

4 Modellentwicklung von CIPS

4.1 Poolkonzept

Das CIPS-Modell ist angelehnt an das Poolkonzept des CANDY-Modells (FRANKO, 1989; FRANKO und OELSCHLÄGEL, 1993; FRANKO et al., 1995 a und b, 1997). Alle organische Substanz des Bodens ist in die in der Tabelle 4.1 aufgeführten Pools aufgeteilt, die durch die Herkunft der organischen Substanz bzw. deren Funktion charakterisiert sind. Neben dem im CANDY-Modell verwendeten FOM-, AOM-, ROM- und CO₂-Pool wird im CIPS-Modell ein DOM-Pool berücksichtigt. Im CIPS-Modell wird prinzipiell die gesamte organische Bodensubstanz als umsetzbar betrachtet. Die organische Substanz ist aber teilweise aufgrund der Lokalisierung im Porenraum gegen Mineralisierung geschützt.

Tabelle 4.1: Pools des CIPS-Modells

Pools	Interpretation
FOM	Frische organische Substanz (F resh O rganic M atter)
FOM _S	Lösliche Anteil an FOM (S oluble FOM)
FOM _L	Labiler Anteil an FOM (L abile FOM)
FOM _R	Stabiler Anteil an FOM (R esistant FOM)
AOM	Aktive organische Substanz (A ctive O rganic M atter)
ROM	Refraktäre organische Substanz (R efractory O rganic M atter)
DOM	Gelöste organische Substanz (D issolved O rganic M atter)
CO ₂	Kohlenstoffdioxid

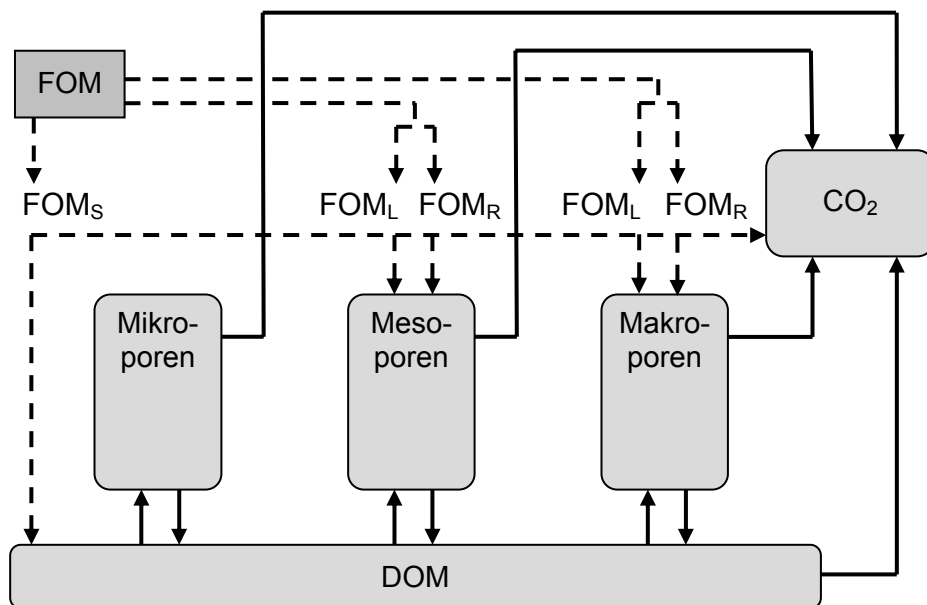
Der FOM-Pool baut sich aus dem Kohlenstoffinput auf, der aus Ernte- und Wurzelrückständen der angebauten Früchte und aus den auf den Boden ausgebrachten organischen Düngern stammt. Die Poolgröße des FOM-Pools berechnet sich aus dem jährlichen Ertrag der Anbaufrucht und der Menge organischen Düngers, die in Korrelation zu fruchtarten- und düngerspezifischen Kohlenstoffgehalten stehen (s. Kap. 3.4). Der FOM-Pool wird in einen löslichen (FOM_S), labilen (FOM_L) und stabilen (FOM_R) Anteil untergliedert, die durch unterschiedliche Mineralisierbarkeiten gekennzeichnet sind.

Der AOM-Pool wird im CIPS-Modell als mikrobielle Biomasse betrachtet, die mit der Chloroform-Fumigation-Extraktion-Methode (CFE) (VANCE et al., 1987) gemessen werden kann, bei der die stoffwechselaktive und ruhende mikrobielle Biomasse insgesamt bestimmt wird. Die Größen des DOM- und des CO₂-Pools lassen sich ebenfalls experimentell

bestimmen. Der ROM-Pool ergibt sich aus der Differenz des Gesamtkohlenstoffgehaltes und der Summe des AOM- und DOM-Pools, wenn man Rückstände frischer organischer Substanz ausschließen kann. Somit sind bis auf den empirisch ermittelten FOM-Pool alle Pools des Modells experimentell ermittelbar, was für die Parametrisierung und Anwendung des Modells einen Vorteil darstellt.

4.2 Modelstruktur

Im Modell erfolgt die Aufteilung des Bodenkörpers in die drei Reaktionsräume der Mikro-Meso- und Makroporen (s. Abb. 4.1), die durch die Beziehung zwischen Wasserspannung und Wassergehalt (pF-Kurve) des Bodens definiert werden. Räume mit schlechten Umsatzbedingungen stellen, aufgrund einer Limitierung des Sauerstoffs, relative Kohlenstoffsenken dar. Dagegen wird aus Räumen, in denen eine erhöhte biologische Aktivität erwartet wird, durch Respiration Kohlenstoff als Kohlenstoffdioxid emittiert.



FOM: Frische organische Substanz (**F**resh **O**rganic **M**atter)
 FOM_S: Löslicher (**S**oluble) Anteil an FOM
 FOM_L: Labiler (**L**abile) Anteil an FOM
 FOM_R: Stabiler (**R**esistant) Anteil an FOM

DOM: Gelöste organische Substanz (**D**issolved **O**rganic **M**atter)
 CO₂: Kohlenstoffdioxid

Abb. 4.1: Modellstruktur von CIPS

Der Porenraum der Mikroporen entspricht dem Volumen bis zum PWP, der Mesoporenraum dem der nFK und das Volumen der Makroporen dem des GW, welches sich aus der Differenz des PV und der FK errechnet. Die Lokalisierung der organischen Substanz erfolgt im Porenraum, wobei der Umsatz der organischen Substanz in den einzelnen Porenklassen in Abhängigkeit der vorherrschenden Umsatzbedingungen stattfindet. Unter der Annahme, dass die Mikroporen aufgrund ihres geringen Porendurchmessers organische Substanz nur in gelöster Form akkumulieren können, wurden im Modell Stoffflüsse vom FOM-Pool ausschließlich zu den Meso- bzw. Makroporen und in den DOM-Pool berücksichtigt. Der FOM-Pool unterteilt sich in einen löslichen (FOM_S), labilen (FOM_L) und stabilen (FOM_R) Anteil, wobei FOM_S direkt in den DOM-Pool fließt. FOM_L und FOM_R werden in den Meso- und Makroporen umgesetzt. Der Stoffaustausch zwischen den einzelnen Porenklassen erfolgt über den DOM-Pool (s. Abb. 4.1). In jeder Porenraumklasse liegt die organische Substanz als AOM und ROM vor (s. Abb. 4.2).

