

WHNSIM

Water, Heat and Nitrogen Simulation

Autor: B. Huwe

1 Überblick

Das Simulationsmodell WHNSIM wurde im Rahmen des interdisziplinären Projektes "Modellierung des großräumigen Wärme- und Schadstofftransportes im Grundwasser" in einer ersten Version im Juni 1990 vorgestellt. Seit August 1992 liegt es in einer zweiten weiterentwickelten Version vor. Es handelt sich um ein eindimensionales deterministisches Simulationsmodell mit dem Schwerpunkt der Abbildung von Sickerwasser- und Stickstoffauswaschungsvorgängen. Der simulierte Zeitraum kann flexibel für eine Vegetationsperiode, ein Kalenderjahr oder eine Fruchtfolge gewählt werden.

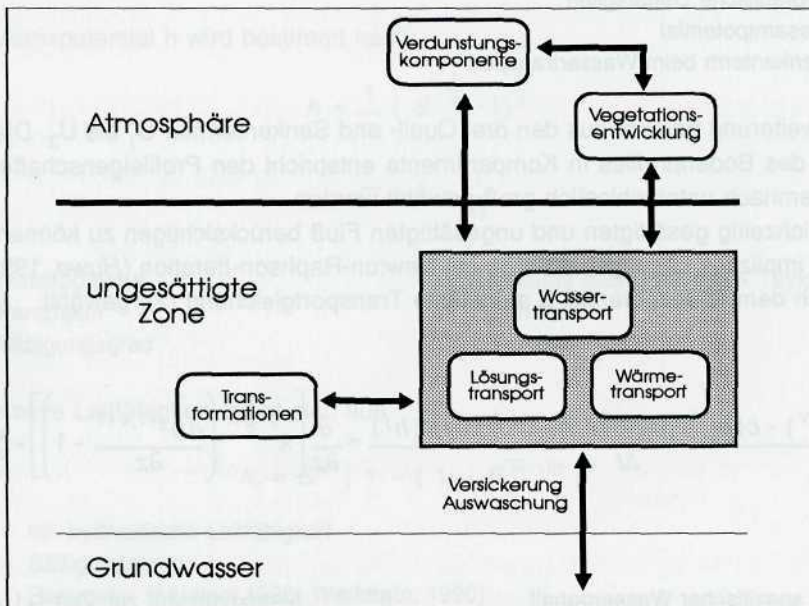


Abb. 1: Schematische Darstellung der Teilmodelle von WHNSIM

Das Modell integriert alle wesentlichen Prozesse wie Wasser-, Wärme- und Lösungstransport sowie Evapotranspiration, Stickstofftransformation und Vegetationsentwicklung (Abb. 1). Bei der Entwicklung wurden Arbeiten von Feddes et al. (1978) (Boden-

wassermodell), *Richter et al.* (1982) (Stickstofftransformation), *Mclsaac et al.* (1985) (Stickstoffaufnahme) und *Hornung & Messing* (1984) (numerisches Verfahren) berücksichtigt.

2 Bodenwasser und Bodenwärme

2.1 Bodenwasser

Die Beschreibung des Wassertransportes erfolgt durch die erweiterte Richardsgleichung (1).

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k(\theta) \frac{\partial H}{\partial z} \right) + \sum_{i=1}^3 U_i \quad (1)$$

θ volumetrischer Wassergehalt

t Zeit

k hydraulische Leitfähigkeit

H Gesamtpotential

U Senkenterm beim Wassertransport

Die Erweiterung besteht aus den drei Quell- und Senkentermen U_1 bis U_3 . Die Einteilung des Bodenprofils in Kompartimente entspricht den Profileigenschaften und kann demnach unterschiedlich groß gewählt werden.

Um gleichzeitig gesättigten und ungesättigten Fluß berücksichtigen zu können, wird ein voll implizites Lösungsverfahren mit Newton-Raphson-Iteration (*Huwe*, 1992), für die nach dem Matrixpotential h aufgelöste Transportgleichung (2), gewählt.

$$\frac{\theta(h^{j+1,v}) - c(h^{j+1,v}) (h^{j+1,v+1} - h^{j+1,v}) - \theta(h^j)}{\Delta t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[k^{j+\frac{1}{2},v} \left(\frac{\partial h^{j+1,v+1}}{\partial z} - 1 \right) \right] + \sum_{i=1}^3 U_i^{j+\frac{1}{2},v} \quad (2)$$

$c(h)$ spezifischer Wassergehalt

z Tiefe (positiv nach unten gerichtet)

U Senkenterm

$\theta(h)$ volumetrischer Wassergehalt in Abhängigkeit vom Matrixpotential

h^j Matrixpotential zur Zeit j

$k(h)$ hydraulische Leitfähigkeit

$h^{j+1,v}$ Matrixpotential zur Zeit $j+1$ der v -ten Iteration

$h^{j+1,v+1}$ Matrixpotential zur Zeit $j+1$ der $(v+1)$ ten Iteration

$k^{j+\frac{1}{2},v}$ $[k(h^{j+1,v}) + k(h^j)] / 2$

$U^{j+\frac{1}{2},v}$ $[U(h^{j+1,v}, t^{j+1}) + U(h^j, t^j)] / 2$

Der spezifische Wassergehalt berechnet sich durch die Ableitung des volumetrischen Wassergehaltes nach dem Matrixpotential h .

Die Grundlage der Lösung des Gleichungssystemes ist die Kenntnis der Transportparameter. Das Modell bietet zur Ermittlung zwei Optionen.

Bei der ersten Option können vorhandene Meßwerte in Form einer θ -lg(-h)- $k(\theta)$ -Tabelle eingelesen werden. Sie werden im Modell in θ - h - $k_r(\theta)$ -Tabellen umgerechnet. Aus der relativen Leitfähigkeit k_r ergibt sich die hydraulische Leitfähigkeit bei Wassersättigung zu $k(\theta) = k_s * k_r(\theta)$.

Bei der zweiten Option können, falls keine Meßwerte vorliegen, die Parameter horizontweise nach dem Ansatz von *van Genuchten* (1980) berechnet werden. Die Wasserspannungskurve hat hierbei folgende Darstellung:

$$\theta = \theta_r + S (\theta_s - \theta_r) \quad (3)$$

θ_s Porosität

θ_r Restwassergehalt

S Sättigungsgrad

Das Matrixpotential h wird bestimmt nach:

$$h = \frac{1}{\alpha} \left(S^{-\frac{1}{m}} - 1 \right)^{\frac{1}{n}} \quad (4)$$

$$m = 1 - \frac{1}{n}$$

h Matrixpotential

m Parameter

S Sättigungsgrad

α Konstante nach *Priestley & Taylor* (1972)

n Parameter

Die relative Leitfähigkeit ergibt sich aus:

$$k_r = S^p \left[1 - \left(1 - S^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (5)$$

k_r rel. hydraulische Leitfähigkeit

S Sättigungsgrad

p Parameter (*Mualem* 1986; *Wendroth*, 1990)

m Parameter (*van Genuchten*, 1980)

Die Größe p kann zur Anpassung an unterschiedliche Porenkontinuitäten nach *Mualem* (1986) und *Wendroth* (1990) variiert werden. Standardmäßig wird ein Wert von 0,5 vorgeschlagen. Die Beziehung $k(\theta) = k_s * k_r(\theta)$ gilt hier ebenfalls.

Die Parameter m , n und l können von gemessenen Wasserspannungskurven abgeleitet oder mittels des Programms SOILPROP (Mishra *et al.*, 1989) aus Körnungssummenkurven bestimmt werden.

Beide Optionen bieten die Möglichkeit der kompartimentweisen Erfassung. Um das entstehende tridiagonale lineare Gleichungssystem mit n Gleichungen und $n+2$ Unbekannten lösen zu können, benötigt man den Startwert sowie die unteren h_{n+1}^{j+1} und oberen h_0^{j+1} Randbedingungen.

