauszustellen. Abbildung 4.3 zeigt, dass das Modell in der Lage ist, für einen steigenden Sauerstoffgehalt einen entsprechenden Übergang in der Stickstoffdynamik zu produzieren.

Die Annahme einer konstanten gelösten organischen Kohlenstoffquelle der Denitrifizierer erlaubte es, den Einfluss unterschiedlicher Sauerstoffgehalte zu analysieren. Eine Abnahme der gelösten organischen Kohlenstoffkonzentration würde in einer Verlangsamung des Denitrifikationsprozesses resultieren und schlussendlich zu einem Abbruch, sobald die Kohlenstoffquelle komplett verbraucht wäre.

Distickstoffmonoxid wird nicht nur in gasförmigen Stickstoff umgewandelt, sondern geht auch aus dem Boden aus. In meinem Modell unterschied ich nicht zwischen diesen beiden Reduktionsprozessen, da sie die Stickstoffdynamik nicht weiter beeinflussen.

Existierende Modelle betrachten häufig die Stickstoffdynamik unter entweder aeroben oder anaeroben Bedingungen und beschränken sich so auf einzelne Transformationsprozesse des Stickstoffkreislaufs. Das Denitrifikationsmodell von Leffelaar und Wessel [36] hängt von der denitrifizierenden Biomasse ab und gilt lediglich unter anaeroben Bedingungen und vernachlässigt damit den Einfluss von Sauerstoff. Mein gekoppeltes Modell

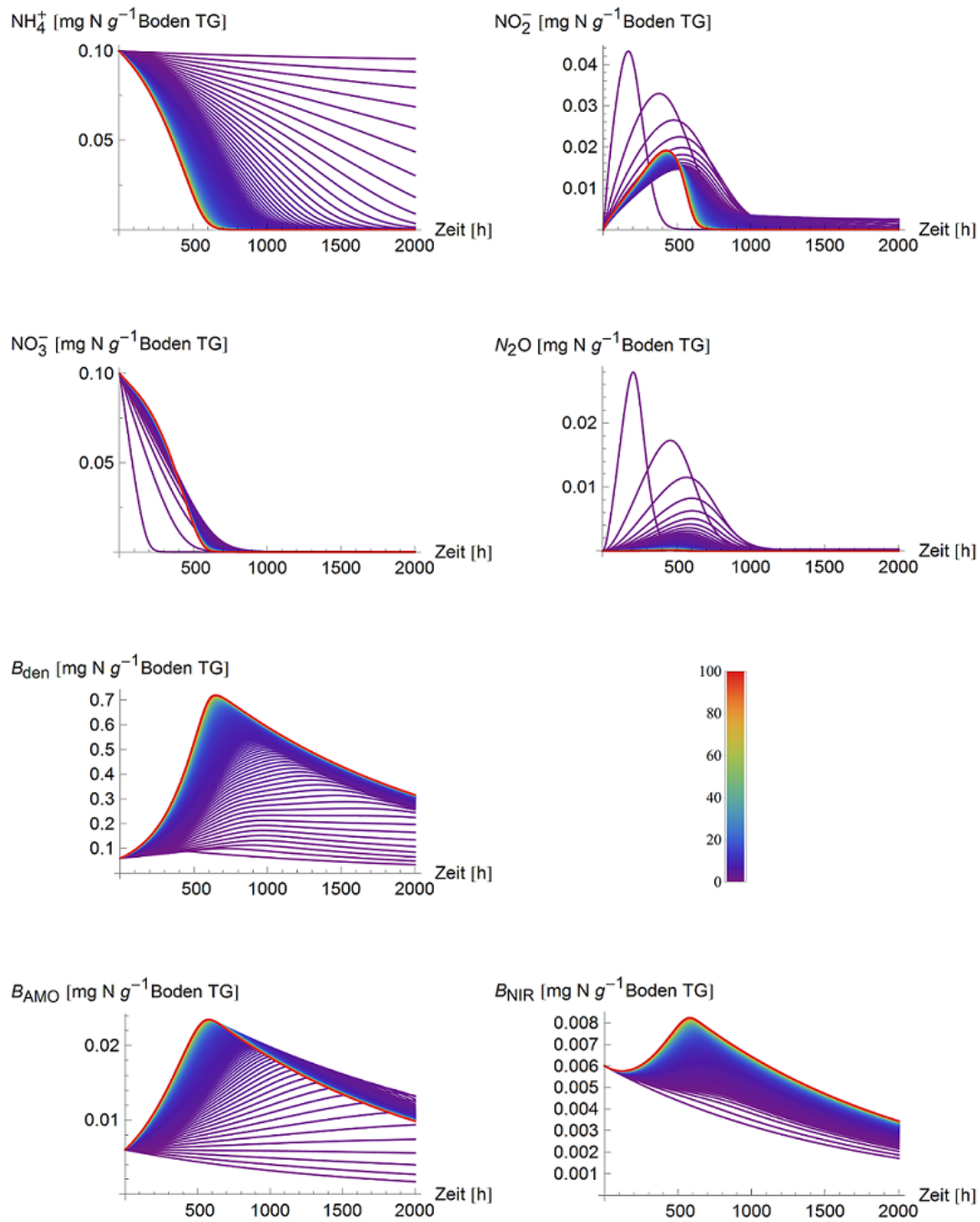


Abbildung 4.3.: Substanzkonzentrationen und mikrobielle Abundanzen für aufsteigende Sauerstoffgehalte (0 bis 100% mit einer Schrittweite von 0,2%).

erzeugte ähnliche Ergebnisse unter strikt anaeroben Bedingungen für die Dynamik von Nitrit, Nitrat und Distickstoffmonoxid wie das Modell von Leffelaar und Wessel [36] und beweist damit seine korrekte Anpassung (Abb. 4.4). Kleinere quantitative Unterschiede in den Modellergebnissen sind auf Unterschiede in der Modellstruktur beim

Stickstoffverbrauch für den Zellerhalt der Mikroorganismen zurückzuführen.

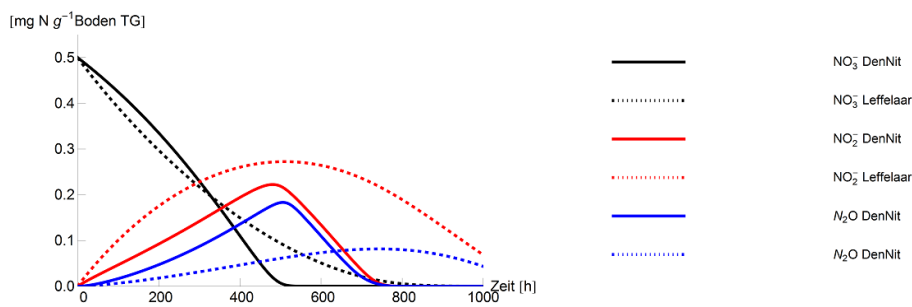


Abbildung 4.4.: Vergleich der Simulationsergebnisse der Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit den Ergebnissen von Leffelaar und Wessel [36]

Das Nitrifikationsmodell von Schauss et al. [51] hängt von der nitrifizierenden Biomasse ab, aber betrachtet ebenfalls nicht den Einfluss von Sauerstoff, bezieht sich also nur auf aerobe Bedingungen. Mein gekoppeltes Modell produzierte unter strikt aeroben Bedingungen eine ähnliche Dynamik für Ammonium und Nitrat (Abb. 4.5). Abweichungen der Ergebnisse können durch Unterschiede in der Modellstruktur durch die Aufnahme zusätzlicher Stickstoffquellen und der Berücksichtigung der Denitrifizierer erklärt werden.

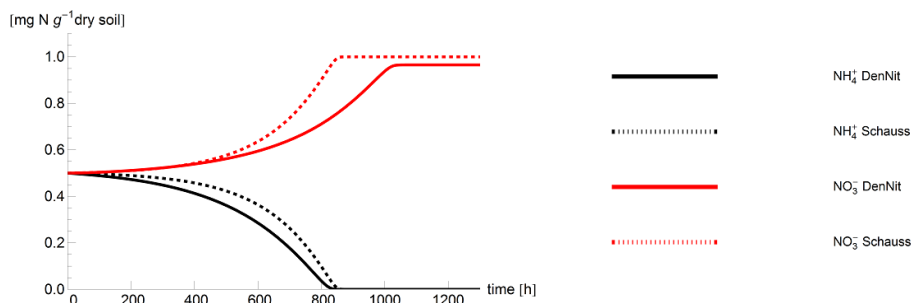


Abbildung 4.5.: Vergleich der Simulationsergebnisse der Ammonium- und Nitratkonzentrationen mit den Ergebnissen von Schauss et al. [51]

Modelle, wie z.B. MiCNiT [3], Expert-N [56], Pnet-N-DNDC [37, 38] und Ecosys [19, 22, 43], die sowohl Nitrifikation als auch Denitrifikation sowie viele andere Stickstoff- und Kohlenstoffumwandlungsprozesse unter dynamischen Sauerstoffbedingungen betrachten, sind in der Lage, die jeweiligen Stickstoffkonzentrationen oder -emissionen aus dem Boden detailliert und akkurat zu simulieren. Auf der anderen Seite benötigen sie jedoch auch viele Parameterwerte (z.B. mehr als 60 beim MiCNiT-Modell im Vergleich

zu 31 bei dem hier vorgestellten Modell) und Daten zu Umweltfaktoren, um ihre Simulationen durchführen zu können. Diese Simulationen sind nicht notwendigerweise in der Lage, Erkenntnisse über die zugrunde liegenden Prozesse zu ermöglichen, da multiple verkettete Faktoren und Prozesse die Ergebnisse erzeugt haben. Mein Modell benötigt eine geringere Anzahl von Parametern und Gleichungen, weist allerdings dadurch auch einige Beschränkungen auf. Ökologische Faktoren wurden außer Acht gelassen, nur zwei Transformationsprozesse des Stickstoffkreislaufs wurden berücksichtigt und die Kohlenstoffkonzentrationen waren fixiert. In diesem Fall waren weitere Einflussfaktoren, abgesehen vom Sauerstoffgehalt, nicht erwünscht und wurden daher ausgeschlossen. Das Ziel dieser Arbeit war es, den Einfluss von Sauerstoff auf die Nitrifikations- und Denitrifikationsprozesse und die dazugehörige mikrobielle Biomasse zu beschreiben und nicht die realistische Berechnung von Substratkonzentrationen.

4.2. Sensitivitätsanalyse

4.2.1. Ergebnisse

Die Sensitivitätsanalyse zeigte den Einfluss der Parameter auf die Varianz der Zustandsgrößen und wird in Form von Balkendiagrammen dargestellt. Der Einfluss der wichtigsten Parameter ist für jede Zustandsgröße an sechs Zeitpunkten ($t = 10, 100, 200, 500, 700, 900$) für unterschiedliche Sauerstoffbedingungen (aerob, transient, anaerob) dargestellt, um die Dynamik über die Zeit wiederzugeben (Abb. 4.6, 4.7, 4.8).

Als die neun einflussreichsten Parameter auf die Varianzen der Zustandsgrößen stellten sich die anfänglichen Anteile an der Gesamtbiomasse der Nitrifizierer (F_{AMO} und F_{NIR}), die maximalen Wachstumsraten ($\mu_{denO_2}^{max}$, μ_{denN}^{max} , μ_{AMO}^{max} , μ_{NIR}^{max}), die Sterberaten der Mikroorganismen (δ_{den} , δ_{nit}) sowie der Erhaltungskoeffizient der Ammoniakoxidierer (m_{AMO}) heraus. Der Einfluss der Parameter änderte sich für die meisten Zustandsgrößen unter den verschiedenen Sauerstoffbedingungen.

Die Varianz der Denitrifizierer wurde unter allen Sauerstoffbedingungen stark von ihrer Sterberate (δ_{den}) geprägt (Abb. 4.6 a, d, g), da die Wachstumsrate durch die Fähigkeit der Denitrifizierer bei Sauerstoffmangel zu einem alternativen Elektronenakzeptor zu wechseln, gerade auch im Vergleich zu den Wachstumsraten bei den Nitrifizierern, etwas an Bedeutung verlor. Der Einfluss der Sterberate nahm über die Zeit noch zu. So lange Sauerstoff nicht zu stark limitierend war, hatte auch die Wachstumsrate der Denitrifizierer auf Sauerstoff ($\mu_{denO_2}^{max}$) einen deutlichen Einfluss. Dieser Effekt blieb jedoch auf die ersten 300 Stunden beschränkt, da er mit der Zeit stark abnahm. Unter strikt anaeroben Bedingungen wirkte sich an Stelle der Wachstumsrate auf Sauerstoff die Wachstumsrate auf Nitrat, Nitrit und Distickstoffmonoxid (μ_{denN}^{max}) deutlich auf die Varianz aus. Genau wie die Rate auf Sauerstoff verringerte sich ihr Einfluss über die Zeit.

Auch die Varianz der Ammoniakoxidierer wurde unter allen drei Sauerstoffbedingungen stark von ihrer Sterberate (δ_{nit}) beeinflusst (Abb. 4.6 b, e, h). Ihre Wachstumsrate (μ_{AMO}^{max}) hatte unter aeroben Bedingungen einen deutlichen Effekt. Allerdings nahm dieser Einfluss, so wie auch bei den Denitrifizierern, über die Zeit schnell ab. Der Erhaltungskoeffizient der Ammoniakoxidierer auf Ammonium (m_{AMO}) zeigte zu Beginn der Simulationszeit einen geringen Einfluss. Der anfängliche Anteil der Ammoniakoxidierer an der Gesamtbiomasse (F_{AMO}) gewann unter anaeroben Bedingungen an Bedeutung, die über die Zeit schnell wieder abnahm.

Wie schon bei den beiden anderen mikrobiellen Gruppen, wurde auch die Varianz der Nitritoxidierer unter allen Sauerstoffbedingungen stark von der Sterberate (δ_{nit}) geprägt (Abb. 4.6 c, f, i). Außerdem war auch ihr anfänglicher Anteil an der Gesamtbiomasse

(F_{NIR}) von über die Zeit abnehmender Bedeutung. Dieser Einfluss gewann an Bedeutung, je weniger Sauerstoff vorhanden war. Unter aeroben und transienten Bedingungen beeinflusste auch die Wachstumsrate der Denitrifizierer auf Sauerstoff ($\mu_{denO_2}^{max}$) kurzfristig die Varianz der Nitritoxidierer, ebenso in geringem Maße die Wachstumsrate der Ammoniakoxidierer (μ_{AMO}^{max}) und die Wachstumsrate der Nitritoxidierer (μ_{NIR}^{max}) selbst. Unter anaeroben Bedingungen gab es diesen Einfluss jedoch nicht.

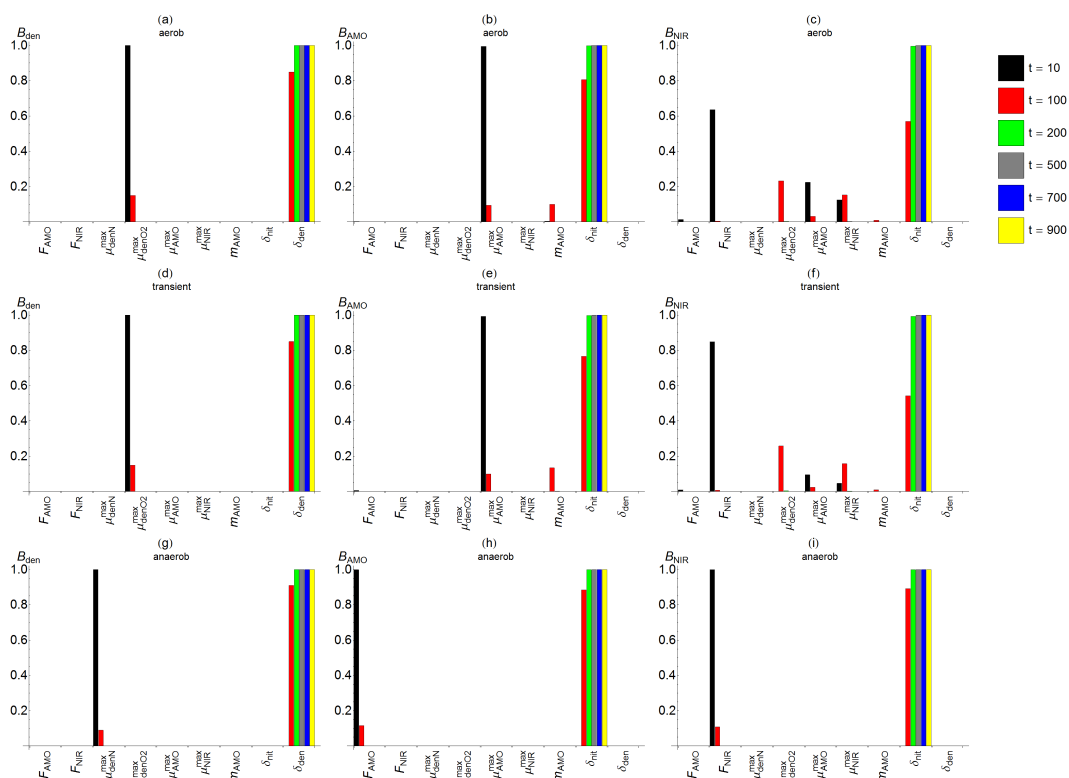


Abbildung 4.6.: Beitrag zur Varianz der Denitrifizierer (a, d, g), Ammoniakoxidierer (b, e, h) und Nitritoxidierer (c, f, i) unter aeroben (oben), transienten (mitte) und anaeroben (unten) Bedingungen.

Für die Ammoniumkonzentration zeigte sich in der Sensitivitätsanalyse, dass ihre Varianz unter aeroben und transienten Bedingungen verstärkt von der maximalen Wachstumsrate der Ammoniakoxidierer (μ_{AMO}^{max}) abhing. Unter anaeroben Bedingungen dagegen gewannen der anfängliche Anteil der Ammoniakoxidierer an der Gesamtbioasse (F_{AMO}), der Erhaltungskoeffizient der Ammoniakoxidierer (m_{AMO}) und die Sterberate der Nitrifizierer (δ_{nit}) an Einfluss (Abb. 4.7 a, c, e).

Die Varianz der Nitritkonzentration wurde unter aeroben und transienten Bedingungen von den Wachstumsraten der Denitrifizierer auf Sauerstoff ($\mu_{denO_2}^{max}$) und der Nitritoxidierer (μ_{NIR}^{max}) beeinflusst. Bei geringem Sauerstoffgehalt wuchs die Bedeutung der Wachstumsrate der Nitritoxidierer gegenüber der der Denitrifizierer an. Unter strikt

anaeroben Bedingungen war an erster Stelle die Wachstumsrate der Denitrifizierer auf Nitrat, Nitrit und Distickstoffmonoxid (μ_{denN}^{max}) relevant (Abb. 4.7 b, d, f).

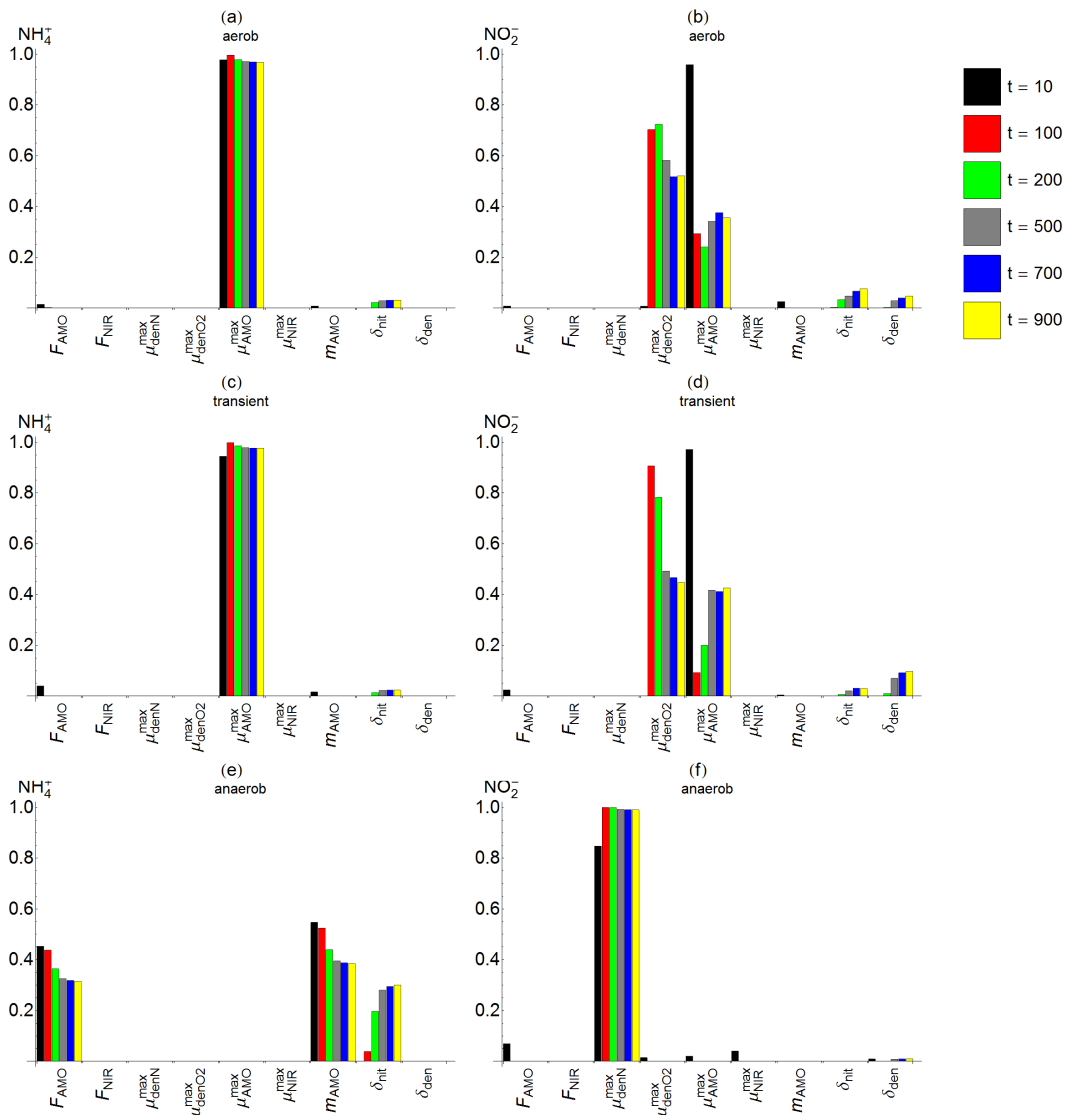


Abbildung 4.7.: Beitrag zur Varianz der Ammonium- (a, c, e) und Nitrit- (b, d, f) Konzentration unter aeroben (oben), transienten (mitte) und anaeroben (unten) Bedingungen.

Die Varianz der Nitratkonzentration wurde unter aeroben und transienten Bedingungen maßgeblich von der Wachstumsrate der Denitrifizierer auf Sauerstoff ($\mu_{denO_2}^{max}$) und unter anaeroben Bedingungen von der Wachstumsrate auf Stickstoff (μ_{denN}^{max}) beeinflusst. Unter allen drei Sauerstoffbedingungen spielte außerdem die Sterberate der Denitrifizierer (δ_{den}) eine geringe Rolle (Abb. 4.8 a, c, e). Für die Distickstoffmonoxidkonzentration fielen die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse ähnlich aus wie für die Nitratkonzentration. Die Wachstumsrate der Denitrifizierer auf Sauerstoff ($\mu_{denO_2}^{max}$) unter aeroben und

transienten Bedingungen und die Wachstumsrate auf Nitrat, Nitrit und Distickstoffmonoxid (μ_{denN}^{max}) unter anaeroben Bedingungen bestimmten die Varianz. Ebenso hatte die Sterberate der Denitrifizierer (δ_{den}) einen geringen Einfluss. Zusätzlich jedoch hatten auch die Wachstumsrate (μ_{AMO}^{max}) und der anfängliche Anteil (F_{AMO}) der Ammoniakoxidierer einen sehr kurzfristigen Einfluss auf die Distickstoffmonoxidkonzentration unter aeroben und transienten Bedingungen (Abb. 4.8 b, d, f).

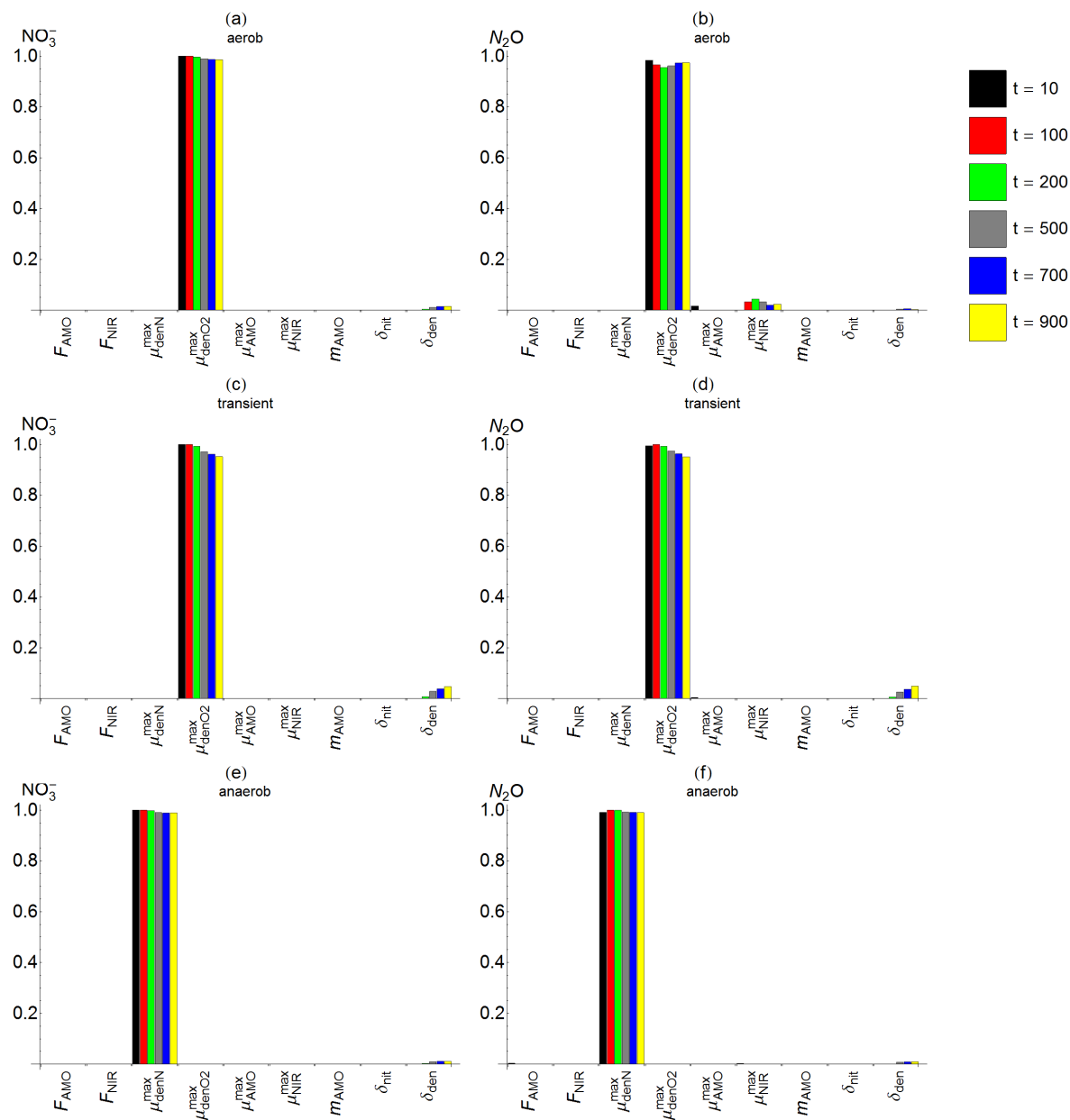


Abbildung 4.8.: Beitrag zur Varianz der Nitrat- (a ,c ,e) und Distickstoffmonoxid- (b, d, f) Konzentration unter aeroben (oben), transienten (mitte) und anaeroben (unten) Bedingungen.

4.2.2. Diskussion

Die Sensitivitätsanalyse wurde für die drei unterschiedlichen Sauerstoffszenarien durchgeführt, um die jeweils einflussreichsten Modellparameter zu identifizieren. Durch die Sensitivitätsanalyse konnte die Anzahl der wichtigen Modellparameter weiter reduziert werden.

Am einflussreichsten waren die mikrobiellen Wachstums- und Sterberaten. Die anfänglichen Anteile der mikrobiellen Gruppen an der Gesamtbiomasse beeinflussten die Modelldynamik naturgemäß ebenfalls. Diese Parameter können relativ leicht in einfachen Experimenten bestimmt werden, wohingegen Parameter wie die Halb-Sättigungskonstanten, Hemmungskonstanten und Erhaltungskoeffizienten, die nur mit hohem experimentellen Aufwand bestimmt werden können, einen geringeren Einfluss zu haben scheinen und so in einem ersten Ansatz vernachlässigt werden können.

Allerdings hat die Literaturrecherche zur Modellparametrisierung gezeigt, dass auch für die Wachstums- und Sterberaten sehr unterschiedliche Werte gefunden werden. Außerdem sind Wachstumsraten für Denitrifizierer, die zwischen Sauerstoff und Stickstoffverbindungen als Elektronenakzeptor unterscheiden, schwer zu finden.

Somit kann die Liste von 31 Parametern unterteilt werden in eine Gruppe, die für die Parametrisierung des Modells notwendig und in eine Gruppe, die für die Modelldynamik wichtig ist, sowie in eine Gruppe von Parametern, die nur begrenzten Einfluss haben, so dass ihr genauer Wert nicht von großer Bedeutung ist. Der Sauerstoffgehalt im Bodenwasser wurde nicht explizit als Parameter in der Sensitivitätsanalyse mit einbezogen, aber seine signifikanten Auswirkungen auf den Einfluss der Wachstumsraten sind offensichtlich. Unter aeroben Bedingungen waren die Wachstumsraten der aeroben Mikroorganismen von Bedeutung, während unter anaeroben Bedingungen die Wachstumsraten der anaeroben Mikroorganismen einen größeren Einfluss hatten. Wurde der Sauerstoffgehalt sehr niedrig (transiente Bedingungen), wurde der Umschwung zwischen den aeroben und den anaeroben Raten sichtbar. Zusammengefasst hatten die Sterberaten der Nitrifizierer und Denitrifizierer einen deutlichen Einfluss auf die meisten Zustandsgrößen unter allen Sauerstoffbedingungen. Die Wachstumsraten der umwandelnden Mikroorganismen waren für die Varianz der Stickstoffverbindungen von stärkerer Bedeutung als die Umwandlungsgeschwindigkeiten der Nitrifikations- und Denitrifikationsschritte. Die Sensitivitätsanalyse wurde für 1000 Stunden durchgeführt. Die Experimente liefen jedoch nur über einen Zeitraum von 144 Stunden. Deswegen können die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse nicht übertragen werden. Für einen kürzeren Beobachtungszeitraum sind weniger die mikrobiellen Wachstums- und Sterberaten und stattdessen die Umsatzgeschwindigkeiten der Stickstoffverbindungen von Bedeutung. Die vorhergegangenen Simulationen zeigen jedoch, dass ein Simulationszeitraum

von mindestens 1000 Stunden notwendig ist, um die vollständige Nitrifikations- Denitrifikationsdynamik abbilden zu können. Bei der Sensitivitätsanalyse ist eine zeitliche Dynamik des relativen Einflusses der Parameter auf die Varianz der Zustandsgrößen sichtbar. Für Nitrat und Distickstoffdioxid gibt es diese Dynamik kaum. Die Varianz beider Verbindungen wird unter aeroben Bedingungen von der Wachstumsrate der Denitrifizierer mit Sauerstoff und unter anaeroben Bedingungen von der Wachstumsrate mit den Stickstoffverbindungen beeinflusst. Unter aeroben Bedingungen existiert zwar ein Einfluss der Denitrifizierer, er beschränkt sich jedoch auf den Verbrauch von Nitrat und Distickstoffmonoxid als Stickstoffquelle. Unter anaeroben Bedingungen besteht der Einfluss der Denitrifizierer und damit ihrer Wachstumsrate neben dem Verbrauch als Stickstoffquelle noch in der Umwandlung während der Denitrifikation.