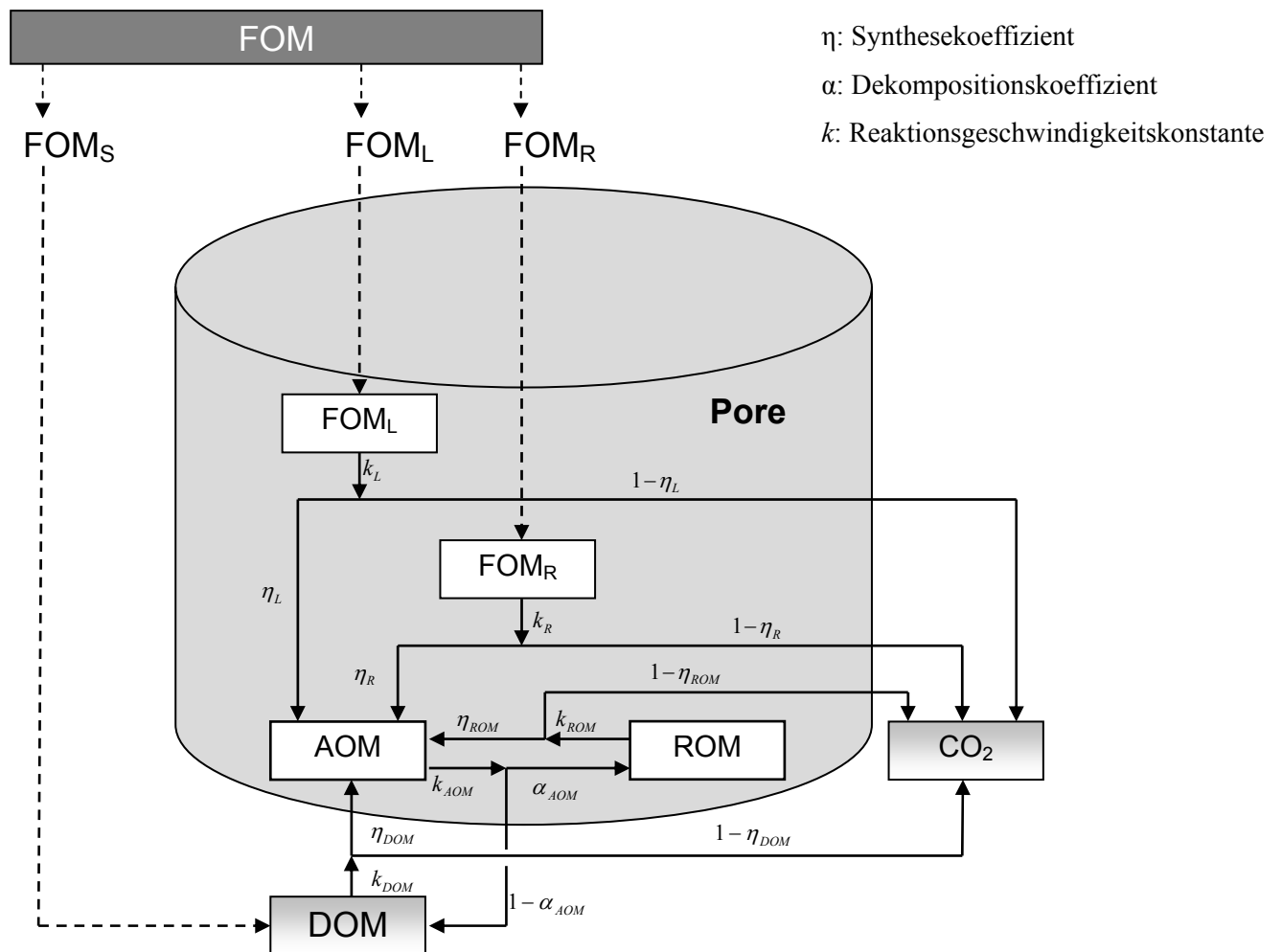


Abb. 4.2: Umsatz der organischen Substanz in einer Pore (Bezeichnungen s. Tabelle 4.2)

Tabelle 4.2: Modellparameter

Parameter	Parameterbeschreibung
α_{AOM}	Dekompositionskoeffizient von AOM
η_{DOM}	Synthesekoeffizient von DOM
η_{ROM}	Synthesekoeffizient von ROM
η_L	Synthesekoeffizient von FOM _L
η_R	Synthesekoeffizient von FOM _R
k_{AOM}	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von AOM
k_{DOM}	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von DOM
k_{ROM}	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von ROM
k_L	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von FOM _L
k_R	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von FOM _R

Der AOM-Pool nimmt zu, indem die organische Substanz aus den FOM_L-, FOM_R-, DOM- und ROM-Pools in Biomasse umgewandelt wird, wobei ein Teil der organischen Substanz durch die Dissimilation als CO₂ entweicht. Beim Abbau des AOM-Pools zerfällt dieser zu ROM und DOM.

Der in Tabelle 4.2 aufgeführte Parametersatz kommt in allen Porenraumklassen in gleicher Weise zur Anwendung.

Der Umsatz der Pools, wie in Gleichungen (4.1) bis (4.4) formuliert, wird ebenso wie im CANDY-Modell in der biologisch aktiven Zeit (BAT- Biological Active Time) angegeben. Die BAT beschreibt die Zeit, die bei optimalen Umweltbedingungen zum Umsatz benötigt werden würde (s. Kap. 2.3).

Der AOM-Pool, der mit der Biomasse assoziiert ist, wird durch die Gleichung (4.1) beschrieben. Dieser wird durch Stoffflüsse aus dem labilen und stabilen Anteil des FOM-Pools (η_L, η_R) und durch den Input aus dem DOM- und ROM-Pool aufgebaut. Außerdem wird ein autolytischer Zerfall der Biomasse mit Stoffflüssen in den ROM-Pool (α_{AOM}) und in den DOM-Pool ($1-\alpha_{AOM}$) angenommen.

$$\frac{dAOM}{dt} = k_L \eta_L FOM_L + k_R \eta_R FOM_R + k_{ROM} \eta_{ROM} ROM + k_{DOM} \eta_{DOM} DOM - k_{AOM} AOM \quad (4.1)$$

Wie in der Gleichung (4.2) formuliert, baut sich der ROM-Pool aus Zerfallsprodukten des AOM-Pools (α_{AOM}) auf. Aus dem Abbau des ROM-Pools resultiert ein Stofffluss, der sich zwischen dem AOM-Pool (η_{ROM}) und CO₂-Pool ($1-\eta_{ROM}$) aufteilt.

$$\frac{dROM}{dt} = k_{AOM} \alpha_{AOM} AOM - k_{ROM} ROM \quad (4.2)$$

Der DOM-Pool [s. Gleichung (4.3)] fungiert als Vehikel für den Stoffaustausch zwischen den einzelnen Porenklassen und hat somit im Modell eine Schlüsselstellung. In allen Porenraumklassen kann die mikrobielle Biomasse auf dieser Kohlenstoffquelle wachsen (η_{DOM}), wobei partiell CO₂ ($1-\eta_{DOM}$) entsteht. Während der Autolyse produziert die Biomasse DOM ($1-\alpha_{AOM}$).

$$\frac{dDOM}{dt} = FOM_S + k_{AOM} (1 - \alpha_{AOM}) AOM - k_{DOM} DOM \quad (4.3)$$

Der erste Term der Gleichung (4.3) repräsentiert den direkten Input aus der löslichen Fraktion des FOM-Pools in den DOM-Pool.

In Gleichung (4.4) sind alle Mineralisationsflüsse während des Biomassewachstums dargestellt, bei denen CO₂ produziert wird.

$$\frac{dCO_2}{dt} = k_{DOM} (1 - \eta_{DOM}) DOM + k_{ROM} (1 - \eta_{ROM}) ROM + k_L (1 - \eta_L) FOM_L + k_R (1 - \eta_R) FOM_R \quad (4.4)$$

4.3 Initialisierung des Modells

Erster Schritt bei der Modellanwendung ist die Definition der initialen Bedingungen.