Der Startwert muß in Form von geschätzten oder gemessenen Matrixpotentialen zur Verfügung gestellt werden. Er kann aber auch aus vorausgegangenen Simulationsläufen eingefügt werden.

Die Ermittlung der oberen Randbedingung wird in Gleichung (6) dargestellt.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} \Big|_{\text{oben}} = - \frac{\partial q}{\partial z} \Big|_{\text{oben}} \quad (6)$$

θ volumetrischer Wassergehalt

z Tiefe

q Flußdichte von Wasser

Δ Differenzenoperator

Der Input in das erste Kompartiment $q_{1/2}$ errechnet sich aus Niederschlag, Interzeptionsverdunstung, potentieller Evapotranspiration, Bedeckungsgrad und Bodenfeuchte.

Zur Beschreibung der unteren Randbedingungen bietet das Modell je nach Kenntnis über den Grundwasserstand vier Optionen zur Wahl an.

Option 1: Die Bedingungen des Matrixpotentials im Kompartiment $n+1$ sind in Tabellenform angegeben (Dirichletbedingungen). Bei Kenntnis des Grundwasserstandes kann er in eine große Tiefe verlegt werden.

Option 2: Der untere Rand ist undurchlässig (Neumannsbedingungen). Dies bedeutet:

$$k \Big|_{\text{unten}} = 0 \quad \text{oder} \quad \frac{\partial h}{\partial z} \Big|_{\text{unten}} = 1 \quad (7)$$

k hydraulische Leitfähigkeit

h Matrixpotential

n Parameter

z Tiefe

Option 3: An der unteren Grenze ändert sich mit zunehmender Tiefe das Matrixpotential nicht mehr. Es wirkt nur noch das Gravitationspotential, so daß gilt:

$$q \Big|_{\text{unten}} = k(\theta_{\text{unten}}) \quad (8)$$

q Flußdichte von Wasser

n Parameter

k hydraulische Leitfähigkeit

θ volumetrischer Wassergehalt

Diese Option ist bei unbekanntem Grundwasserverhältnissen zu wählen.

Option 4: Es herrschen gemischte Randbedingungen. Mit einem Gradientenabschwächungsverfahren wird ein Wert α eingeführt.

$$\left. \frac{\partial h}{\partial z} \right|_{\text{unten}} = \alpha \left. \frac{\partial h}{\partial z} \right|_{\text{unten}} \quad (9)$$

h Matrixpotential

z Tiefe

α Konstante

n Parameter

Diese Option kann bei unbekannter oder sehr großer Grundwassertiefe angewendet werden.

Durch die Wahl von einer der vier Optionen kann die untere Randbedingung gelöst werden. Das Gleichungssystem zur Berechnung des Wassertransportes ist somit lösbar.

2.1.1 Verdunstungskomponente

Dem Input an Wasser in Form von Niederschlag stehen im Modell reale Evaporation, Interzeptionsverdunstung und Transpiration als Verlustgrößen gegenüber. Die reale Evaporation und die Interzeptionsverdunstung werden hierbei als Verlustgrößen für die erste Bodenschicht in Gleichung (10) berechnet.

$$q_{1/2} = P - EI - EP_r \quad (10)$$

$q_{1/2}$ Fluß in das erste Kompartiment

P Niederschlag

EI Interzeptionsverdunstung

EP_r reale Evaporation

Zur Bestimmung der Interzeptionsverdunstung bietet das Modell zwei Möglichkeiten.

1. Die Berechnungen erfolgen als Funktion des Niederschlages und des Bodenbedeckungsgrades nach *Rijtema* (1965) und *Feddes et al.* (1978). Es wird zwischen zwei Niederschlagsintensitäten unterschieden (11).

$$EI = \begin{cases} 0,55 \text{ BDG } P^{0,53} - 0,0085 (P - 5) & \text{für } P \leq 17 \text{ mm} \\ 1,85 \text{ BDG} & \text{für } P > 17 \text{ mm} \end{cases} \quad (11)$$

EI Interzeptionsverdunstung

BDG Bodenbedeckungsgrad

P Niederschlag

2. Die Berechnung erfolgt in Abhängigkeit von Niederschlag und Blattflächenindex nach *Hoyningen-Huene* (1980, 1983) und *Schrödter* (1985) (12).

$$EI = -0,42 + 0,245P + 0,2LAI + 0,0271P LAI - 0,0111P^2 - 0,0109LAI^2 \quad (12)$$

EI Interzeptionsverdunstung

LAI Blattflächenindex

P Niederschlag

Die Niederschlagsmenge, die zur Erschöpfung der maximalen Interzeptionsspeicherkapazität in Abhängigkeit vom Blattflächenindex führt, berechnet sich nach:

$$P_g = 11,04 + 1,221 LAI \quad (13)$$

P_g Niederschlagsmenge für Interzeptionsspeicher

LAI Blattflächenindex

Die zweite Möglichkeit der Interzeptionsberechnung kann zwischen den einzelnen Kulturarten besser differenzieren. Die aktuellen Daten für den Blattflächenindex, der bei der Berechnung der Verdunstungskomponente eine wichtige Rolle spielt, werden aus den Berechnungen des Pflanzenwachstums zur Verfügung gestellt.

Die Ermittlung der realen Evaporation aus der potentiellen Evaporation erfolgt nach *Beese et al.* (1977).

$$EP_r = [1,78 - 0,5767 \log_{10}(h_5)] EP_p \quad (14)$$

EP_r reale Evaporation

h_5 Saugspannung in 5 cm Bodentiefe

EP_p potentielle Evaporation

Die potentielle Evaporation wird wie die potentielle Transpiration aus der potentiellen Evapotranspiration ermittelt:

$$EP_p = (1 - BDG) (ET_p - EI) \quad (15)$$

$$T_p = BDG (ET_p - EI) \quad (16)$$

EP_p potentielle Evaporation

BDG Bodenbedeckungsgrad

ET_p potentielle Evapotranspiration

EI Interzeptionsverdunstung

T_p potentielle Transpiration

Die potentielle Evapotranspiration kann entweder als Datensatz eingelesen oder mit Hilfe des Ansatzes von *Priestley & Taylor (1972)* berechnet werden. Bei der Berechnung gehen neben der Strahlung auch Albedo und definierte Konstanten ein.

$$ET_p = \alpha \frac{\frac{\Delta}{\gamma}}{\frac{\Delta}{\gamma} + 1} R_n \quad (17)$$

$$R_N = (1 - \beta) R_s + R_t \quad (18)$$

ET_p	potentielle Evapotranspiration	α	Konstante nach <i>Priestley & Taylor (1972)</i>
γ	Psychrometerkonstante	β	mittlere Albedo des Bestandes
R_n	Nettostrahlung	R_s	Globalstrahlung
Δ	Steigung der Sättigungsdampfdruckkurve	R_t	langwellige Strahlungsbilanz

Die reale Transpiration wird für jedes Bodenkompartiment berechnet. Sie entspricht dem Term U_1 der erweiterten Richardsgleichung und wird durch Multiplikation einer Reduktionsfunktion mit der potentiellen Wurzelwasseraufnahme (19) ermittelt.

$$S_r(z,t) = f(h) S_p(z,t) \quad (19)$$

S_r	reale Senke (Wurzelwasseraufnahme)	$f(h)$	Reduktionsfunktion zur Berechnung der Wurzelwasseraufnahme
S_p	potentielle Senke (Wurzelwasseraufnahme)	z	Tiefe
h	Matrixpotential	t	Zeit

Die Reduktionsfunktion $f(h)$ beschreibt den Zusammenhang zwischen Wurzelaktivität und Bodenfeuchte (Abb. 2).