Für Ammonium besteht eine zeitliche Dynamik nur unter anaeroben Bedingungen. Der Einfluss der anfänglichen Abundanz der Ammoniakoxidierer sowie ihres Erhaltungskoeffizienten geht unter anaeroben Bedingungen über die sechs Zeitpunkte zurück, während der Einfluss der Sterberate steigt. Dieses Verhalten ist auf den Rückgang der ammoniakoxidierenden Biomasse unter anaeroben Bedingungen zurückzuführen. Da die Mikroorganismen bei Sauerstoffmangel nicht wachsen, sondern aussterben, wird der Einfluss ihrer anfänglichen Abundanz niedriger, während ihre Sterberate an Bedeutung gewinnt. Für Nitrit ist unter aeroben und transienten Bedingungen der Einfluss der Parameter dynamisch über die Zeit. Der Einfluss der Wachstumsrate der Denitrifizierer mit Sauerstoff ist zunächst gering, wächst dann sprunghaft an, um dann wieder langsam zurückzugehen. Da bei vorhandenem Sauerstoff kaum denitrifiziert wird, ist dieser Einfluss auf den Verbrauch von Nitrit für den Zellerhalt zurückzuführen. Die Wachstumsrate der Ammoniakoxidierer dagegen ist anfänglich sehr hoch, geht dann aber wieder zurück und steigt dann wieder leicht an. Der kurzfristige starke Rückgang liegt an dem zusätzlichen Einfluss der Wachstumsrate der Denitrifizierer, der ab dem zweiten Beobachtungspunkt auftritt. Da in der Analyse der relative Einfluss betrachtet wird, geht mit der erst verzögert einsetzenden Bedeutung der Wachstumsrate der Denitrifizierer automatisch der relative Beitrag der Wachstumsrate der Ammoniakoxidierer auf die Varianz von Nitrit zurück.

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse sollten sich so lange als robust erweisen, wie die Dynamik der Stickstoffverbindungen und der mikrobiellen Biomasse erhalten bleibt. Gegebenenfalls müssten lediglich die Beobachtungszeitpunkte angepasst werden, um die gleichen Ergebnisse erkennen zu können.

Im Angesicht des Klimawandels ist auch der Einfluss der Temperatur interessant. Durch eine erhöhte Temperatur ist ein schnellerer Verlauf der gesamten Stickstoff- und mikrobiellen Dynamik zu erwarten. Passt man die Beobachtungszeitpunkte der Analyse jedoch entsprechend an, so sollte die Sensitivitätsanalyse die gleichen Ergebnisse liefern.

Das bedeutet, dass steigende Temperaturen zu einer schnelleren Dynamik der Sensitivitätsanalyse und damit zu schnelleren Änderungen in der Bedeutung der einzelnen Modellparameter auf die Modelldynamik führt.

4.3. Parameteroptimierung

4.3.1. Ergebnisse

Durch eine Parameteroptimierung der vier Umsatzgeschwindigkeiten und einem zusätzlichen Parameter für die Mineralisierungsrate wurde versucht, die Ergebnisse aus den Experimenten an das Modell anzupassen.

Für die Ansätze A und B (50% des WHK_{max}) wurden die Umsatzgeschwindigkeiten der Nitrifikation und für die Ansätze C und D (80% des WHK_{max}) die Umsatzgeschwindigkeiten der Denitrifikation optimiert, da die Nitrifikation unter anaeroben und die Denitrifikation umgekehrt unter aeroben Bedingungen nur geringe Bedeutung hat.

Tabellen 4.1 zeigt die Ergebnisse der händischen Parameteroptimierung. In den beiden untersten Zeilen der Tabelle stehen die berechneten Fehler.

Tabelle 4.1.: Per Hand optimierte Parameterwerte für die Standorte AEG 02, AEG 15 und AEG 30 in den Ansätze A, B, C und D mit relativem Fehler (F_{rel}), Summe der gewichteten Fehlerquadrate (F_{wSSR}), quadriertem relativen Fehler (F_{srel}) und Fehlerfaktor (F_{FF}). Markiert sind in dunkelgrau die geringsten und in hellgrau die höchsten Fehlerwerte einer Fehlerdefinition für alle Standorte.

	AEG 02				AEG 15	
	A	B	C	D	A	B
v_{denNO3}^{max}			0,0008	0,0002		
v_{denNO2}^{max}			0,15	0,0015		
v_{nitNH4}^{max}	0,001	0,003			0,002	0,0008
v_{nitNO2}^{max}	0,002	0,003			0,02	0,0015
min	0,001	0,003	0,0002	0,0002	0	0,0005
F_{rel}	4,4180	6,0143	1,5730	10,2446	27,5943	19,4527
F_{wSSR}	0,4561	0,3591	0,1363	0,1873	0,9899	0,3945
F_{srel}	4,6772	5,0868	1,2691	48,5062	475,707	118,404
F_{FF}	78,0292	21,5025	1,5758	9,2946	74,3997	36,7516
	AEG 30					
	A	B	C	D		
v_{denNO3}^{max}			0,0012	0,0014		
v_{denNO2}^{max}			0,0015	0,0025		
v_{nitNH4}^{max}	0,0003	0,0005				
v_{nitNO2}^{max}	0,0004	0,0001				
min	0,0001	0,0003	0,0001	0,0001		
F_{rel}	5,8966	5,6379	11,0010	9,6144		
F_{wSSR}	0,6709	0,5462	0,4000	0,6288		
F_{srel}	7,2739	5,5591	37,7450	16,9625		
F_{FF}	107,312	32,8786	3172,67	24527,3		

Die durch die Optimierung erzielten Parameterwerte bewegten sich in einem realistischen Bereich (vgl. Tabelle 3.4). Für fast alle Standorte und Ansätze, mit Ausnahme von AEG 02 Ansatz B und AEG 30 Ansatz B, fällt die Umsatzgeschwindigkeit von Nitrit zu Nitrat größer als die Rate von Ammonium zu Nitrit. Dies entspricht ebenfalls aktuellen Kenntnissen, da die Ammoniumoxidation den geschwindigkeitsbestimmenden Schritt im Nitrifikationsprozess darstellt.

Alle vier gewählten Fehlerdefinitionen ergaben für Standort AEG 02 Ansatz C die besten Ergebnisse (Abb. 4.9). Dies resultierte jedoch aus den lückenhaften Daten. Für Ammonium waren die Daten vollständig, für Nitrat lagen jedoch nur zwei und für Nitrit keine Datenpunkte vor.

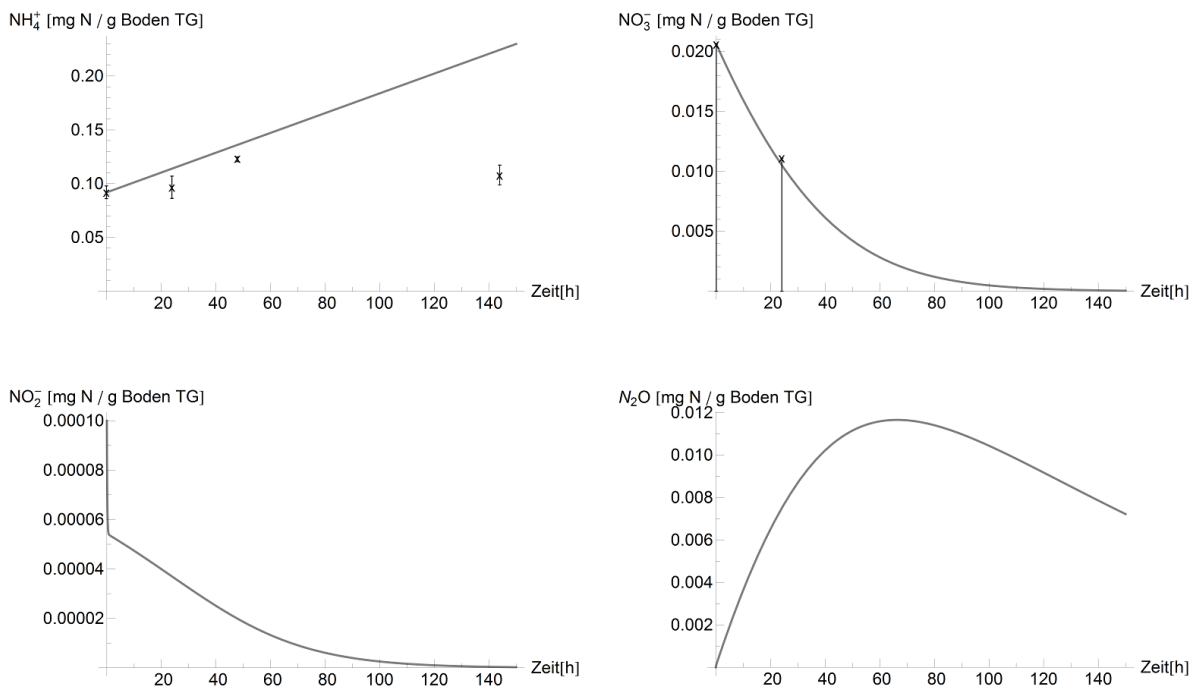


Abbildung 4.9.: Verlauf von Ammonium-, Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit per Hand optimierten Parameterwerten und den experimentellen Daten (x) mit den jeweiligen Maximal- und Minimalwerten für Standort AEG 02 Ansatz C.

Ansatz B, ebenfalls von Standort AEG 02 (Abb. 4.10), lag bei drei der vier Fehler unter den besten drei Ergebnissen (Ausnahme beim relativen Fehler (Gl. 3.23)).

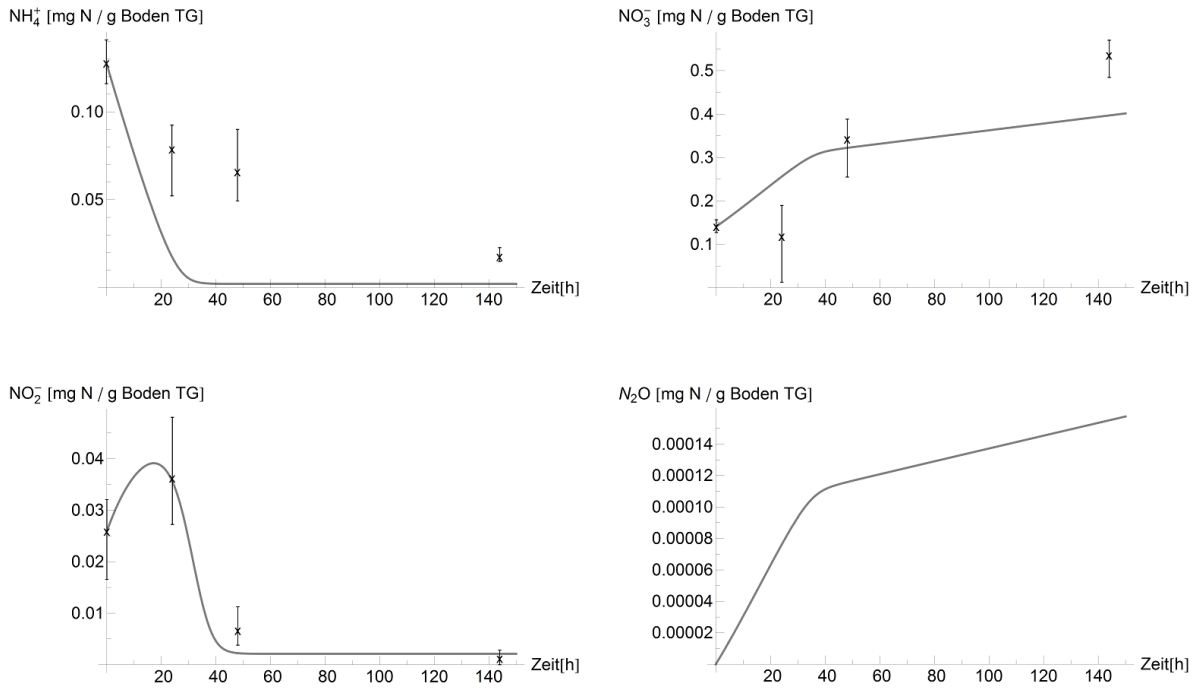


Abbildung 4.10.: Verlauf von Ammonium-, Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit per Hand optimierten Parameterwerten und den experimentellen Daten (x) mit den jeweiligen Maximal- und Minimalwerten für Standort AEG 02 Ansatz B.

Am schlechtesten schnitt dagegen bei drei der vier Fehler Standort AEG 15 mit Ansatz A ab (Abb. 4.11). Eine Ausnahme bildet hier der Fehlerfaktor (Gl. 3.24). Bei diesem zeigten die Ansätze C und D des Standorts AEG 30 deutliche Abweichungen (Abb. 4.12). Für beide Ansätze waren die Fehler sehr groß. Dies ist vermutlich auf das im Methodenteil erwähnte Problem der großen relativen Fehler bei kleinen absoluten Abweichungen zurückzuführen.

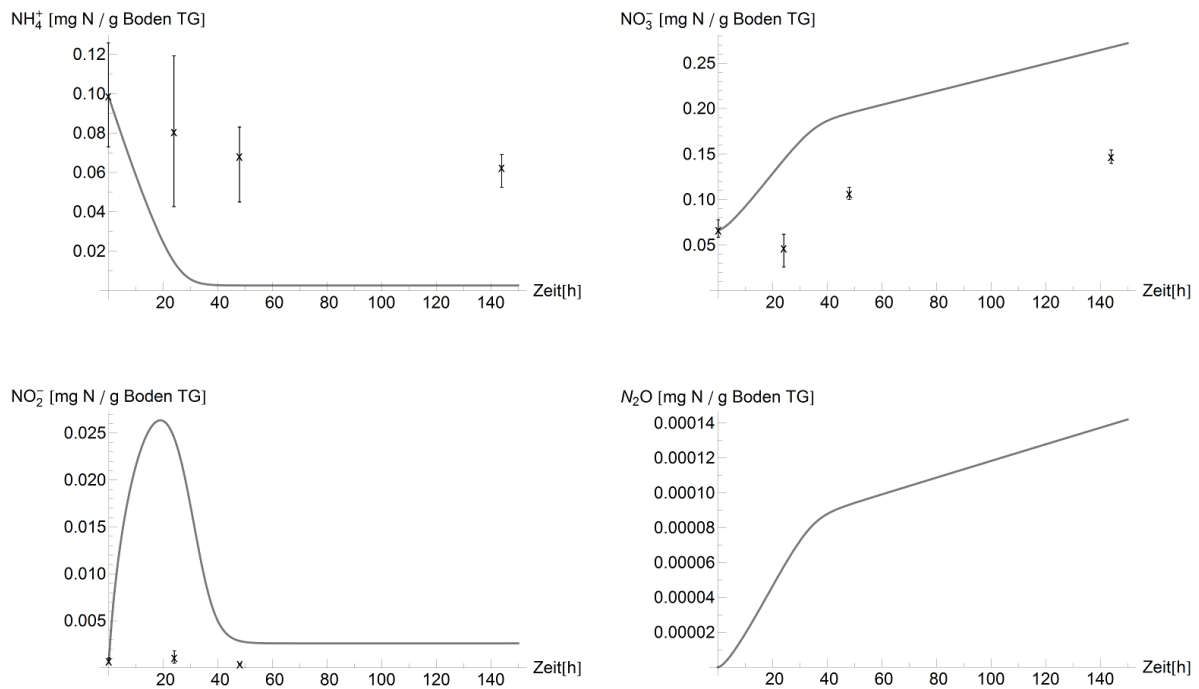


Abbildung 4.11.: Verlauf von Ammonium-, Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit per Hand optimierten Parameterwerten und den experimentellen Daten (x) mit den jeweiligen Maximal- und Minimalwerten für Standort AEG 15 Ansatz A.

Zwar wurde hier mit einer Schranke gerechnet, jedoch darf diese nicht zu hoch gewählt werden, um das Ergebnisse nicht zu verzerren. Da die Nitrat- und Nitritkonzentrationen deutliche Größenunterschiede aufwiesen, ist die Wahl einer gemeinsamen Schranke schwierig. In diesem Fall lag das Problem vermutlich bei der Nitratkonzentration, die für die letzten beiden Zeitpunkte vom Modell mit fast null berechnet wurde, während die gemessenen Werte im Intervall $[0; 0,06]$ bzw. $[0; 0,1]$ lagen.

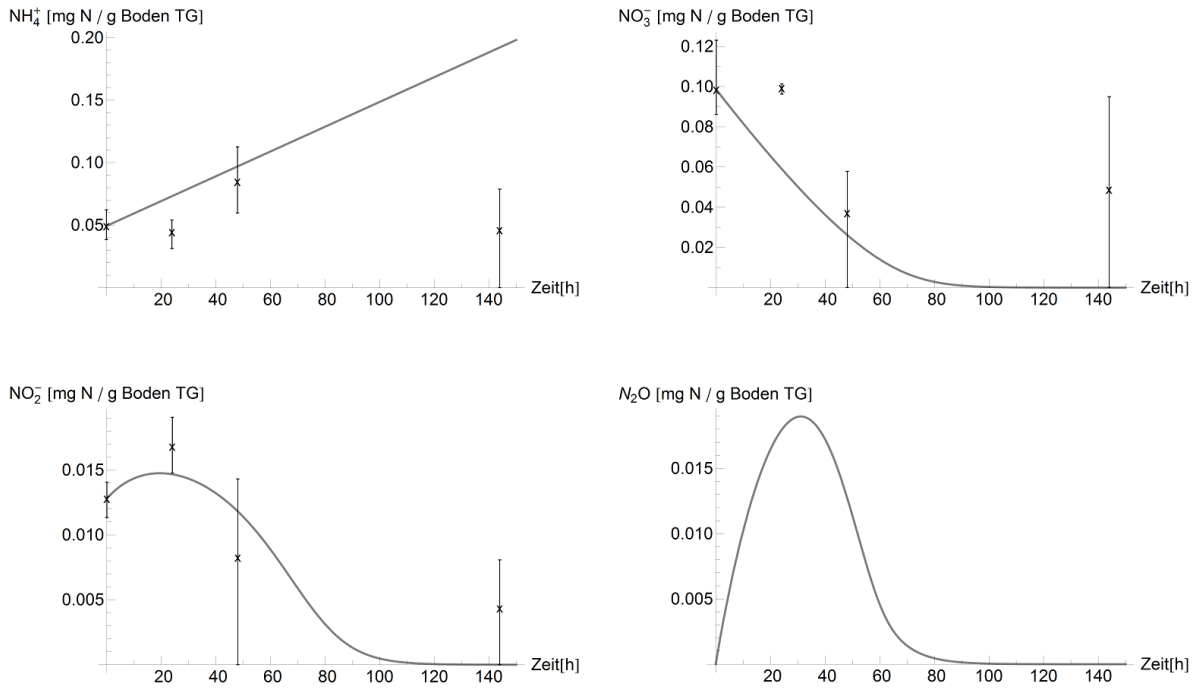


Abbildung 4.12.: Verlauf von Ammonium-, Nitrat-, Nitrit- und Distickstoffmonoxidkonzentrationen mit per Hand optimierten Parameterwerten und den experimentellen Daten (x) mit den jeweiligen Maximal- und Minimalwerten für Standort AEG 30 Ansatz D.

Die Abbildungen für Standort AEG 02 Ansätze A und D, Standort AEG 15 Ansatz B und Standort AEG 30 Ansätze A, B und C befinden sich im Anhang.

4.3.2. Diskussion

Die im Zuge des Projekts durchgeführten Experimente sollten der Parametrisierung des Modells dienen. Jedoch gab es massive Probleme, die dieses Unterfangen erschweren. Obwohl rechnerisch $78 \mu g NH_4^+ - N$ pro Gramm Boden Trockengewicht auf die Proben gegeben wurden (mit Ausnahme der Kontrollen), lag die experimentell ermittelte Differenz zwischen den Ammoniumkonzentrationen in den Kontrollen und in den Replikaten beim ersten Messpunkt, also kurz nach der Zugabe, lediglich bei 20 bis 26 $\mu g/g$ für 80% WHK_{max} und bei 29 bis 56 $\mu g/g$ bei 50% WHK_{max} (Tab. 4.2). Bei einer Zugabe von 78 $\mu g/g$ auf die Replikate sollte die Differenz aber etwa 78 $\mu g/g$ betragen. Von der Ammoniumzugabe bis zur tatsächlichen ersten Messung verging etwa eine Stunde. In der Zeit wurde zwar wahrscheinlich schon Ammonium umgewandelt, um die gemessene Differenz zwischen Kontrollen und Replikaten zu erreichen, müsste die Umwandlungsrate von Ammonium in den Replikaten aber deutlich höher sein als in den Kontrollen. Eine solch hohe Rate ist jedoch in den Daten für die nachfolgenden Mess-

zeitpunkte nicht zu erkennen. Die Ammoniumkonzentration müsste bei einer solchen Rate innerhalb weniger Stunden fast vollständig reduziert sein. Dies könnte durch einen ammoniumproduzierenden Prozess wie die Mineralisierung nicht ausgeglichen werden.

Tabelle 4.2.: NH_4^+ -Konzentrationen [$\mu g NH_4^+ - N/g$ Boden TG] in Kontrolle und Replikaten bei t_0 für 50% und 80% des WHK_{max} und ihre Differenz.

	Kontrolle		Replikate		Differenz	
	50%	80%	50%	80%	50%	80%
	WHK_{max}	WHK_{max}	WHK_{max}	WHK_{max}	WHK_{max}	WHK_{max}
AEG 02	110	64	153	90	43	26
AEG 15	43	47	99	67	56	20
AEG 30	35	26	64	50	29	24

Daher ist fraglich, ob die resultierende Dynamik in den Experimenten aus der Ammoniumzugabe entstanden ist. Dies würde den fehlenden Unterschied in der Dynamik von Replikaten und Kontrollen (Abbildungen zur Dynamik in den Kontrollen befinden sich im Anhang) zu allen Messzeitpunkten erklären. Damit wäre jedoch die eigentlich gewünschte Auslösung der Transformationsprozesse durch die Ammoniumzugabe ausgeblieben und die gemessene Dynamik würde in Folge dessen auch keine Reaktion auf die Zugabe darstellen. Der Unterschied in den Konzentrationen der verschiedenen Standorte kann durch unterschiedliche Ammoniumkonzentrationen im Boden selbst erklärt werden. Der Unterschied zwischen den Konzentrationen der beiden Wassergehalte eines Standorts ist jedoch nicht erklärbar.

Unklarheiten gibt es auch beim Verlauf der Ammoniumkonzentration. Für 50% des WHK_{max} ist die Abnahme weniger als erwartet (für AEG 30 kam es sogar zu einer leichten Zunahme), für 80% des WHK_{max} gibt es sogar eine Zunahme. Eine mögliche Erklärung besteht in der Mineralisierung. Dies ist jedoch ein eigentlich relativ langsam verlaufender Prozess, der verstärkt unter aeroben Bedingungen abläuft. Die Zunahme unter anaeroben Bedingungen könnte eventuell durch Nitritammonifikation stammen. Diese tritt in deutschen Grünlandböden jedoch nicht auf und ist eher in Reisfeldern anzusiedeln. Die experimentellen Bedingungen (lange Lagerung und Sieben des Bodens vor Beginn der Experimente) könnten jedoch zu dem Auftreten dieses Prozesses geführt haben.

Die Parameteroptimierung gestaltete sich schwierig, da vier Messzeitpunkte über 144 Stunden nicht ausreichen, um eine zufriedenstellende Optimierung zu erhalten. Da auch die Abweichungen innerhalb der Replikate recht hoch waren, kann ich nicht sicher davon ausgehen, dass für einige Substratkonzentrationen überhaupt eine Dynamik existierte oder ob der abgebildete Verlauf einer Messreihe lediglich natürlich Schwankungen wiedergibt. Der bereits oben erwähnte Umstand, dass eventuell zu wenig Ammonium zuge-

geben wurde, um eine veränderte Dynamik auszulösen, könnte hier eine Rolle spielen. Eine weitere Möglichkeit, die Diskrepanz zwischen Experimenten und Modellergebnissen zu erklären, ist die im Modell fehlende Verzögerung zwischen Ammoniumzugabe und sichtbarer Reaktion in der Dynamik der Stickstoffverbindungen. Allerdings lässt sich in den Daten eine solche Verzögerung nicht klar erkennen.

Bei der Optimierung hat sich gezeigt, dass sich der Modellverlauf von Nitrat und Nitrit und Ammonium durch Variation der Umsatzgeschwindigkeiten relativ gut an die Datenwerte angleichen lässt. Dies ist jedoch nur in einem begrenzten Rahmen möglich, da alle drei Konzentrationen durch Umwandlungsprozesse miteinander verbunden sind. Der konstante Eintrag durch die Mineralisierungsrate kann den Verlauf der modellierten Ammoniumkonzentration nur bedingt den Daten anpassen. Eine konstante Mineralisierungsrate ist nicht unbedingt die geeignete Wahl. Um ein besseres Ergebnis zu erzielen, muss der Mineralisierungsprozess genauer betrachtet und vermutlich explizit modelliert werden. Viele der optimierten Parameterwerte haben Größenordnungen, die mit Literaturwerten vergleichbar und daher plausibel sind. Außerdem sind die Verhältnisse der Umsatzgeschwindigkeiten der Nitrifikation zueinander in den meisten Fällen ebenfalls realistisch.

Da ich aus den Daten keinen sicheren Rückschluss auf die Dynamik ziehen kann, gestaltete sich die Interpretation der Ergebnisse der Parameteroptimierung schwierig. Für eine bessere Parametrisierung mittels einer Parameteroptimierung sind neue Experimente mit mehr Replikaten und mehr Messzeitpunkten nötig. Daher griff ich bei allen weiteren Simulationen auf die Parameterwerte aus der Literatur, die ich bereits im ersten Teil der Arbeit verwendet habe, zurück.

4.4. Zeitreihen

4.4.1. Ergebnisse

4.4.1.1. Sauerstoff

Die berechneten Sauerstoffzeitreihen aus den Biodiversitätsexploratorien bewegten sich mit Werten zwischen 90 und 100% im aeroben Bereich. Daher war zu erwarten, dass die Nitrifikation eine verstärkte Rolle spielen und Denitrifikation nur im begrenzten Rahmen auftreten würde. Da es zwischen HEG 03 und HEG 29 kaum Unterschiede gab, beschränke ich mich hier auf die Darstellung der Simulationen für HEG 03.

Die modellierten Ammoniumkonzentration nahmen durch Nitrifikation schnell ab. Nach etwa 60 Tagen waren nur noch sehr geringe Konzentrationen vorhanden. Auch die Nitratkonzentration ging rasch zurück. Da die Bedingungen aerob waren, ist dies auf die Aufnahme von Nitrat als Stickstoffquelle durch die Denitrifizierer zu erklären. Die Nitritkonzentrationen zeigten einen Zuwachs mit einem lokalen Maximum nach etwa 45 Tagen und anschließender Abnahme. Distickstoffmonoxid wurde aufgrund der aeroben Bedingungen kaum produziert (Abb. 4.13 a). Die Abundanz der Denitrifizierer stieg zunächst deutlich an, bis sie nach etwa 50 Tagen ein Maximum erreichten, anschließend nahm sie wieder ab. Ähnlich verhielt es sich mit den Ammoniakoxidierern auf einem deutlich niedrigeren Level. Die Nitritoxidierer blieben bei konstant geringer Abundanz (Abb. 4.13 b).

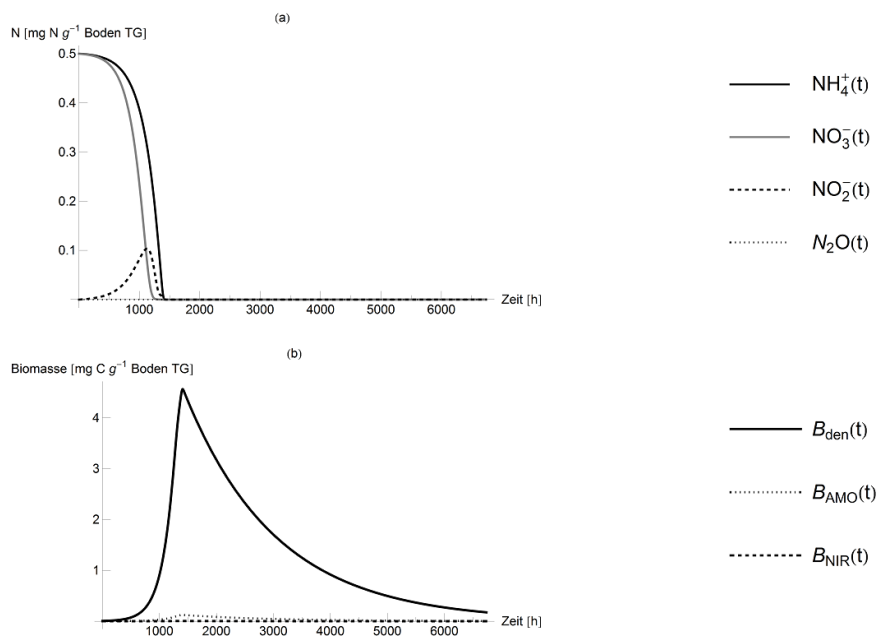


Abbildung 4.13.: Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse über einen Zeitraum von 6700 Stunden für den Sauerstoffgehalt von HEG 03.

4.4.1.2. Sauerstoff und Bodenwassergehalt

Wurde neben der Zeitreihe für Sauerstoff auch der Einfluss der Bodenfeuchte auf die mikrobielle Aktivität mit einbezogen, zeigte sich für die Stickstoffverbindungen ein ganz ähnliches Bild wie bei der Betrachtung ohne den Einfluss des Bodenwassergehalts. Für beide Standorte war die Dynamik von Stickstoffverbindungen und mikrobieller Biomasse vergleichbar, daher stelle ich wieder nur die Ergebnisse für HEG 03 vor (Abb. 4.14). Der Bereich, in dem die Werte der Bodenfeuchte für beide Standorte lagen, befand sich zwischen knapp 30 und 50% des volumetrischen Wassergehalts. Da der optimale Bereich für die Mikroorganismen bei etwa 60% beginnt, bedeutet dies, dass die Wachstumsraten durch die vorliegenden Werte für die Bodenfeuchte reduziert und die Umwandlungsprozesse verlangsamt wurden.

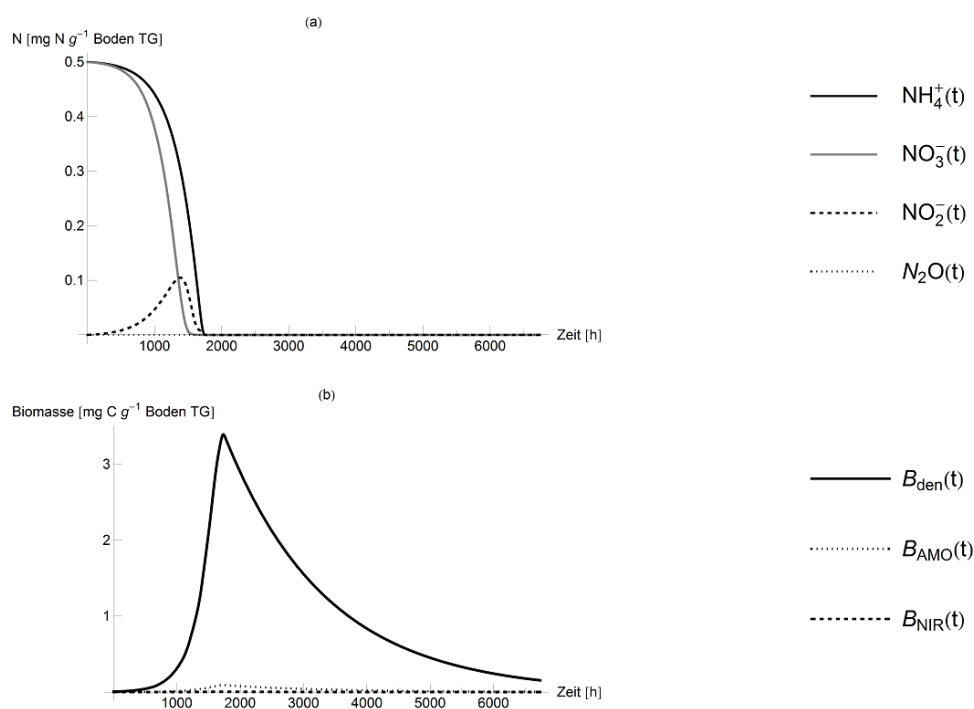


Abbildung 4.14.: Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse für Sauerstoffgehalt und Bodenfeuchte von HEG 03.