Im CIPS-Modell wird der Kohlenstoff des Bodens auf die Mikro- (mic), Meso- (mes) und Makroporen (mac) in Abhängigkeit des Anteils der Porenoberfläche einer Porenklasse an der Gesamtporenoberfläche aufgeteilt. Es wird angenommen, dass die Oberflächengröße der Poren eine entscheidende Größe bei der Kohlenstoffanlagerung ist.

Soll ein Versuch simuliert werden, wird die Aufteilung des Kohlenstoffgehaltes (C_{org_ges}), der zu Beginn des Simulationszeitraumes gemessen wurde, auf die Porenklassen nach Gleichung (4.5) berechnet.

$$C_{org_n} = C_{org_ges} \cdot \frac{A_n}{\sum A_i} \quad i, n \in \{mic; mes; mac\} \quad (4.5)$$

mit

- C_{org_n} C_{org} -Gehalt in einer Porenraumklasse
 C_{org_ges} Gesamtkohlenstoffgehalt (Simulationsbeginn)
 $A_{n,i}$ Oberfläche einer Porenraumklasse

Die Oberfläche einer Porenraumklasse ($A_{n,i}$) kann aus dem Volumen der jeweiligen Porenraumklasse (V_n) und dem der Porenraumklasse entsprechenden Äquivalentporenradius (R_n) berechnet werden [s. Gleichung (4.6)].

$$A_n = 2 \cdot \frac{V_n}{R_n} \quad n \in \{mic; mes; mac\} \quad (4.6)$$

Als R_n für die Mikro-, Meso- und Makroporen werden 5×10^{-8} , 10×10^{-8} bzw. 500×10^{-8} m verwendet, die den unteren Grenzen der in SCHEFFER und SCHACHTSCHABEL (1992) angegebenen Spannweiten für die Mittel- und Grobporen entsprechen. Für die Mikroporen entspricht der R_n dem Mittelwert der Feinporen.

Zur Berechnung der Kohlenstoffverteilung in Abhängigkeit der Porenoberfläche einer Porenklasse wurde ein Programm in DELPHI© geschrieben, welches unter dem Namen POF (Porenoberfläche) geführt wird (s. Anhang E).

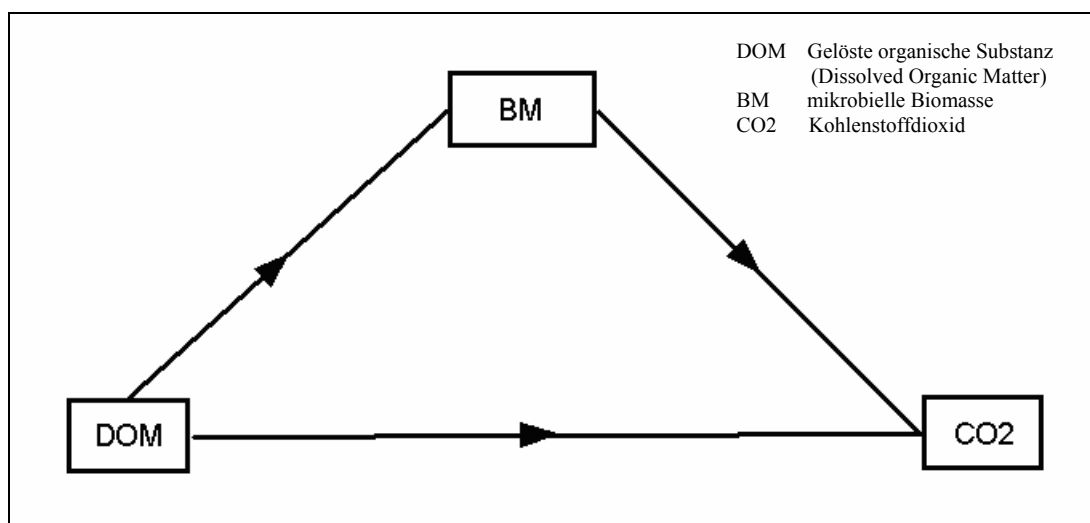
4.4 Parametrisierung von CIPS

Im Anschluss an die Modellentwicklung erfolgte die Parametrisierung des Modells. Die Ermittlung der Modellparameter (s. Tabelle 4.2) resultiert aus der Anpassung der Simulationsergebnisse an Messwerten aus Labor- und Freilandexperimenten. Ausgehend von plausiblen Parameterwerten, die der Literatur (s. Tabelle 4.3) entnommen sind oder sich auf eine mittlere Verteilung stützen, wurde durch schrittweise Änderung der Parameter eine Anpassung an die Zielgrößen erreicht. Das Programm ModelMaker© unterstützt die Optimierungsmethoden Marquardt und Simplex (u.a. in PRESS et al., 1989), die für die Parametrisierung des Versuchsmodells (Abb. 4.3) eingesetzt werden konnten. Aufgrund der Komplexität des Gesamtmodells war eine automatische Optimierung nicht möglich, so dass eine manuelle Anpassung vorgenommen werden musste.

Tabelle 4.3: Startparameter

Parameter	Parameterwert	Modell	Autor	Parameter in CIPS
k_{SOM}	0,00032	CANDY	FRANKO (2003)	k_{ROM}
k_{AOM2}	0,07	DAISY	JENSEN et al. (1997)	k_{AOM}
k_{AOM1}	0,007	DAISY	JENSEN et al. (1997)	k_R

Die Startparameter für den Synthesekoeffizienten (η_{DOM}) und der Reaktionsgeschwindigkeitskonstante (k_{DOM}) des DOM-Pools konnten unter Verwendung der Ergebnisse des in Kap. 3.1.1 beschriebenen DOM - Inkubationsexperimentes (KALBITZ, 2003 a und b) ermittelt werden. Diese Messwertreihe, die im Anhang A in der Tabelle 1 aufgeführt ist, wurde zur Parameterbestimmung herangezogen. Das dazu entwickelte Versuchsmodell ist in Abb. 4.3 dargestellt. Die Modellentwicklung folgte der Vorstellung, dass DOM bei der Mineralisierung zu Kohlenstoffdioxid (CO_2) gleichzeitig den Pool der mikrobiellen Biomasse (BM) aufbaut, der wiederum CO_2 produziert. Da keine Messwerte zur BM vorlagen, wurde deren Autolyse nicht betrachtet und der k-Wert (k_{BM}) nicht für die Parametrisierung des CIPS-Modells übernommen.

**Abb. 4.3:** DOM-Versuchsmodell

Das Versuchsmodell lässt sich durch die Gleichungen (4.7) bis (4.9) beschreiben.

$$\frac{dDOM}{dt} = -k_{DOM} \cdot DOM \quad (4.7)$$

mit

DOM Gelöster organischer Kohlenstoff
 k_{DOM} Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von DOM

Der Abbau des DOM-Pools ist in Gleichung (4.7) formuliert.

$$\frac{dBM}{dt} = k_{DOM} \cdot \eta_{DOM} \cdot DOM - k_{BM} \cdot BM \quad (4.8)$$

mit

BM Kohlenstoff in mikrobieller Biomasse
 k_{BM} Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von BM
 η_{DOM} Synthesekoeffizient von DOM

Der erste Term in Gleichung (4.8) beschreibt den Aufbau des BM-Pools mit Zufluss aus dem DOM-Pool und der zweite Term steht für das emittierte CO_2 .

$$\frac{dCO_2}{dt} = k_{BM} \cdot BM + k_{DOM} \cdot (1 - \eta_{DOM}) \cdot DOM \quad (4.9)$$

mit

CO_2 Kohlenstoffdioxid

In Gleichung (4.9) sind die Mineralisierungsflüsse aus dem BM-Pool und aus dem DOM-Pool wiedergegeben.