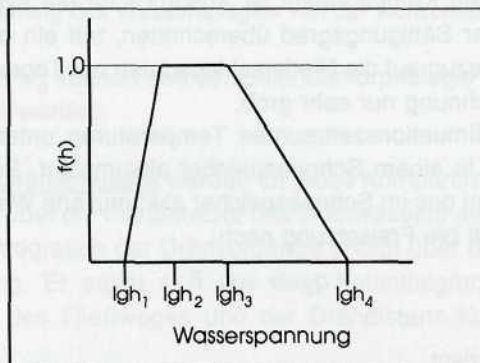


Abb. 2: : Reduktionsfunktion $f(h)$ zur Berechnung der Wurzelwasseraufnahme

Zur Ermittlung der potentiellen Wasserentnahme werden sowohl die potentielle Transpiration als auch eine Beschreibung der Wurzelverteilung in Form von Wurzellängendichten benötigt.

$$S_p(z,t) = T_p(t) \frac{w(z,t)}{\int_0^{z_{\max}} w(z,t) dz} \quad (20)$$

S_p	potentielle Senke (Wurzelwasseraufnahme)	t	Zeit
z	Tiefe	T_p	potentielle Transpiration
		$w(z,t)$	Wurzellängendichte

Die benötigte Wurzellängendichte wird aus dem Modellteil Pflanzenwachstum zur Verfügung gestellt.

Die Globalstrahlung, die langwellige Strahlungsbilanz und der Parameter Δ/γ werden als Tagesdaten eingelesen. Der Albedo des Bestandes ermittelt sich aus dem Albedo des Bodens unter Berücksichtigung des Bedeckungsgrades. Ist mit nennenswerter Verdunstung im Winterhalbjahr zu rechnen, kann die langwellige Strahlungsbilanz R_t in Gleichung (18) angepaßt werden.

Zur Berücksichtigung spezieller Standortbedingungen stellt das Modell sowohl für die Interzeptionsverdunstung E_I als auch für die potentielle Evapotranspiration ET_p Kalibrierfaktoren zur Verfügung.

2.1.2 Oberflächenabfluß und Schneebildung

Das Modell berechnet grundsätzlich einen oberflächigen Abfluß, wenn eine Infiltration nicht möglich ist. Der Oberflächenabfluß kann auch bei ungesättigten Bodenverhältnissen auftreten. Die Höhe und der Zeitpunkt hängen von der Niederschlagsverteilung und den hydraulischen Bodeneigenschaften der Oberflächenzone ab. Der maximale Sättigungsgrad im ersten Kompartiment ist Ausdruck für die hydraulischen Bodeneigenschaften. Wird der Sättigungsgrad überschritten, tritt ein oberflächiger Abfluß auf. Da das Modell in bezug auf die Niederschlagsdaten nur Tagesmittelwerte berücksichtigt, ist diese Berechnung nur sehr grob.

Treten während des Simulationszeitraumes Temperaturen unter 0°C auf, wird der gesamte Niederschlag in einem Schneespeicher akkumuliert. Bei Schneeschmelze (Temperatur $> 0^\circ\text{C}$) kann das im Schneespeicher akkumulierte Wasser infiltrieren. Die Abschmelzrate q_s regelt die Freisetzung nach:

$$q_s = \alpha_s \bar{T} \quad (21)$$

q_s	Abschmelzrate
α_s	Abschmelzkoeffizient
\bar{T}	mittlere Tagestemperatur

Der Abschmelzkoeffizient α_s kann durch Kalibrierung ermittelt werden. Der entscheidende Einfluß bei der Berücksichtigung von Schneebildung liegt in der zeitlich verzögerten Infiltration bzw. in dem eventuellen Auftreten von oberflächigen Abfluß aufgrund größerer Schmelzwassermengen.

2.1.3 Hangzugswasser und Dränabfluß

Unter Sättigungsbedingungen muß in Hanglagen sowie in Böden mit periodischem Stauwasser und mit ausgedehnten Dränsystemen mit lateralen Zu- und Abflüssen gerechnet werden. Im Modell wird dies mit entsprechenden Senkentermen berücksichtigt.

Um die Auswirkungen der Hanglage zu erfassen, muß das Gravitationspotential berechnet werden (22), (25).

$$h_g = -z \cos \varphi \quad (22)$$

h_g Gravitationspotential

z Tiefe

φ Abweichung der Fließrichtung von der Vertikalen (horizontaler Fluß bei $\varphi = 90$)

Für den Senkenterm U_2 , der Hangzugswasser in die Richardsgleichung integriert, ergibt sich:

$$Q_h = k_h \frac{H_u - H_o}{10000} \quad (23)$$

Q_h durch Hangzugswasser verursachter Senkenterm

k_h hydraulische Leitfähigkeit bei Wassersättigung in horizontaler Richtung

H_u mittlere Abweichung des Wasserspiegels von der Horizontalen hangaufwärts

H_o mittlere Abweichung des Wasserspiegels von der Horizontalen hangabwärts

Die Parameter H_u und H_o können aus der Geländemorphologie geschätzt oder durch Kalibrierung bestimmt werden.

Zur Berechnung des Dränabflusses werden für jedes Kompartiment laterale Leitfähigkeiten berechnet, die über die Fließstrecke des Dränwassers als harmonisches Mittel gewichtet sind. Die Integration der Dränvorgänge erfolgt über den Senkenterm U_3 in der Richardsgleichung. Er ergibt sich aus dem Potentialgradienten, der mittleren Leitfähigkeit entlang des Fließweges und der Drändistanz für das entsprechende Kompartiment.

$$Q_{dr_i} = 0,8 \frac{k_{dr_i}}{0,25L} \frac{h_i - z_i + z_{dr}}{s_i} \quad (24)$$

Q_{dr}	durch Dränwasser verursachter Senkenterm	z	Tiefe
k_{dr}	mittlere Leitfähigkeit	s_i	Fließstrecke des Dränwassers aus Kompartiment i
L	Drändistanz	z_{dr}	Einbautiefe des Dränrohres
h	Matrixpotential	i	Kompartiment

Vorausgesetzt wird, daß das Matrixpotential bei Dränabfluß am Dränrohr gleich Null ist.

2.1.4 Bewässerung

Das Modell bietet die Möglichkeit, Bewässerungsmaßnahmen zu integrieren. Hierbei können unterschiedliche Bewässerungsintervalle und Konzentrationen des Beregnungswassers für jedes Intervall frei gewählt werden.

Option 1: Die Beregnung erfolgt in einem starren Schema. Eine konstante zeitliche Rate im Intervall wird berücksichtigt.

Option 2: Die Bewässerung wird automatisch gesteuert. Nach Feststellung der Saugspannung in einer vom Anwender wählbaren Bodentiefe wird ein Wasserddefizit bilanziert. Überschreitet die Saugspannung einen vom Anwender definierten Schwellenwert, wird eine Bewässerungsrate berechnet. Die Höhe dieser Rate muß vom Anwender zu Beginn festgelegt werden.

Option 3: Sie stellt eine Erweiterung von Option 2 dar. Es wird zusätzlich die Konzentration in der Bodenlösung gemessen. Sie wird als Kriterium für eine Bewässerung berücksichtigt.

In semihumiden und -ariden Klimaten können durch die Berücksichtigung von Bewässerungsmaßnahmen Fragestellungen wie z.B. die Versalzung bearbeitet werden.