4.4.1.3. Sauerstoff und Temperatur

Durch den zusätzlichen Einfluss der Bodentemperatur kam es zu einem erkennbaren Unterschied in der Dynamik von Stickstoffverbindungen und mikrobieller Biomasse. Die Temperaturen zeigten einen deutlichen Jahresgang. Die Werte bewegten sich dabei zwischen knapp über null und etwas über 25°C. Die Temperaturkurve startete im September und ging bis Juli, so dass in der Mitte der Grafik (Abb. 4.15) die Reaktionen

auf die niedrigeren Temperaturen im Winter zu erkennen sind, die das Wachstum der Mikroorganismen verlangsamen. Da die Temperaturkurve für beide Standorte gleich verlief, wurden für die Simulation beider Standorte die Werte aus HEG 03 verwendet. Dadurch ergaben sich zwischen den beiden Standorten keine sichtbaren Unterschiede in der Simulationsdynamik. Daher verzichte ich an dieser Stelle wieder auf die Darstellung für HEG 29.

Die Nitratkonzentration nahm innerhalb der Simulationszeit von etwa 6700 Stunden (knapp 300 Tage) ab. Die Abnahme erfolgte dabei zunächst relativ zügig, um sich dann im Winter zu verlangsamen und bei steigenden Temperaturen wieder zu beschleunigen. Der Verlauf der Ammoniumkonzentration folgte einer ähnlichen Dynamik. Die Nitritkonzentration stieg im Verlauf allmählich an, um kurz vor Ende der Simulationszeit rasch wieder zu sinken.

Die Abundanz der Denitrifizierer stieg innerhalb der ersten 60 Tage an und sank danach wieder. Gegen Ende der Simulationszeit stieg ihre Abundanz jedoch als Reaktion auf den Temperaturanstieg wieder deutlich an. Für die Ammoniakoxidierer folgte die Dynamik einem ganz ähnlichen Verlauf auf einem deutlich niedrigeren Level. Die Abundanz der Nitritoxidierer blieb die gesamte Simulationszeit über auf einem konstant geringen Level.

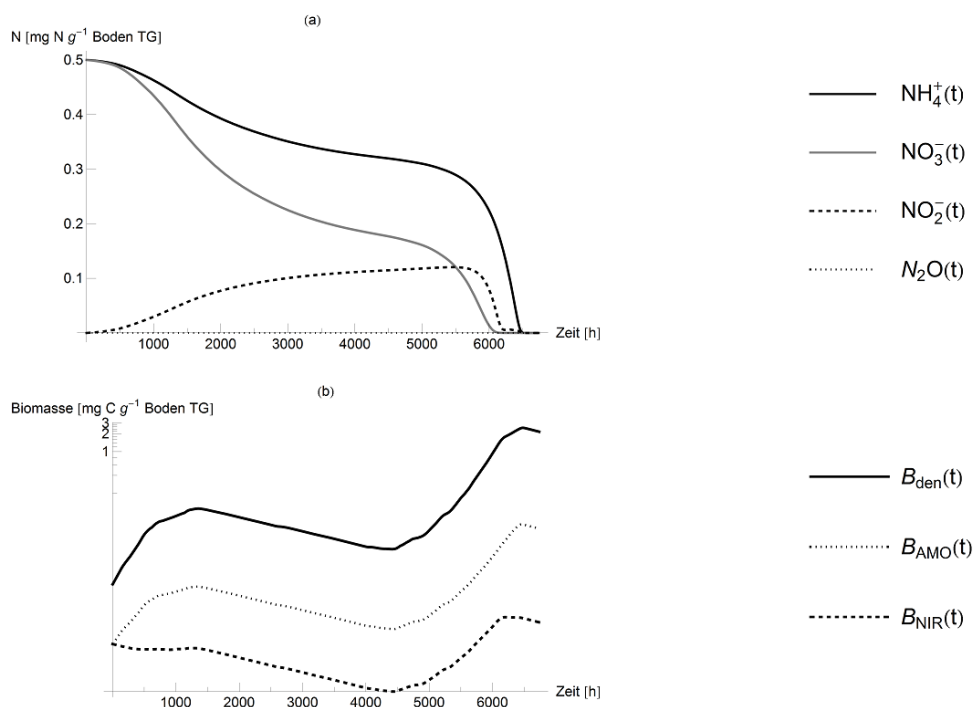


Abbildung 4.15.: Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse in logarithmischer Darstellung über einen Zeitraum von 6700 Stunden für Sauerstoffgehalt und Bodentemperatur von HEG 03.

4.4.1.4. Düngung

Für die Simulationen mit zweimaliger Düngung für den Standort HEG 03 und einmaliger Düngung und 14-tägiger Beweidung für HEG 29 nahm ich die erste Düngung fünf Tage nach Beginn der Simulationszeit an, gefolgt vom zweiten Eintrag durch die zweite Düngung bzw. die Beweidung etwa zwei Monate später. Die Auswirkungen untersuchte ich wieder für drei verschiedene Sauerstoffbedingungen: aerobe, transiente und anaerobe Bedingungen. Aerobe Bedingungen führten zu deutlichem Wachstum und einem deutlichen Anstieg der Abundanz von Denitrifizierern und Ammoniakoxidierern (Abb. 4.16). Unter anaeroben Bedingungen verringerten sich die Abundanzen aller mikrobiellen Gruppen. Die Abundanz der Denitrifizierer verringerte sich unter aeroben Bedingungen zunächst etwas, bis die erste Düngung erfolgte. Diese führte zu einem deutlichen Anstieg für etwa 80 Tage. Anschließend ging die Abundanz wieder langsam zurück. Am Ende der Simulationszeit lag die Abundanz etwas unterhalb des Ausgangswerts, jedoch mit weiter fallender Tendenz. Die zweite Düngung war nicht deutlich in den Ergebnissen erkennbar, da sie in einen Bereich der Dynamik fiel, in dem die Abundanz stark anstieg. Unter transienten Bedingungen verringerte sich die Abundanz ebenfalls kurzfristig bis zur ersten Düngung. Genau wie unter aeroben Bedingungen stieg die Abundanz anschließend deutlich an. Das Maximum wurde jedoch etwas später und mit geringerer Abundanz erreicht.

Die Abundanz der Ammoniakoxidierer fiel unter allen Sauerstoffbedingungen, unter anaeroben Bedingungen jedoch am schnellsten.

Die Abundanz der Nitritoxidierer nahm für alle Sauerstoffbedingungen ab. Dies geschah, da die Nitritkonzentrationen zu gering waren, als dass die Wachstumsrate der Nitritoxidierer größer gewesen wäre als ihre Sterberate. Bei der vorliegenden Parametrisierung und einem Sauerstoffgehalt von 100% müsste die Nitritkonzentration größer als 0,007 mg N/g Boden TG sein, damit die Nitritoxidierer ein positives Wachstum zeigen könnten.

Im Verlauf der Ammoniumkonzentration waren deutlich die beiden Einträge durch die Düngung zu erkennen (Abb. 4.17). Für anaerobe Bedingungen stieg die Konzentration nach der Düngung durch den zusätzlichen konstanten Ammoniumeintrag leicht weiter, transiente Bedingungen führten ebenfalls zu einem Anstieg zwischen den Düngungen, jedoch war dieser Anstieg deutlich geringer. Unter aeroben Bedingungen nahm die Konzentration nach der ersten Düngung zunächst leicht ab, nach der zweiten Düngung stiegen die Konzentrationen wieder leicht an.

Auch in der Nitratdynamik waren Reaktionen auf die Düngung zu erkennen. Kurzfristig sank die Konzentration, um als Reaktion auf die erste Düngung nach oben zu springen und anschließend wieder zu sinken. Bei der zweiten Düngung war wieder ein deutlicher

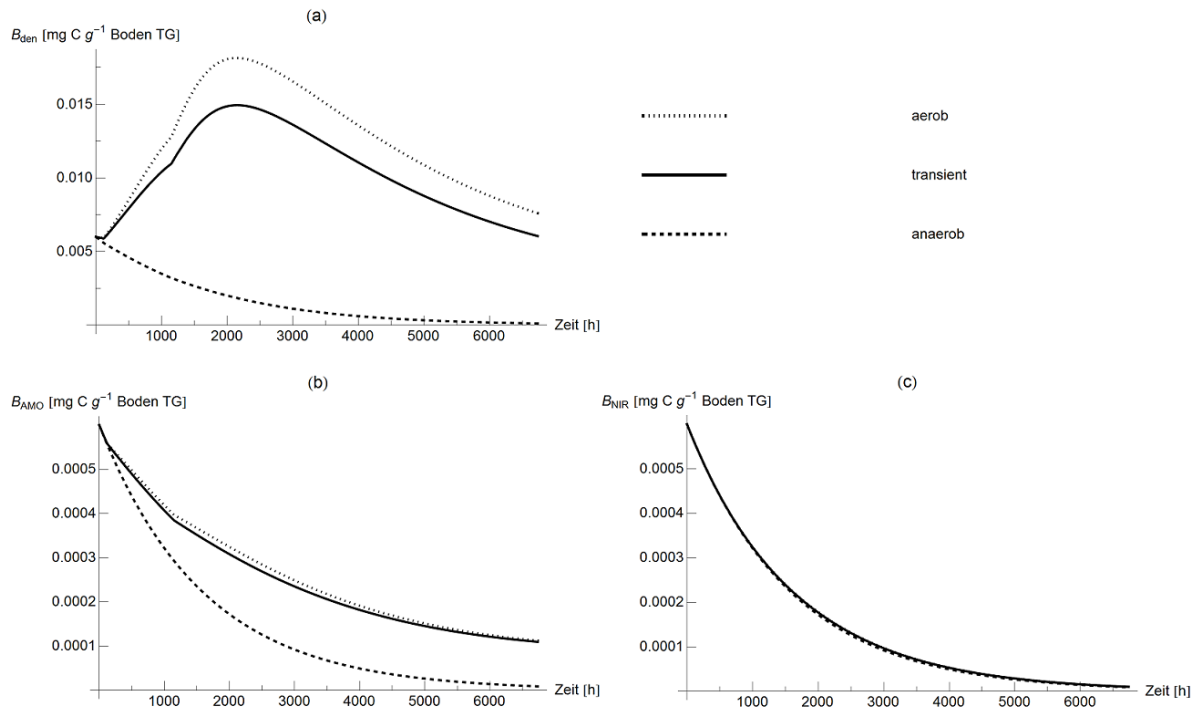


Abbildung 4.16.: Simulierte Biomasse: (a) Denitrifizierer, (b) Ammoniakoxidierer und (c) Nitritoxidierer unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen für einen Simulationszeitraum von 6700 Stunden mit zweimaliger Düngung von HEG 03.

Sprung in der Konzentration nach oben zu erkennen, der wieder von einer Abnahme gefolgt wurde. Unter anaeroben Bedingungen war die Abnahme jeweils deutlich stärker und schneller als unter transienten Bedingungen.

Unter anaeroben Bedingungen war in der Nitritdynamik der Nitratintrag durch die Düngung erkennbar. Auf die Düngung folgte ein Konzentrationsanstieg, gefolgt von einer Abnahme. Durch den zweiten Eintrag erfolgte ein erneuter Anstieg, wieder gefolgt von einer Abnahme. Unter aeroben und transienten Bedingungen war ebenfalls ein jedoch etwas langsamerer Anstieg der Nitritkonzentration zu beobachten. Die zweite Düngung war durch einen leichten Knick in der Kurve zu erkennen. Ein Maximum wurde nach etwa 75 Tagen erreicht. Anschließend sank die Konzentration wieder leicht, um nach etwa 150 Tagen wieder leicht zu steigen. Unter aeroben Bedingungen war der Konzentrationsverlauf generell etwas niedriger als unter transienten Bedingungen.

Die Distickstoffmonoxidkonzentrationen zeigten unten anaeroben Bedingungen eine deutliche Reaktion auf die Düngung. Diese bestand in einem Anstieg der Konzentration, gefolgt von einer leichten Abnahme und einer weiteren geringen Zunahme als Reaktion auf die zweite Düngung. Anschließend sank die Konzentration langsam. Unter transienten Bedingungen war eine deutlich geringere Zunahme zu erkennen, die auf einen

konstanten Wert nach etwa 130 Tagen hinauslief. Unter aeroben Bedingungen wurde kaum Distickstoffmonoxid produziert.

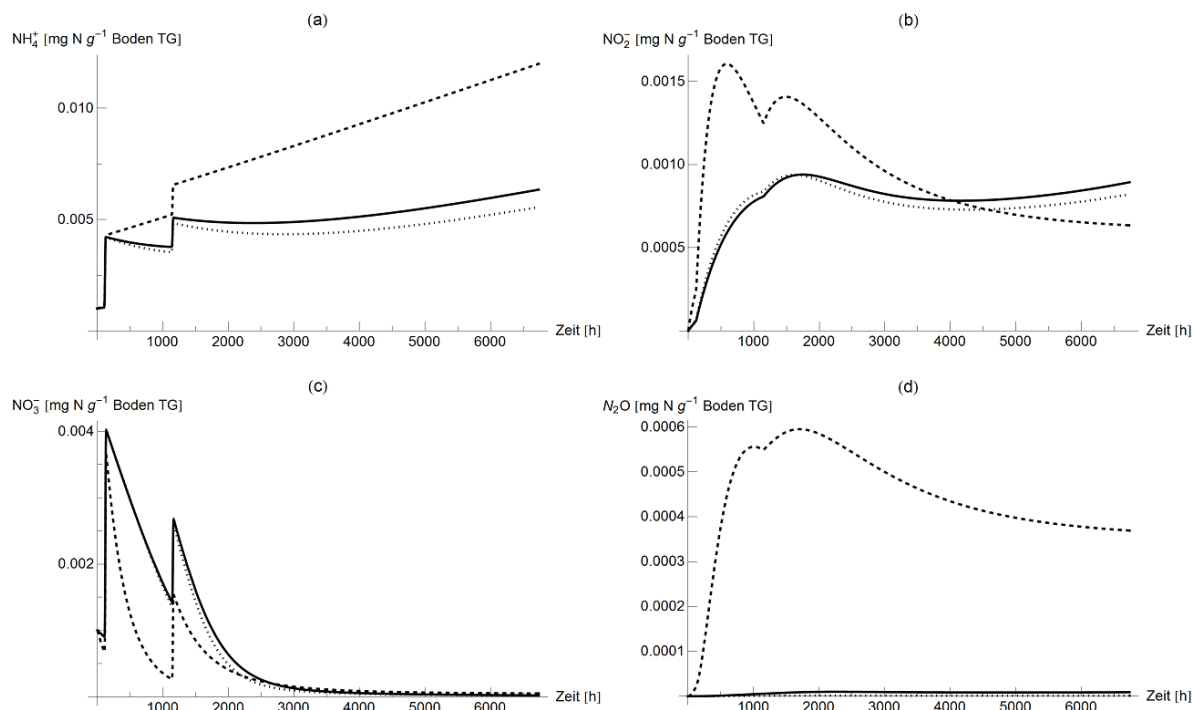


Abbildung 4.17.: Simulierte Stickstoffverbindungen: (a) Ammonium, (b) Nitrit, (c) Nitrat und (d) Distickstoffmonoxid unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen für einen Simulationszeitraum von 6700 Stunden mit zweimaliger Düngung von HEG 03. Legende wie in Abb. 4.16.

Für den zweiten Standort, HEG 29, ließen sich sichtbare Unterschiede zu HEG 03 feststellen (Abb. 4.18).

Für die Denitrifizierer war die Reaktion auf die erste Düngung gleich. Der Eintrag durch die 14-tägige Beweidung bewirkte jedoch einen längerfristigen und stärkeren Anstieg. Unter transienten Bedingungen war zum Ende der Simulationszeit noch kein Rückgang der Abundanz erkennbar. Unter aeroben Bedingungen zeigte sich ein solcher Rückgang nach etwa 200 Tagen. Unter anaeroben Bedingungen nahm die Abundanz der Denitrifizierer auch an diesem Standort kontinuierlich ab.

Wie auch bei Standort HEG 03 nahm die Abundanz der Ammoniakoxidierer bis zur zweiten Düngung ab. Je niedriger der Sauerstoffgehalt, desto stärker. Durch den Ammoniumeintrag durch die Beweidung verlangsamte sich der Rückgang unter transienten Bedingungen deutlich. Unter aeroben Bedingungen kam es zu einem Anstieg, nach etwa 130 Tagen ging die Abundanz aber auch hier wieder zurück. Anaerobe Bedingungen führten ebenfalls zu einem kontinuierlichen Rückgang.

Die Abundanz der Nitritoxidierer ging wiederum kontinuierlich zurück, da die Nitrit-

konzentration zu gering war, um die Sterberate durch ihr Wachstum auszugleichen.

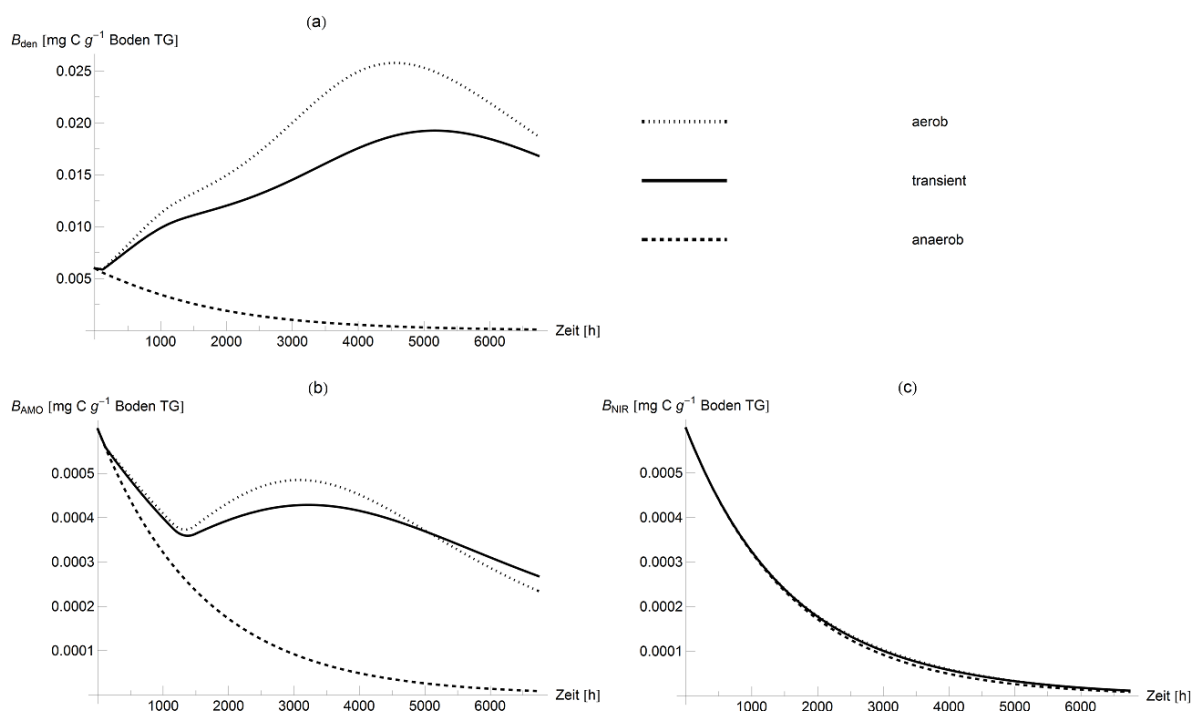


Abbildung 4.18.: Simulierte Biomasse: (a) Denitrifizierer, (b) Ammoniakoxidierer und (c) Nitritoxidierer unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen für einen Simulationszeitraum von 6700 Stunden mit einmaliger Düngung und kurzzeitigem Viehbesatz von HEG 29.

Der Konzentrationsverlauf von Ammonium für HEG 29 bis zur zweiten Düngung bzw. bis zum Eintrag durch Beweidung glich dem von HEG 03 (Abb. 4.19). Durch die Beweidung erfolgte für 14 Tage ein kontinuierlicher Anstieg. Anschließend stiegen die Konzentrationen für anaerobe Bedingungen weiter, während sie unter transienten Bedingungen leicht sanken und sich für aerobe Bedingungen deutlich verringerten.

Düngung und Beweidung unter anaeroben Bedingungen führten für die Nitritkonzentration zu einem Anstieg für etwa 30 Tage und einem anschließenden Rückgang. Unter aeroben und transienten Bedingungen stiegen die Nitritkonzentrationen an, als Reaktion auf die Beweidung verstärkte sich der Anstieg noch etwas. Unter aeroben Bedingungen wurde nach etwa 130 Tagen das Maximum erreicht, bei geringem Sauerstoffgehalt etwas später.

Der Konzentrationsverlauf von Nitrat glich dem aus HEG 03, jedoch fehlte die zweite Spitze durch die zweite Düngung, da durch die Beweidung lediglich Ammonium eingetragen wurde.

Auch der Verlauf der Distickstoffmonoxidkonzentration glich dem aus HEG 03, jedoch war unter anaeroben Bedingungen kein zweites Maximum zu erkennen und die Abnah-

me erfolgte schneller.

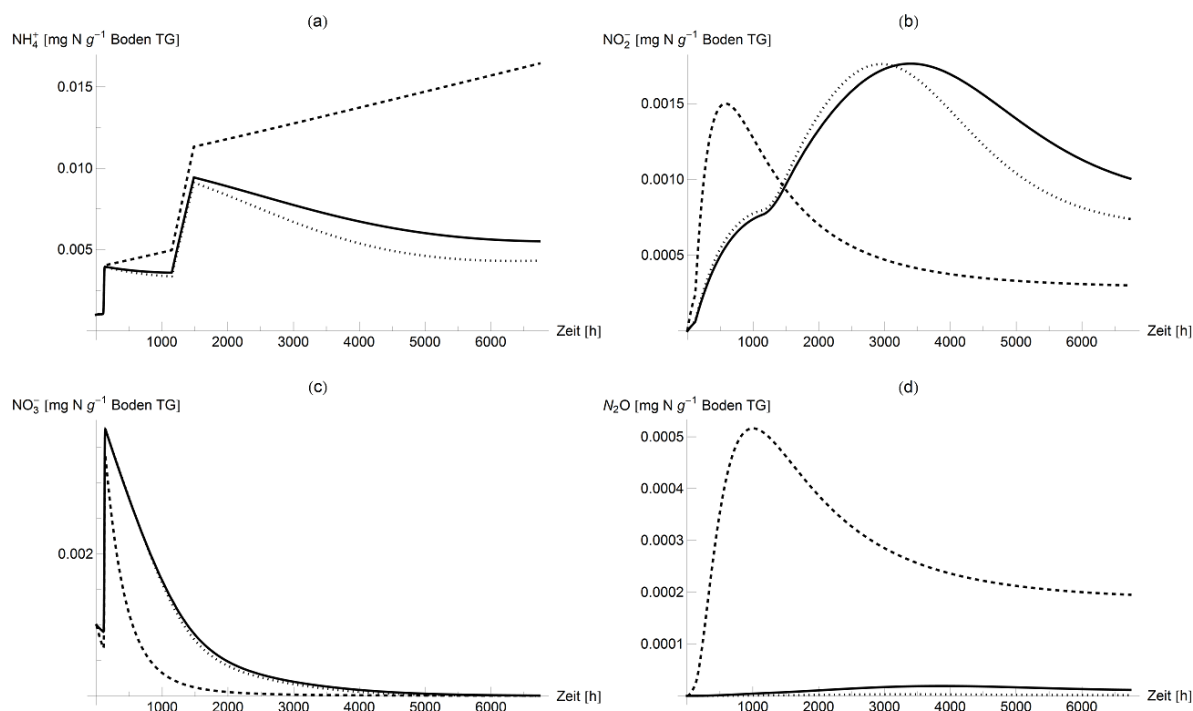


Abbildung 4.19.: Simulierte Stickstoffverbindungen: (a) Ammonium, (b) Nitrit, (c) Nitrat und (d) Distickstoffmonoxid unter aeroben, transienten und anaeroben Bedingungen für einen Simulationszeitraum von 6700 Stunden mit einmaliger Düngung und kurzzeitigem Viehbesatz von HEG 29. Legende wie in Abb. 4.18.

4.4.1.5. Sauerstoff, Bodenfeuchte, Temperatur und Düngung

Im letzten Schritt kombinierte ich die Zeitreihe für den Sauerstoffgehalt, den Einfluss von Bodenfeuchte und Bodentemperatur und den Eintrag durch Düngung und Beweidung. Gleichzeitig behielt ich den konstanten Ammoniuminput bei. Da die Düngung im Frühjahr und Sommer (4. April und 26. Juni) erfolgte und die Zeitreihen für Bodenfeuchte (und damit Sauerstoffgehalt) und Bodentemperatur leider keinen längeren Zeitraum hergaben, reichte die Simulation lediglich vom 1. Januar bis zum 5. Juli. Die resultierende simulierte Dynamik der beiden Standorte glich sich besonders für die Abundanzen der mikrobiellen Biomassen.

Zwischen dem Start der Simulation und der ersten Düngung stieg die Ammoniumkonzentration in HEG 03 leicht an (Abb. 4.20). Durch die Düngung im April war ein deutlicher Sprung zu verzeichnen, auf den wieder ein leichter Anstieg folgte. Die zweite Düngung erzeugte wieder einen deutlichen Konzentrationsprung, in deren Folge der Ammoniumgehalt wieder weiter zunahm.

Die Nitratkonzentration sank nach Simulationsbeginn etwas. Durch die erste Düngung kam es zu einer ersten, durch die zweite Düngung zu einer zweiten Konzentrationsspitze. Zwischen den Spitzen nahm die Konzentration jeweils wieder ab.

Die Nitritkonzentration zeigte eine leichte Zunahme. Nach der ersten Düngung war eine erneute leichte Zunahme erkennbar. Die zweite Düngung erzeugte eine weitere leichte Zunahme, die aufgrund der Darstellung in der Abbildung jedoch nicht zu erkennen ist. Durch den aeroben Charakter des Standortes wurde kaum Distickstoffmonoxid produziert.

Die simulierten Abundanzen aller mikrobiellen Gruppen nahmen über die Zeit ab.

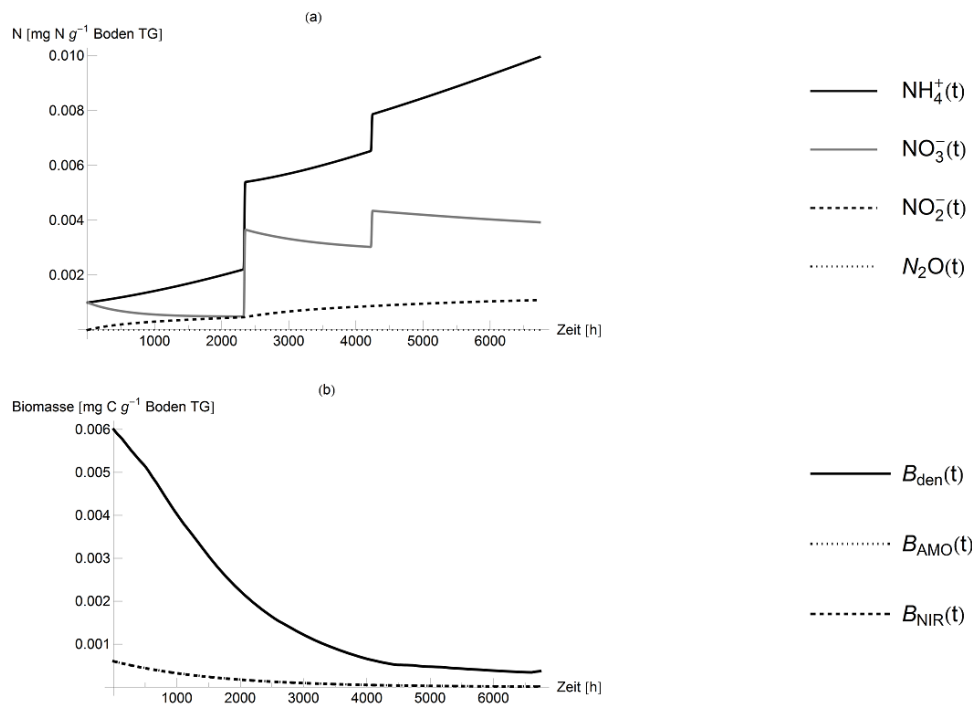


Abbildung 4.20.: Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse über einen Zeitraum von 6700 Stunden für Sauerstoffgehalt, Bodenfeuchte und Bodentemperatur von HEG 03.

Der Konzentrationsverlauf von Ammonium in HEG 29 war dem aus HEG 03 ähnlich. Der Konzentrationsanstieg durch die Beweidung fiel jedoch deutlich höher aus. Für die Nitratkonzentration glich die Dynamik ebenfalls der aus HEG 03. Allerdings kam es zu keiner zweiten Konzentrationsspitze, da keine zweite Düngung erfolgte. Die Nitritdynamik ist aufgrund der Skalierung in der Abbildung nicht zu erkennen. Die Konzentration stieg jedoch leicht an, sank bis zur ersten Düngung ein klein wenig und stieg als Reaktion auf die Düngung wieder. Die Beweidung führte zu einem weiteren Anstieg der Nitritkonzentration. Die Distickstoffmonoxidkonzentrationen waren aufgrund des aeroben Charakters wiederum kaum vorhanden.

Die Abundanzen aller mikrobiellen Gruppen nahmen auch in HEG 29 über die Zeit ab.

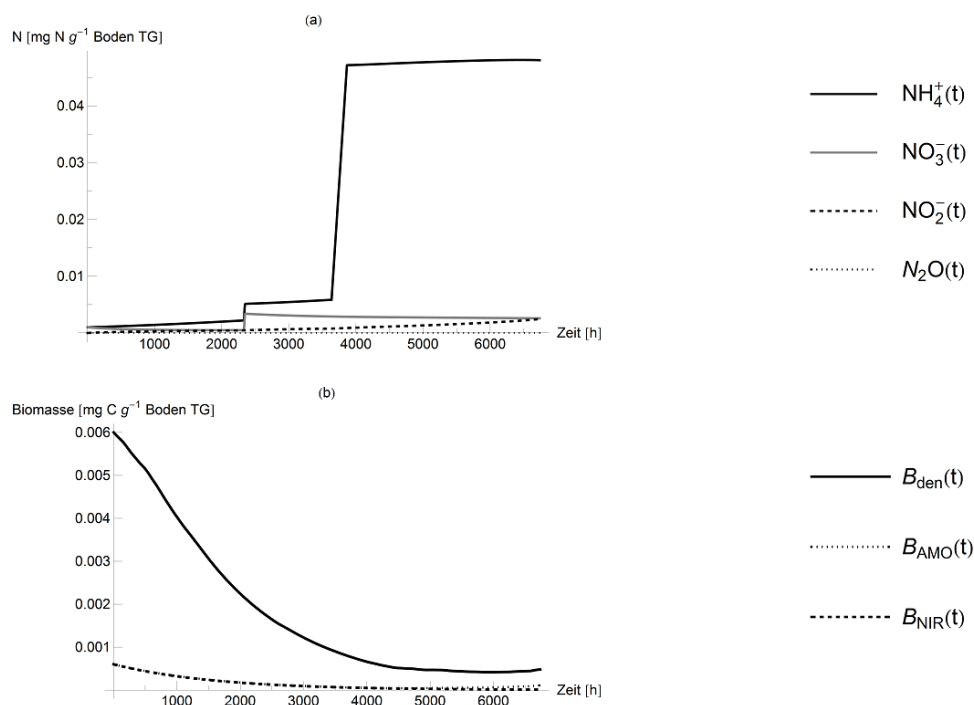


Abbildung 4.21.: Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse über einen Zeitraum von 6700 Stunden für Sauerstoffgehalt, Bodenfeuchte und Bodentemperatur von HEG 29.