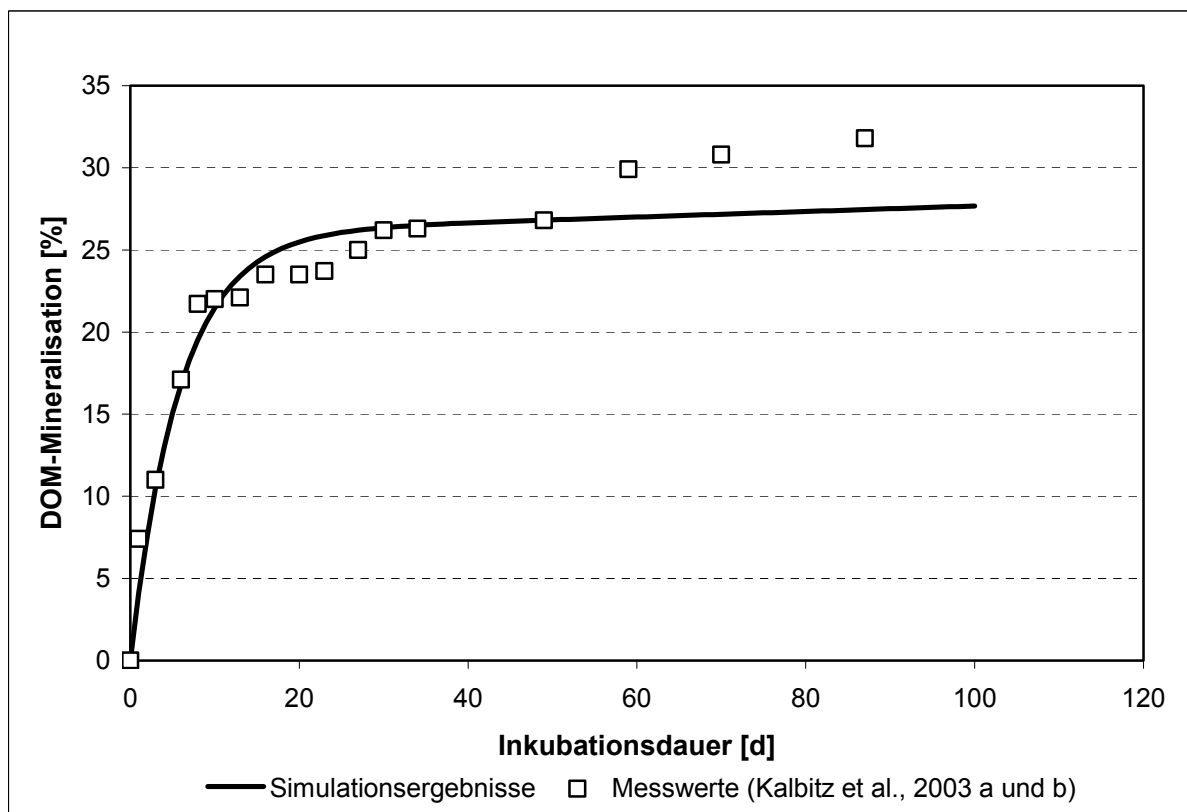


Abb. 4.4: Abbau von DOM gewonnen aus Boden der STM-Parzelle (30 t/ha/2a) des „Statischen Düngungsversuches“ Bad Lauchstädt

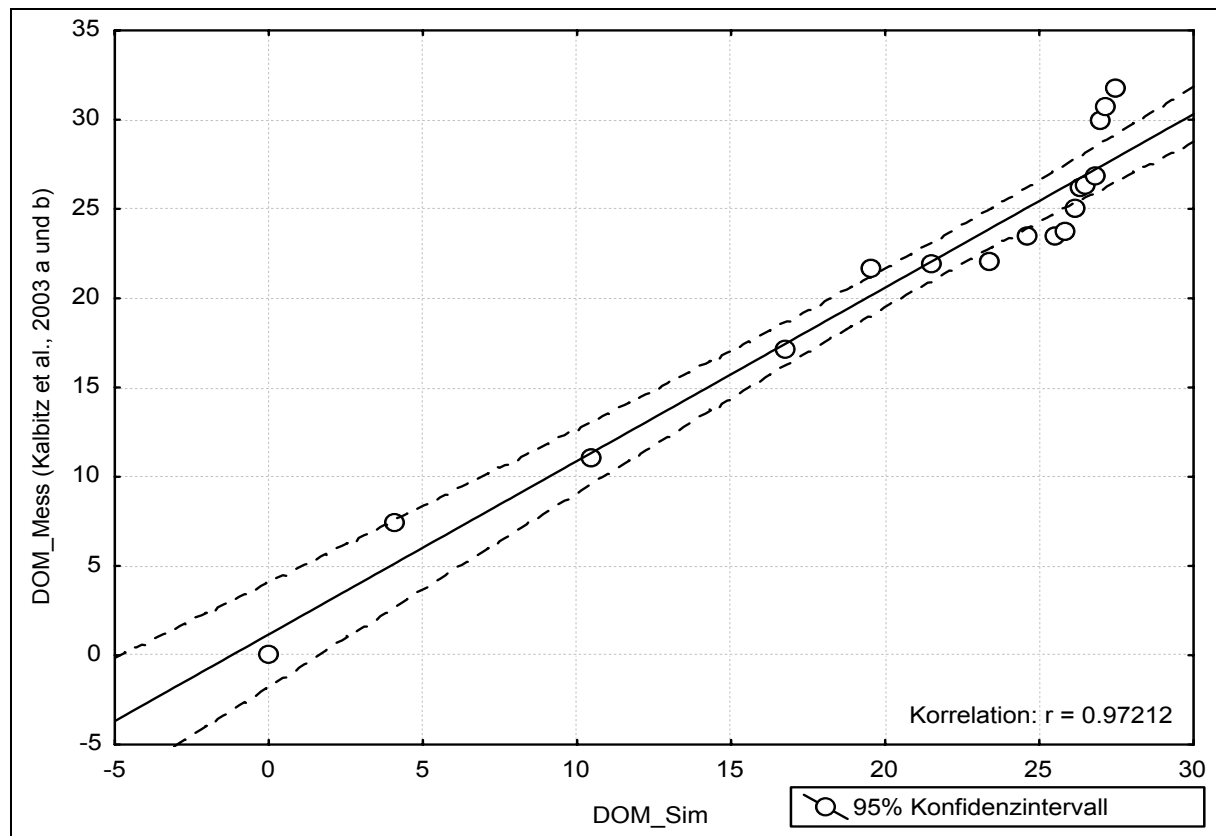


Abb. 4.5: Scatterplot zwischen gemessenen (DOM-Mess) und simulierten (DOM-Sim) DOM-Werten

Durch Optimierung der Simulationsergebnisse an die beim DOM-Abbau ermittelten CO_2 -Messwerte (KALBITZ, 2003 a und b) (s. Abb. 4.4), wurden k_{DOM} ($0,17 \text{ d}^{-1}$), k_{BM} ($0,0002 \text{ d}^{-1}$) und η_{DOM} ($0,74$) bestimmt. Die Parameterwerte für k_{DOM} , und η_{DOM} aus dem Versuchsmodell dienten im weiteren Verlauf der Parametrisierung des CIPS-Modells als Startparameterwerte.

Bei Überprüfung der Kovarianz zwischen den Messwerten des DOM-Abbaus und den Simulationsergebnissen wurde ein Korrelationskoeffizient von $r=0,97$ ermittelt (s. Abb. 4.5), der schlussfolgern lässt, dass eine gute Parameterschätzung vorliegt. Bei Betrachtung der Simulationskurve in Abb. 4.4 erkennt man allerdings eine höhere Abweichung der Messwerte am Ende der Inkubationszeit. Da dieser Versuch nur einen Teilausschnitt der Modellvorstellung von CIPS widerspiegelt und mit diesem nur die Größenordnungen von k_{DOM} , und η_{DOM} ermittelt wurden, erfolgte die Übernahme der Parameter als Startwerte für weitere Anpassungen ohne weitere Überprüfung.