2.2 Bodenwärme

Der Wärmehaushalt wird durch eine eindimensionale partielle Differentialgleichung beschrieben (22), (25).

$$\frac{\partial(c_v(\theta) T)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} (\lambda(\theta) \frac{\partial T}{\partial z}) - c_w \frac{\partial(q T)}{\partial z} + V \quad (25)$$

λ	thermische Leitfähigkeit	c_w	vol. Wärmekapazität des Wassers
c_v	vol. Wärmekapazität des Bodens	θ	vol. Wassergehalt
T	Bodentemperatur	V	Senkenterm bei Wärmetransport
q	Flußdichte von Wasser	z	Tiefe

Angaben zur thermischen Leitfähigkeit können als Funktion des Wassergehaltes in Tabellenform eingelesen werden. Es besteht desweiteren die Möglichkeit der Schätzung nach *de Vries* (1975) aus dem volumetrischen Gehalt an Quarz, restlicher Minerale, Wasser und Luft. Bei Schneebedeckung und verstärkter Austrocknung der Bodenoberfläche wird ein Reduktionsfaktor eingeführt. Die volumetrische Wärmekapazität ermittelt sich aus den Gehalten an mineralischer, organischer Substanz und Wasser.

$$c_v = 0,46 M + 0,60 O + \theta \quad (26)$$

c_v vol. Wärmekapazität des Bodens
M vol. Gehalt der Minerale

O vol. Gehalt der organischen Substanz
 θ vol. Wassergehalt

Als Startwert sind gemessene oder geschätzte Bodentemperaturen für jedes Kompartiment erforderlich.

Die unteren Randbedingungen können als gemessene oder geschätzte Bodentemperaturen in Tabellenform eingelesen werden (Dirichletbedingungen).

Zur Bestimmung der oberen Randbedingungen stehen drei Möglichkeiten zur Auswahl.

1. Möglichkeit: Die täglichen mittleren Bodentemperaturen an der Bodenoberfläche oder die täglichen mittleren Lufttemperaturen werden eingegeben.
2. Möglichkeit: Die Kalkulation der Tagesamplitude aus minimaler, maximaler sowie mittlerer Tagestemperatur.

$$T_0 = \bar{T}_0 + (T_{0_{\max}} - T_{0_{\min}}) \sin 2\pi t \quad (27)$$

T_0 Temperatur an der Bodenoberfläche
 \bar{T}_0 Tagesmitteltemperatur an der Bodenoberfläche
min minimal
max maximal
t Zeit in Tagen

Die mittlere Tagestemperatur für jeden Zeitschritt berechnet sich aus:

$$\bar{T}(\Delta t) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^*}^{t^*+\Delta t} T_0 dt \quad (28)$$

bzw.

$$\bar{T}(\Delta t) = \bar{T}_0 + \frac{T_{0_{\max}} - T_{0_{\min}}}{2\pi \Delta t} (\cos 2\pi t^* - \cos 2\pi (t^* + \Delta t)) \quad (29)$$

\bar{T}	Tagesmitteltemperatur	\bar{T}_0	Tagesmitteltemperatur an der Bodenoberfläche
min	minimal	T_0	Temperatur an der Bodenoberfläche
max	maximal	t^*	Zeitschritt während des Tages

3. Möglichkeit: Gemessene oder geschätzte Tagesgänge der Temperaturen an der Bodenoberfläche können aus anderen Verfahren eingelesen werden. Die Berechnung der mittleren Tagestemperaturen für jeden Zeitschritt erfolgt nach den Gleichungen (28) und (29).

3 Bodenstickstoff

3.1 Stickstofftransport

Der Transport von gelöstem Nitrat erfolgt durch Massenfluß, Diffusion und Dispersion mit dem Bodenwasser. Er läßt sich unter Vernachlässigung der horizontalen Flüsse mit Hilfe der eindimensionalen partiellen Differentialgleichung (30) darstellen.

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D(\theta) \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial(q C)}{\partial z} + \sum_{i=1}^6 W_i \quad (30)$$

θ vol. Wassergehalt	z Tiefe
C Konzentration in der Bodenlösung	W Quell-/ Senkenterm
D scheinbarer Diffusionskoeffizient	i Fraktionen des Senkenterms
q Flußdichte von Wasser	

Als Quellenterme wird die Mineralisierung von drei unterschiedlich zersetzbare Fraktionen berücksichtigt. Senkenterme sind der Entzug durch die Pflanzenwurzel und die Immobilisierung von gelöstem Nitrat.

Der scheinbare Diffusionskoeffizient wird mit Hilfe des effektiven Diffusionskoeffizienten und der hydrodynamischen Dispersion durch Gleichung (33) ermittelt.

$$D = D_m + D_h \quad (31)$$

$$D_m = \delta D_0 \quad \delta = a \frac{e^{(b \theta)}}{\theta} \quad (32)$$

$$D_h = \epsilon \frac{|q|}{\theta} \quad (33)$$

D_m	effektiver Diffusionskoeffizient	ϵ	Dispersivität
D_h	hydrodynamische Dispersion	D	scheinbarer Diffusionskoeffizient
D_0	Diffusionskoeffizient in Wasser	δ	wassergehaltsabhängiger Labyrinthfaktor
$ q / \theta$	Absolutbetrag der Porenwassergeschwindigkeit	a	bodenartspezifische Konstante
		b	bodenartspezifische Konstante

Der scheinbare Diffusionskoeffizient ist bei großen Porenwassergeschwindigkeiten (> 10 mm / Tag) weitgehend mit der hydrodynamischen Dispersion identisch.

Als Startwerte können Konzentrationen oder Menge von Stickstoff pro Kompartiment eingegeben werden. Stickstoff in mobilen bzw. immobilen Wasserfraktionen kann getrennt eingegeben werden.

Der Lösungs-transport am unteren Rand erfolgt rein konvektiv. Es gilt (Neumannbedingung):

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0 \tag{34}$$

C Konzentration in der Bodenlösung
z Tiefe

Als obere Randbedingung wird eine Flußbedingung (Cauchy'sche Randbedingung) errechnet. Der Fluß ist gleich Null, wenn kein Niederschlag auftritt. Andernfalls wird die N-Konzentration im Niederschlagswasser sowie anorganische Düngung als Eintrag in das erste Kompartiment berechnet.

3.2 Immobiles Wasser und Anionenausschluß

Um die Auswirkungen immobilen Wassers im Kompartiment untersuchen zu können, wird Gleichung (30) wie folgt verändert:

$$\frac{\partial(\theta_{mo} C_{mo})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}(\theta_{mo} D \frac{\partial C_{mo}}{\partial z}) - \frac{\partial(q_{mo} C_{mo})}{\partial z} - f(C_{mo} - C_{im}) + W \tag{35}$$

$$\frac{\partial(\theta_{im} C_{im})}{\partial t} = f(C_{mo} - C_{im})$$

θ	vol. Wassergehalt	f	Austauschkoeffizient zwischen mobiler und immobil Phase
C	Konzentration der Bodenlösung	W	Senkenterm des Lösungs-transportes
z	Tiefe	mo	mobile Phase
D	scheinbarer Diffusionskoeffizient	im	immobile Phase
q	Flußdichte von Wasser		

Die kompartimentweise Angabe des immobilen Anteils kann als konstante Größe erfolgen. Wird ein variabler immobil Anteil angenommen, errechnet sich der immobile Wassergehalt nach:

$$\theta_{im} = r(\theta - \theta_{if}) + \theta_{if} \tag{36}$$

θ _{im}	immobiler vol. Wassergehalt	θ _{if}	fixer immobil Anteil
r	Parameter zwischen 0 und 1	θ	vol. Gesamtwassergehalt

Beim Transport von Anionen kann sich die negative Ladung der Tonminerale dadurch bemerkbar machen, daß die Anionenkonzentration in Tonmineralnähe geringer ist als in größeren Abständen von der Porenwand (Dyer, 1965; Thomas & Swoboda, 1970; Appelt et al., 1975). Dieser Effekt des Anionenausschlusses kann im Modell dadurch berücksichtigt werden, daß die mobile und immobile Phase ersetzt wird durch:

$$\theta_{mo} = \theta_{mo} - \theta_{ex_{mo}} \quad (37)$$

$$\theta_{im} = \theta_{im} - \theta_{ex_{im}}$$

- θ volumetrischer Wassergehalt
- θ_{ex} von Anionenausschluß betroffener vol. Wassergehalt
- mo mobile Phase
- im immobile Phase

3.3 Stickstoffaufnahme

Die Simulation der Stickstoffaufnahme durch die Pflanze wird in Anlehnung an McIsaac et al. (1985) durchgeführt. Neben der potentiellen und konvektiven Stickstoffaufnahme wird auch eine diffusive Aufnahme berechnet.