4.4.2. Diskussion

Durch die Verwendung der Zeitreihen für Sauerstoff konnten die Auswirkungen von fluktuierendem Sauerstoff untersucht werden. Der natürliche Sauerstoffgehalt im Boden ist nicht konstant, sondern verändert sich stetig. Dadurch werden auch die Umsatzgeschwindigkeiten der Nitrifikations- und Denitrifikationsprozessen sowie die Wachstumsraten der Mikroorganismen verändert. Da ich den Sauerstoffgehalt des Porenwassers aus dem Bodenwassergehalt berechnet habe und dieser ebenfalls Auswirkungen auf die Aktivität der Mikroorganismen hat, konnte ich diese Zeitreihe nutzen, um die Simulation weiter der Realität anzupassen. Das Gleiche galt bei der Verwendung der Zeitreihe für die Bodentemperatur, die für einen Simulationszeitraum von mehr als einem halben Jahr von Bedeutung war. Die Daten zur Düngung und Beweidung machten es möglich, die zusätzlichen Ammonium- und Nitrateinträge mit den Zeitreihen zu verbinden und so die realistischen Auswirkungen dieser vier Faktoren auf den Nitrifikations-Denitrifikationsprozess zu erkennen.

Die Sauerstoffzeitreihen der beiden Standorte HEG 02 und HEG 29 enthielten Werte

zwischen etwa 90 und 100% des maximalen gelösten Sauerstoffgehalts. Diese Werte liegen im aeroben Bereich, weswegen die Denitrifikation gehemmt und die Nitrifikation gefördert wurde.

In deutschen Grünlandböden herrschen meist aerobe Bedingungen vor, so dass die Denitrifikation kaum eine Rolle spielen dürfte, wenn der gesamte Boden homogen durchmischt wäre. Dies ist jedoch nicht der Fall. In kleinen Bereichen, sogenannten Mikrohabitaten, herrschen anaerobe Bedingungen. In diesen Mikrohabitaten wird dann denitrifiziert. Zwischen den aeroben und anaeroben Bereichen findet ein Stoffaustausch statt. Zwischen den beiden Bereichen befindet sich außerdem eine Übergangszone. Ammonium, Nitrat und Nitrit tauschen sich zwischen diesen Zonen aus. Ein nächster möglicher Schritt für das vorgestellte Modell wäre es, diese Diffusionsprozesse zu integrieren und das Modell für die unterschiedlichen Sauerstoffgehalte laufen zu lassen und die Ergebnisse zu verknüpfen.

Die Aufnahme des Sauerstoffs durch die Bodenmikroorganismen war in meiner Arbeit von großer Bedeutung, da die Sauerstoffverfügbarkeit maßgeblich das Auftreten der beiden Prozesse Nitrifikation und Denitrifikation lenkt.

Der Bodenwassergehalt in der Zeitreihe aus HEG 02 und HEG 29 lagen zwischen 25 und 50%. Damit wurden für die Mikroorganismen keine optimalen Werte erreicht. Dadurch kam es zu einer leichten Verlangsamung der Nitrifikationsprozesse und die Wachstumsrate der Mikroorganismen fiel etwas niedriger aus, als ohne diesen Einfluss. An der Dynamik veränderte sich im Vergleich zu der Simulation mit nur der Sauerstoffzeitreihe nichts.

Anders war dies bei der Bodentemperaturzeitreihe. Die Werte lagen zwischen etwa 2 und 22°C. Eine Temperatur von 2°C liegt deutlich unterhalb des optimalen Bereiches für die Mikroorganismen, so dass deren Wachstum sichtbar verlangsamt wurde. 22°C dagegen liegen nahe am Optimum. Daher kam es im Jahresverlauf zu deutlichen Schwankungen in der Wachstumsrate der Mikroorganismen, was Auswirkungen auf die Transformationsprozesse der Stickstoffverbindungen hatte. Im Winter kamen die Prozesse beinahe zum Erliegen, während sie im Sommer verstärkt abliefen. Die Daten für die Bodentemperatur wiesen einige Auffälligkeiten auf. Die Temperaturen reichten von über +10 bis unter -100°C. Realistische Werte liegen in Deutschland zwischen -5 und +25°C [5]. Daher habe ich die Werte außerhalb dieser Grenzen abgeschnitten.

Dennoch ist möglich, dass die verwendeten Temperaturwerte gegen Ende der Datenreihe höher waren, als die tatsächlich im Boden vorherrschenden Werte. Die starke Reaktion der Mikroorganismen auf die warmen Temperaturen würde entsprechend schwächer ausfallen, wenn die wahren Temperaturen niedriger lägen. Das Wachstum würde an dieser Stelle geringer ausfallen und der Stickstoffumsatz würde langsamer ablaufen. Gleichzeitig ist es durch die Beschränkung auf das Intervall [-5; 25] möglich, dass ich

Werte entfernt habe, die tatsächlich den realen Werten entsprachen, und der Boden in der Realität im Maximum etwas wärmer und im Minimum etwas kälter war, als ich in den Simulationen angenommen habe.

Die Düngung von Grünlandflächen stellte für die Mikroorganismen einen kurzfristigen Eintrag von Ammonium und Nitrat dar. Die Konzentrationen wurden je nach Sauerstoffgehalt zügig abgebaut. Die Biomasse reagierte auf diese Einträge etwas verzögert und nicht so stark wie die verschiedenen Stickstoffkonzentrationen. Die Auswirkungen waren in der Dynamik der mikrobiellen Biomasse besonders unter anaeroben Bedingungen kaum feststellbar. Das könnte daran liegen, dass der Rückgang der Abundanz zu stark war, um durch die kurzfristig vergrößerten Substratkonzentrationen verringert zu werden. Für HEG 29 war durch den längerfristigen zusätzlichen Eintrag durch die Beweidung unter aeroben und transienten Bedingungen eine deutlichere Reaktion zu erkennen. Ein geringerer, aber dafür langfristigerer Eintrag hatte stärkere Auswirkungen als ein kurzfristiger Eintrag höherer Konzentration.

Die Verbindung der drei Zeitreihen zusammen mit der Düngung ergab das zu erwartende Bild. Die Düngung bzw. Beweidung der Flächen hatte den größten Einfluss auf die Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik. Da die Sauerstoffbedingungen aeroben Bedingungen entsprachen und keine Schwankungen ins Anaerobe stattfanden, lief der Nitrifikationsprozess verstärkt ab, während kaum denitrifiziert wurde, was vor allen Dingen an den geringen Distickstoffmonoxidkonzentrationen zu erkennen war. Der Bodenwasser-gehalt lag zumeist knapp unterhalb des optimalen Bereichs und führte daher auch zu keinen sichtbaren Schwankungen in der Gesamtdynamik. Einzig die Bodentemperatur zeigte erkennbare Auswirkungen. Die Temperaturen zum Zeitpunkt der ersten Düngung waren mit knapp über null Grad noch sehr niedrig, während bei der zweiten Düngung bzw. bei der Beweidung bereits deutlich höhere Temperaturen von etwa 15° C im Boden vorherrschten. Daher müssten die Wachstumsraten der Mikroorganismen als Reaktion auf den zweiten Eintrag größer gewesen sein als auf die erste Düngung. Dies war in der Dynamik der mikrobiellen Abundanzen insofern erkennbar, dass der Rückgang der Abundanzen sich mit der Zeit abschwächte und bei gleichbleibender niedrigerer Temperatur schneller abgelaufen wäre.

Zwischen den Nitritoxidierern und den Denitrifizierern herrschte Konkurrenz um das Substrat Nitrit. Die Nitritoxidierer benötigten Nitrit als Elektronendonator und als Stickstoffquelle. Die Denitrifizierer benutzten es ebenfalls als Stickstoffquelle und unter sauerstoffarmen Bedingungen als Elektronenakzeptor. Die Denitrifizierer waren in ihrer Abundanz den Nitritoxidierern überlegen. Je nach Wahl der Wachstumsraten gehen die Denitrifizierer oder die Nitritoxidierer als Gewinner aus dieser Konkurrenz hervor. In meiner Parametrisierung hatten die Denitrifizierer den Vorteil. Weiterhin waren die Nitritkonzentrationen zu niedrig, als das das Wachstum der Nitritoxidierer stärker gewesen

wäre als die Sterberate, so dass die Nitrifizierer in dieser Parametrisierung aussterben bzw. auf eine sehr niedrige Abundanz fallen. Durch eine Anpassung der Parametrisierung könnte dies geändert werden.

4.5. Modellvergleich

Im Folgenden ziehe ich Vergleiche zwischen verschiedenen Ökosystemmodellen und ihrer Anwendung und meinem Modell.

Blagodatsky et al. [3] überprüfen ihr MiCNit-Modell durch die Anwendung auf den Boden eines Waldgebiets in Deutschland. Über 400 Tage werden $NH_4^+ - N$ - und CO_2 -Konzentrationen, mikrobielle Aktivität und N_2O -Emissionen aus dem Höglwald simuliert und mit Messungen aus dem Jahr 1995 verglichen. Die simulierten Ammoniumkonzentrationen zeigen zu Anfang der Simulationszeit (die ersten 100 Tage) einen deutlichen An- und danach einen raschen Abstieg, die mit der simulierten Aktivität der Nitrifizierer übereinstimmen. Die Ammoniummessungen werden dadurch in der Jahresmitte (Sommer) unterschätzt, was durch die nicht exakte Beschreibung der Ammoniumaufnahme durch Pflanzen erklärt wird. Die Abnahme der Aktivität der Nitrifizierer in der Jahresmitte wird mit einem erhöhten anaeroben Volumen im Boden begründet. Die simulierten N_2O -Emissionen stimmen gut mit den durchgeführten Messungen überein. Sie sind abhängig von dem anaeroben Volumen des Bodens und dem Kohlenstoffgehalt. Ein saisonal bedingter Ammoniumanstieg hat eine Aktivitätssteigerung der Nitrifizierer zur Folge, was durch den höheren Verbrauch wiederum in einer Abnahme der Ammoniumkonzentration resultiert. Die geringeren Ammoniumkonzentrationen ergeben wiederum die verringerte Aktivität der Mikroorganismen. Anschließend hemmt der im Verlauf des Jahres auftretende Sauerstoffmangel die Aktivität der Nitrifizierer und die Nitrifikation, so dass die Ammoniumkonzentration auf relativ konstanter Höhe bleibt.

Dieser Zusammenhang kann teilweise auch durch mein Modell beschrieben werden. Da der Anstieg in der Ammoniumkonzentration und gleichzeitig in der Aktivität der Nitrifizierer von äußeren Faktoren verursacht wird, die in mein Modell nicht einfließen, muss dieser Anstieg von außen herbeigeführt werden. Der Kohlenstoffgehalt in meinem Modell ist keine Zustandsgröße, so dass eine Zeitreihe oder eine Funktion eingesetzt werden muss, die den Konzentrationsverlauf wiedergeben. Auch der Sauerstoffgehalt kann durch Zeitreihen oder eine Funktion wiedergegeben werden. Die resultierende Dynamik entspricht qualitativ derjenigen aus dem MiCNit-Modell. Durch den zusätzlichen Einfluss der Temperatur auf die Mikroorganismen kann auch der Jahresgang wiedergegeben werden. Die Modelle unterscheiden sich jedoch dahingehend, dass Blagodatsky et al. [3] nicht die Abundanzen der Mikroorganismen, sondern ihre Aktivität beschreiben. Die Verwendung der Aktivität hat gegenüber der Benutzung der Abundanzen den Vorteil, dass auch in kritischen Phasen eines Substratmangels oder ungünstiger Umgebungsparameter die Biomasse erhalten bleibt, da die Aktivität zurück geht, die Mikroorganismen selber jedoch lediglich in einen ruhenden Zustand übergehen und nicht aussterben. Ein Nachteil sind weitere notwendige Parameter für die Simulation.

Das MiCNit-Modell ist in der Lage, die N_2O -Emissionen als Resultat der Prozesse in und zwischen mehreren Bodenschichten zu berechnen. Für ein vergleichbares Ergebnis müsste mein Modell in mehreren Schritten mit unterschiedlichen Parametersätzen und Zeitreihen oder Funktionen für Sauerstoff- und Kohlenstoffgehalt ausgeführt und die Ergebnisse zusätzlich verknüpft werden, da kein Austausch zwischen den Schichten gegeben ist. Im Gegensatz zum Modell von Blagodatsky et al. [3] eignet sich mein Modell lediglich zur Simulation von einzelnen Bodenschichten. Im MiCNit-Modell sind neben Nitrifikation und Denitrifikation noch weitere Prozesse des Stickstoffkreislaufs und der Kohlenstoffkreislauf, sowie die Aufnahme von Kohlenstoff und Stickstoff durch Pflanzen und umgekehrt die Dekomposition von Pflanzenrückständen enthalten. Die Dynamik des Kohlenstoffkreislaufs kann in meinem Modell durch eine Zeitreihe oder Funktion ersetzt werden, die weiteren Eintrags- und Austragsprozesse des Stickstoffkreislaufs gehen jedoch nicht ein. Dadurch ist es jedoch möglich die genauen Auswirkungen der beiden zentralen Prozesse Nitrifikation und Denitrifikation auf die Stickstoffkonzentrationen und die Abundanzen der Mikroorganismen im Zusammenhang mit der Sauerstoff- und ggf. Kohlenstoffdynamik zu untersuchen.

Die Einbettung des Stickstoff- und Kohlenstoffumsatzmodells in eine Umwelt wie bei Blagodatsky et al. [3] schafft den Vorteil, dass äußere Parameter, die diese Prozesse beeinflussen und ggf. anstoßen, enthalten sind. Kritisch ist jedoch die Beschaffung der Parameterwerte und Zeitreihen. Das Modell reagiert sensitiv auf Änderungen der Bodeneigenschaften, was auch Auswirkungen auf die Simulationsergebnisse von NO , N_2O und CO_2 -Emissionen hat. Diese Problematik entsteht bei meinem Modell nicht, so dass die Analyse der Simulationsergebnisse und damit der Erkenntnisgewinn in Hinblick auf die Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik erleichtert werden.

Das Modell Expert-N von Stenger et al. [56] wird in einer Arbeit von Kaharabata et al. [33] verwendet, um N_2O -Emissionen über ein Jahr aus unterschiedlich bearbeiteten Böden in Kanada zu berechnen. Die Simulationsergebnisse werden mit Messergebnissen aus der Mitte des Beobachtungszeitraumes verglichen. Das Modell ist in der Lage, die gemessenen Emissionen gut wiederzugeben und kann gute Vorhersagen für Bodentemperatur, Bodenfeuchtegehalte und Bodennitratgehalte berechnen.

Die höchsten simulierten und gemessenen N_2O -Emissionen korrelieren mit einer Serie von Niederschlagsereignissen, der eine einmonatige Trockenperiode folgt. Die hohen Emissionen sind auf den durch den Niederschlag verursachten Sauerstoffmangel zurückzuführen. Die anaeroben Bedingungen begünstigen die Denitrifikation, durch die N_2O produziert wird. Anfang des Jahres werden N_2O -Emissionen simuliert, da die berechneten Temperaturen Werte über Null Grad hatten. In diesem Zeitraum wurden jedoch keine Messungen vorgenommen, so dass diese Simulationsergebnisse nicht überprüft

werden können.

Die grundlegende Stickstoffdynamik aus Expert-N kann auch mit meinem Modell wiedergegeben werden. Durch anaerobe Bedingungen wird die Denitrifikation gefördert und die Nitrifikation gehemmt. Ähnlich wie bei dem Modell von Stenger et al. [56] wird dazu eine Zeitreihe für den Sauerstoffgehalt benötigt, der in meiner Arbeit durch den Bodenwassergehalt berechnet und in Expert-N durch Niederschlagsereignisse, die den Bodenwassergehalt beeinflussen, bestimmt wird. In meinem Modell werden Bodenwassergehalt und Temperatur nicht explizit berechnet, sondern nur ihre Auswirkungen auf das mikrobielle Wachstum einbezogen, was die Parametrisierung meines Modells erleichtert. Die Einbettung des Stickstoffumsatzmodells in ein Ökosystemmodell wie bei Expert-N macht es möglich, über einen Zeitraum von einem Jahr zu simulieren. Durch die verschiedenen Prozesse werden Kohlenstoff und Stickstoff immer wieder nachgeliefert und verschwinden nicht aus dem System. In meinem Modell kann dies durch entsprechende Gleichungen oder Zeitreihen ausgeglichen werden und so ein ähnliches Ergebnis erzielt werden.

Das Ökosystemmodell Ecosys, entwickelt über mehrere Jahre von R. Grant, hat viele Anwendungen gefunden, die von der Simulation von N_2O -Emissionen aus Ackerböden [21, 43], über die Ökosystemproduktivität von borealen Schwarzwaldfichten im Klimawandel [23], bis zur Dynamik von Energie, Wasser, Kohlenstoff und Stickstoff in landwirtschaftlichen Ökosystemen [20] reichen. Ein Vergleich mit meiner Arbeit lässt am ehesten die Anwendung im Bereich der N_2O -Emissionen und der Dynamik von Stickstoff in landwirtschaftlichen Ökosystemen zu.

Die Anwendung in der Arbeit von Metivier et al. [43] untersucht die zeitliche Variabilität von N_2O -Emissionen aus Rapsfelder. Dazu wird die Hypothese aufgestellt, dass diese Variabilität durch Veränderungen in den Nitrifikations- und Denitrifikationsprozessen durch kleine Änderungen im Bodenwasservolumen zustande kommt. Die Simulation in dieser Arbeit erfolgt von Tag 100 bis Tag 200 eines Jahres, vom 125. bis zum 210. Tag erfolgten Messungen für Niederschlagsmenge, Lufttemperatur, den wassergefüllten Porenraum, die Bodentemperatur und N_2O -Konzentrationen. An Tag 125 erfolgte eine Düngung mit Urea. Ecosys prognostiziert einen Anstieg der Ammoniumkonzentrationen als Reaktion auf die Düngung mit einem anschließenden Rückgang, der zu einer Zunahme der Nitratkonzentration führt, die wiederum nach einer einiger Zeit ebenfalls zurückgeht. Dies wird auf den Nitrifikationsprozess zurückgeführt. Die N_2O -Messungen zeigen ein deutliches Maximum in der Konzentration als Reaktion auf Düngung und Niederschlag. Dies zeigt sich auch in den Modellergebnissen. Auch im weiteren Verlauf lassen sowohl Messungen als auch Simulationsergebnisse auf einen Zusammenhang zwischen Niederschlagsereignissen und erhöhten N_2O -Konzentrationen schließen. Die

kurzfristigen Anstiege in der Konzentration werden durch den Denitrifikationsprozess unter anaeroben Bedingungen bewirkt. Nachdem die Nitratkonzentrationen komplett verbraucht waren, zeigen sich auch keine N_2O -Emissionen mehr.

In der Arbeit von Grant [20] wird die Dynamik von Energie, Wasser, Kohlenstoff und Stickstoff in landwirtschaftlichen Ökosystemen untersucht. Dazu wird das Modell Ecosys für die Simulation verwendet und die Ergebnisse mit Experimenten validiert. Simulation und Experimente liefen von Januar 1990 bis Ende Dezember 1991. Im ersten Jahr wurden Zuckerrüben, im zweiten Jahr Gerste angepflanzt. In beiden Jahren wurde mehrmals gedüngt, bewässert und geerntet. In den Simulationen werden die gleichen Maßnahmen durchgeführt. Für die Kalibrierung des Modells stehen stündliche Daten zur Sonneneinstrahlung, Lufttemperatur, Feuchte, Windgeschwindigkeit und Niederschlagsmenge zur Verfügung. Für den Vergleich zwischen Simulationsergebnissen und experimentellen Daten werden Ammonium- und Nitratgehalte, Ertragstrockenmasse, Stickstoffgehalte in verschiedenen Pflanzenteilen und das Bodenwasser gemessen und simuliert. Messung und Simulation erfolgen in drei Bodentiefen. In beiden Jahren ist in der oberen Bodenschicht deutlich der Ammoniumeintrag durch die Düngung zu erkennen. Durch Nitrifikation steigt auch die Nitratkonzentration in den obersten 30 cm zeitlich etwas verzögert an. Zwischen den Düngzeitpunkten ist jeweils nur ein geringer Rückgang in der Konzentration zu beobachten. Einige Zeit nach der letzten Düngung geht die Nitratkonzentration deutlich zurück. Der Rückgang ist dabei in den Messungen schneller als in der Simulation. In den tieferen Bodenschichten ist die Dynamik von Ammonium- und Nitratkonzentrationen deutlich geringer, was größtenteils auch durch die Messungen bestätigt wird.

Qualitativ ähnliche Ergebnisse lassen sich auch mit meinem Modell erzielen. Niederschlagsereignisse können durch die Zeitreihen für Bodenwassergehalt und Sauerstoffgehalt im Boden in das Modell eingehen. Als Reaktion auf eine Düngung mit einem ammoniumhaltigen Dünger steigt zwangsläufig die Ammoniumkonzentration. Unter eher aeroben Bedingungen läuft der Nitrifikationsprozess an und das Ammonium wird zu Nitrat abgebaut. Dessen Konzentration steigt so an und wird im Verlauf wieder durch verschiedene Prozesse dezimiert. Durch Niederschlagsereignisse wandeln sich die Bedingungen von aerob zu anaerob, so dass Denitrifikation auftritt, Nitrat reduziert und N_2O produziert wird. In den beiden Arbeiten, die Ecosys verwenden, sind Nitrifikation und Denitrifikation, abhängig vom Niederschlag und damit dem Sauerstoffgehalt im Boden, die beiden bestimmenden Prozesse. Da ich mich in meiner Arbeit auf eben diese Prozesse und den Einflussfaktor Sauerstoff beschränke, können durch mein einfacheres Modell qualitativ ähnliche Ergebnisse erzielt werden, jedoch mit einer im Vergleich deutlich geringeren Anzahl von Parameter und Daten.

Das Modell Pnet-N-DNDC von Li et al. [38] wird von Stange et al. [55] validiert. Dafür werden Daten aus sieben verschiedenen gemäßigten Waldökosystemen in Europa und den USA verwendet. Gemessen wurden über einen Zeitraum von etwa einem Jahr die N_2O und/ oder NO -Emissionen, sowie die Bodenfeuchte. Die notwendigen meteorologischen Eingangsdaten werden von Wetterstationen vor Ort oder nahe bei bereitgestellt. Das an einem Standort gemessene wassergefüllte Porenvolumen wird von den Simulationen gut wiedergegeben. Lediglich an den Birkenstandorten kommt es zu leichten Abweichungen, hervorgerufen durch eine Unterschätzung der Evapotranspiration. Die simulierten N_2O -Emissionsraten geben die gemessenen Werte im Allgemeinen gut wieder. Höhe und saisonale Schwankungen werden getroffen.

Durch die fehlende Messung und Darstellung von Ammonium- oder Nitratkonzentrationen ist es schwierig, die Simulationsergebnisse von Stange et al. [55] mit meinem Modell zu vergleichen. Es erfolgt kein Stickstoffeintrag durch Düngung o.ä. außer dem atmosphärischen Eintrag und der Mineralisierung, die beide nicht in meinem Modell vorkommen. Die N_2O -Emissionsraten lassen nur teilweise einen direkten Zusammenhang mit der Niederschlagsmenge oder dem wassergefüllten Porenraum erkennen, so dass nicht festzustellen ist, ob diese einen Einfluss haben. Lediglich ein Jahresgang ist deutlich sichtbar, da durch die höheren Temperaturen im Sommer die Emissionsraten ebenfalls erhöht sind. Dies wird durch den Einfluss der Temperatur auf die Wachstumsraten der Mikroorganismen in meinem Modell ebenfalls erreicht. Das Modell von Li et al. [38] beinhaltet viele Prozesse, die in ihrer Summe in der Lage sind die gemessenen Werte gut wiederzugeben. Allerdings geht durch die Anzahl der verschiedenen Einflussfaktoren die Möglichkeit verloren, Rückschlüsse auf die Ursache einer bestimmten Dynamik in den Ergebnissen zu erzielen. Kritisch ist sicher auch die Parametrisierung dieses Modells. Ein Vergleich der Modellergebnisse mit meinen ist aus den genannten Gründen nicht möglich.

5. Schlussfolgerungen und Ausblick

In meiner Arbeit habe ich ein Modell für die Simulation von gekoppelter Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik unter veränderlichen Sauerstoffbedingungen entwickelt, das die Dynamik der Stickstoffverbindungen und die Abundanzen der spezifischen mikrobiellen Biomasse enthält. Das Modell bezieht die Tatsache mit ein, dass Sauerstoff einen ausgeprägten Einfluss auf die Transformationsprozesse der Stickstoffverbindungen im Boden hat und damit die Dynamik der Stickstoffkonzentrationen und die Abundanzen der mikrobiellen Gruppen stark beeinflusst.

Mein Modell liefert unter strikt aeroben Bedingungen die qualitativ gleichen Ergebnisse wie das Nitrifikationsmodell von Schauss et al. [51]. Ammonium wird oxidiert und so zu Nitrat umgewandelt. In meinem Modell geschieht dieser Schritt über Nitrit. Außerdem werden alle Stickstoffverbindungen auch als Stickstoffquelle für den Zellerhalt der Mikroorganismen genutzt. Die Unterscheidung in Archaeen und Bakterien war für meine Betrachtung nicht relevant, stattdessen wurde die nitrifizierende Biomasse in ammoniak- und nitritoxidierende Mikroorganismen unterschieden.

Unter anaeroben Bedingungen erzielt mein Modell die gleichen Ergebnisse wie das Denitrifikationsmodell von Leffelaar und Wessel [36]. Nitrat wird über Nitrit und Distickstoffmonoxid zu gasförmigen Stickstoff reduziert. In meinem Modell wird der gasförmige Stickstoff dabei nicht explizit modelliert. Durch den Verbrauch der Stickstoffverbindungen für den Zellerhalt der Denitrifizierer werden die Konzentrationen in meinem Modell weiter reduziert, während bei Leffelaar und Wessel [36] der Stickstoff für den Zellerhalt lediglich umgewandelt und nicht verbraucht wird.

Auch mit den Ökosystemmodellen wie MiCNit von Blagodatsky et al. [3], Expert-N von Stenger et al. [56] und Ecosys von Grant et al. [23] können qualitativ vergleichbare Ergebnisse wie mit meinem Modell erzielt werden. Eine verbreitete Anwendung dieser Modelle ist die Abschätzung von Distickstoffmonoxidkonzentrationen aus unterschiedlichen Böden. So führen bei diesen Modellen Niederschlagsereignisse durch Denitrifikation zu erhöhten N_2O -Emissionen. Unter aeroben Bedingungen wird Ammonium nitrifiziert und die Konzentration so reduziert.

Vorhandene Modelle unterscheiden sich u.a. hinsichtlich der beschriebenen Prozesse, des Einflusses des Sauerstoffgehalts und der Anzahl der benötigten Parameter. Die

Einzelprozessmodelle benötigen nur wenige Parameter. Dafür bilden sie auch jeweils nur einen Prozess ab. Der Sauerstoffgehalt hat bei diesen Modellen keinen Einfluss, da von konstanten Sauerstoffbedingungen ausgegangen wird. In Ökosystemmodellen sind neben Nitrifikation und Denitrifikation noch eine Reihe weiterer Prozesse des Stickstoffkreislaufs, der Kohlenstoffkreislauf, die Aufnahme von Stickstoff und Kohlenstoff durch Pflanzen, Flüsse zwischen verschiedenen Bodenschichten und der Austausch mit der Atmosphäre enthalten. Auch Sauerstoff und seine Dynamik sind in diesen Modellen enthalten. Die Realisierung der Prozesse ist dabei immer unterschiedlich. Anwendung finden diese Modelle häufig in der Abschätzung von N_2O -Emissionen aus unterschiedlich genutzten Böden verschiedener Standorte. Die Modelle sind meist eingebettet in Umgebungsmodelle, die viele Einflussfaktoren wie pH-Wert, Bodenparameter und Wetterbedingungen, wie Niederschlag und Temperaturen, enthalten. Die Daten für diese Faktoren müssen anfangs den Modellen übergeben werden. Neben diesen Daten sind außerdem noch viele Parameter für die Prozessbeschreibung notwendig. Die genaue Anzahl der benötigten Parameter und Daten lässt sich nur schwer abschätzen, ohne die Modelle für ein bestimmtes Problem zu parametrisieren. Es sind aber nur für die Parametrisierung der Prozesse in jedem Fall mehr als 50.

Mein Modell liegt mit etwas mehr als 30 Parametern zwischen diesen beiden Modellarten. Es enthält die beiden Prozesse Nitrifikation und Denitrifikation. Welcher der beiden dabei dominant ist, hängt von den vorliegenden Sauerstoffbedingungen ab.

Für die weitere Verbesserung meines Modells und weitere Analysen gibt es eine Reihe von Möglichkeiten.

So sind die Parameteroptimierung und damit die Parametrisierung des Modells in einem ersten Versuch nur mit mäßigem Erfolg verlaufen. Daher wäre es sinnvoll, weitere Experimente zu planen und durchzuführen, um das Modell zu parametrisieren. Dabei kann teilweise auf die Ergebnisse aus der Sensitivitätsanalyse zurückgegriffen werden, so dass die Anzahl der zu bestimmenden Parameter eingeschränkt wird. Zu beachten ist der Zeitraum, in dem die Experimente durchgeführt werden, da die Versuchslänge auch dazu beiträgt, welche Parameter die Dynamik beeinflussen. Bei einer Versuchsdauer von mehr als einem Monat sind die Wachstums- und Sterberaten der Mikroorganismen von großer Bedeutung, während bei einem deutliche kürzeren Zeitraum die Umsatzgeschwindigkeiten der Stickstoffverbindungen größere Bedeutung haben.

Die Verwendung der drei Zeitreihen für Sauerstoff, Wassergehalt und Temperatur erlaubte nicht den Vergleich mit realen Stickstoffkonzentrationen, da es viele weitere Prozesse und Umweltfaktoren gibt, die eine Rolle spielen. All diese Faktoren zu berücksichtigen würde zu einem Modell führen, das ähnlich komplex ist, wie z. B. die Modelle MiCNit [3] und Expert-N [56]. Die Anwendung machte es jedoch möglich, reale Sauer-

stoffgehalte für die Simulation der Transformationsprozesse der Stickstoffverbindungen zu benutzen und gleichzeitig die Auswirkungen von Temperatur und Wassergehalt im Boden zu berücksichtigen. Der Einfluss von Sauerstoff selbst scheint in Grünlandböden aufgrund der guten Durchlüftung eher konstant zu sein und die Denitrifikation ist auf kleine Mikrohabitate begrenzt. Ausnahmen bilden kurzfristige Starkregenereignisse und Böden mit Stauwassereinfluss.

Die in meiner Arbeit verwendete Sauerstoffzeitreihe bewegte sich so stark im aeroben Bereich, dass in der Dynamik der Stickstoffverbindungen kaum ein Unterschied zu den Ergebnissen mit einem konstanten aeroben Sauerstoffgehalt zu erkennen war. Dadurch wurde auch nur die Nitrifikationsdynamik sichtbar. Um die Auswirkungen von einem stärker schwankendem Sauerstoffgehalt untersuchen zu können, wären Zeitreihen mit einem größeren Intervall an Sauerstoffgehalten nötig. Eine Alternative wäre auch die Erzeugung einer künstlichen Zeitreihe mit längeren Zeiträumen sowohl aerober und als auch anaerobe Bedingungen, sowie Übergängen zwischen diesen Extremsituationen.