Um eine möglichst exakte Parametrisierung des CIPS-Modells durchführen zu können, müssen viele Poolgrößen als Messwerte vorliegen, die zeitgleich experimentell bestimmt werden. Zur Parameterbestimmung wurde ein Inkubationsexperiment von MARTENS und VOGT (2001) ausgewählt, bei dem die Verteilung des Kohlenstoffs beim

Abbau von ^{14}C -markiertem Weizenstroh im Boden des „Statischen Dauerdüngungsversuches“ Bad Lauchstädt untersucht wurde (s. Kap. 3.1.2).

Durch die ^{14}C -Markierung des Kohlenstoffinputs konnte der Umsatz der frischen organischen Substanz von der des Bodens getrennt betrachtet werden. Mit Messwerten für die mikrobielle Biomasse, die der Poolgröße des AOM-Pools entspricht, für DOM und CO_2 sowie der bekannten Menge an Kohlenstoffinput konnte eine Optimierung durchgeführt werden, die zu einer passenden Lösung führte.

Zunächst erfolgte die Kalkulation des Kohlenstoffinputs in den Boden, die der Poolgröße von FOM entspricht, die sich aus der eingesetzten TM an Stroh (167 mg) und dessen Kohlenstoffgehalt (42,7%) in Bezug zur Bodenmenge (100 g/TM) ergibt. Die FOM-Poolgröße beträgt demnach $713 \mu\text{g C/g Boden}$ ($167 \times 1000 \times 0.427 / 100$).

Da die vorherrschenden Umsatzbedingungen während der Durchführung des Laborexperimentes nicht genau rekonstruiert werden konnten, wurde mit einer maximalen BAT (s. Kap. 2.3) gerechnet. Das bedeutet, dass über den gesamten Versuchszeitraum optimale Umsatzbedingungen angenommen wurden. Der Anteil der BAT in den Mikroporen wurde anhand von Langzeitsimulationsergebnissen des Statischen Dauerdüngungsversuches Bad Lauchstädt mit dem CANDY-Modell ermittelt (s. Tabelle 5.2). In den Mikroporen findet 2% des Kohlestoffumsatzes statt. Die Verteilung der übrigen BAT erfolgte zu gleichen Anteilen von 49% auf die Meso- und Makroporen (s. Tabelle 4.4). Da es sich bei dem Laborexperiment um gesiebten Boden handelt, bei welchem im wesentlichen die natürliche Makrostruktur des Bodens zerstört wurde, konnte keine eindeutige Verteilung der BAT ermittelt werden. Eigene Tests, bei dem die Verteilung der BAT zwischen den Meso- und Makroporen variiert wurden, ergaben nur einen geringen Einfluss auf das Simulationsergebnis.

Tabelle 4.4: BAT-Verteilung für Stroh-Inkubationsexperiment

Parameterbezeichnung	Parameter	Wert
Anteil BAT der Makroporen	BAT_{mac}	0,49
Anteil BAT der Mesoporen	BAT_{mes}	0,49
Anteil BAT der Mikroporen	BAT_{mic}	0,02

Die Ermittlung der Modellparameter (s. Tabelle 4.5) von CIPS erfolgte, indem die Simulationsergebnisse alle gleichzeitig an die Messergebnisse von ^{14}C -DOM (s. Abb. 4.6), ^{14}C -Biomasse (s. Abb. 4.8) und ^{14}C - CO_2 (s. Abb. 4.10) angepasst wurden.

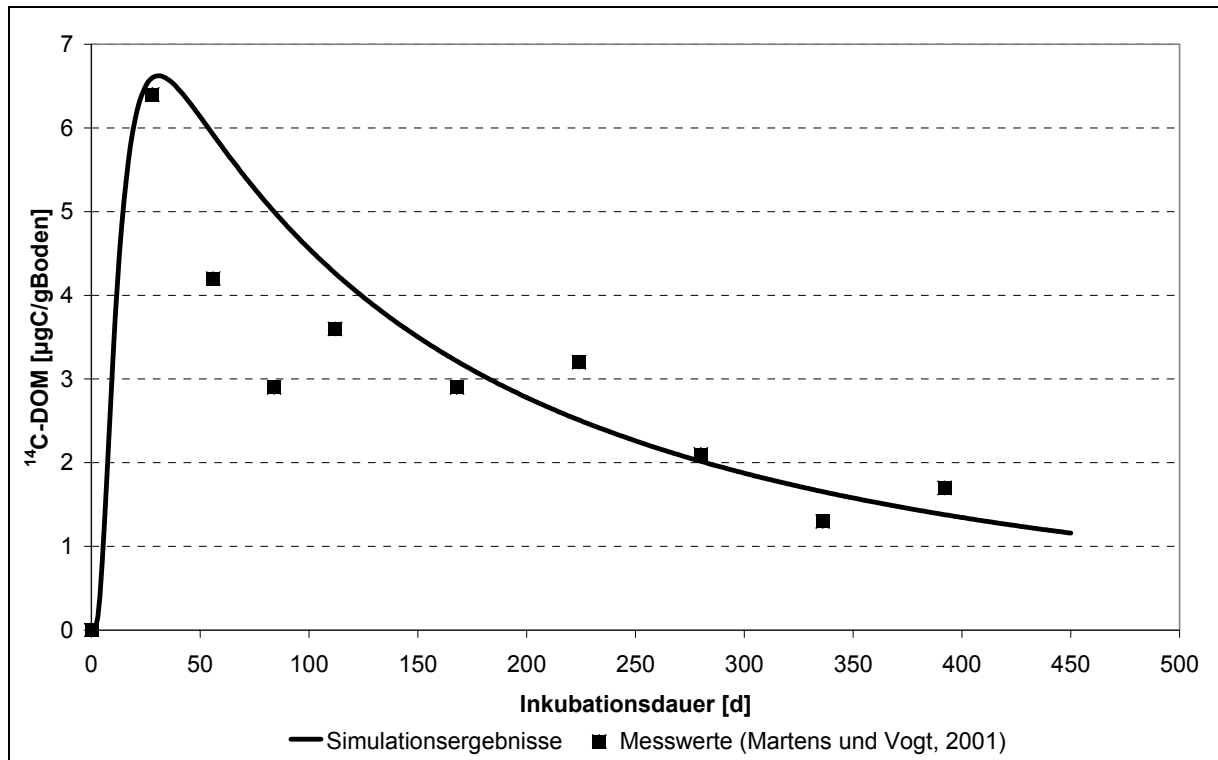


Abb. 4.6: ^{14}C -DOM-Dynamik beim Abbau von markiertem Weizenstroh im Boden der Volldüngungspartelle des „Statischen Düngungsversuches“ Bad Lauchstädt