Die potentielle Aufnahme von Stickstoff ermittelt sich aus:

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{pot} = b \frac{T}{\Delta e} N (N_{max} - N) \quad (38)$$

- b artspezifische Konstante
- T Bodentemperatur
- N bereits aufgenommene Gesamtstickstoffmenge
- N_{max} maximal mögliche Gesamtstickstoffaufnahme
- Δe Dampfdruck

Die konvektive Gesamtaufnahme kalkuliert sich nach:

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{kon} = \int_0^{z_{max}} U_1 C dz \quad (39)$$

- U Senkentern
- z_{max} maximale Durchwurzelungstiefe
- C Konzentration der Bodenlösung
- z Tiefe

Übersteigt die konvektive die potentielle Gesamtaufnahme, wird keine diffusive Aufnahme berechnet und die konvektive reduziert. Wird aufgrund einer geringeren konvektiven eine diffusive Aufnahme berechnet, muß zunächst die potentielle diffusive Aufnahme kalkuliert werden.

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{difp} = \left(\frac{dN}{dt} \right)_{pot} - \left(\frac{dN}{dt} \right)_{kon} \quad (40)$$

$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{difp}$ potentielle diffusive Stickstoffaufnahme
 $\left(\frac{dN}{dt} \right)_{pot}$ potentielle Gesamtstickstoffaufnahme
 $\left(\frac{dN}{dt} \right)_{kon}$ konvektive Stickstoffaufnahme

Für die diffusive Gesamtaufnahme ergibt sich:

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{dif} = \int_0^{z_{max}} S_{dif} dz \quad (41)$$

$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{dif}$ diffusive Stickstoffaufnahme
 S_{dif} diffusive Aufnahme­rate
 z Tiefe
 z_{max} maximale Durchwurzelungstiefe

Die diffusive Aufnahme­rate wird bestimmt nach:

$$S_{dif} = B(z) * D(\theta) * \frac{C - C_r}{d} \quad (42)$$

S_{dif}	diffusive Aufnahme­rate	C	Konzentration der Bodenlösung
B	Wurzeloberfläche pro Volumeneinheit Boden	C_r	Konzentration an der Wurzeloberfläche
D	molekularer Diffusionskoeffizient	d	charakteristische Diffusionslänge

Die maximale diffusive Aufnahme­rate wird erreicht, wenn die Konzentration an der Wurzeloberfläche gleich Null ist. Ist die maximale diffusive Stickstoffaufnahme kleiner als die potentielle, wird die maximale zur aktuellen Stickstoffaufnahme. Andernfalls wird C_r errechnet aus:

$$C_r = C * \left(1 - \frac{\left(\frac{dN}{dt} \right)_{difp}}{\int_0^{z_{max}} S_{difm} dz} \right) \quad (43)$$

C_r	Konzentration an der Wurzeloberfläche	$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{difp}$	potentielle diffusive Stickstoffaufnahme
C	Konzentration der Bodenlösung	S_{dif}	diffusive Aufnahme­rate
z	Tiefe		

Die Gesamtstickstoffaufnahme errechnet sich aus der Summe von konvektiver und diffusiver Stickstoffaufnahme.

3.4 Stickstofftransformation

Im Modell werden neben Mineralisierung und Immobilisierung auch Denitrifizierungsprozesse berücksichtigt. Die Anordnung der Einzelprozesse wird aus Abb. 3 deutlich.

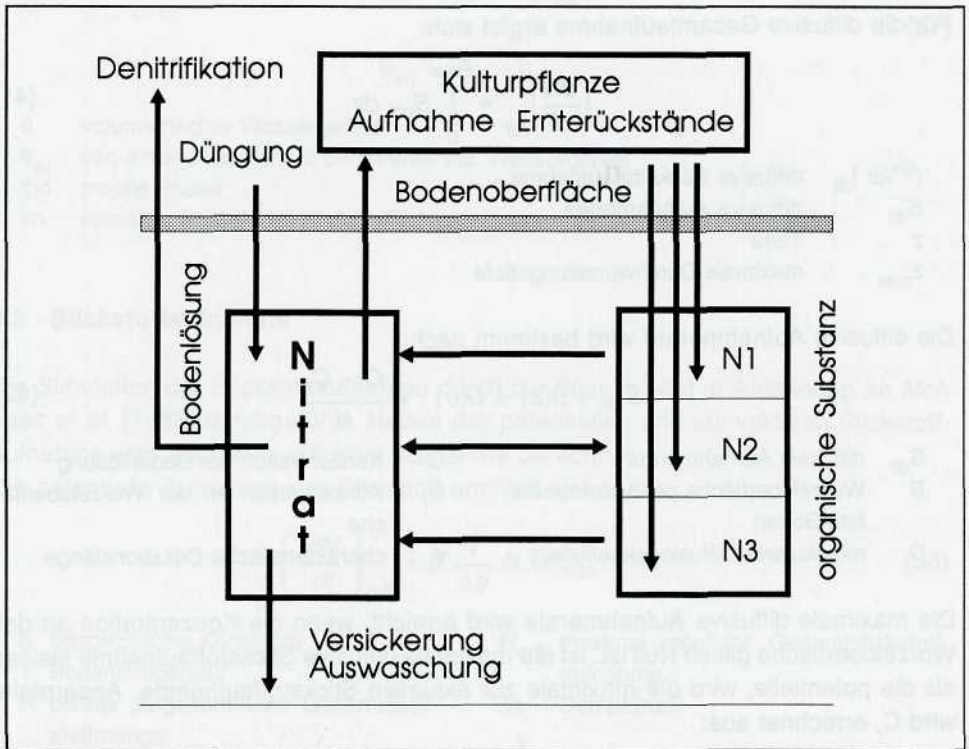


Abb. 3: Schematische Darstellung der berücksichtigten Stickstofffraktionen

3.4.1 Mineralisierung

Die Mineralisierung findet in bis zu drei verschiedene Fraktionen statt. Die Fraktionen unterscheiden sich durch ihre Abbaugeschwindigkeit. Sie werden definiert:

Fraktion N1 sehr leicht zersetzbare Fraktion der organischen Substanz

Fraktion N2 leicht zersetzbare Fraktion der organischen Substanz

Fraktion N3 schwer zersetzbare Fraktion der organischen Substanz

Die Umwandlungsprozesse werden mit Hilfe einer Reaktion erster Ordnung beschrieben.

$$\frac{dN_i}{dt} = -k_i * N_i \quad i = 1, 2, 3 \quad (44)$$

N Fraktion der organischen Substanz
 k Reaktionskoeffizient

i Nummer der Fraktion

Als entscheidende Größe wird der Reaktionskoeffizient durch die Bodentemperatur und die Bodenfeuchte beeinflusst (Richter et al, 1982; van Veen & Frissel, 1981). Er berechnet sich nach:

$$k_i = r(h) * g_i(T) \quad i = 1, 2, 3 \quad (45)$$

k Reaktionskoeffizient
 r(h) Funktion der Bodenfeuchte

g(T) Funktion der Bodentemperatur
 i Nummer der Fraktion

Der prinzipielle Verlauf der Funktion r(h) entspricht dem Verlauf von f(h) in Abb. 2 (Seite 8), wobei die Eckpunkte vom Benutzer festzulegen sind. Die Funktion g(T) hat für alle Fraktionen den gleichen Aufbau:

$$g_i(T) = K_0^{F_1} K_{20}^{F_2} \quad (46)$$

mit

$$F_1 = \frac{3999,45}{(T + 273) - 13,65} \quad (47)$$

$$F_2 = 1 - F_1$$

K₀ Reaktionskoeffizient bei 0°C
 K₂₀ Reaktionskoeffizient bei 20°C

g(T) Reduktionsfaktor der Bodentemperatur
 i Nummer der Fraktion

Durch Brutversuche oder Anpassung an Feldermittlungen können Parameter K₀ und K₂₀ sowie die Gehalte an mineralisierbarem Stickstoff der Fraktionen ermittelt werden.