Neben dem Sauerstoffgehalt hat auch die Kohlenstoffkonzentration einen großen Einfluss auf das Wachstum der Mikroorganismen. Daher wäre es in einem nächsten Schritt auch interessant, für den Kohlenstoffgehalt ähnliche Analysen durchzuführen wie in dieser Arbeit für den Sauerstoffgehalt. Zunächst wäre also die Dynamik bei unterschiedlichen Kohlenstoffgehalten zu betrachten. Beschränkt man sich dabei auf den gelösten organischen Kohlenstoff, ergibt sich lediglich ein Einfluss auf die Denitrifizierer, so dass nur ihre Dynamik und damit die Dynamik der Denitrifikation beeinflusst wird. Ein niedrigerer Kohlenstoffgehalt hat zunächst ein geringeres mikrobielles Wachstum zur Folge. Dadurch verlangsamt sich auch der Umsatz bei der Denitrifikation. Da sowohl Denitrifizierer als auch Nitritoxidierer unter aeroben Bedingungen Nitrit als Stickstoffquelle nutzen, könnte es hier zu einer veränderten Dynamik kommen, bei der die Nitritoxidierer, unter aeroben Bedingungen, einen Vorteil haben. Nach der Untersuchung der Dynamik bei unterschiedlichen Kohlenstoffgehalten, könnte wieder eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt werden. Hier würde ich jedoch ähnliche Ergebnisse erwarten, wie in dieser Arbeit mit unterschiedlichen Sauerstoffbedingungen, und den größten Einfluss bei den mikrobiellen Wachstums- und Sterberaten sehen. Anschließend könnte der Kohlenstoffgehalt mit Hilfe von Zeitreihen variiert werden, um reale Umweltbedingungen zu untersuchen. Da der Kohlenstoffgehalt in Böden oft deutlichen Schwankungen unterliegt, sollten die Auswirkungen hier deutlich sichtbar sein.

In meinem Modell gibt es neben der Düngung keine Eintragsprozesse für Stickstoff. Da die Mikroorganismen Stickstoff für den Zellerhalt verbrauchen und unter anaeroben Bedingungen Distickstoffmonoxid in gasförmigen Stickstoff umgewandelt wird, der das betrachtete System verlässt, gibt es mehrere Verlustprozesse, so dass die Konzentrationen der Stickstoffverbindungen über die Zeit sinken, ohne dass Stickstoff nachgeliefert

wird. Simuliert man die Nitrifikations- Denitrifikationsdynamik also über einen längeren Zeitraum ohne Düngung, gehen die Stickstoffkonzentrationen und damit auch die Abundanzen der Mikroorganismen zurück. In einem ersten Schritt kann dies durch einen unspezifischen Ammoniumeintrag verändert werden. Für eine realistischere Darstellung müssen die möglichen Eintragspfade wie zum Beispiel Mineralisierung und Stickstofffixierung genauer untersucht und gegebenenfalls mitmodelliert werden. Dies kann allerdings zu einem komplexeren Modell führen, bei dem die Zusammenwirkung von Nitrifikation und Denitrifikation schwerer zu verstehen ist.

Mein Modell füllt die Lücke zwischen den Einzelprozessmodellen, die einen Einblick in den einzelnen Prozess geben können, und den Ökosystemmodellen, die zwar die Realität gut abbilden können, bei denen jedoch das Prozessverständnis auf Grund der vielen enthaltenen Prozesse und Einflussfaktoren verloren geht.

Es koppelt Nitrifikation und Denitrifikation und bezieht den Sauerstoffgehalt dabei mit ein. Weitere Faktoren gehen nicht ein, so dass erkennbar bleibt, wie die beiden Prozesse unter Sauerstoffeinfluss zusammenwirken.

Es benötigt nur eine begrenzte Anzahl von Parametern, ist aber durch die Einbindung von Zeitreihen auch in der Lage, die Auswirkungen weiterer Einflüsse wiederzugeben. In meiner Arbeit hat sich gezeigt, dass besonders die Temperatur einen deutlichen Einfluss auf die Mikroorganismen und damit auch auf die Stickstoffdynamik hat. Steigende Temperaturen, zum Beispiel ausgelöst durch den Klimawandel, führen zu einer schnelleren Dynamik und zu einem höheren Verbrauch der Stickstoffverbindungen. Treten zusätzlich vermehrt Niederschlagsereignisse auf, die zu anaeroben Verhältnissen im Boden führen, ist mit höheren N_2O -Emissionen zu rechnen, die wiederum den Klimawandel verstärken. Gleichzeitig könnte eine verstärkte mikrobielle Aktivität auch zu einem geringeren Gesamtstickstoffgehalt im Boden führen, da der Stickstoff schneller verbraucht und auch schneller umgewandelt wird.

Mit meinem Modell ist es möglich, den Einfluss einzelner Faktoren, wie Sauerstoff- und Kohlenstoffgehalt, aber auch Wassergehalt und Temperatur, auf die Nitrifikations-Denitrifikationsdynamik zu erkennen und mit den gewonnenen Erkenntnissen Rückschlüsse für die Auswirkungen in der realen Umwelt zu ziehen.

Danksagung

Ich danke den Managern der drei Exploratorien, Kirsten Reichel-Jung, Swen Renner, Katrin Hartwich, Sonja Gockel, Kerstin Wiesner und Martin Gorke für ihre Arbeit bei der Instandhaltung der Standorte und der Projektinfrastruktur; Christiane Fischer und Simone Pfeiffer für die Unterstützung im Hauptbüro, Michael Owonibi für die Organisation der zentralen Datenbank; und Markus Fischer, Eduard Linsenmair, Dominik Hessenmöller, Jens Nieschulze, Daniel Prati, Ingo Schöning, François Buscot, Ernst-Detlef Schulze, Wolfgang W. Weisser und der verstorbenen Elisabeth Kalko für ihre Rolle in der Aufstellung der Biodiversitätsexploratorien. Diese Arbeit wurden durch das DFG Schwerpunktprogramm 1374 "Infrastruktur-Biodiversitätsexploratorien" gefördert (DFG-Ref# MA 1829/5-2). Alle notwendigen Genehmigungen der zuständigen Umweltämter von Baden-Württemberg, Thüringen und Brandenburg (gem. §72 BbgNatSchG) lagen vor.

Außerdem danke ich der Arbeitsgruppe der Abteilung Environmental Genomics (EGEN) am Helmholtzzentrum in München, besonders Prof. Dr. Schloter und Dipl.-Biol. Stempfhuber, für die Durchführung der Experimente, deren Ergebnisse in dieser Arbeit verwendet wurden, und ihre Unterstützung.

Des Weiteren möchte ich mich bei den Mitarbeitern des Instituts für Umweltsystemforschung an der Universität Osnabrück bedanken, die mich während meiner Promotion unterstützt haben. Besonderer Dank kommt dabei Prof. Dr. Matthies und Dr. Klasmeier zu. Außerdem danke ich Dr. Focks von Alterra in Wageningen (NL) für seine Betreuung während meiner gesamten Promotionszeit.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Beccari, R. Passino, R. Ramadori, und V. Tandoi. Kinetics of dissimilatory nitrate and nitrite reduction in suspended growth culture. *Journal (Water Pollution Control Federation)*, 55(1):58–64, 1983.
- [2] L.W. Belsler. Nitrate reduction to nitrite, a possible source of nitrite for growth of nitrite-oxidizing bacteria. *Applied and Environmental Microbiology*, 34(4):403–410, 1977.
- [3] S. Blagodatsky, R. Grote, R. Kiese, C. Werner, und K. Butterbach-Bahl. Modelling of microbial carbon and nitrogen turnover in soil with special emphasis on N-trace gases emission. *Plant Soil*, 346:297–330, 2011.
- [4] N. Blüthgen, C.F. Dormann, D. Prati, V.H. Klaus, T. Kleinebecker, N. Hölzel, F. Alt, S. Boch, S. Gockel, A. Hemp, J. Müller, J. Nieschulze, S.W. Renner, I. Schöning, U. Schumacher, S.A. Socher, K. Wells, K. Birkhofer, F. Buscot, Y. Oelmann, C. Rothewöhrer, C. Scherber, T. Tschardtke, C.N. Weiner, M. Fischer, E.K.V. Kalko, K.E. Linsenmair, E.-D. Schulze, und W.W. Weisser. A quantitative index of land-use intensity in grasslands: Integrating mowing, grazing and fertilization. *Basic and Applied Ecology*, 13:207–220, 2012.
- [5] H.-P. Blume, G.W. Brümmer, R. Horn, E. Kandeler, I. Kögel-Knabner, R. Kretzschmar, K. Stahr, und B.-M. Wilke. *Scheffer/Schachtschabel: Lehrbuch der Bodenkunde*. Spektrum Akademischer Verlag, 16 Edition, 2010.
- [6] P. Bonin, M. Gilewicz, und J.C. Bertrand. Effects of oxygen on each step of denitrification on *Pseudomonas nautica*. *Can. J. Microbiol.*, 35:1061–1064, 1989.
- [7] H. Bothe, G. Jost, M. Schloter, B.B. Ward, und K.-P. Witzel. Molecular analysis of ammonia oxidation and denitrification in natural environments. *FEMS Microbiology Reviews*, 24:673–690, 2000.
- [8] F. Dassonville, P. Renault, und V. Vallès. A model describing the interactions between anaerobic microbiology and geochemistry in a soil amended with glucose and nitrate. *European Journal of Soil Science*, 55:29–45, 2004.

- [9] E.A. Davidson. *Fluxes of Nitrous Oxide and Nitric Oxide from Terrestrial Ecosystems*, Seiten 219–235. American Society for Microbiology, Washington DC, 1991.
- [10] E.A. Davidson, S.C. Hart, C.A. Shanks, und M.K. Firestone. Measuring gross nitrogen mineralization, immobilization, and nitrification by ^{15}N isotopic pool dilution in intact soil cores. *Journal of Soil Science*, 42:335–349, 1991.
- [11] A.N.G. de Bruijn und K. Butterbach-Bahl. Linking carbon and nitrogen mineralization with microbial responses to substrate availability – the DECONIT model. *Plant Soil*, 328:271–290, 2010.
- [12] H.L. Ehrlich und D.K. Newman. *Geomicrobiology*. Tylor & Francis Group, LLC, 5. Edition, 2009.
- [13] V. Felber. Nitrification-denitrification-dynamics under different land-use intensities in grassland soils. Bachelorarbeit, Technische Universität München, 2013. unveröffentlicht.
- [14] M. Fischer, O. Bossdorf, S. Gockel, F. Hänsel, A. Hemp, D. Hessenmöller, G. Korte, J. Nieschulze, S. Pfeiffer, D. Prati, S. Rennerand I. Schöning, U. Schumacher, K. Wells, F. Buscot, E.K.V. Kalko, K.E. Linsenmair, E.-D. Schulze, und W.W. Weisser. Implementing large-scale and long-term functional biodiversity research: The Biodiversity Exploratories. *Basic and Applied Ecology*, 11:473–485, 2010.
- [15] A. Focks. *Effects of Sulfadiazine in Soil: Integrative Modelling Approaches as a Basis for Environmental Risk Assessment*. PhD thesis, Institut für Umweltsystemforschung, Universität Osnabrück, 2008.
- [16] C.A. Francis, M.J. Beman, und M.M.M. Kuypers. New processes and players in the nitrogen cycle: the microbial ecology of anaerobic and archaeal ammonia oxidation. *The ISME Journal*, 1:19–27, 2007.
- [17] P. Garnier, C. Néel, B. Mary, und F. Lafolie. Evaluation of a nitrogen transport and transformation model in a bare soil. *European Journal of Soil Science*, 52: 253–268, 2001.
- [18] T. Granli und O.C. Böckman. Nitrous oxide from agriculture. *Norwegian Journal of Agricultural Science*, 12, 1994.
- [19] R.F. Grant. Simulation of ecological controls on nitrification. *Soil Biology and Biochemistry*, 26(3):305–315, 1994.

- [20] R.F. Grant. Dynamics of energy, water, carbon and nitrogen in agricultural ecosystems: simulation and experimental validation. *Ecological Modelling*, 81:169–181, 1995.
- [21] R.F. Grant und E. Pattey. Modelling variability in n_2o emissions from fertilized agricultural fields. *Soil Biology and Biochemistry*, 35:225–243, 2002.
- [22] R.F. Grant und E. Pattey. Modelling variability in N_2O emissions from fertilized agricultural fields. *Soil Biology and Biochemistry*, 23:225–243, 2003.
- [23] R.F. Grant, T.A. Black, D. Gaumont-Guay, N. Klujn, A.G. Barr, K. Morgenstern, und Z. Nestic. Net ecosystem productivity of boreal aspen forests under drought and climate change: Mathematical modelling with Ecosys. *Agricultural and Forest Meteorology*, 140:152–170, 2006.
- [24] J.C. Helton und F.J. Davis. *Sensitivity Analysis*, Kapitel Sampling-Based Methods, Seiten 101–153. John Wiley & Sons, LTD, 2000.
- [25] E. Höhne. *Entwicklung eines mechanistischen Modells zur Simulation der frostbedingten N_2O Emission aus Böden*. Grin Verlag, 2008.
- [26] M.E. Hinkle. Environmental conditions affecting concentrations of He , CO_2 , O_2 and N_2 in soil gases. *Applied Geochemistry*, 9:53–63, 1994.
- [27] H. Johnsson, L. Bergstrom, und P.-E. Jansson. Simulated nitrogen dynamics and losses in a layered agricultural soil. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 18: 333–356, 1981.
- [28] S.M. Hocaoglu, G. Insel, E.U. Cokgor, und D. Orhon. Effect of low dissolved oxygen on simultaneous nitrification and denitrification in a membrane bioreactor treating black water. *Bioresource Technology*, 102:4333–4340, 2011.
- [29] R. Horn, Domzal, Slowinska-Jurkiewicz, und van Ouwerkerk. Soil compaction processes and their effects on the structure of arable soils and the environment. *Soil & Tillage Research*, 35:23–36, 1995.
- [30] S. Hwang und K. Hanaki. Effects of oxygen concentration and moisture content of refuse on nitrification, denitrification and nitrous oxide production. *Bioresource Technology*, 71:159–165, 2000.
- [31] R.L. Iman und J.C. Helton. An investigation of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models. *Risk Analysis*, 8:71–90, 1988.

- [32] R.G. Joergensen und T. Mueller. The fumigation-extraction method to estimate soil microbial biomass: Calibration of the k_{EN} value. *Soil Biology and Biochemistry*, 28:33–37, 1996.
- [33] S.K. Kaharabata, C.F. Drury, E. Priesack, R.L. Desjardins, D.J. Mckenney, C.S. Tan, und D. Reynolds. Comparing measured and expert-n predicted n_2o emissions from conventional till and not no till corn treatments. *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, 66:107–118, 2003.
- [34] K. Khalil, P. Renault, N. Guérin, und B. Mary. Modelling denitrification including dynamics of denitrifiers and their progressive ability to reduce nitrous oxide: Comparison with batch experiments. *European Journal of Soil Science*, 56:491–504, 2005.
- [35] G.M. Laudone, G.P. Matthews, N.R.A. Bird, W.R. Whalley, L.M. Cardenas, und A.S. A.S. Gregory. A model to predict the effects of soil structure on denitrification and N_2O emission. *Journal of Hydrology*, 409:283–290, 2011.
- [36] P.A. Leffelaar und W.W. Wessel. Denitrification in a homogeneous, closed system: Experiment and simulation. *Soil Science*, 146:335–349, 1988.
- [37] C. Li, S. Frokling, und T.A. Frokling. A model of nitrous oxide evolution from soil driven by rainfall events: 1. model structure and sensitivity. *Journal of Geophysical Research*, 97(D9):9759–9776, 1992.
- [38] C. Li, J. Aber, F. Stange, K. Butterbach-Bahl, und H. Papen. A process-oriented model of N_2O and NO emissions from forest soils: 1. model development. *Journal of Geophysical Research*, 105(D4):4369–4384, 2000.
- [39] T. Lueders, M. Manefield, und M.W. Friedrich. Enhanced sensitivity of DNA- and rRNA-based stable isotope probing by fractionation and quantitative analysis of isopycnic centrifugation gradients. *Environmental Microbiology*, 6:73–78, 2004.
- [40] M. Madigan, J. Martinko, D. Stahl, und D. Clark. *Brock - Biology of Microorganisms*. Pearson, 13. Edition, 2012.
- [41] M.D. McKay. Latin hypercube sampling as a toll in uncertainty analysis of computer models. In J.J. Swain, D. Goldsmann, Crain R.C., und J.R. Wilson, Editoren, *Proceedings of the 1992 Winter Simulation Conference*, 1992.
- [42] D.J. McKenney, C.F. Drury, und S.W. Wang. Effects of oxygen on denitrification inhibition, repression, and derepression in soil columns. *Soil Science Societies*, 65: 126–132, 2001.

- [43] K.A. Metivier, E. Pattey, and R.F. Grant. Using ecosys mathematical model to simulate temporal variability of nitrous oxide emissions from a fertilized agricultural soil. *Soil Biology and Biochemistry*, 41:2370–2386, 2009.
- [44] A. Meyer, A. Focks, V. Radl, D. Keil, G. Welzl, I. Schöning, S. Boch, S. Marhan, E. Kandeler, and M. Schloter. Different land use intensities in grassland ecosystems drive ecology of microbial communities involved in nitrogen turnover in soil. *PLOS ONE*, 2013.
- [45] J.A.E. Molina, C.E. Clapp, M.J. Shaffer, F.W. Chichester, and W.E. Larson. NC-SOIL, a model of nitrogen and carbon transformations in soil: Description, calibration, and behavior. *Soil Science Society of America Journal*, 47(1):85–91, 1981.
- [46] D.V. Murphy, A. Bhogal, M. Shepherd, K.W.T. Goulding, S.C. Jarvis, D. Barraclough, and J.L. Gaunt. Comparison of ^{15}N labelling methods to measure gross nitrogen mineralisation. *Soil Biology and Biochemistry*, 33:1211–1216, 1999.
- [47] R.S. Murray and C.D. C.D. Grant. The impact of irrigation on soil structure. *School of Earth & Environmental Science, The University of Adelaide, The National program for Sustainable irrigation (Land & Water Australia)*, 2007.
- [48] J.C.G. Ottow. *Mikrobiologie von Böden*. Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- [49] S. Pfeiffer, P. Bernert, M. Grossmann, E. Henne, E.K.V. Kalko, K.E. Linsenmair, D. Prati, E.-D. Schulze, W.W. Weisser, and M. Fischer. Exploratorien für funktionelle Biodiversitätsforschung. *Naturschutz und Biologische Vielfalt*, 60:181–188, 2008.
- [50] S.J. Pirt. The maintenance energy of bacteria in growing cultures. *Proc. R. Soc. London*, 163:224–231, 1965.
- [51] K. Schauss, A. Focks, S. Leininger, A. Kotzerke, H. Heuer, S. Thiele-Bruhn, S. Sharma, B.-M. Wilke, M. Matthies, K. Smalla, J.C. Munch, W. Amelung, M. Kaupenjohann, M. Schloter, and C. Schleper. Dynamics and functional relevance of ammonia-oxidizing archaea in two agricultural soils. *Environmental Microbiology*, 12:446–456, 2009.
- [52] H.R. Schwarz and N. Köckler. *Numerische Mathematik*. Vieweg+Teubner, Wiesbaden, 2011.
- [53] A. Sessitsch, A. Weilharter, M.H. Gerzabek, H. Kirchmann, and E. Kandeler. Microbial population structures in soil particle size fractions of a long-term fertilizer field experiment. *Applied and Environmental Microbiology*, 67:4215–4224, 2001.

- [54] P. Sorensen. Short-term nitrogen transformations in soil amended with animal manure. *Soil Biology and Biochemistry*, 33:1211–1216, 2001.
- [55] F. Stange, K. Butterbach-Bahl, H. Papen, S. Zechmeister-Boltensten, C. Li, and J. Aber. A process-oriented model of n_2o and no emissions from forest soils 2. sensitivity analysis and validation. *Journal of Geophysical Research*, 105(D4):4385–4398, 2000.
- [56] R. Stenger, E. Priesack, G. Barkle, and C. Sperr. Expert-N – A tool for simulating nitrogen and carbon dynamics in the soil-plant-atmosphere system. In M. Tomer, M. Robinson, and G. Gielen, Editoren, *Proceedings Technical Session 20: Modeling of Land Treatment Systems*, Seiten 12–28, New Plymouth, October 1999. NZ Treatment Collective.
- [57] M.K. Stenstrom und R.A. Poduska. The effect of dissolved oxygen concentration on nitrification. *Water Research*, 14:643–649, 1988.
- [58] I. Suzuki, U. Dular, und S.C. Kwok. Ammonia or ammonium ion as substrate for oxidation by *Nitrosomonas europaea* cells and extracts. *Journal of Bacteriology*, 120(1):556–558, 1974.
- [59] J.M. Tiedje, S. Simkins, und P.M. Groffman. Perspectives on measurement of denitrification in the field including recommended protocols for acetylene based methods. *Plant and Soil*, 115:261–284, 1989.
- [60] I.A. van de Leemput, A.J. Veraart, V. Dakos, J.J.M de Klein, M. Strous, und M. Scheffer. Predicting microbial nitrogen pathways from basic principles. *Environmental Microbiology*, 13:1477–1487, 2011.
- [61] N. Wrage, N. Sahi, K.-U. Röver, M. Hofmann, und J. Isselstein. Zeitliche Verteilung von Nährstoffen auf beweidetem Grünland: Nährstoffverarmung durch Weidehaltung? *Abteilung Graslandwissenschaft, Department für Nutzpflanzenwissenschaften, Heorg-August-Universität Göttingen*, Seiten 221–224, 2006.
- [62] X. Zhang, Q. Wang, F.S. Gilliam, W. Bai, X. Han, und I.Li. Effect of nitrogen fertilization on net nitrogen mineralization in a grassland soil, northern China. *Grass and Forage Science*, 67:219–230, 2011.

Anhang

A. Experimente

Die Untersuchungen wurden im Helmholtz-Zentrum München, Abteilung Umweltgenomik von Veronika Felber unter Betreuung von Barbara Stempfhuber und Prof. Dr. Michael Schloter durchgeführt und als Bachelorarbeit am Lehrstuhl Bodenkunde der Technischen Universität München eingereicht [13].

A.1. Auswertung der Daten

A.1.1. Potentielle Denitrifikation

Die Methode zur Quantifizierung der potentiellen Denitrifikation wurde von Tiedje et al. [59] entwickelt, um Aussagen über die potentielle Aktivität der denitrifizierenden Mikroorganismen in den Bodenproben machen zu können. Das Prinzip der Methode beruht auf der Messung der Entstehungsraten von Distickstoffmonoxid über einen Inkubationszeitraum von drei Stunden. Die Messung erfolgte zu zwei verschiedenen Zeitpunkten während der Inkubation, in diesem Fall eine und drei Stunden nach der anfänglichen Zugabe von Acetylen. Um vollständig anoxische Bedingungen herzustellen, wurde in einer Heliumatmosphäre inkubiert. Da die Gaschromatographie Distickstoffmonoxid, aber nicht elementaren Stickstoff quantifizieren kann, wurde zu Anfang der Inkubationszeit Acetylen zugefügt.

Acetylen inhibiert die Distickstoffmonoxidreduktase und damit die Umwandlung von N_2O zu gasförmigem Stickstoff [48]. Da die Umwandlung von N_2O zu N_2 für diese Arbeit ebenfalls von Interesse war, wurde in einem zweiten Ansatz auf die Gabe von Acetylen verzichtet, so dass später abgeschätzt werden konnte, wie viel N_2O reduziert wurde. Für die Umrechnung der Ausgabe des Gaschromatographen von ppb zu nmol N_2O wurde die folgende Gleichung verwendet:

$$N[nmol] = \frac{Druck[bar] \cdot Gasraum[l] \cdot N[ppb]}{R \cdot T[K]}$$

mit

Druck = 0,96 bar,

Gasraum = 0,1079 l (Gasraum der 150 ml Serumflasche mit 15 g Boden),
 $T = 294 K$ und $R = 0,0831 \text{ bar} \cdot \text{mol}^{-1} K^{-1}$.

A.1.2. Gelöste Stickstoffkomponenten

Um Daten über die Konzentrationen von Ammonium, Nitrat und Nitrit sowie den gesamten gelösten Stickstoff zu gewinnen, wurden die Proben mit Kalziumchlorid extrahiert. Eine 0,5 molare Kalziumchloridlösung wurde den Proben in einem Verhältnis von 1:4 hinzugefügt. Die Proben wurden anschließend für 30 Minuten in einen Überkopfschüttler gestellt, danach für zwei Minuten bei 20°C und 3500 rpm zentrifugiert und darauffolgend filtriert. Die Extrakte wurden bei -20°C bis zur weiteren Analyse gelagert. Die Extrakte wurden mittels Continuous Flow Analysis gemessen.

A.1.3. Mikrobielle Biomasse

Die Menge von mikrobiellem Kohlenstoff wurde durch Chloroform-Fumigation-Extraktion und anschließender Kalziumchlorid-Extraktion bestimmt. Dabei werden mikrobielle Zellen durch das Tränken der Bodenproben mit Chloroform zerstört. Dadurch werden die organischen Substanzen der Zellen in die Umgebung verteilt, wodurch es zu einer Erhöhung des Anteils an gelöstem organischen Kohlenstoff (DOC_f) kommt. Der DOC kann aus Bodenproben ebenfalls mit Kalziumchlorid extrahiert werden. Probenpaare von fumigierten und nicht fumigierten Bodenproben werden extrahiert und die Menge an DOC gemessen. Die Differenz zwischen den Mengen DOC in den fumigierten (DOC_f [mg C/kg TS]) und den nicht-fumigierten (DOC_{nf} [mg C/kg TS]) Proben ist ein Maß für den Anteil von mikrobieller Biomasse (C_{mic} [mg C/kg TS]) im Boden. Bei dieser Art der Messung werden zunächst die anorganischen Kohlenstoffkomponenten durch Ansäuerung der Flüssigkeit ausgetrieben und anschließend wird der DOC zu CO_2 oxidiert und quantifiziert. Das Protokoll wurde nach Joergensen und Mueller [32] modifiziert. Die Berechnung des mikrobiellen Kohlenstoffs erfolgt durch

$$C_{mic} = (DOC_f - DOC_{nf})/k_{EC}$$

mit $k_{EC} = 0,45$ (Faktor für den extrahierbaren Anteil von C_{mic} nach der Fumigation).

A.1.4. Genabundancen

Das Protokoll für die Koextraktion von DNA/ RNA wurde modifiziert nach Lueders et al. [39]. Bei dieser Methode wird eine Phenol-Chloroformlösung zu der wässrigen Lösung einer Probe, in diesem Fall einer Bodenprobe, gegeben. Das Zentrifugieren dieser Mischung führt zu einer oberen wässrigen Phase, die DNA und RNA enthält. In der unteren, organischen Phase befinden sich Fettsäuren und andere organische Moleküle. Die Zwischenphase enthält Proteine. Über mehrere Schritte werden die organische und die Zwischenphase entfernt und die DNA/RNA gereinigt. Um Daten über die Abundancen von nitrifizierenden und denitrifizierenden Genen zu erhalten, wurde Real Time Quantitative PCR (qPCR) verwendet. Die Zielgene dafür waren *amoA AOA* und *amoA AOB* (Ammoniumoxidation), *nosZ* (N_2O -Reduktion) und *nirK* und *nirS* (Nitritreduktion). Mit Hilfe dieser Daten konnte ich die anfänglichen Anteile der nitrifizierende und denitrifizierenden Biomasse bestimmen.

A.2. Ergebnisse aus den Experimenten

A.2.1. Anfangsbedingungen

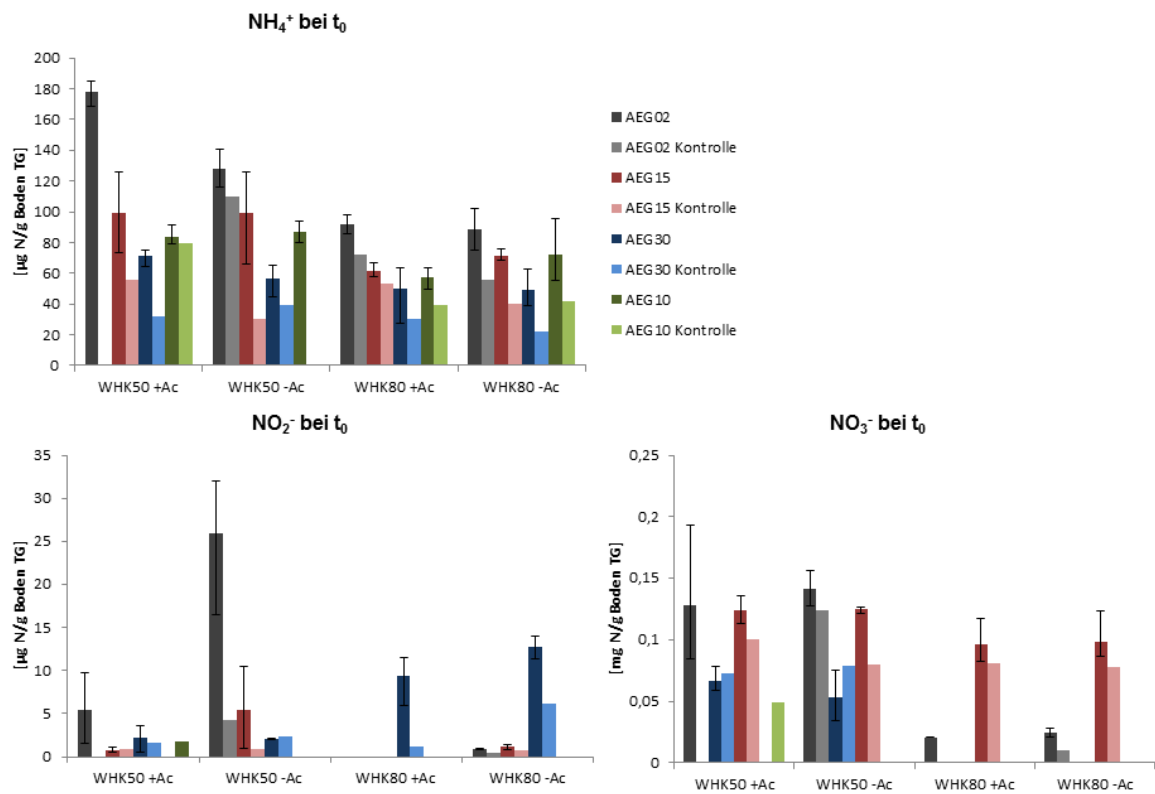


Abbildung A.1.: Mittlere Ammonium-, Nitrit- und Nitratkonzentrationen der Replikate mit maximalen Abweichungen zusammen mit der Kontrolle für die vier Standorte und die vier Ansätze (50% WHK_{max} +Acetylen, 50% WHK_{max} -Acetylen, 80% WHK_{max} +Acetylen, 80% WHK_{max} -Acetylen) bei Messzeitpunkt t_0 (= 0 h).