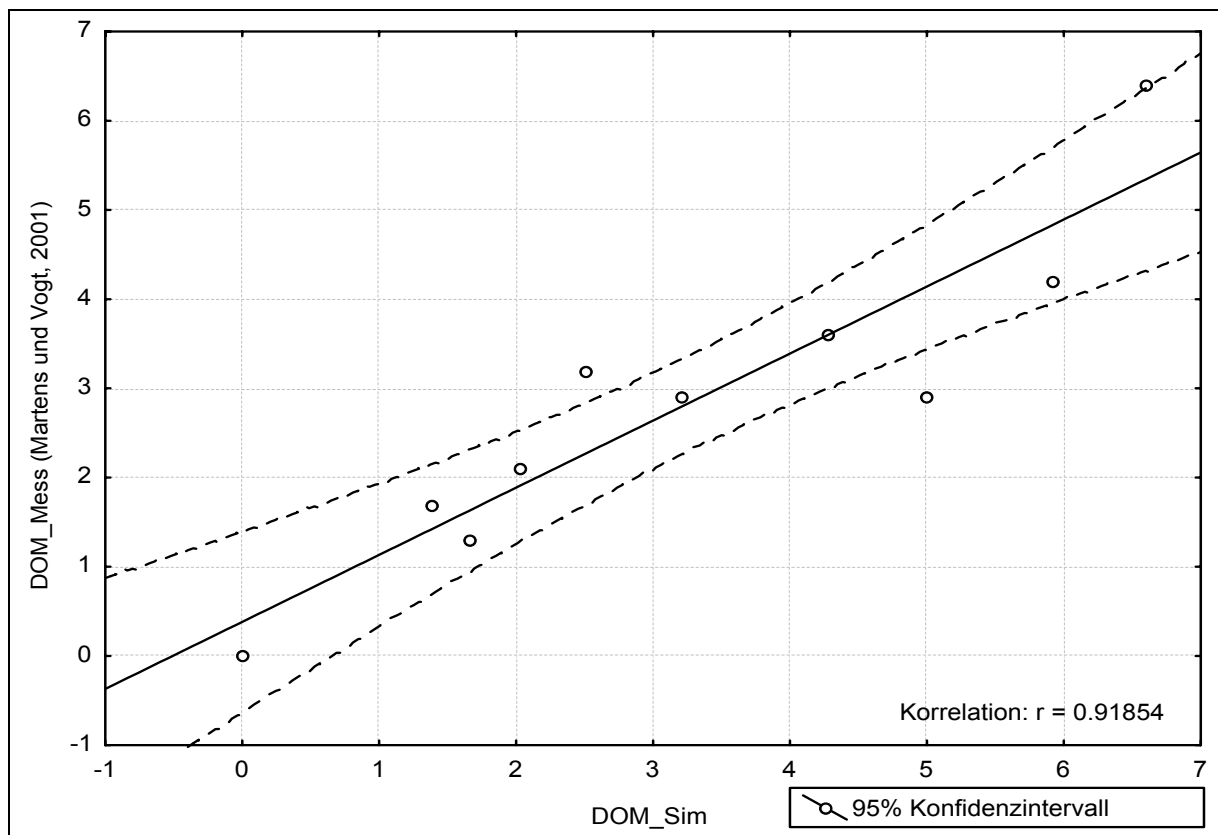


Abb. 4.7: Scatterplot zwischen gemessenen (DOM-Mess) und simulierten (DOM-Sim) ^{14}C -DOM Werten

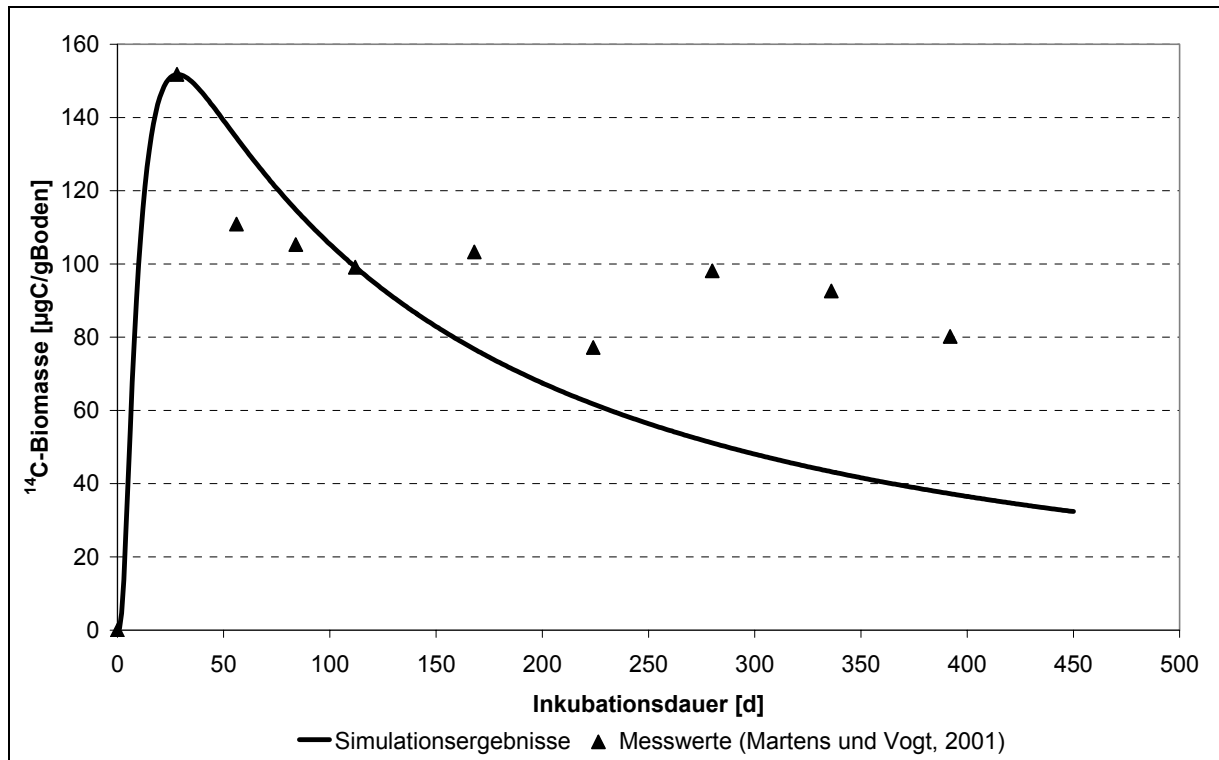


Abb. 4.8: ¹⁴C-Biomasse-Dynamik beim Abbau von markiertem Weizenstroh im Boden der Volldüngungsparzelle des „Statischen Düngungsversuches“ Bad Lauchstädt