3.4.2 Immobilisierung

Die Immobilisierung wird beschrieben als Reaktion 1. Ordnung. Sie findet ausschließlich in der Fraktion N₂ statt.

$$\frac{dN_2}{dt} = k_4 * (\theta C) \quad (48)$$

N₂ leicht zersetzbare Fraktion der organischen Substanz
 θ vol. Wassergehalt

k₄ Reaktionskoeffizient für die Immobilisierung
 C N-Konzentration der Bodenlösung

Der Reaktionskoeffizient für die Immobilisierung wird entsprechend der Reduktionskoeffizientenberechnung bei der Mineralisierung (45) ermittelt.

3.4.3 Denitrifizierung

Zur Berechnung der Denitrifizierung kann zwischen Reaktionen 0. oder 1. Ordnung gewählt werden. Für die Reaktion 1. Ordnung können verschiedene Begrenzungen festgelegt werden.

Der Reaktionskoeffizient ist eine Funktion von pH-Wert, Temperatur, Sättigungsgrad und leicht verfügbarer Kohlenstoffquellen. Die leicht verfügbaren Kohlenstoffquellen lassen sich durch die Größen löslicher Kohlenstoff, potentielle Denitrifizierungskapazität und BSB5-Werte (Huwe, 1992b) ausdrücken.

a) Reaktion 0. Ordnung

$$\frac{d(\theta C)}{dt} = -k_d \quad (49)$$

k_d Reaktionskoeffizient für die Denitrifizierung C N-Konzentration in der Bodenlösung
 θ vol. Wassergehalt

Der Reaktionskoeffizient für die Denitrifizierung berechnet sich nach:

$$k_d = c_d f_s f_t SC \theta \quad (50)$$

k_d Reaktionskoeffizient für die Denitrifizierung f_t temperaturabhängiger Reduktionsfaktor
 c_d Reaktionskonstante SC Konzentration an löslicher organischer Substanz
 f_s sättigungsabhängiger Reduktionsfaktor θ vol. Wassergehalt

Für den Reduktionsfaktor f_s gilt (Williams, 1983):

$$f_s = \begin{cases} 0 & \frac{\theta}{\theta_s} < 0,9 \\ 10 \left[\frac{\theta}{\theta_s} - 0,9 \right] & 0,9 < \frac{\theta}{\theta_s} < 1 \end{cases} \quad (51)$$

f_s sättigungsabhängiger Reduktionsfaktor θ vol. Wassergehalt
 θ_s Porosität

Für den Reduktionsfaktor f_t gilt (Williams, 1983):

$$f_t = \begin{cases} 0 & T < 0^\circ\text{C} \\ 0,1 + 0,9 \left[\frac{T}{T + e^{(9,54 - 0,3 T)}} \right] & 0^\circ\text{C} \leq T < 35^\circ\text{C} \end{cases} \quad (52)$$

f_t temperaturabhängiger Reduktionsfaktor
 T Bodentemperatur

Die Reaktionskonstante c_d wird nach Reddy *et al.* (1982) mit einem Wert von $1,47 \cdot 10^{-3}$ pro Tag und mg löslicher organischer Substanz angegeben. Anstatt der löslichen organischen Substanz kann, wie bereits erwähnt, die potentielle Denitrifizierungskapazität oder der BSB5-Wert (Huwe, 1992b) eingegeben werden, wodurch sich der Wert für c_d entsprechend ändert.

b) Reaktion 1. Ordnung mit Begrenzung durch die Nitratkonzentration.

$$\frac{d(\theta C)}{dt} = \begin{cases} -k_d C & \text{für } C \leq C_s \\ -k_d C_s & \text{für } C > C_s \end{cases} \quad (53)$$

k_d Reaktionskoeffizient für die Denitrifizierung
 C_s Konzentrationsschwelle für Nitrat bei Denitrifizierung
 C N-Konzentration der Bodenlösung

Der Reaktionskoeffizient berechnet sich wie unter a.).

c) Reaktion 1. Ordnung mit Begrenzung durch die Konzentration an löslicher organischer Substanz.

Die Berechnung erfolgt wie unter 1.) und 2.). Bei Ermittlung des Reaktionskoeffizienten k_d wird die Konzentration an löslicher organischer Substanz wie folgt berechnet (Mclsaac *et al.*, 1985; Reddy *et al.*, 1982; Lueking & Schepers, 1984):

$$SC = 0,58116 \frac{N_2}{\theta} \quad (54)$$

SC Konzentration an löslicher organischer Substanz
 N_2 Gehalt an leicht mineralisierbarer organischer Substanz
 θ vol. Wassergehalt

d) Reaktion 1. Ordnung mit Begrenzung durch Gesamt-C-Gehalt.

Die Formulierung der Reaktion ist identisch mit Gleichung (53). Der Reduktionskoeffizient wird berechnet nach:

$$k_d = c_d' f_r \theta \quad (55)$$

- k_d Reduktionskoeffizient
- c_d' Reaktionskonstante in Abhängigkeit von Gesamt-C-Gehalt
- f_r Reduktionsfaktor

Für die Reaktionskonstante c_d' gilt (Stanford et al., 1975):

$$c_d' = 0,006 + 0,026 C_t \quad (56)$$

- c_d' Reaktionskonstante in Abhängigkeit von Gesamt-C-Gehalt
- C_t Gesamtkohlenstoffgehalt

Für Reduktionsfaktor f_r gilt:

$$f_r = \min (f_{pH}, f_s, f_t) \quad (57)$$

- f_r Reduktionsfaktor
- f_{pH} pH-Wert abhängiger Reduktionsfaktor
- f_s sättigungsabhängiger Reduktionsfaktor
- f_t temperaturabhängiger Reduktionsfaktor

Die unterschiedlichen Reduktionsfaktoren werden wie folgt bestimmt:

$$f_{pH} = \begin{cases} 1 & \text{für } 6 \leq pH \leq 8 \\ pH - 5 & \text{für } 5 < pH < 6 \\ 9 - pH & \text{für } 8 \leq pH < 9 \\ 0 & \text{für } 9 \leq pH \text{ oder } 5 \geq pH \end{cases} \quad (58)$$

- f_{pH} pH-Wert abhängiger Reduktionsfaktor
- pH pH-Wert

$$f_s = \begin{cases} 0 & \text{für } \theta < \theta_{FK} \\ \frac{\theta - \theta_{FK}}{\theta_s - \theta_{FK}} & \text{für } \theta_{FK} \leq \theta \leq \theta_s \end{cases} \quad (59)$$

- θ_{FK} vol. Wassergehalt bei Feldkapazität
- θ_s Porosität
- θ vol. Wassergehalt
- T Bodentemperatur
- f_t temp.abhängiger Reduktionsfaktor
- f_s wassersättigungsabhängiger Reduktionsfaktor

3.5 Düngung

Im Modell können sowohl organische als auch anorganische Düngungsmaßnahmen berücksichtigt werden.

Bei anorganischer Düngung wird der Düngerstickstoff nicht unmittelbar dem ersten Bodenkompartment zur Verfügung gestellt, sondern erst durch Akkumulation von 25 mm Niederschlag nach dem Düngungszeitpunkt.

Der organische Dünger wird zu den mineralisierbaren N-Vorräten gerechnet. Hierbei kann eine gewichtete Verteilung auf die Bodenschichten und jeweils auf die drei unterschiedlich schnell mineralisierbaren Fraktionen vorgenommen werden.