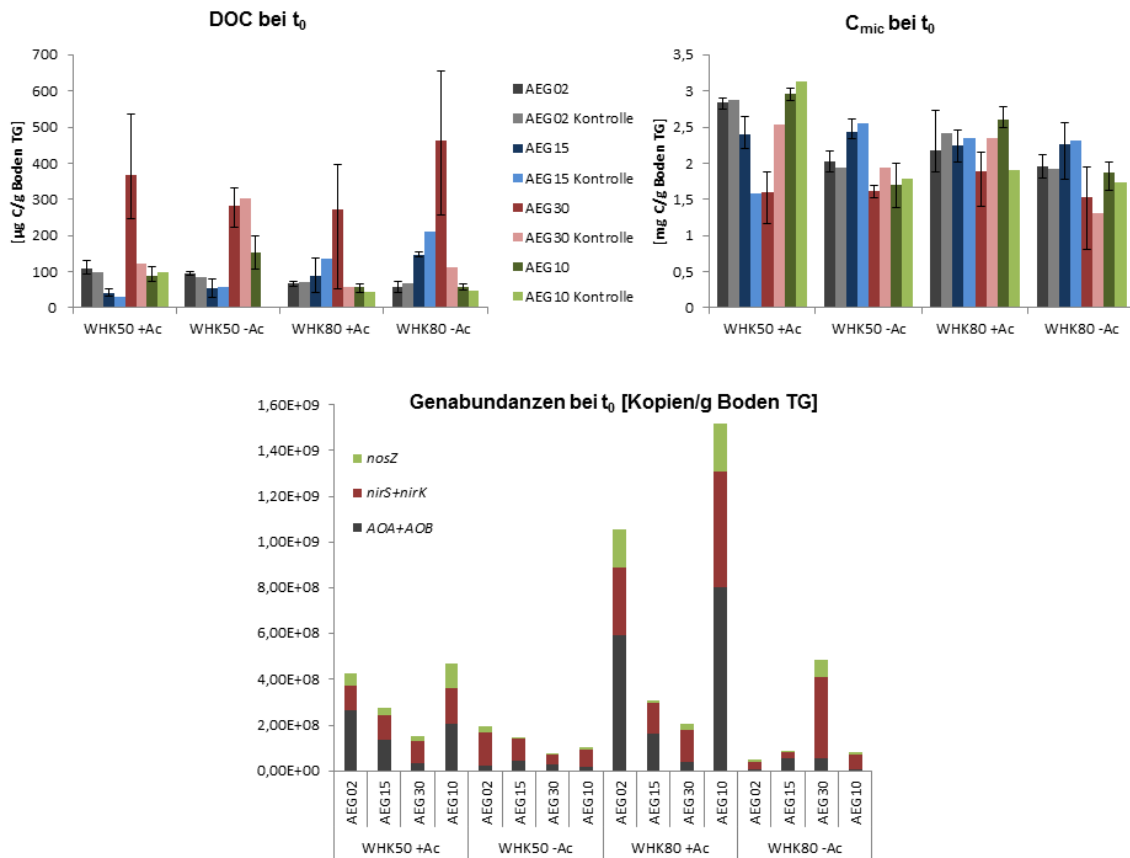


Abbildung A.2.: (a) Mittlere gelöste organische Kohlenstoffkonzentrationen, (b) mittlerer mikrobieller Kohlenstoff mit maximalen Abweichungen bei den Replikaten zusammen mit der Kontrolle und (c) Abundanz der drei Gengruppen (Ammoniakoxidierer (*AOA+AOB*), Nitritreduzierer (*nirS+nirK*) und Distickstoffmonoxidreduzierer (*nosZ*)) der Kontrolle für die vier Standorte und die vier Ansätze beim Messzeitpunkt t_0 (= 0 h).

A.2.2. Dynamik der Stickstoffverbindungen

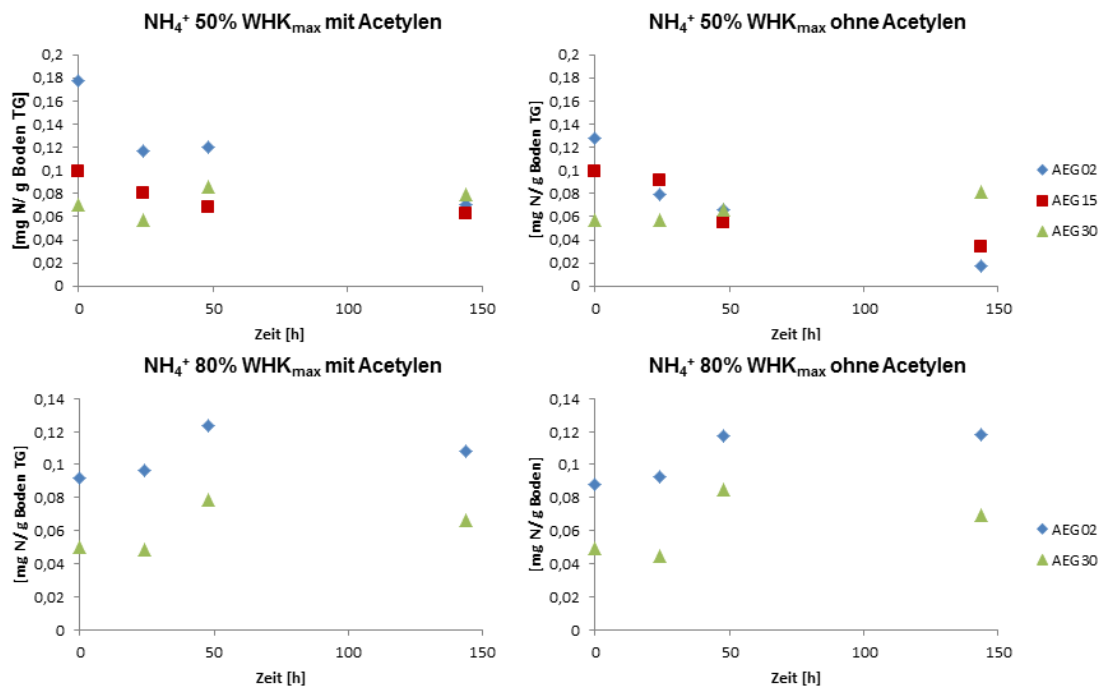


Abbildung A.3.: Verlauf der mittleren Ammoniumkonzentrationen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% des WHK_{max} (oben) und 80% des WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts).

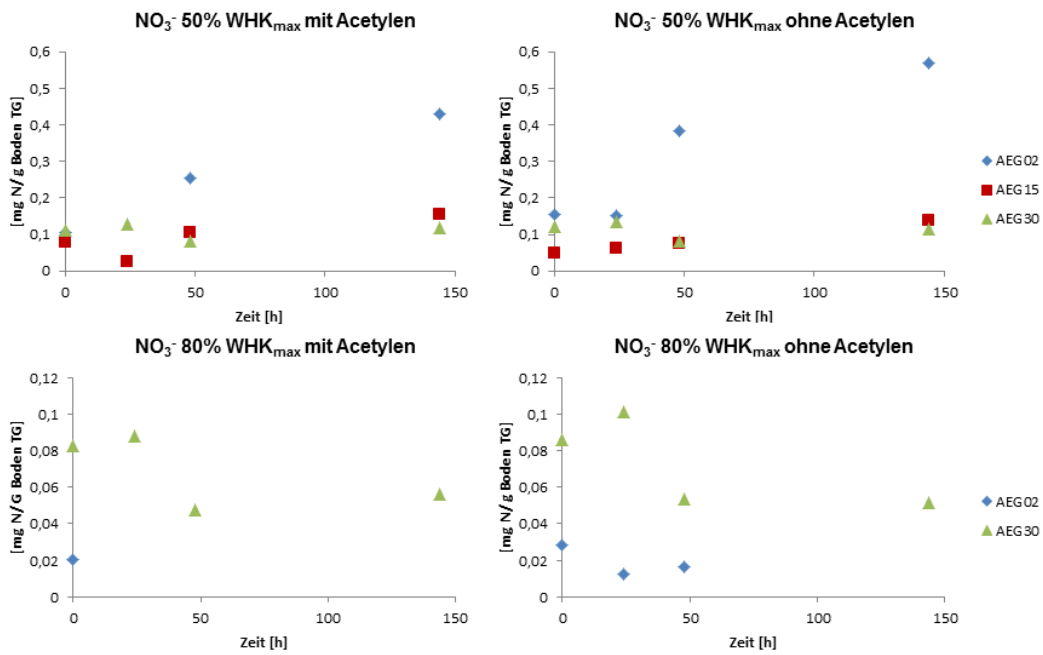


Abbildung A.4.: Verlauf der mittleren Nitratkonzentrationen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% des WHK_{max} (oben) und 80% des WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts).

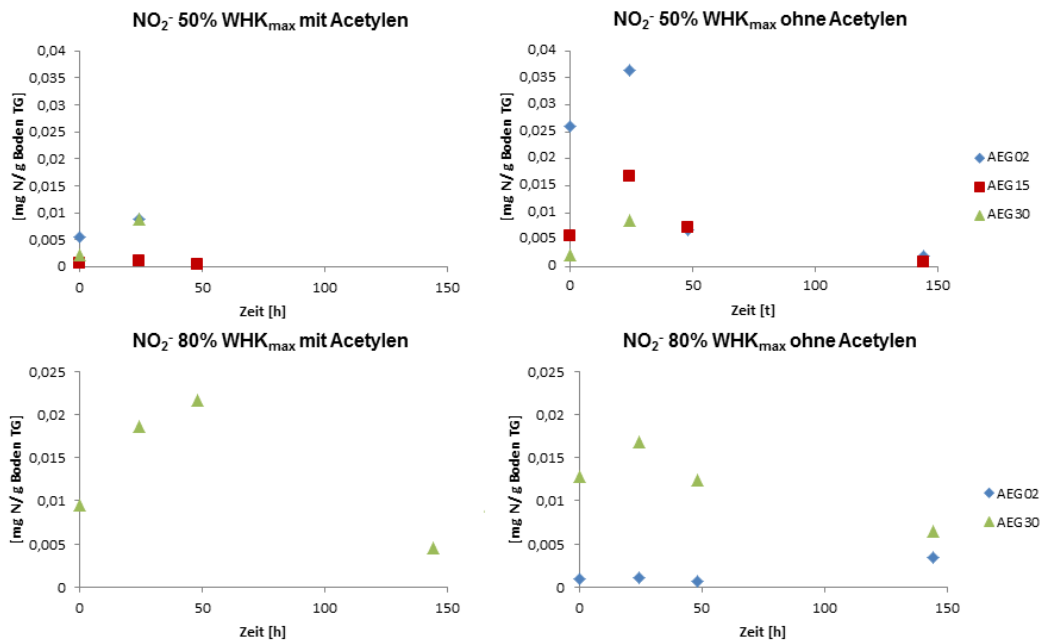


Abbildung A.5.: Verlauf der mittleren Nitritkonzentrationen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% des WHK_{max} (oben) und 80% des WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts).

A.2.3. Dynamik der DOC-Konzentrationen

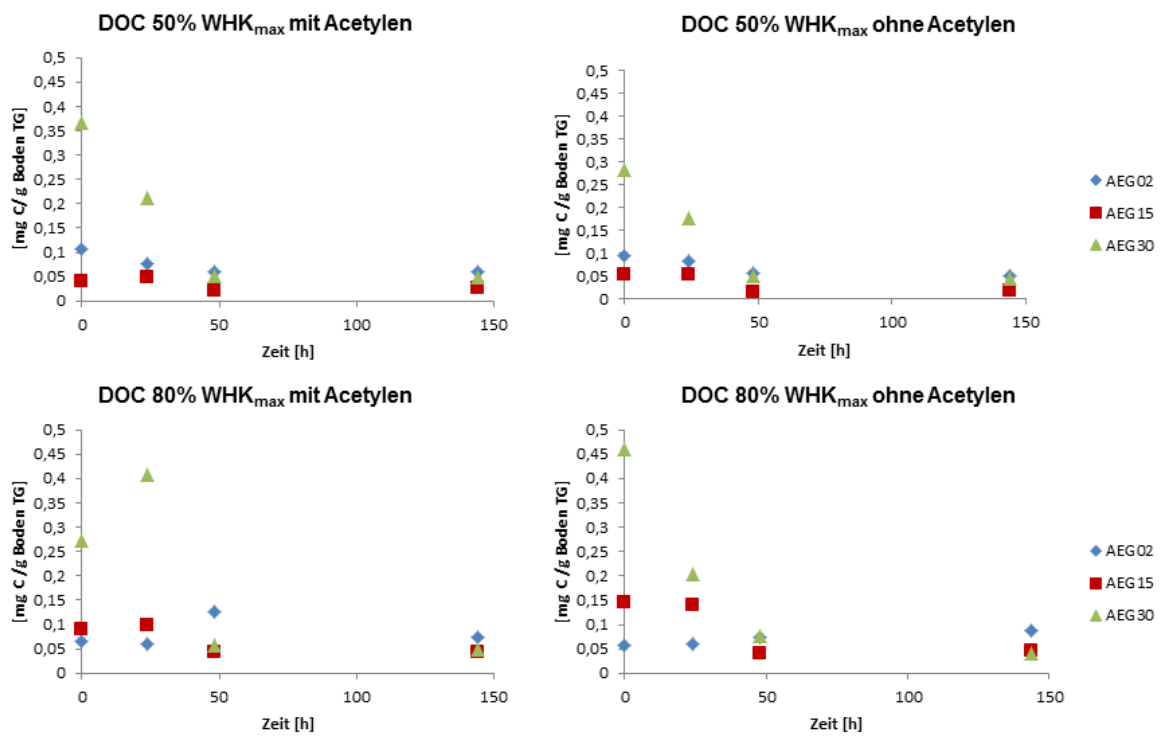
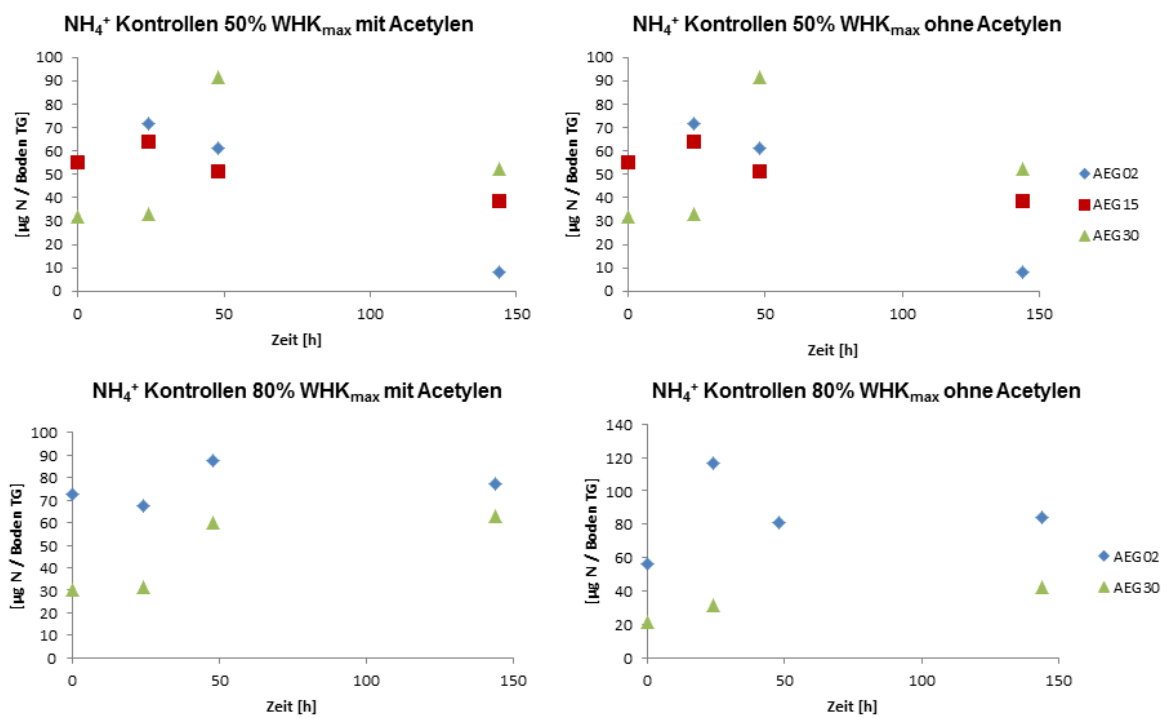


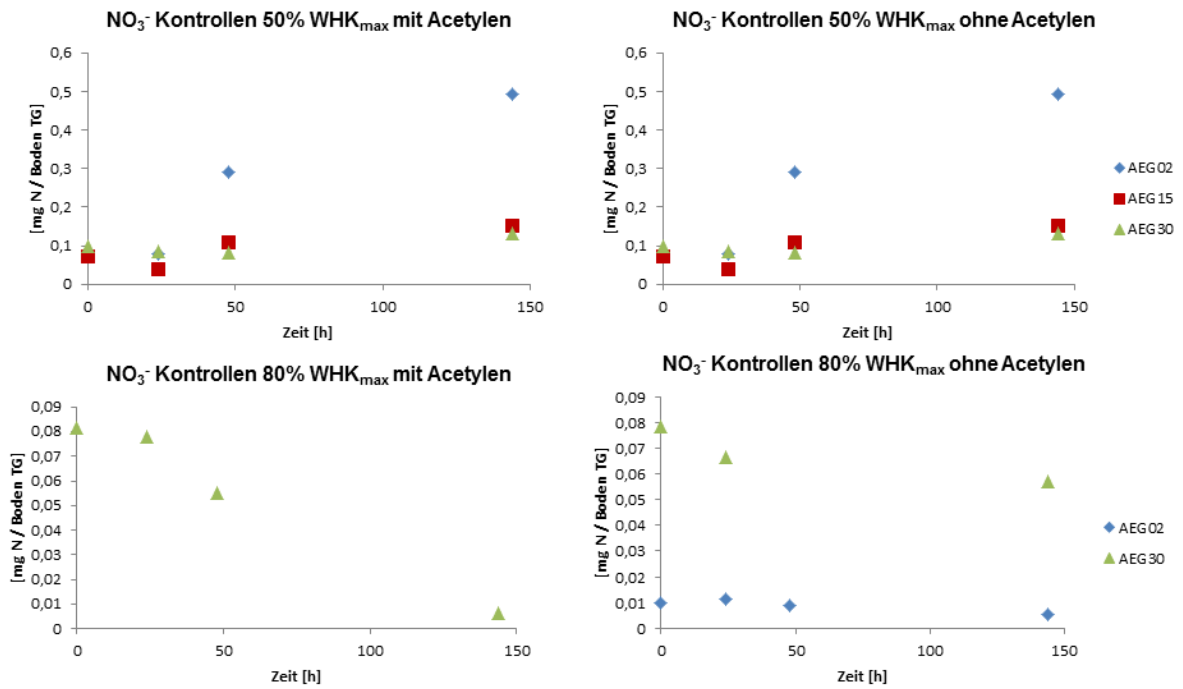
Abbildung A.6.: Verlauf der mittleren Konzentrationen des gelösten organischer Kohlenstoffs (DOC) für die drei Standorte AEG 02, AEG 15 und AEG 30 bei 50% WHK_{max} (oben) und 80% WHK_{max} (unten) und mit (links) und ohne (rechts) Acetylenzugabe.

A.3. Ergebnisse der Kontrollen

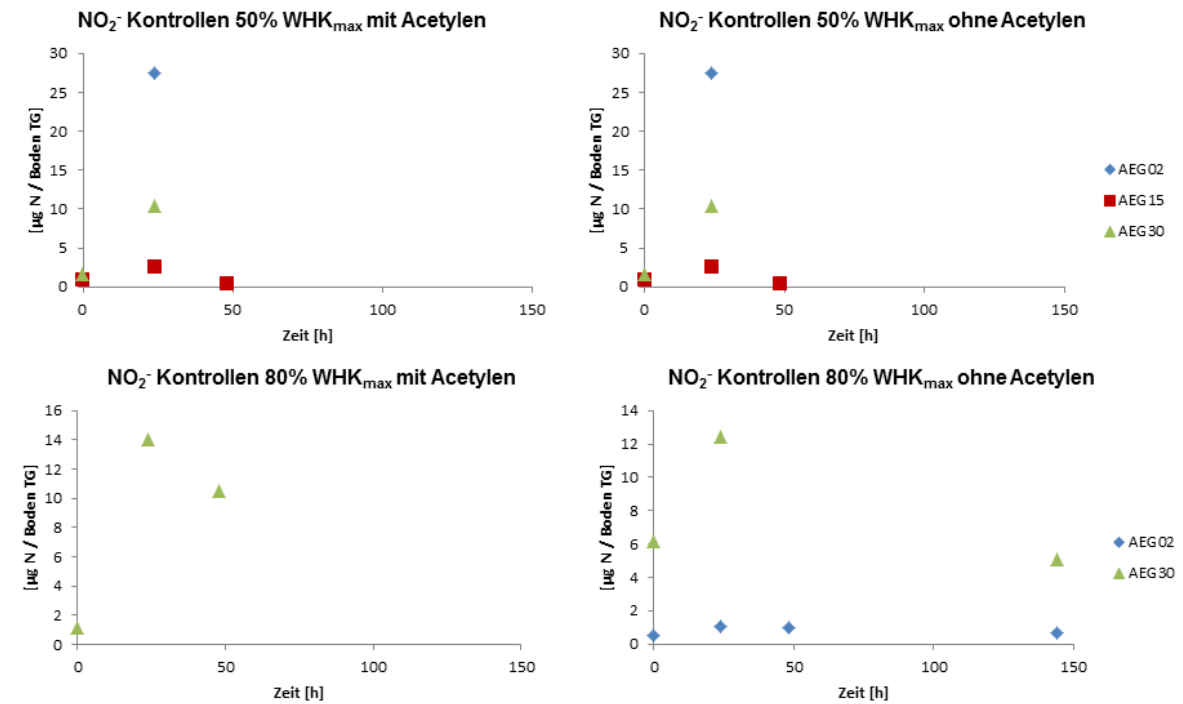
Abbildungen für die Dynamik von Ammonium, Nitrit und Nitrat in den Kontrollen



Verlauf der Ammoniumkonzentrationen in den Kontrollen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% (oben) und 80% WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts)



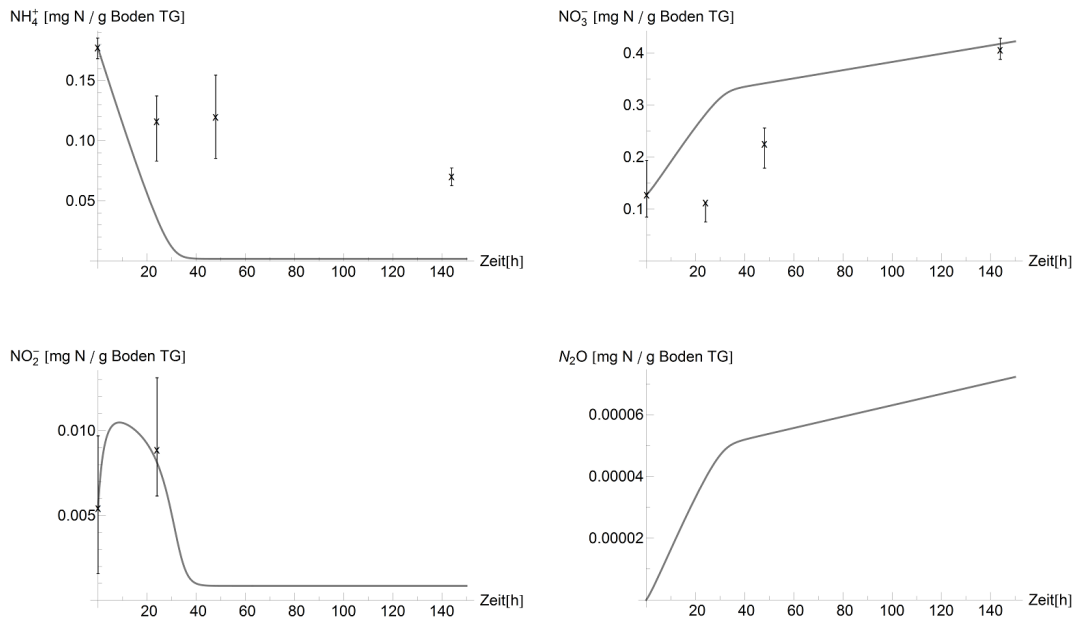
Verlauf der Nitratkonzentrationen in den Kontrollen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% (oben) und 80% WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts)



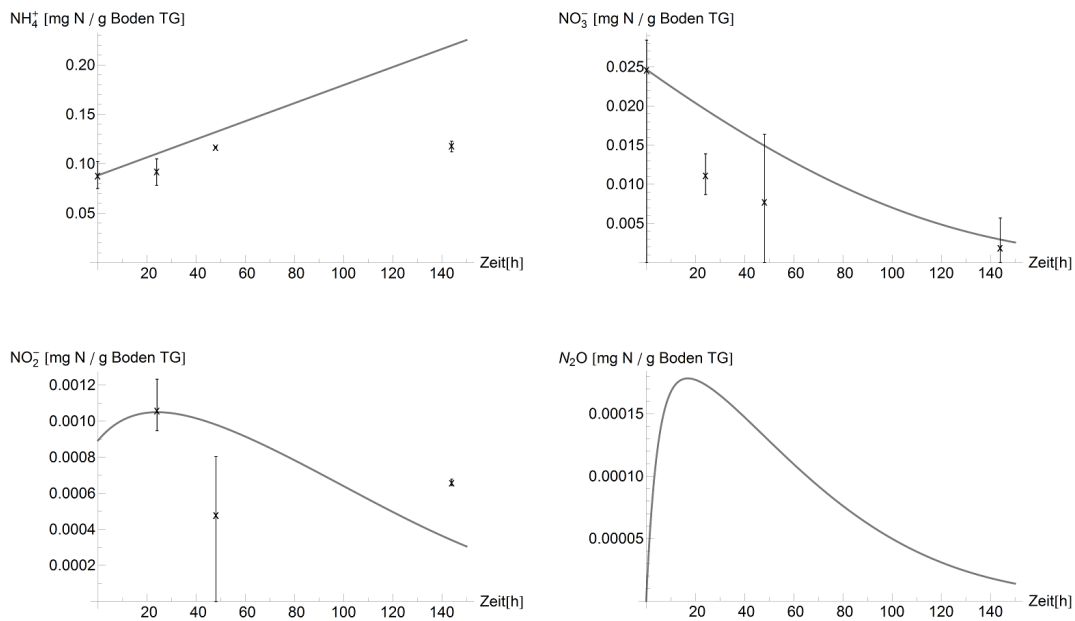
Verlauf der Nitritkonzentrationen in den Kontrollen für die Standorte AEG 02, 15 und 30 bei 50% (oben) und 80% WHK_{max} (unten) mit (links) und ohne Acetylenzugabe (rechts)

B. Parameteroptimierung

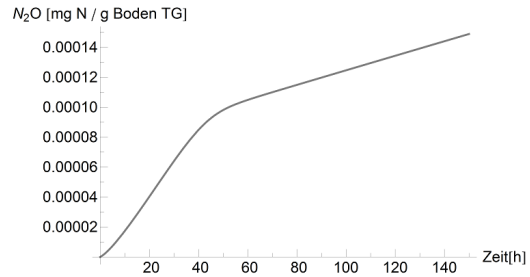
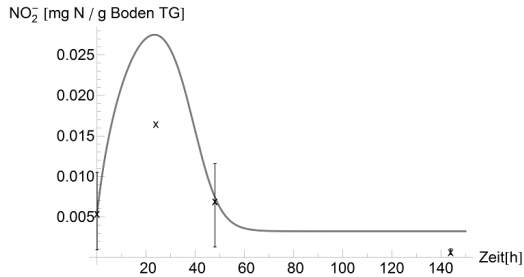
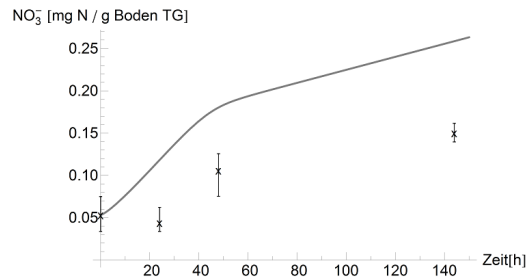
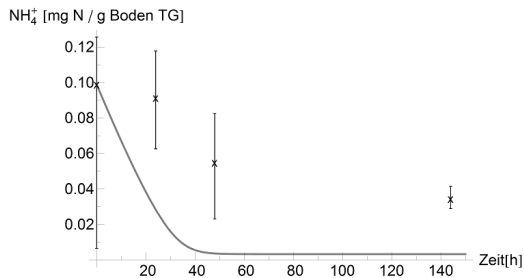
Ergebnisse der Parameteroptimierung für AEG 02, Ansätze A und D, AEG 15 Ansatz B und AEG 30 Ansätze A, B und C.



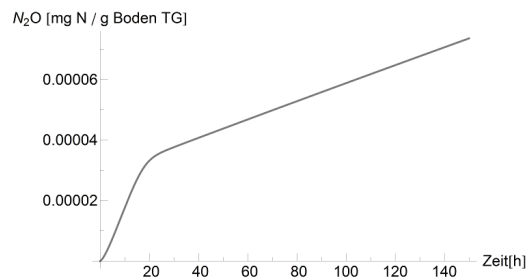
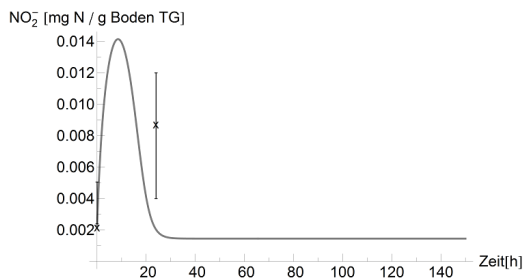
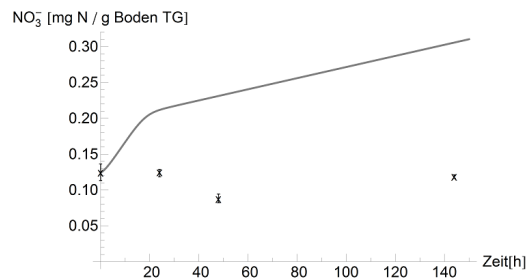
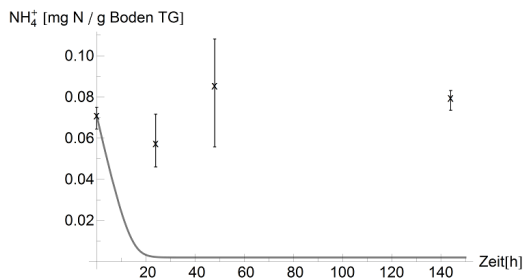
Ergebnisse der Parameteroptimierung für AEG 02 Ansatz A zusammen mit den Mittelwerten und Minimal- und Maximalwerten aus den Experimenten (x).



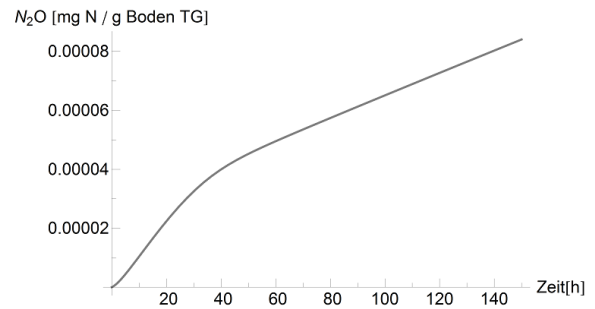
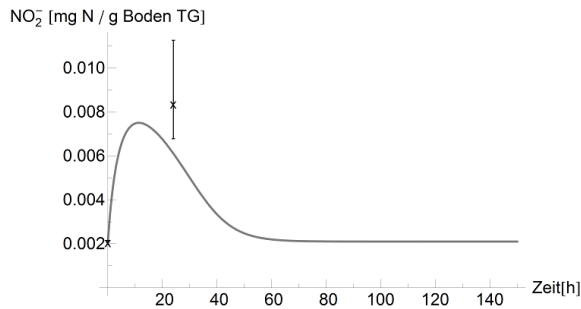
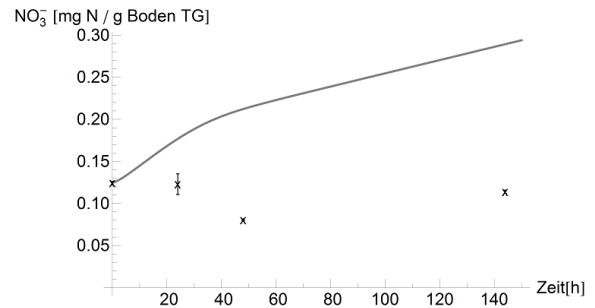
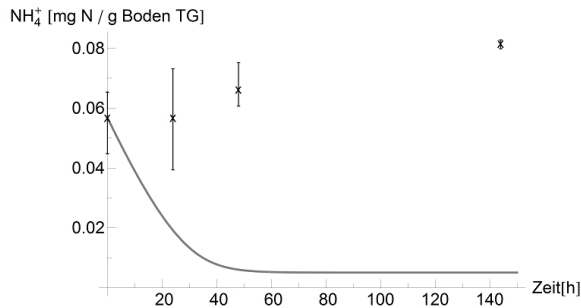
Ergebnisse der Parameteroptimierung für AEG 02 Ansatz D zusammen mit den Mittelwerten und Minimal- und Maximalwerten aus den Experimenten (x).