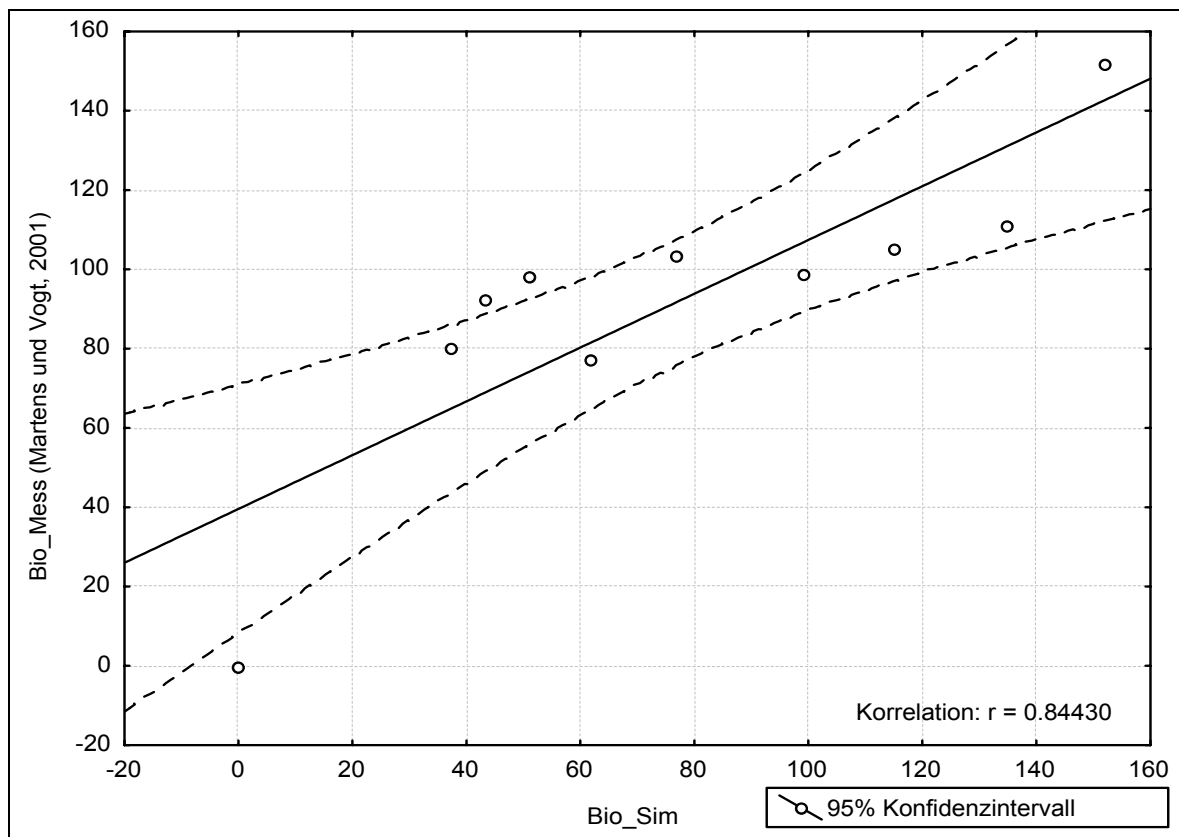


Abb. 4.9: Scatterplot zwischen gemessenen (Bio-Mess) und simulierten (Bio-Sim) ¹⁴C-Biomasse Werten

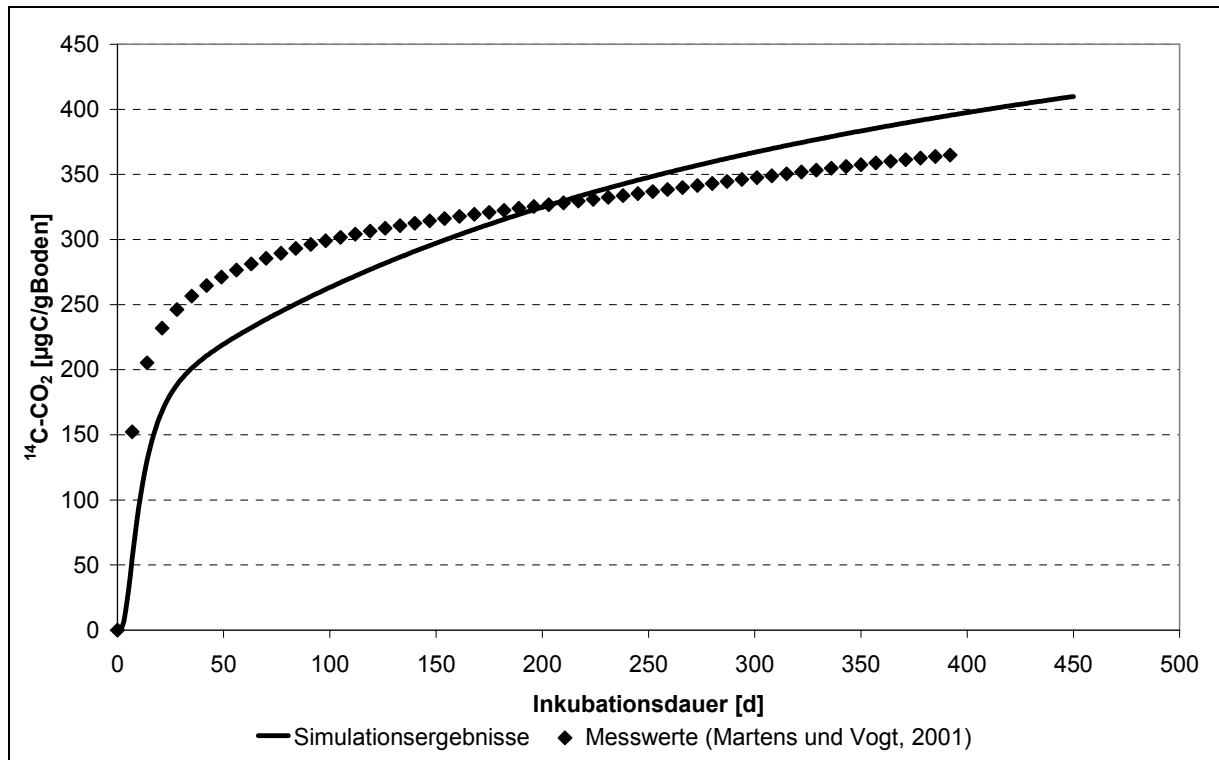


Abb. 4.10: $^{14}\text{C-CO}_2$ -Dynamik beim Abbau von markiertem Weizenstroh im Boden der Volldüngungsparzelle des „Statischen Düngungsversuches“ Bad Lauchstädt

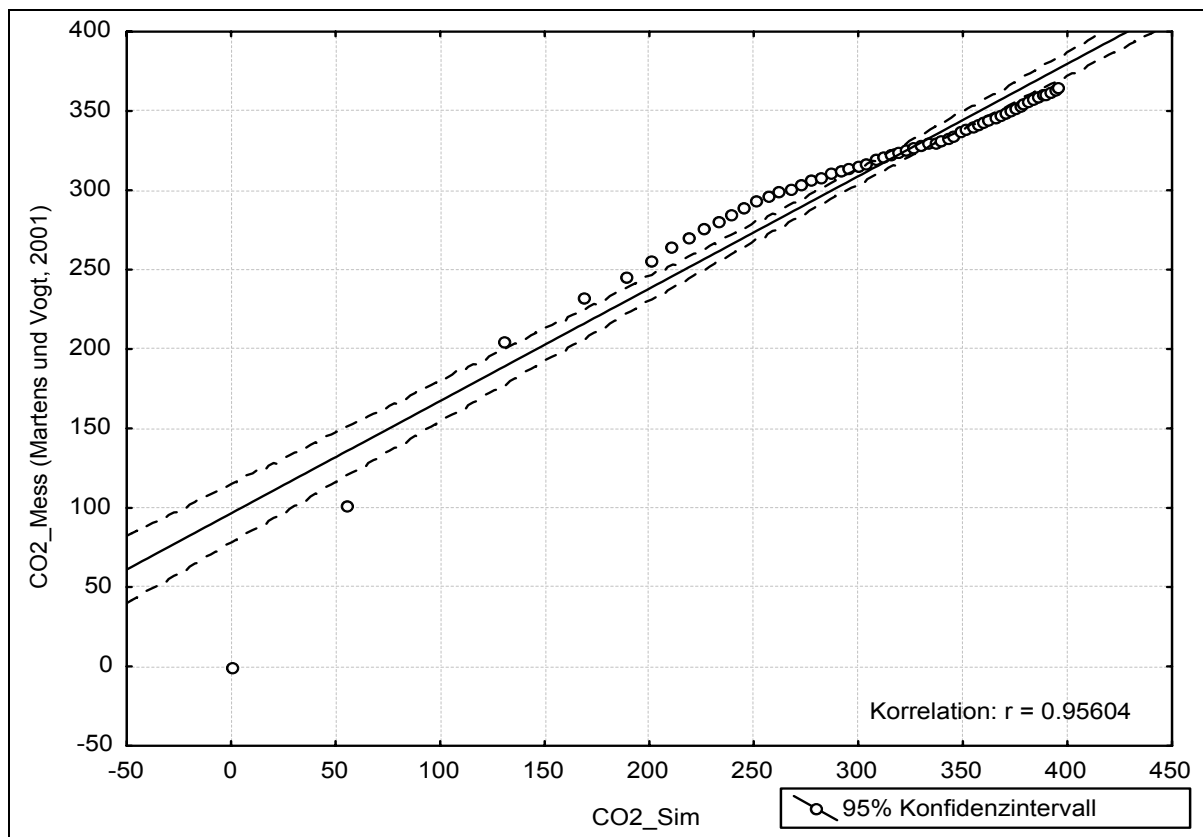


Abb. 4.11: Scatterplot zwischen gemessenen ($\text{CO}_2\text{-Mess}$) und simulierten ($\text{CO}_2\text{-Sim}$) $^{14}\text{C-CO}_2$ -Werten