3.6 Atmosphärischer Eintrag

Ein atmosphärischer Eintrag kann mit den Niederschlägen und als Trockendeposition erfolgen. Letztere kann im Modell mit frei wählbarer konstanter Rate berücksichtigt werden. Erfolgt kein oberflächiger Abfluß, wird davon ausgegangen, daß Stickstoff aus dem Niederschlag vollständig infiltriert. Bei Oberflächenabfluß wird ein Anteil als N-Verlust bilanziert.

4 Pflanze

4.1 Biomassebildung

Zur Ermittlung der Trockenmassebildung wird die Rate w errechnet (Bierhuizen & Slatyer, 1965; Feddes et al., 1978):

$$w_j = a \frac{T_r^j}{\Delta e_j} \quad (60)$$

w	Rate der Trockensubstanzbildung	a	pflanzenspezifische Konstante
T_r	aktuelle Transpiration	j	Tag
Δe	mittleres Sättigungsdefizit der Luft		

Die Gesamttrockenmassebildung bis zu einem Tag beträgt dann:

$$TM = \sum_{j=1}^m w_j \Delta t \quad (61)$$

TM	Gesamtertrag	Δt	Zeitintervall von 1 Tag
j	Tag	m	Tag der Berechnung
w	Rate der Trockensubstanzbildung		

Um die Pflanzenentwicklung abbilden zu können, werden neben Angaben über Feldaufgang und Erntetermin die Minimal- und Maximalwerte für Bedeckungsgrad, Blattflächenindex, Durchwurzelungstiefe, Gesamtwurzellänge, Gesamtmenge der Trockenmasse und des gespeicherten Stickstoffes benötigt.

Zur Berechnung der Trockenmassebildung und der Ermittlung der Wurzelentwicklung müssen aktuelle Werte für Bodenbedeckungsgrad, Blattflächenindex, Durchwurzelungstiefe und Gesamtwurzellänge pro Einheit Bodenoberfläche eingegeben werden. Die Ermittlung dieser Werte geschieht auf Grundlage vom Benutzer definierter Standort- und kulturspezifischer Interpolationstabellen, wobei zwei Möglichkeiten zur Verfügung stehen:

1. Die Berechnung erfolgt als Funktion der Gesamttrockenmasse. Der letzte Vegetationsabschnitt des Vorjahres enthält die gleichen Informationen wie der erste Abschnitt des Folgejahres.
2. Die Berechnung erfolgt als Funktion der relativen Vegetationszeit. Es muß dafür gesorgt werden, daß der zeitliche Verlauf der Vegetationsstruktur über den Jahreswechsel hinweg fließend ist.

Eine Wechselwirkung zwischen Wasserhaushalt und Pflanzenwachstum wird nur bei Berücksichtigung der Gesamttrockenmasse erreicht. Die Schwierigkeiten der Kalibrierung sind bei ausschließlicher Berücksichtigung der Vegetationszeit geringer.

Weitere wesentliche Angaben zur Modellierung des Pflanzenwachstums sind Verhältniszahlen für:

- Verhältnis von unterirdischer zu oberirdischer Trockenmasse
- Anteile geernteter oberirdischer und abgestorbener unterirdischer Pflanzensubstanz
- Verteilung von Stickstoff auf unterirdische und oberirdische Pflanzenteile
- Anteil abgestorbener leicht zersetzbarer Wurzelsubstanz während der Vegetationsphase
- Aufteilung des unterirdischen Stickstoffes auf leicht und schwer zersetzbare organische Substanz

4.2 Entwicklung des Wurzelwachstums

Die Durchwurzelungstiefe und die Gesamtwurzellänge werden als Minimal- und Maximalwert eingegeben. Um die aktuelle Verteilung der Wurzeln zwischen den Kompartimenten zu beschreiben, benötigt das Modell die optimale Entfaltung des Wurzel-

systems zu Beginn des Vegetationsabschnittes und die relative Wurzelverteilung zum Zeitpunkt der Ernte.

Die Vegetationsperiode läßt sich durch die Beziehung von aktueller relativer Trockenmasse TMR zu optimaler relativer Trockenmasse TMR₀ in zwei Abschnitte unterteilen:

1. Abschnitt Die aktuelle relative Trockenmasse TMR ist kleiner als die relative Trockenmasse TMR₀. Für die Verteilung auf die Kompartimente wird die aktuelle relative Trockenmasse TMR in Beziehung gesetzt zur relativen Gesamttrockenmasse TM_{ri} für Kompartiment i bis zu dem Wurzeln vorhanden sind. Wenn TM_{ri} ≥ TMR, dann enthält Kompartiment i keine Wurzeln. Ist TM_{ri} < TMR, wird die Verteilung als Funktion der Trockenmasse durch Interpolation errechnet.
2. Abschnitt Die aktuelle relative Trockenmasse TMR ist größer als die relative Trockenmasse TMR₀. Wenn TM_{ri} ≤ TMR, dann enthält Kompartiment i keine Wurzeln. Ist TM_{ri} > TMR, wird die Verteilung als Funktion der Trockenmasse durch Interpolation errechnet.

Bei Interpolation der Tiefenverteilung der Wurzelmerkmale errechnet sich die relative Wurzelverteilung nach:

$$rw(z,t) = \frac{w(z,t)}{\int_0^{z_{\max}} w(z,t) dz} \quad (62)$$

rw(z,t) relative Wurzelverteilung z_{max} maximale Durchwurzelungstiefe
w(z,t) Wurzellängendichte

Mit Hilfe der Gesamtwurzellänge pro Bodenoberflächeneinheit können die Wurzellängendichten für jedes Kompartiment errechnet werden.

5 Modellüberprüfung

Die Modellentwicklung wurde im Rahmen des DFG-Forschungsprojektes "Modellierung des großräumigen Wärme- und Schadstofftransportes im Grundwasser" anhand des erhobenen Datenmaterials validiert (Huwe, 1992a). Eine weitere Modellüberprüfung wurde anhand von Daten aus Haren in den Niederlanden (Groot & Verberne, 1991) durchgeführt. Die Darstellung der Ergebnisse erfolgt von de Willigen (1991) und Huwe & van der Ploeg (1991). Weitere Modellvalidierungen liegen von Huwe & van der Ploeg (1988) und Götz-Huwe (1989) vor.

6 Ein- und Ausgabedaten

6.1 Eingabedaten

Wetterdaten

- täglicher Niederschlag
- N-Konzentration im Niederschlag
- mittlere Tagestemperatur
- tägliche minimale, maximale und mittlere Bodenoberflächentemperatur
- Sättigungsdefizit der Luft
- potentielle Evapotranspiration
- lang- und kurzweilige Strahlung pro Tag
- Globalstrahlung

Bodendaten

- Darstellung in Tabellenform in Abhängigkeit vom Wassergehalt:
 - Wasserspannungskurve
 - hydraulische Leitfähigkeit
 - thermische Leitfähigkeit
- pH-Wert
- löslicher organischer Kohlenstoffgehalt

Vegetationsdaten

- Feldaufgang (Beginn des Vegetationsabschnittes)
- Erntetermin (Ende des Vegetationsabschnittes)
- Minimal- und Maximalwerte für Bedeckungsgrad
- Minimal- und Maximalwerte für Blattflächenindex
- Minimal- und Maximalwerte für Durchwurzelungstiefe
- Minimal- und Maximalwerte für Gesamtwurzellänge
- Minimal- und Maximalwerte für Gesamttrockenmasse
- Minimal- und Maximalwerte für Gesamtstickstoffmenge in der Pflanze
- Minimal- und Maximalwerte für relative Wurzelverteilung zum Erntezeitpunkt

Bewirtschaftungsmaßnahmen

- organische und mineralische Düngung: Zeitpunkt, Menge
- Bewässerung: Zeitpunkt, Menge, N-Konzentration

Standortdaten

- Geländeneigung
- Dränabstand
- Dräntiefe

Startwerte

- Wassergehalte
- Stickstoff pro Kompartiment: Konzentration, Menge (kann getrennt auch für mobile und immobile Phase eingegeben werden)
- N-Gehalte in schwer, leicht und sehr leicht zersetzbarer Fraktion der organischen Substanz
- Gesamttrockenmasse
- Gesamt-N in Pflanzensubstanz

6.2 Ausgabedaten

Die Angaben erfolgen mit Ausnahme der Schneedaten als Tages- und kumulative Werte.