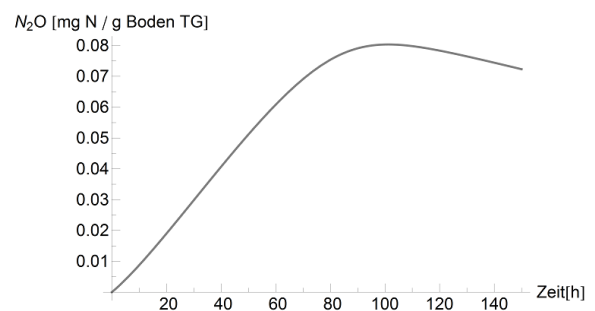
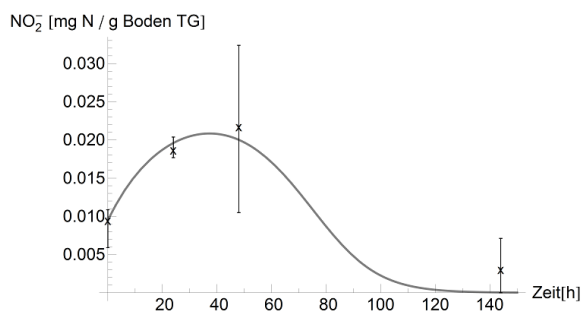
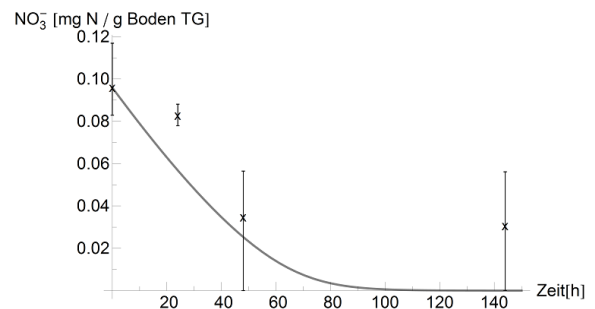
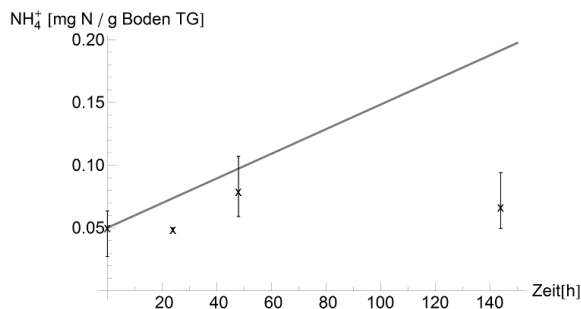
Ergebnisse der Parameteroptimierung für AEG 15 Ansatz B zusammen mit den Mittelwerten und Minimal- und Maximalwerten aus den Experimenten (x).



Ergebnisse der Parameteroptimierung für AEG 30 Ansatz A zusammen mit den Mittelwerten und Minimal- und Maximalwerten aus den Experimenten (x).



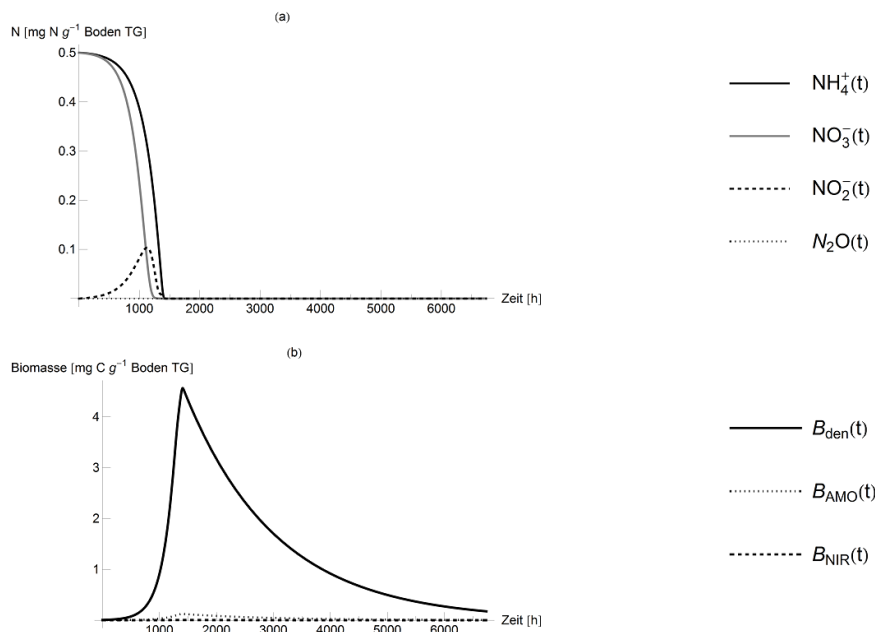
Ergebnisse der Parameteroptimierung für AEG 30 Ansatz B zusammen mit den Mittelwerten und Minimal- und Maximalwerten aus den Experimenten (x).



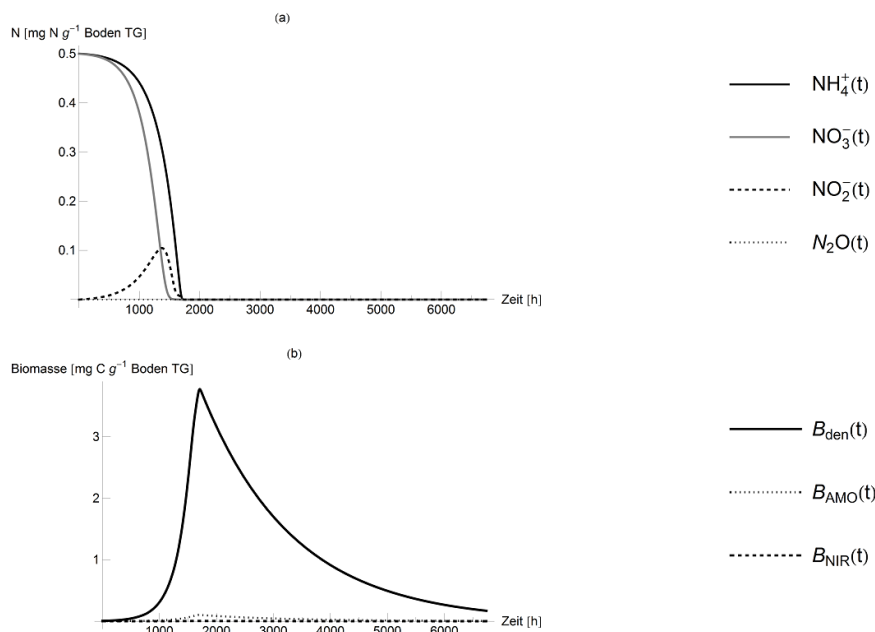
Ergebnisse der Parameteroptimierung für AEG 30 Ansatz C zusammen mit den Mittelwerten und Minimal- und Maximalwerten aus den Experimenten (x).

C. Zeitreihen

Ergebnisse für die Simulationen mit Zeitreihen für HEG 29.

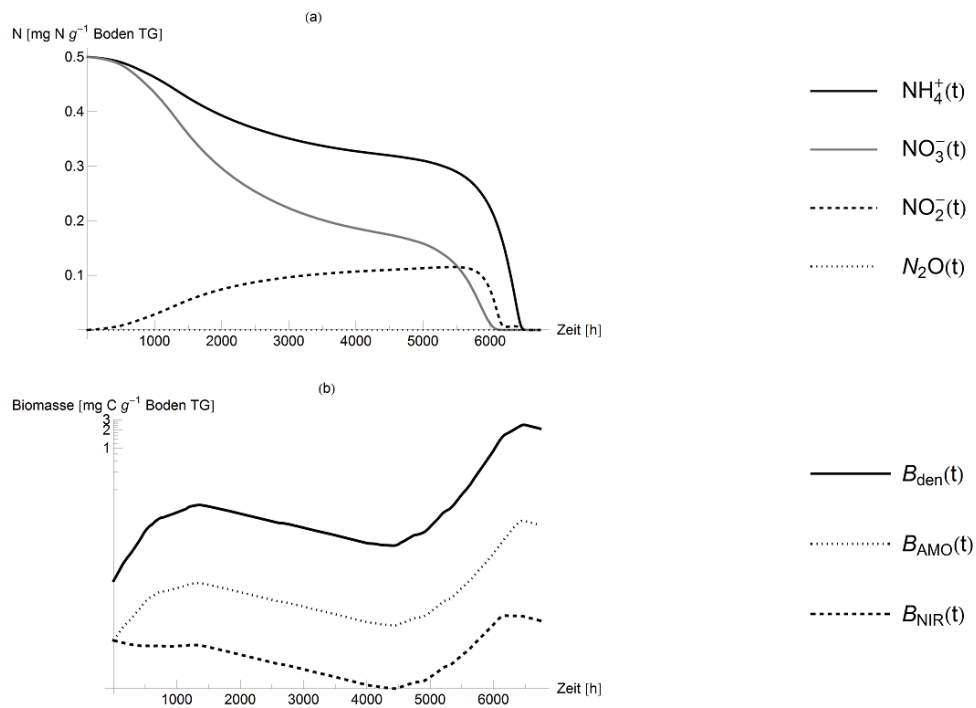


Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse für den Sauerstoffgehalt von HEG 29.



Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse für Sauerstoffgehalt und Bodenfeuchte von HEG 29.

Dynamik der Stickstoffverbindungen und der mikrobiellen Biomasse unter der Sauerstoff- und Temperaturzeitreihe von HEG 29.



Simulierte (a) Stickstoffkonzentrationen und (b) Biomasse in logarithmischer Darstellung für Sauerstoffgehalt und Bodentemperatur von HEG 29.

D. Programme

D.1. Nitrifikations-Denitrifikationsmodell

Mathematica-Programm für das Nitrifikations-Denitrifikationsmodell, inklusive der Funktionen für die Zeitreihen.

Parameterwerte

```
tend = 1100 (* Simulationszeit [h] *);
params :=
{(* Anfänglicher Anteil der mikrobiellen Gruppen an der Gesamtbioasse *)
  Fden → 0.6,
  FAMO → 0.06,
  FNIR → 0.06,
  (* Wachstumsraten Denitrifizierer *)
  μdenNmax → 0.003,
  μdenO2max → 0.006,
  (* Wachstumsraten Nitrifizierer *)
  μnitAMOmax → 0.005,
  μnitNIRmax → 0.005,
  (* Umsatzgeschwindigkeiten Denitrifikation *)
  vdenNO3max → 0.01,
  vdenNO2max → 0.005,
  vdenN2Omax → 0.01,
  (* Umsatzgeschwindigkeiten Nitrifikation *)
  vnitNH4max → 0.015,
  vnitNO2max → 0.03,
  (* Halb-Sättigungskonstanten*)
  KC → 0.0039,
  KO → 0.02,
  KOnit → 0.032,
  Kden → 0.02,
  KNnit → 0.01,
  KNden → 0.01,
  Knit → 0.0129,
  (* Hemmkonstanten *)
  HdenBO → 0.002,
  HdenN → 0.001,
  HdenNO3 → 0.00358,
  (* Erhaltungskoeffizienten *)
  mdenNO3 → 0.0018,
  mdenNO2 → 0.0007,
  mdenN2O → 0.0016,
  mnitNH4 → 0.0007,
  mnitNO2 → 0.0007,
  (* Sterberaten *)
  δnit → 0.625 * 10-3,
  δden → 0.625 * 10-3,
  (* Anfangsbedingungen *)
  OC[t] → 0.1,
  CO2[t] → 0.1,
  B0 → 0.1,
  NH40 → 0.5,
  NO30 → 0.5,
  NO20 → 0.0,
  N2O0 → 0.0 }
```

Gleichungen

(* Hilfsternme für Stickstoffquelle (NO₃, NO₂, N₂O) der Denitrifizierer *)

$$E_{NO_3den}[t] = NO_3[t] / (K_{Nden} + NO_3[t] + NO_2[t] + N_2O[t]);$$

$$E_{NO_2den}[t] = NO_2[t] / (K_{Nden} + NO_3[t] + NO_2[t] + N_2O[t]);$$

$$E_{N_2Oden}[t] = N_2O[t] / (K_{Nden} + NO_3[t] + NO_2[t] + N_2O[t]);$$

(* Hilfsternme für Stickstoffquelle Ammoniumoxidierer *)

$$E_{NH_4nit}[t] = NH_4[t] / (K_{Nnit} + NH_4[t]);$$

(* Hilfsternme für Stickstoffquelle Nitritoxidierer *)

$$E_{NO_2nit}[t] = NO_2[t] / (K_{Nnit} + NO_2[t]);$$

(* aktuelle Wachstumsrate der Ammoniumoxidierer *)

$$\mu_{nitAMO}[t] = \mu_{nitAMO}^{max} * \frac{CO_2[t]}{K_C + CO_2[t]} * \frac{NH_4[t]}{NH_4[t] + K_{nit}} * \frac{O_2[t]}{K_{Onit} + O_2[t]} * \frac{NH_4[t]}{NH_4[t] + K_{Nnit}};$$

(* relative Umsatzgeschwindigkeit von NH₄ zu NO₂ bei Nitrifikation *)

$$v_{nitNH_4}[t] = v_{nitNH_4}^{max} * \frac{NH_4[t]}{NH_4[t] + K_{nit}} * \frac{O_2[t]}{K_{Onit} + O_2[t]};$$

(* aktuelle Wachstumsrate der Nitritoxidierer *)

$$\mu_{nitNIR}[t] = \mu_{nitNIR}^{max} * \frac{CO_2[t]}{K_C + CO_2[t]} * \frac{NO_2[t]}{NO_2[t] + K_{nit}} * \frac{O_2[t]}{K_{Onit} + O_2[t]} * \frac{NO_2[t]}{NO_2[t] + K_{Nnit}};$$

(* relative Umsatzgeschwindigkeit von NO₂ zu NO₃ bei Nitrifikation *)

$$v_{nitNO_2}[t] = v_{nitNO_2}^{max} * \frac{NO_2[t]}{NO_2[t] + K_{nit}} * \frac{O_2[t]}{K_{Onit} + O_2[t]};$$

(* aktuelle Wachstumsrate der Denitrifizierer *)

$$\mu_{den}[t] = \left(\mu_{denO_2}^{max} * \frac{O_2[t]}{O_2[t] + K_O} + \mu_{denN}^{max} * \frac{NO_3[t] + NO_2[t] + N_2O[t]}{K_{den} + NO_3[t] + NO_2[t] + N_2O[t]} * \frac{H_{denBO}}{O_2[t] + H_{denBO}} \right) * \frac{NO_3[t] + NO_2[t] + N_2O[t]}{K_{Nden} + NO_3[t] + NO_2[t] + N_2O[t]} * \frac{OC[t]}{K_C + OC[t]};$$

(* aktuelle Umsatzgeschwindigkeit von NO₃ zu NO₂ bei Denitrifikation *)

$$v_{denNO_3}[t] = v_{denNO_3}^{max} * \frac{NO_3[t]}{K_{den} + NO_3[t]} * \frac{H_{denN}}{H_{denN} + O_2[t]};$$

(* aktuelle Umsatzgeschwindigkeit von NO₂ zu N₂O bei Denitrifikation *)

$$v_{denNO_2}[t] = v_{denNO_2}^{max} * \frac{NO_2[t]}{K_{den} + NO_2[t]} * \frac{H_{denN}}{H_{denN} + O_2[t]};$$

(* aktuelle Umsatzgeschwindigkeit von N₂O zu N₂ bei Denitrifikation *)

$$v_{denN_2O}[t] = v_{denN_2O}^{max} * \frac{N_2O[t]}{K_{den} + N_2O[t]} * \frac{H_{denNO_3}}{NO_3[t] + H_{denNO_3}} * \frac{H_{denN}}{H_{denN} + O_2[t]};$$

Differentialgleichungen und Zustandsgrößen

```
(* Differentialgleichungen *)
DGLs = {
  Bden'[t] == (μden[t] - δden) * Bden[t],
  BAMO'[t] == (μnitAMO[t] - δnit) * BAMO[t],
  BNIR'[t] == (μnitNIR[t] - δnit) * BNIR[t],
  NH4'[t] == -vnitNH4[t] * BAMO[t] - mnitNH4 * ENH4nit[t] * BAMO[t],
  NO3'[t] == vnitNO2[t] * BNIR[t] - vdenNO3[t] * Bden[t] - mdenNO3 * ENO3den[t] * Bden[t],
  NO2'[t] == (vdenNO3[t] - vdenNO2[t]) * Bden[t] + vnitNH4[t] * BAMO[t] -
    vnitNO2[t] * BNIR[t] - mdenNO2 * ENO2den[t] * Bden[t] - mnitNO2 * ENO2nit[t] * BNIR[t],
  (N2O)'[t] == (vdenNO2[t] - vdenN2O[t]) * Bden[t] - mdenN2O * EN2Oden[t] * Bden[t],

  Bden[0] == B0 * Fden,
  BAMO[0] == B0 * FAMO,
  BNIR[0] == B0 * FBNIR,
  NH4[0] == NH40,
  NO3[0] == NO30,
  NO2[0] == NO20,
  N2O[0] == N2O0
};

(* Zustandsgrößen *)
variables = {Bden, BAMO, BNIR, NH4, NO3, NO2, N2O};
```

Lösung des Differentialgleichungssystems mit konstantem Sauerstoffgehalt

```
(* transient *)
sRef = NDSolve[
  DGLs /. params /. O2[t] → .15, variables, {t, 0, tend}, MaxStepSize → 1][[1]];

(* aerob *)
sPlus = NDSolve[
  DGLs /. params /. O2[t] → 1, variables, {t, 0, tend}, MaxStepSize → 1][[1]];

(* anaerob *)
sMinus = NDSolve[
  DGLs /. params /. O2[t] → 0, variables, {t, 0, tend}, MaxStepSize → 1][[1]];
```

Einfluss der Zeitreihen für Wassergehalt und Temperatur

Der jeweilige Term wird an die mikrobiellen Wachstumsraten multipliziert.

```
(* Wassergehalt *)
EinflussWG[t] = WG[t]^5 / (30^5 + WG[t]^5);

(* Temperatur in °C *)
EinflussT[t] = Exp[-(T[t] - 25)^4 / (15^4)];
```

Berechnung des Sauerstoffgehalts aus dem Wassergehalt

WG ist eine Zeitreihe für den Wassergehalt.

```
O2[WG_] := If[WG ≤ 5, 0,
  If[WG ≤ 10, 1 / 5^2 * (WG - 5)^2 * 100, 100 - WG^4 / ((WG - 120)^4 + 100^4) * 100]];
```

Düngung und Viehbesatz

Terme werden an die Differentialgleichungen für NH_4 und NO_3 addiert.

```
Dünger1$HEG03 = 0.0012;
Dünger2$HEG03 = 0.0005;
Dünger$HEG29 = 0.0011;
Ausscheidungen$HEG29 = 0.000018;

(* HEG 03: Zweimalige Düngung *)
InputNH4[t] = Dünger1$HEG03 /  $\sqrt{\pi * 7}$  * Exp[-(t - 120)^2 / 7^2] +
  Dünger2$HEG03 /  $\sqrt{\pi * 7}$  * Exp[-(t - 1150)^2 / 7^2];
InputNO3[t] = Dünger1$HEG03 /  $\sqrt{\pi * 7}$  * Exp[-(t - 120)^2 / 7^2] +
  Dünger2$HEG03 /  $\sqrt{\pi * 7}$  * Exp[-(t - 1150)^2 / 7^2];

(* HEG 29: Einmalige Düngung und 14tägiger Viebesatz *)
InputNH4[t] = Dünger$HEG29 /  $\sqrt{\pi * 7}$  * Exp[-(t - 120)^2 / 7^2] +
  If[1150 < t ≤ 1486, Ausscheidungen$HEG29, 0];
InputNO3[t] = Dünger$HEG29 /  $\sqrt{\pi * 7}$  * Exp[-(t - 120)^2 / 7^2];
```

D.2. Sensitivitätsanalyse

Mathematica-Programme für die Sensitivitätsanalyse. Aufgeteilt in Methodendefinitionen, Modelldefinition 1 (für die erste CTV-Analyse), Modelldefinition 2 (für die zweite CTV-Analyse), CTV Analyse 1 und CTV Analyse 2.

D.2.1. Methodendefinitionen

Methodendefinitionen

Default-Werte

```
(* Ausgabegenauigkeit für die Monte Carlo-Ergebnisse *)
MCCoutPrecision = 1.0*^-5;
```

■ Output settings

```
(* Quantile für die Ausgabe bei der Statistik der Monte Carlo-
Simulationen *)
outputStatQuantiles = {0.0, 0.05, 0.10, 0.5, 0.90, 0.95, 1.00};

(* Definition der Default Histogrammkästengrenzen *)
defaultHistogramMin = 0;
defaultHistogramMax = 1001;
defaultHistogramBinSize = 1;
defaultHistogramBins =
  {defaultHistogramMin, defaultHistogramMax, defaultHistogramBinSize};
```

Interne Hilfsfunktionen

■ Transposition von irregulären 2D-Tabellen

```
(* Tauscht Zeilen und Spalten in einer Tabelle auch
wenn sich Spalten und zeilenanzahl unterscheiden. *)
(* tbl_ : Die zu transponierende Tabelle; filler : Symbol,
das eingefügt wird, wenn die taktuelle Zeile in der
Originaltabelle kürzer ist als die insgesamt längste *)
TransposeIrregular[tbl_, filler_ : "" ] := Block[{res, iMax, jMax},
  iMax = Max[Table[Length[tbl[[k]]], {k, Length[tbl]}]];
  res = Table[filler, {i, iMax}, {k, Length[tbl]}];
  For[j = 1, j ≤ Length[tbl], j++,
    For[i = 1, i ≤ Length[tbl[[j]]], i++,
      res[[i, j]] = tbl[[j, i]];]; res]
```

■ Beobachtungszeitpunktdaten

```
(* Generiert Beobachtungszeitpunkte
vars: Liste von Zustandgrößenlist of observed state variables,
params : Parameterliste,
times : Liste mit Zeiten für jede beobachtete Zustansgröße
tSymbol (optional): Symbol für die Zeit (default: t) *)
GenerateObsPointData[vars_, params_, times_, tSymbol_: t] :=
Block[{obsPoints, obsTimes, varRanges, i, lb, ub, varLabels, paramRange},
obsPoints =
Join[
Flatten[
Table[TimeSeriesForVar[vars[[i]], times[[i]]], {i, Length[vars]}]],
params];
obsTimes = Join[Flatten[times], Table[0, {i, Length[params]}]];
varRanges = {};
lb = 1;
For[i = 1, i ≤ Length[vars], i++,
Module[{},
ub = lb + Length[times[[i]]] - 1;
AppendTo[varRanges, lb ;; ub];
lb = ub + 1;]];
varLabels = Table[
ToString[vars[[i]]] <> "[" <> ToString[tSymbol] <> "]", {i, Length[vars]}];
paramRange = lb ;; lb + Length[params] - 1;
{"Observation points" → obsPoints, "Observation times" → obsTimes,
"Var labels" → varLabels,
"Var ranges" → varRanges, "Params range" → paramRange}]
```

■ Test, ob alle Elemente einer Liste gleich sind

```
AllEqual[list_] := Count[list, list[[1]]] == Length[list]
```

■ Numerische Lösung eines Parametersets

```
(* Löst ein System von Differentialgleichungen mit gegebenen Parametern *)
(* eqns = Gleichungen,
vars = Zustandsgrößen,
tRange = Zeitraum {Name, Min, Max},
params = konstante Parameterwerte in Form von Austauschregeln,
z.B. {p1→1, p2→0.5},
(options = NDSolve Optionen) *)
NumSolution[eqns_, vars_, tRange_, params_, solveOptions_: {}] :=
NDSolve[eqns /. Evaluate[params], vars, tRange, solveOptions];
```

■ Berechnung der Statistiken des Ergebnissets

```
(* Berechnung der Statistiken (Mittelwert, Standardabweichung,
Variationskoeffizient und Schiefe an den Beobachtungspunkten)
für ein Monte Carlo-Ergebnisset *)
MCResultStats[raw_, resultForm_] := Block[{M, SD, CV, Skew, rawTrans, i, q},
  rawTrans = Transpose[raw];
  M = {"Mean"};
  SD = {"SD"};
  CV = {"CV"};
  Skew = {"Skewness"};
  For[i = 1, i ≤ Length[rawTrans], i++,
    AppendTo[M, Round[Mean[rawTrans[[i]]], MCooutPrecision] ];
    AppendTo[SD, Round[StandardDeviation[rawTrans[[i]]], MCooutPrecision] ];
    AppendTo[CV,
      If[Mean[rawTrans[[i]]] ≠ 0, Round[StandardDeviation[rawTrans[[i]]] /
        Abs[Mean[rawTrans[[i]]], MCooutPrecision],
        Indeterminate] ];
    AppendTo[Skew, Round[If[AllEqual[rawTrans[[i]]],
      Indeterminate, Skewness[rawTrans[[i]]], MCooutPrecision] ]];];
  {Prepend[resultForm, " "], M, SD, CV, Skew}];
```

■ Berechnung der Quantile des Ergebnissets

```
MCRResultQuantiles[raw_, resultForm_, quantiles_: outputStatQuantiles] :=
Block[{rawTrans, result, i, q},
  result = Table[
    Which[quantiles[[q]] == 1.0, {"maximum"},
    quantiles[[q]] == 0.0, {"minimum"},
    quantiles[[q]] == 0.5, {"median"},
    True, {ToString[quantiles[[q]]] <> "-quantile"}],
    {q, Length[outputStatQuantiles] }];
  rawTrans = Transpose[raw];
  For[i = 1, i ≤ Length[rawTrans], i++,
    For[q = 1, q ≤ Length[quantiles], q++,
      AppendTo[result[[q]], Round[
        Quantile[rawTrans[[i]], quantiles[[q]], MCooutPrecision] ]];];];
  Join[{Prepend[resultForm, " "]}, result]]
```

Latin Hypercube Funktionen

```
LHCsample[paramList_, parts_] := Block[{stratInd, invCDFs},
  stratInd = Table[RandomSample[Range[parts]], {i, Length[paramList] }];
  Table[Table[
    paramList[[j, 1]] → InverseCDF[paramList[[j, 2]],
    RandomReal[{(stratInd[[j, i]] - 1) / parts, stratInd[[j, i]] / parts}],
    {j, Length[paramList] }], {i, parts}]]

LHCsamples[paramList_, parts_, iterations_] :=
  Flatten[Table[LHCsample[paramList, parts], {i, iterations}], 1]
```

```

LHCsimulate[eqns_, vars_, tRange_, fixedParams_,
  paramDists_, LHCdiv_, LHCruns_, resultForm_, solveOptions_: {}] :=
Block[{nSolution, result, currentParams, i, LHCsampleData},
  MCstartTime = SessionTime[];
  MCcurrTime = SessionTime[];
  LHCsampleData = LHCsamples[paramDists, LHCdiv, LHCruns];
  MCprogressMaxRuns = LHCdiv * LHCruns;
  result = Table[Block[{}],
    MCcurrTime = SessionTime[];
    MCprogressRuns = i;
    currentParams = Join[LHCsampleData[[i]], fixedParams];
    nSolution =
      NumSolution[eqns, vars, tRange, currentParams, solveOptions][[1]];
    (resultForm /. nSolution /. currentParams), {i, LHCdiv * LHCruns}];
  Round[result, MCOutPrecision] ];

ScenarioDataLHC[eqns_, vars_, tRange_, paramsFixed_,
  paramDists_, LHCdiv_, LHCruns_, resultForm_, solveOptions_] :=
{Join[{"Equations"}, Table[eqns[[i]] // OutputForm, {i, Length[eqns]}]],
  Join[{"solveOptions"},
    Table[solveOptions[[i]] // OutputForm, {i, Length[solveOptions]}]],
  {"LHC divisions", LHCdiv, "iterations", LHCruns,
    "time range", tRange // OutputForm},
  (Join[{"Fixed parameters"}, ToString/@paramsFixed]),
  (Join[{"Parameter Distributions"}, ToString/@paramDists])}

LHCsimOutput[eqns_, vars_, tRange_, fixedParams_,
  paramDists_, LHCdiv_, LHCruns_, obsData_, solveOptions_: {},
  bins_: defaultHistogramBins, comments_: {}, outputRaw_: False] :=
Block[{resultForm, obsTimes, raw, rawOut, binnedOut,
  statOut, quantileOut, scenData, binData},
  resultForm = ("Observation points" /. obsData);
  obsTimes = ("Observation times" /. obsData);
  raw = LHCsimulate[eqns, vars, tRange, fixedParams,
    paramDists, LHCdiv, LHCruns, resultForm, solveOptions];
  rawOut = If[outputRaw, Join[{resultForm}, raw], "raw data not exported"];
  binnedOut = Join[{resultForm}, Transpose[
    Table[BinCounts[Transpose[raw][[i]], bins], {i, Length[resultForm]}]]];
  statOut = MCRresultStats[raw, resultForm];
  quantileOut = MCRresultQuantiles[raw, resultForm];
  scenData = TransposeIrregular[ScenarioDataLHC[eqns, vars, tRange,
    fixedParams, paramDists, LHCdiv, LHCruns, resultForm, solveOptions]];
  binData = {xMin → bins[[1]], xMax → bins[[2]], dx → bins[[3]]};
  {"Binned data" → binnedOut,
    "Statistics" → statOut, "Quantiles" → quantileOut,
    "Observation times" → obsTimes, "Observation data" → obsData,
    "Raw data" → rawOut, "Scenario Data" → scenData,
    "Bin size data" → binData, "Comments" → comments}]

```

Funktionen zur Berechnung der Rankkorrelationen und CTV

■ Extraktion der Rohdaten aus einem MonteCarloOutput[...] Ergebnisset

```
ExtractRawData[MCRresult_] := ("Raw data" /. MCRresult)[[2 ;;]];
```

■ Berechnung von Rank, Korrekturfaktoren und Spearman Rho

```
(* Berechnung von Rängen und Korrekturfaktoren
   (aus MultiDescriptiveStatistics.m) *)
Ranks[zlist_] :=
Block[{splitvals, adjustRank, lisval, ranklist, correctionTerm},
  If[Length[Union[zlist]] === Length[zlist],
    {Ordering[Ordering[zlist]], 0},
    splitvals = Split[
      Transpose[
        {Sort[Transpose[{zlist, Range[Length[zlist]]}], #1[[1]] < #2[[1]] &],
          Range[Length[zlist]]}],
      #1[[1, 1]] - #2[[1, 1]] == 0 &];
    adjustRank[lisval_List] := If[Length[lisval] > 1,
      Block[{oldvals = lisval},
        oldvals[[All, 2]] = Mean[oldvals[[All, 2]]];
        Transpose[{oldvals[[All, 1, 2]], oldvals[[All, 2]]}],
        {{lisval[[1, 1, 2]], lisval[[1, 2]]}}];
    ranklist = Sort[Flatten[Map[adjustRank, splitvals], 1]][[All, 2]];
    correctionTerm = Total[Map[ (#^3 - #) &, Map[Length, splitvals]]] / 12;
    {ranklist, correctionTerm}]]

(* Berechnung Spearman Rho
   (Modifizierte Version der Funktion aus MultiDescriptiveStatistics.m) *)
SpearmanRhoMod[xRanks_, yRanks_, n_] :=
Block[{xrank, yrank, xCorrection, yCorrection, SoS},
  {xrank, xCorrection} = xRanks;
  {yrank, yCorrection} = yRanks;
  SoS = Dot[#, #] &[(xrank - yrank)];
  (1 / 6 (n^3 - n) - SoS - xCorrection - yCorrection) /
  Sqrt[(1 / 6 (n^3 - n) - 2 xCorrection) (1 / 6 (n^3 - n) - 2 yCorrection) ]]
```

```

(* Berechnet die Spearman Rankkorrelationskoeffizienten jedes Parameters
   MCresult : RohdatenErgebnisset,
   obsData : Beobachtungspunkte aus GenerateObsPointData[...] *)
ParamSpearmanCorrelationsRaw[MCresult_, obsData_] :=
Block[{paramsRange, seriesN, varSeries,
  paramSeries, varRanks, paramRanks, result, obsPoints},
  paramsRange = "Params range" /. obsData;
  obsPoints = "Observation points" /. obsData;

  varSeries = Transpose[MCresult[[1 ;;, 1 ;; First[paramsRange] - 1]]];
  paramSeries = Transpose[MCresult[[1 ;;, paramsRange]]];
  varRanks = Table[Ranks[varSeries[[i]]], {i, Length[varSeries]}];
  paramRanks = Table[Ranks[paramSeries[[i]]], {i, Length[paramSeries]}];
  seriesN = Length[varSeries[[1]]];
  Off[Power::infy];
  Off[Infinity::indet];

  result =
  Table[
    Table[
      N[SpearmanRhoMod[
        paramRanks[[paramIndex]], varRanks[[varIndex]], seriesN]],
      {paramIndex, Length[paramSeries]}],
    {varIndex, Length[varSeries]}];

  On[Power::infy];
  On[Infinity::indet];
  Transpose[result]]

(* Berechnet die Spearman Rankkorrelationskoeffizienten jedes Parameters
   MCresult : Ergebnisset *)
ParamSpearmanCorrelations[MCresult_] :=
ParamSpearmanCorrelationsRaw[
  ExtractRawData[MCresult], "Observation data" /. MCresult]

```

■ Transformation von Spearman Rho zu Contribution to Variance (CTV)

```

RankCorrelToCTV[correlData_] := Block[{squares},
  squares = Transpose[
    Table[correlData[[i]] * correlData[[i]], {i, Length[correlData]}]];
  Transpose[Table[squares[[i]] / Total[squares[[i]]],
    {i, Length[squares]}]]];

```

D.2.2. Modelldefinition 1

Modelldefinition 1

In diesem Notebook werden alle modelspezifischen Variablen, Parameter und Gleichungen für den 1. Schritt der CTV-Analysedefiniert.

Modellvariablen und Gleichungen

■ Zustandsgrößen

```
modelVariables = {Bden, Bamo, Bnir, NH4, NO3, NO2, N2O};
```

■ Differentialgleichungen

```
modelEquations = {  
  Bden '[t] == (µden[t] - dden) * Bden[t],  
  Bamo '[t] == (µnitAMO[t] - dnit) * Bamo[t],  
  Bnir '[t] == (µnitNO3[t] - dnit) * Bnir[t],  
  NH4 '[t] == -vnitNH4[t] * Bamo[t] - mnitNH4 * Enh4nit[t] * Bamo[t],  
  NO3 '[t] ==  
    vnitNO2[t] * Bnir[t] - vdenNO3[t] * Bden[t] - mdenNO3 * Eno3den[t] * Bden[t],  
  NO2 '[t] == (vdenNO3[t] - vdenNO2[t]) * Bden[t] +  
    vnitNH4[t] * Bamo[t] - vnitNO2[t] * Bnir[t] -  
    mdenNO2 * Eno2den[t] * Bden[t] - mnitNO2 * Eno2nit[t] * Bnir[t],  
  N2O '[t] == (vdenNO2[t] - vdenN2O[t]) * Bden[t] - mdenN2O * En2oden[t] * Bden[t],  
  
  (* Anfangsbedingungen *)  
  Bden[0] == B0 * Fden,  
  Bamo[0] == B0 * Famo,  
  Bnir[0] == B0 * Fnir,  
  NH4[0] == NH40,  
  NO3[0] == NO30,  
  NO2[0] == NO20,  
  N2O[0] == N2O0  
};
```


■ Zeitabhängige Gleichungen

$$\text{Eno3den}[t_]:= \text{NO3}[t] / (\text{Knden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]);$$

$$\text{Eno2den}[t_]:= \text{NO2}[t] / (\text{Knden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]);$$

$$\text{En2oden}[t_]:= \text{N2O}[t] / (\text{Knden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]);$$

$$\text{Enh4nit}[t_]:= \text{NH4}[t] / (\text{Knnit} + \text{NH4}[t]);$$

$$\text{Eno2nit}[t_]:= \text{NO2}[t] / (\text{Knnit} + \text{NO2}[t]);$$

$$\mu\text{nitAMO}[t_]:= \mu\text{nitAMOmax} * \frac{\text{CO2}}{\text{Kc} + \text{CO2}} * \frac{\text{NH4}[t]}{\text{NH4}[t] + \text{Knit}} * \frac{\text{O2}}{\text{Konit} + \text{O2}} * \frac{\text{NH4}[t]}{\text{NH4}[t] + \text{Knnit}};$$

$$\text{vnitNH4}[t_]:= \text{vnitNH4max} * \frac{\text{NH4}[t]}{\text{NH4}[t] + \text{Knit}} * \frac{\text{O2}}{\text{Konit} + \text{O2}};$$

$$\mu\text{nitNO3}[t_]:= \mu\text{nitNIRmax} * \frac{\text{CO2}}{\text{Kc} + \text{CO2}} * \frac{\text{NO2}[t]}{\text{NO2}[t] + \text{Knit}} * \frac{\text{O2}}{\text{Konit} + \text{O2}} * \frac{\text{NO2}[t]}{\text{NO2}[t] + \text{Knnit}};$$

$$\text{vnitNO2}[t_]:= \text{vnitNO2max} * \frac{\text{NO2}[t]}{\text{NO2}[t] + \text{Knit}} * \frac{\text{O2}}{\text{Konit} + \text{O2}};$$

$$\mu\text{den}[t_]:=$$

$$\left(\mu\text{denO2max} * \frac{\text{O2}}{\text{O2} + \text{Ko}} + \mu\text{denNmax} * \frac{\text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]}{\text{Kden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]} * \frac{\text{HdenBO}}{\text{O2} + \text{HdenBO}} \right) * \frac{\text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]}{\text{Knden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]} * \frac{\text{OC}}{\text{Kc} + \text{OC}};$$

$$\text{vdenNO3}[t_]:= \text{vdenNO3max} * \frac{\text{NO3}[t]}{\text{Kden} + \text{NO3}[t]} * \frac{\text{HdenNO3}}{\text{HdenNO3} + \text{O2}};$$

$$\text{vdenNO2}[t_]:= \text{vdenNO2max} * \frac{\text{NO2}[t]}{\text{Kden} + \text{NO2}[t]} * \frac{\text{HdenNO2}}{\text{HdenNO2} + \text{O2}};$$

$$\text{vdenN2O}[t_]:= \text{vdenN2Omax} * \frac{\text{N2O}[t]}{\text{Kden} + \text{N2O}[t]} * \frac{\text{HdenN}}{\text{NO3}[t] + \text{HdenN}} * \frac{\text{HdenN2O}}{\text{HdenN2O} + \text{O2}};$$

Modellparameter

■ Fixierte Modellparameter

```
fixedParams :=
{OC → 0.1,
 CO2 → 0.1,
 B0 → 0.1,
 NH40 → 0.5,
 NO30 → 0.5,
 NO20 → 0.0,
 N200 → 0.0 }
```

■ Stochastische Modellparameter

```

stochasticParamDists :=
  {Fden → UniformDistribution[{0.01, 0.8}],
   Famo → UniformDistribution[{0.01, 0.6}],
   Fnir → UniformDistribution[{0.01, 0.6}],

   vdenNO3max → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
   vdenNO2max → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
   vdenN2Omax → UniformDistribution[{0.0010, 1}],

   µdenNmax → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
   µdenO2max → UniformDistribution[{0.0001, 1}],

   vnitNH4max → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
   vnitNO2max → UniformDistribution[{0.0001, 1}],

   µnitAMOmax → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
   µnitNIRmax → UniformDistribution[{0.0001, 1}],

   Kc → UniformDistribution[{0.001, 0.017}],
   Ko → UniformDistribution[{0.06 * 10^-6, 0.035 * 10^-2}],
   Konit → UniformDistribution[
     {0.032 * 10^-2 - 0.032 * 10^-2 * 0.75, 0.032 * 10^-2 + 0.032 * 10^-2 * 0.75}],
   Kden → UniformDistribution[{0.02 * 10^-3, 0.03}],
   Knnit → UniformDistribution[{0.2 * 10^-4, 0.02}],
   Knden → UniformDistribution[{0.2 * 10^-4, 0.02}],
   Knit → UniformDistribution[{0.0129 - 0.0129 * 0.75, 0.0129 + 0.0129 * 0.75}],

   HdenBO → UniformDistribution[{0.002 - 0.002 * 0.75, 0.002 + 0.002 * 0.75}],
   HdenNO3 →
     UniformDistribution[{0.001 - 0.001 * 0.75, 0.001 + 0.001 * 0.75}],
   HdenNO2 → UniformDistribution[{0.001 - 0.001 * 0.75, 0.001 + 0.001 * 0.75}],
   HdenN2O → UniformDistribution[{0.001 - 0.001 * 0.75, 0.001 + 0.001 * 0.75}],
   HdenN → UniformDistribution[
     {3.58 * 10^-3 - 3.58 * 10^-3 * 0.75, 3.58 * 10^-3 + 3.58 * 10^-3 * 0.75}],

   mdenNO3 → UniformDistribution[{0.0018, 0.18}],
   mdenNO2 → UniformDistribution[{0.0007, 0.07}],
   mdenN2O → UniformDistribution[{0.0016, 0.16}],
   mnitNH4 → UniformDistribution[{0.0002, 0.2}],
   mnitNO2 → UniformDistribution[{0.0002, 0.2}],

   dnit → UniformDistribution[{0.625 * 10^-3, 0.042}],
   dden → UniformDistribution[{0.625 * 10^-3, 0.042}];

```

Beobachtungsdaten

■ Simulationszeitraum (Zeitsymbol, Min, Max)

```
modelTimeRange = {t, 0, 1500};
```

■ Beobachtungszeitpunkte

```
(* Beobachtungszeitpunkte in Stunden*)
DefaultObsTimes = Range[0, 1500, 10];

(* Beobachtungszeitpunkte für jede Zustandgröße *)
modelVarObsTimes = {
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes};
```

Automatisch generierte Datenpakete

```
stochasticParamList = stochasticParamDists[[All, 1]]
modelObsData =
  GenerateObsPointData[modelVariables, stochasticParamList, modelVarObsTimes, t]
```

D.2.3. Modeldefinition 2

Modelldefinition 2

In diesem Notebook werden alle modelspezifischen Variablen, Parameter und Gleichungen für den 2. Schritt der CTV-Analyse definiert.

Modellvariablen und Gleichungen

■ Zustandsgrößen

```
modelVariables = {Bden, Bamo, Bnir, NH4, NO3, NO2, N2O};
```

■ Differentialgleichungen

```
modelEquations = {  
  Bden'[t] == (μden[t] - dden) * Bden[t],  
  Bamo'[t] == (μnitAMO[t] - dnit) * Bamo[t],  
  Bnir'[t] == (μnitNO3[t] - dnit) * Bnir[t],  
  NH4'[t] == -vnitNH4[t] * Bamo[t] - mnitNH4 * Enh4nit[t] * Bamo[t],  
  NO3'[t] ==  
    vnitNO2[t] * Bnir[t] - vdenNO3[t] * Bden[t] - mdenNO3 * Eno3den[t] * Bden[t],  
  NO2'[t] == (vdenNO3[t] - vdenNO2[t]) * Bden[t] +  
    vnitNH4[t] * Bamo[t] - vnitNO2[t] * Bnir[t] -  
    mdenNO2 * Eno2den[t] * Bden[t] - mnitNO2 * Eno2nit[t] * Bnir[t],  
  N2O'[t] == (vdenNO2[t] - vdenN2O[t]) * Bden[t] - mdenN2O * En2oden[t] * Bden[t],  
  
  (* Anfangsbedingungen *)  
  Bden[0] == B0 * Fden,  
  Bamo[0] == B0 * Famo,  
  Bnir[0] == B0 * Fnir,  
  NH4[0] == NH40,  
  NO3[0] == NO30,  
  NO2[0] == NO20,  
  N2O[0] == N2O0  
};
```

■ Zeitabhängige Gleichungen

$$\text{Eno3den}[t_]:= \text{NO3}[t] / (\text{Knden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]);$$

$$\text{Eno2den}[t_]:= \text{NO2}[t] / (\text{Knden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]);$$

$$\text{En2oden}[t_]:= \text{N2O}[t] / (\text{Knden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]);$$

$$\text{Enh4nit}[t_]:= \text{NH4}[t] / (\text{Knnit} + \text{NH4}[t]);$$

$$\text{Eno2nit}[t_]:= \text{NO2}[t] / (\text{Knnit} + \text{NO2}[t]);$$

$$\mu\text{nitAMO}[t_]:= \mu\text{nitAMOmax} * \frac{\text{CO2}}{\text{Kc} + \text{CO2}} * \frac{\text{NH4}[t]}{\text{NH4}[t] + \text{Knit}} * \frac{\text{O2}}{\text{Konit} + \text{O2}} * \frac{\text{NH4}[t]}{\text{NH4}[t] + \text{Knnit}};$$

$$\text{vnitNH4}[t_]:= \text{vnitNH4max} * \frac{\text{NH4}[t]}{\text{NH4}[t] + \text{Knit}} * \frac{\text{O2}}{\text{Konit} + \text{O2}};$$

$$\mu\text{nitNO3}[t_]:= \mu\text{nitNIRmax} * \frac{\text{CO2}}{\text{Kc} + \text{CO2}} * \frac{\text{NO2}[t]}{\text{NO2}[t] + \text{Knit}} * \frac{\text{O2}}{\text{Konit} + \text{O2}} * \frac{\text{NO2}[t]}{\text{NO2}[t] + \text{Knnit}};$$

$$\text{vnitNO2}[t_]:= \text{vnitNO2max} * \frac{\text{NO2}[t]}{\text{NO2}[t] + \text{Knit}} * \frac{\text{O2}}{\text{Konit} + \text{O2}};$$

$$\mu\text{den}[t_]:=$$

$$\left(\mu\text{denO2max} * \frac{\text{O2}}{\text{O2} + \text{Ko}} + \mu\text{denNmax} * \frac{\text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]}{\text{Kden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]} * \frac{\text{HdenBO}}{\text{O2} + \text{HdenBO}} \right) * \frac{\text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]}{\text{Knden} + \text{NO3}[t] + \text{NO2}[t] + \text{N2O}[t]} * \frac{\text{OC}}{\text{Kc} + \text{OC}};$$

$$\text{vdenNO3}[t_]:= \text{vdenNO3max} * \frac{\text{NO3}[t]}{\text{Kden} + \text{NO3}[t]} * \frac{\text{HdenNO3}}{\text{HdenNO3} + \text{O2}};$$

$$\text{vdenNO2}[t_]:= \text{vdenNO2max} * \frac{\text{NO2}[t]}{\text{Kden} + \text{NO2}[t]} * \frac{\text{HdenNO2}}{\text{HdenNO2} + \text{O2}};$$

$$\text{vdenN2O}[t_]:= \text{vdenN2Omax} * \frac{\text{N2O}[t]}{\text{Kden} + \text{N2O}[t]} * \frac{\text{HdenN}}{\text{NO3}[t] + \text{HdenN}} * \frac{\text{HdenN2O}}{\text{HdenN2O} + \text{O2}};$$

Modellparameter

■ Fixierte Modellparameter

```
fixedParams :=
{Fden → 0.6,
 vdenNO3max → 0.01,
 vdenNO2max → 0.005,
 vdenN2Omax → 0.01,
 vnitNH4max → 0.015,
 vnitNO2max → 0.03,
 Kc → 0.0039,
 Ko → 0.02,
 Konit → 0.032,
 Kden → 0.02,
 Knnit → 0.01,
 Knden → 0.01,
 Knit → 0.0129,
 HdenBO → 0.002,
 HdenNO3 → 0.001,
 HdenNO2 → 0.001,
 HdenN2O → 0.001,
 HdenN → 0.00358,
 mdenNO3 → 0.0018,
 mdenNO2 → 0.0007,
 mdenN2O → 0.0016,
 mnitNO2 → 0.007,
 OC → 0.1,
 CO2 → 0.1,
 B0 → 0.1,
 NH40 → 0.5,
 NO30 → 0.5,
 NO20 → 0.0,
 N200 → 0.0
}
```

■ Stochastische Modellparameter

```
stochasticParamDists :=
{Famo → UniformDistribution[{0.01, 0.6}],
 Fnir → UniformDistribution[{0.01, 0.6}],
 μdenNmax → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
 μdenO2max → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
 μnitAMOmax → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
 μnitNIRmax → UniformDistribution[{0.0001, 1}],
 mnitNH4 → UniformDistribution[{0.0002, 0.2}],
 dnit → UniformDistribution[{0.625 * 10^-3, 0.042}],
 dden → UniformDistribution[{0.625 * 10^-3, 0.042}]};
```

Beobachtungsdaten

■ Simulationszeitraum (Zeitsymbol, Min, Max)

```
modelTimeRange = {t, 0, 1300};
```

■ Beobachtungszeitpunkte

```
(* Beobachtungszeitpunkte in Stunden*)
DefaultObsTimes = {10, 100, 300, 700, 1000, 1300};

(* Beobachtungszeitpunkte für jede Zustandgröße *)
modelVarObsTimes = {
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes,
  DefaultObsTimes};
```

Automatisch generierte Datenpakete

```
stochasticParamList = stochasticParamDists[[All, 1]]
modelObsData =
  GenerateObsPointData[modelVariables, stochasticParamList, modelVarObsTimes, t]
```


D.2.4. CTV-Analyse 1

CTV Analyse 1

Gibt diejenigen Parameter aus, die für eine bestimmte Anzahl von Zeitpunkten einen bestimmten Wert der CTV - Analyse überschreiten.

Es werden also Parameter ausgewählt, die über einen gewissen Zeitraum einen größeren Einfluss auf die Varianz der Zustandsgrößen haben.

Settings

```
runs = 1000; (* Anzahl der Latin Hypercube Durchläufe *)
signLevel = 0.1; (* Prozentzahl,
die die Parameter in der CTV-Analyse für numTimes überschreiten müssen *)
numTimes = 10; (* Anzahl der male,
die die Parameter signLevel überschreiten müssen *)
numObsTimes = 101; (* Anzahl der Beobachtungspunkte *)
numStateVars = 7; (* Anzahl der Zustandsgrößen *)
numStockParams = 31; (* Anzahl der stochastischen Parameter *)
```

CTV-Analyse

■ Aerob

```
modelResultsAerob = LHCsimOutput[modelEquations /. 02 -> .2,
  modelVariables, modelTimeRange, fixedParams, stochasticParamDists,
  runs, 10, modelObsData, {}, defaultHistogramBins, {}, True];

correlationTableAerob = ParamSpearmanCorrelations[modelResultsAerob];
ctvAerob = ShowCTVTable[correlationTableAerob, modelObsData];

For[zi = 1, zi <= numStateVars, zi++,
  For[pi = 2, pi <= numStockParams + 1,
    pi++, (* pi max: number stochastic parameters + 2 *)
    (* 101: number of observation points *)
    If[Length@Select[Drop[Transpose[ctvAerob[[1, 1]]][[pi]], 1][[
      1 + (zi - 1) * numObsTimes ;; numObsTimes + (zi - 1) * numObsTimes]],
      # > signLevel &] > numTimes,
      Print["state variable:" <> ToString [Transpose[ctvAerob[[1, 1]]][[
        1, 2 + (zi - 1) * numObsTimes]]] <> "Parameter:" <>
        ToString[Transpose[ctvAerob[[1, 1]]][[pi, 1]]] <> ":" <> ToString[
          Length@Select[Drop[Transpose[ctvAerob[[1, 1]]][[pi]], 1][[
            1 + (zi - 1) * numObsTimes ;;
            numObsTimes + (zi - 1) * numObsTimes]], # > signLevel &]]];];];
```

■ Transient

```
modelResultsLow = LHCsimOutput[modelEquations /. 02 -> .05,
  modelVariables, modelTimeRange, fixedParams, stochasticParamDists,
  runs, 10, modelObsData, {}, defaultHistogramBins, {}, True];
```

```

correlationTableLow = ParamSpearmanCorrelations[modelResultsLow];
ctvLow = ShowCTVTable[correlationTableLow, modelObsData];

For[zi = 1, zi ≤ numStateVars, zi++,
  For[pi = 2, pi ≤ numStockParams + 1, pi++,
    If[Length@
      Select[Drop[Transpose[ctvLow[[1, 1]]][[pi]], 1][[1 + (zi - 1) * numObsTimes
        ; numObsTimes + (zi - 1) * numObsTimes]], # > signLevel &] ≥ numTimes,
      Print["state variable:" <> ToString [Transpose[ctvLow[[1, 1]]][[
        1, 2 + (zi - 1) * numObsTimes]]] <> "Parameter:" <>
        ToString[Transpose[ctvLow[[1, 1]]][[pi, 1]]] <> ":" <> ToString[
          Length@Select[Drop[Transpose[ctvLow[[1, 1]]][[pi]], 1][[
            1 + (zi - 1) * numObsTimes ; numObsTimes + (zi - 1) * numObsTimes]],
            # > signLevel &]]];]]

```

■ Anaerob

```

modelResultsAnaerob = LHCsimOutput [modelEquations /. 02 → 0,
  modelVariables, modelTimeRange, fixedParams, stochasticParamDists,
  runs, 10, modelObsData, {}, defaultHistogramBins, {}, True];

correlationTableAnaerob = ParamSpearmanCorrelations[modelResultsAnaerob];
ctvAnaerob = ShowCTVTable[correlationTableAnaerob, modelObsData];

For[zi = 1, zi ≤ numStateVars, zi++,
  For[pi = 2, pi ≤ numStockParams + 1, pi++,
    If[Length@Select[
      Drop[Transpose[ctvAnaerob[[1, 1]]][[pi]], 1][[1 + (zi - 1) * numObsTimes
        ; numObsTimes + (zi - 1) * numObsTimes]], # > signLevel &] ≥ numTimes,
      Print["state variable:" <> ToString [Transpose[ctvAnaerob[[1, 1]]][[
        1, 2 + (zi - 1) * numObsTimes]]] <> "Parameter:" <>
        ToString[Transpose[ctvAnaerob[[1, 1]]][[pi, 1]]] <> ":" <> ToString[
          Length@Select[Drop[Transpose[ctvAnaerob[[1, 1]]][[pi]], 1][[
            1 + (zi - 1) * numObsTimes ; numObsTimes + (zi - 1) * numObsTimes]],
            # > signLevel &]]];]]

```

D.2.5. CTV-Analyse 2

CTV - Analyse 2 der relevanten Parameter in Balkendiagrammen für fünf Zeitschritte

Für den Einfluss der relevanten Parameter werden Balkendiagramme über die Beobachtungspunkte erstellt.

```
Needs["PlotLegends`"]
```

Settings

```
runs = 1000; (* Anzahl der Latin Hypercube Durchläufe *)
axeslabel = {"Bden", "BAMO", "BNIR", "NH4", "NO3", "NO2", "N2O"};
(* Namen der Zustandgrößen *)
chartlabel =
  {"FAMO", "FNIR", "μdenNmax", "μdenO2max", "μnitAMOmax", "μnitNIRmax", "mnitAMO", "δnit", "δden"};
(* Namen der relevanten Parameter *)
anzParams = Length[chartlabel]; (* Anzahl der relevanten Parameter *)
numObsTimes = Length[DefaultObsTimes];
(* Anzahl der Beobachtungszeitpunkte *)
numStateVars = Length[axeslabel]; (* Anzahl der Zustandsgrößen *)
num = numStateVars * numObsTimes;
```

CTV-Analyse

■ Aerob

```
modelResultsAerob = LHCsimOutput[modelEquations /. O2 → 1,
  modelVariables, modelTimeRange, fixedParams, stochasticParamDists,
  runs, 10, modelObsData, {}, defaultHistogramBins, {}, True];
correlationTableAerob = ParamSpearmanCorrelations[modelResultsAerob];

ctvAerob = ShowCTVTable[correlationTableAerob, modelObsData];
pListAerob = {};
For[j = 1, j ≤ num, j += numObsTimes,
  list = {};
  For[i = j + 1, i ≤ j + numObsTimes,
    AppendTo[list, Drop[ctvAerob[[1, 1, i]], 1]]; i++];
  AppendTo[pListAerob, BarChart[Transpose[list][[1 ;; anzParams]],
    GridLines → {None, None}, PlotLabel → Style["aerob", 32],
    PlotRange → {Automatic, {0, 1}}, BarSpacing → None,
    BaseStyle → {FontSize → 40, FontFamily → "Arial"}, ChartStyle → "GrayTones",
    ChartLabels → {Placed[chartlabel, Axis, Rotate[#, Pi / 2] &], None},
    ImagePadding → {{50, 10}, {130, 10}}, ImageSize → 1000]]];
pListAerob[[#]] & /@ Range[6];
```

■ Transient

```

modelResultsLow = LHCsimOutput[modelEquations /. O2 -> .15,
  modelVariables, modelTimeRange, fixedParams, stochasticParamDists,
  runs, 10, modelObsData, {}, defaultHistogramBins, {}, True];
correlationTableLow = ParamSpearmanCorrelations[modelResultsLow];

ctvLow = ShowCTVTable[correlationTableLow, modelObsData];
pListLow = {};
For[j = 1, j <= num, j += numObsTimes,
  list = {};
  For[i = j + 1, i <= j + numObsTimes,
    AppendTo[list, Drop[ctvLow[[1, 1, i]], 1]]; i++];
  AppendTo[pListLow,
    BarChart[Transpose[list] [[1 ;; anzParams]], GridLines -> {None, None},
      PlotLabel -> Style["wenig O2", 32], PlotRange -> {Automatic, {0, 1}},
      AxesLabel -> {"", axeslabel[[j + numObsTimes - 1] / numObsTimes]},
      BaseStyle -> {FontSize -> 40, FontFamily -> "Arial"}, ChartStyle -> "GrayTones",
      ChartLabels -> {Placed[chartlabel, Axis, Rotate[#, Pi / 2] &], None},
      ImagePadding -> {{50, 10}, {130, 60}}, ImageSize -> 1000]];]
pListLow[[#]] & /@ Range[6];

```

■ Anaerob

```

modelResultsAnaerob = LHCsimOutput[modelEquations /. O2 -> 0,
  modelVariables, modelTimeRange, fixedParams, stochasticParamDists,
  runs, 10, modelObsData, {}, defaultHistogramBins, {}, True];
correlationTableAnaerob = ParamSpearmanCorrelations[modelResultsAnaerob];

ctvAnaerob = ShowCTVTable[correlationTableAnaerob, modelObsData];
pListAnaerob = {};
For[j = 1, j <= num, j += numObsTimes,
  list = {};
  For[i = j + 1, i <= j + numObsTimes,
    AppendTo[list, Drop[ctvAnaerob[[1, 1, i]], 1]]; i++];
  AppendTo[pListAnaerob,
    BarChart[Transpose[list] [[1 ;; anzParams]], GridLines -> {None, None},
      PlotLabel -> Style["anaerob", 32], PlotRange -> {Automatic, {0, 1}},
      AxesLabel -> {"", axeslabel[[j + numObsTimes - 1] / numObsTimes]},
      BaseStyle -> {FontSize -> 40, FontFamily -> "Arial"}, ChartStyle -> "GrayTones",
      ChartLabels -> {Placed[chartlabel, Axis, Rotate[#, Pi / 2] &], None},
      ImagePadding -> {{50, 10}, {130, 10}}, ImageSize -> 1000]];]
pListAnaerob[[#]] & /@ Range[6];

```

Legende

```

legend = Graphics[Legend[
  {{Graphics[{ColorData["GrayTones", 0], EdgeForm[Black], Rectangle[{0, 1}]}],
    Style["t=10", 38, FontFamily -> "Arial"] },
  {Graphics[{ColorData["GrayTones", 1 / 4], EdgeForm[Black],
    Rectangle[{0, 1}]}], Style["t=100", 38, FontFamily -> "Arial"] },
  {Graphics[{ColorData["GrayTones", 2 / 4], EdgeForm[Black],
    Rectangle[{0, 1}]}], Style["t=200", 38, FontFamily -> "Arial"] },
  {Graphics[{ColorData["GrayTones", 3 / 4], EdgeForm[Black],
    Rectangle[{0, 1}]}], Style["t=500", 38, FontFamily -> "Arial"] },
  {Graphics[{ColorData["GrayTones", 1], EdgeForm[Black], Rectangle[{0, 1}]}],
    Style["t=900", 38, FontFamily -> "Arial"] }
  ], LegendShadow -> None, LegendSpacing -> .1, LegendSize -> 1,
  LegendBorderSpace -> 0.5, LegendTextSpace -> 1,
  LegendBorder -> None], ImageSize -> res / 2.8]

```

Balkendiagramme

■ Mikrobielle Biomasse

```

Grid[{
  {Style["(a)", 40, FontFamily -> "Arial"], Style["(b)", 40, FontFamily -> "Arial"],
    Style["(c)", 40, FontFamily -> "Arial"]},
  {pListAerob[[1]], pListAerob[[2]], pListAerob[[3]], legend},
  {Style["(d)", 40, FontFamily -> "Arial"], Style["(e)", 40,
    FontFamily -> "Arial"], Style["(f)", 40, FontFamily -> "Arial"]},
  {pListLow[[1]], pListLow[[2]], pListLow[[3]]},
  {Style["(g)", 40, FontFamily -> "Arial"], Style["(h)", 40,
    FontFamily -> "Arial"], Style["(i)", 40, FontFamily -> "Arial"]},
  {pListAnaerob[[1]], pListAnaerob[[2]], pListAnaerob[[3]]}, Spacings -> 2];

```

■ NH₄ und NO₂

```

Grid[{
  {Style["(a)", 40, FontFamily -> "Arial"],
    Style["(b)", 40, FontFamily -> "Arial"]},
  {pListAerob[[4]], pListAerob[[6]], legend},
  {Style["(c)", 40, FontFamily -> "Arial"],
    Style["(d)", 40, FontFamily -> "Arial"]},
  {pListLow[[4]], pListLow[[6]]},
  {Style["(e)", 40, FontFamily -> "Arial"],
    Style["(f)", 40, FontFamily -> "Arial"]},
  {pListAnaerob[[4]], pListAnaerob[[6]]}, Spacings -> 2];

```

■ NO_3 und N_2O

```
Grid[{
  {Style["(a)", 40, FontFamily → "Arial"],
   Style["(b)", 40, FontFamily → "Arial"]},
  {pListAerob[[5]], pListAerob[[7]], legend},
  {Style["(c)", 40, FontFamily → "Arial"],
   Style["(d)", 40, FontFamily → "Arial"]},
  {pListLow[[5]], pListLow[[7]]},
  {Style["(e)", 40, FontFamily → "Arial"],
   Style["(f)", 40, FontFamily → "Arial"]},
  {pListAnaerob[[5]], pListAnaerob[[7]]}, Spacings → 2];
```


Erklärung über die Eigenständigkeit der erbrachten wissenschaftlichen Leistung

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus anderen Quellen direkt oder indirekt übernommenen Daten und Konzepte sind unter Angabe der Quelle gekennzeichnet.

Weitere Personen waren an der inhaltlichen materiellen Erstellung der vorliegenden Arbeit nicht beteiligt. Insbesondere habe ich hierfür nicht die entgeltliche Hilfe von Vermittlungs- bzw. Beratungsdiensten (Promotionsberater oder andere Personen) in Anspruch genommen. Niemand hat von mir unmittelbar oder mittelbar geldwerte Leistungen für Arbeiten erhalten, die im Zusammenhang mit dem Inhalt der vorgelegten Dissertation stehen.

Die Arbeit wurde bisher weder im In- noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Ort, Datum

Name