Wasserhaushalt

- Niederschlag
- Infiltration
- Schnee
- potentielle Evapotranspiration
- Transpiration
- Evaporation
- Interzeptionsverdunstung
- Sickerwasser
- Oberflächenabfluß
- Bewässerung

Stickstoffhaushalt

- Stickstoffeintrag in das erste Kompartiment
- Stickstoffaustrag aus dem ersten Kompartiment
- Mineralisierung aus den Fraktionen N_1 , N_2 und N_3
- Nettomineralisierung
- Immobilisierung
- aufgenommener Stickstoff im Wurzelsystem
- aufgenommener Stickstoff in der oberirdischen Pflanzensubstanz
- aufgenommener Stickstoff in der Gesamtpflanze

Vegetationsentwicklung

- Trockenmasseproduktion unter der Bodenoberfläche
- Trockenmasseproduktion über der Bodenoberfläche
- Gesamttrockenmasseproduktion
- Bodenbedeckungsgrad
- Blattflächenindex

7 EDV-technische Umsetzung

Das Modell WHNSIM ist in FORTRAN 77 geschrieben und wurde auf einem ICL Großrechner unter dem Betriebssystem VME entwickelt. Die hier vorliegende Version 2.0 ist auf jedem PC mit 286iger, 386iger Prozessoren mit entsprechenden Coprozessoren sowie 486iger Prozessoren lauffähig. Die PC-Version wurde mit MS-Fortran 5.0 kompiliert.

8 Literatur

- Appelt, A., K. Holtzclaw and P.F. Pratt (1975):** Effect of anion exclusion on the movement of chloride through soils. Soil Science Society of America Proceedings, 39, 264-267.
- Bear, J. (1972):** Dynamic of fluids in porous media. New York.
- Beese, F., R.R. van der Ploeg and W. Richter (1977):** Test of the soil water model under field conditions. Soil Science Society of America Journal, 41, 979-984.
- Beese, F. (1986):** Parameter des Stickstoffumsatzes in Ökosystemen mit Böden unterschiedlicher Acidität. Göttinger Bodenkundliche Berichte, 90, 1-344.
- Bierhuizen, J.F. and R.O. Slatyer (1965):** Effect of atmospheric concentration of water vapor and CO₂ in determining transpiration photosynthesis relationships of cotton leaves. Agricultural Meterology, 2, 265-270.
- de Vries, D.A. (1975):** Heat transfer in soil. In: Heat and mass transfer in the biosphere. (eds) de Vries, D.A. und N.H. Afgan, Washington D.C., 5-28.
- de Willigen, P. (1991):** Nitrogen turnover in the soil-crop system; comparison of fourteen simulation models. Fertilizer Research, 27, 141-149.
- Dyer, K.L. (1965):** Unsaturated flow phenomena in Panoche sandy clay loam as indicated by leaching of chloride and nitrate ions. Soil Science Society of America Proceedings, 29, 121-126.
- Feddes, A. R., J.P Kowalik and H. Zaradny (1978):** Simulation of field water use and crop yield. Pudoc Centre of Agricultural Publishing and Documentation.

- Gözl-Huwe, H., B. Huwe, W. Simon, and R.R. van der Ploeg (1989):** Zum jahreszeitlichen Nitratgehalt und zur Nitratwaschung von landwirtschaftlich genutzten Böden in Baden-Württemberg. Zeitschrift Pflanzenernährung Bodenkunde, 152, 273-280.
- Groot, J.J.R. and E.L.J. Verberne (1991):** Response of wheat to nitrogen fertilization, a data set to validate simulation models for nitrogen dynamics in crop and soil. Fertilizer Research, 27, 349-383.
- Hornung, U. und W. Messing (1984):** Poröse Medien - Methoden und Simulation. Kirchzarten.
- Hoyningen Huene, J. von (1983):** Die Interzeption des Niederschlags in landwirtschaftlichen Pflanzenbeständen. Schriftenreihe DVWK, 57, 1-53.
- Huwe B. (1992a):** Deterministische und stochastische Ansätze zur Modellierung des Stickstoffhaushaltes landwirtschaftlich genutzter Flächen auf unterschiedlichem Skalenniveau. Institut für Wasserbau, Stuttgart, Mitteilungen, 77, 385 p.
- Huwe B. (1992b):** WHNSIM: Ein Modell zur Simulation des Wasser-, Wärme- und Stickstoffhaushaltes von Standorten mit unterschiedlicher Nutzung. Version 2.0 Programmdokumentation. Universität Bayreuth, Bodenkunde und Bodenphysik, Bayreuth, 108 p.
- Huwe B. und R. van der Ploeg (1988):** Modelle zur Simulation des Stickstoffhaushaltes von Standorten mit unterschiedlicher landwirtschaftlicher Nutzung. Institut für Wasserbau, Stuttgart, Mitteilungen, 69, 213 p.
- Kobus, H. (1985):** Modellierung des großräumigen Wärme- und Schadstofftransports im Grundwasser. Institut für Wasserbau, Stuttgart, Mitteilungen, 59, 146 p.
- Mclsaac, G., D. Martin and D. Watts (1985):** User's Guide to NITWAT, A Nitrogen and Water Management Model. Agricultural Engineering Department.
- Mishra, S., J.C. Parker and N. Singhal (1989):** Estimation of soil hydraulic properties and their uncertainty from particle size distribution data. Journal of Hydrology, 108, 1-18.
- Mualem, J. (1986):** Hydraulic conductivity of unsaturated soils: prediction formulas. In: methods of soil analysis. (eds) Klute, A., Madison Wisconsin USA, 9 (1).

- Priestley, C.H.B. and R.J. Taylor (1972):** The assessment of surface heat flux and evaporation using large-scale parameters. *Month. Weath. Rev.*, 100, 81-92.
- Reddy, K.R., P.S.C. Rao and R.E. Jessup (1982):** The effect of carbon mineralization on denitrification kinetics in mineral and organic soils. *Soil Science Society of America Journal*, 46, 62-68.
- Richter, J., A. Nuske, W. Habenicht and J. Bauer (1982):** Optimized N-mineralization parameters of loess soils from incubation experiments. *Plant and Soil*, 68, 379-388.
- Rijtema, P.E. (1965):** An analysis of actual evapotranspiration. *Agricultural Research Report*, Wageningen, 659, 1-107.
- Schrödter, H. (1985):** Verdunstung, anwendungsorientierte Meßverfahren und Bestimmungsmethoden. Berlin, Heidelberg.
- Stanford, G., R.A. van der Pol and St. Dzienna (1975):** Denitrification rates in relation to total and extractable soil carbon. *Soil Science Society of America Proceedings*, 39, 284-289.
- Stanford, G., St. Dzienna and R.A. van der Pol (1975):** Effects of temperature on denitrification rate in soils. *Soil Science Society of America Proceedings*, 39, 867-870.
- Thomas, G.W. and A.R. Swoboda (1970):** Anion exclusion effects on chloride movement in soils. *Soil Science*, 110, 163-167.
- van Genuchten, M.-Th. (1980):** A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44, 892-898.
- van Genuchten, M.Th. and P.J. Wierenga (1986):** Solute dispersion coefficients and retardation factors. In: Klute, A. (ed) *Methods of soil analysis*. Madison Wisconsin USA, 9 (1).
- Wendroth, O. (1990):** Koeffizient des Wasser- und Gastransportes zur Ableitung von Kenngrößen des Bodengefüges. *Dissertation*, Georg-August-Universität zu Göttingen.