Das Ziel der Parameteroptimierung ist es, mit den Simulationsergebnissen sowohl das C-Niveau der Messergebnisse zu treffen als auch deren Dynamik abzubilden. In Abb. 4.6, Abb. 4.8 und Abb. 4.10 sind die Simulationsergebnisse zusammengestellt. Die Poolgröße des CO₂-Pools ist ca. doppelt so groß wie der Biomasse-Pool, der wiederum ca. um das Zwanzigfache größer ist als der DOM-Pool. Diese Unterschiede können sehr gut abgebildet werden. Die DOM- und Biomasse-Messwerte weisen in der Anfangsphase einen Peak auf, der nach 30 d Versuchsdauer wieder abfällt. Die qualitative Beschreibung der Dynamik dieser beiden Pools kommt der Realität sehr nahe, lässt sich für die Simulation der Biomasse aber noch präzisieren. Nach 120 d Versuchsdauer erfolgt die Dekomposition der Biomasse in Wirklichkeit nicht so schnell, wie es mit dem CIPS-Modell simuliert wird. Der Abb. 4.10 ist zu entnehmen, dass die simulierten C-CO₂ Gehalte in der Anfangsphase zu niedrig und in der Endphase der Versuchsdauer zu hoch sind. Im Mittel wird eine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Messwerten erreicht.

Die Güte der einzelnen Anpassungen ist in den Abb. 4.7, Abb. 4.9 und Abb. 4.11 dargestellt. Der niedrigste Korrelationskoeffizient wurde mit $r = 0,84$ zwischen den Simulationen und den Messwerten der mikrobiellen Biomasse (s. Abb. 4.9) erzielt. Die Biomassebestimmung beruht auf einer indirekten Methode, wobei es auch auf Seiten der experimentellen Messung zu Fehlbestimmungen gekommen sein kann. Der Korrelationskoeffizient zwischen simuliertem und gemessenem CO₂ beträgt $r=0,96$ und zwischen simuliertem und gemessenem DOM $r=0,92$. Die in Abb. 4.6, Abb. 4.8 und Abb. 4.10 dargestellten Simulationsergebnisse stellen das beste Resultat der Anpassung an die Messergebnisse dar. In Tabelle 4.5 ist das Ergebnis der Parametrisierung zusammengestellt.

Tabelle 4.5: Parameterwerte von CIPS nach erster Parametrisierung

Parameterbezeichnung	Parameter	Wert
Dekompositionskoeffizient der AOM	α_{AOM}	0,3
Synthesekoeffizient der ROM	η_{ROM}	0,65
Synthesekoeffizient des DOM	η_{DOC}	0,77
Synthesekoeffizient des labilen Anteils von FOM	η_L	0,5
Synthesekoeffizient des stabilen Anteils von FOM	η_R	0,7
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von AOM	k_{AOM}	$0,055 \text{ d}^{-1}$
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von ROM	k_{ROM}	$0,0012 \text{ d}^{-1}$
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von DOM	k_{DOM}	$0,429 \text{ d}^{-1}$
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante des labilen Anteils von FOM	k_L	$0,25 \text{ d}^{-1}$
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante des stabilen Anteils von FOM	k_R	$0,008 \text{ d}^{-1}$

Aufgrund der unbekanntenen Umsatzverhältnisse während der Durchführung der Laborexperimente besteht die Notwendigkeit, eine weitere Parametrisierung des CIPS-Modells mit einem Freilandexperiment vorzunehmen. Dazu wurde zunächst eine Sensitivitätsanalyse mit dem CIPS-Modell durchgeführt, um die Sensitivität bzw. Robustheit der Modellparameter zu testen.

Ausgehend vom Standardwert (s. Tabelle 4.5) wurde jeweils ein Parameterwert um $\pm 10\%$ verändert, während alle anderen Parameter ihre Standardeinstellung behielten. Mit allen möglichen Parametereinstellungen wurde die Kontrollvariante des „Statischen Düngungsversuches“ Bad Lauchstädt mit einem mittleren jährlichen Kohlenstoffinput von $102 \mu\text{gC/gBoden}$ über einen Versuchszeitraum von 100 a simuliert. Die Initialisierung des Modells erfolgte nach Kap. 4.3. Die Verteilung der globalen BAT von 29 d, welche anhand von Langzeitsimulationsergebnissen des Statischen Dauerdüngungsversuches Bad Lauchstädt mit dem CANDY-Modell ermittelt wurde, erfolgte mit 2% auf die Mikroporen, mit 56% auf die Mesoporen und 42% auf die Makroporen (s. Tabelle 5.2). Die sich ergebende Abweichung zur Simulationsrechnung mit Standardeinstellung ist in Tabelle 4.6 zusammengestellt.

Tabelle 4.6: Sensitivitätsanalyse der Modellparameter – Berechnung als prozentuale Abweichung vom Gesamtkohlenstoffgehalt nach 100 a Simulation des Kontrollplots des „Statischen Düngungsversuches“ Bad Lauchstädt gegenüber der Simulation mit Originalparametersatz (s. Tabelle 4.5)

Modellparameter	Abweichung der Simulationsergebnisse in [%] vom C_{org} -Gehalt bei Parameteränderung Δp	
	$\Delta p = -10\%$	$\Delta p = +10\%$
α_{AOM}	-1,60	1,49
η_{ROM}	-1,94	2,06
η_{DOM}	-3,66	4,89
η_{L}	-0,73	0,73
η_{R}	-0,97	0,97
k_{AOM}	0,24	-0,20
k_{ROM}	2,47	-2,27
k_{DOM}	0,01	-0,01
k_{L}	< 0,001	< -0,001
k_{R}	-0,07	0,06

Aus der Tabelle 4.6 ist ersichtlich, dass die Modellparameter η_{DOM} , k_{ROM} , η_{ROM} und η_{AOM} am sensitivsten sind. Eine Änderung dieser Parameter hat einen signifikanten Einfluss auf die simulierten Gesamtkohlenstoffgehalte.

Der durch Änderung der Parameterwerte verursachte Effekt ist bei den meisten Parametern in beiden Richtungen ungefähr gleich stark. Mit Änderung des η_{DOM} -Parameters tritt jedoch eine deutliche Divergenz zwischen beiden Richtungen auf. Der stärkere Einfluss des erhöhten η_{DOM} lässt sich dadurch erklären, dass aus dem resultierenden größeren DOM-Pool ein erhöhter DOM-Fluss unter anderem in die Mikroporen zu verzeichnen ist. Aufgrund der in den Mikroporen vorherrschenden schlechten Umsatzbedingungen findet eine langfristige Festlegung der organischen Substanz statt. Umgekehrt werden bei Erniedrigung des η_{DOM} Umsatzprozesse beeinflusst, die einen geringeren Einfluss auf den Gesamtkohlenstoffgehalt im Boden ausüben.

Da der sensitivste Modellparameter η_{DOM} mit DOM-Messwerten aus den Inkubationsversuchen von KALBITZ et al. (2003 a und b) und MARTENS und VOGT (2001) parametrisiert wurde, sollte bei der weiteren Parametrisierung der zweitsensitivste Modellparameter k_{ROM} optimiert werden.

Um das CIPS-Modell für Freilandversuche anwenden zu können, erfolgte die Optimierung des k_{ROM} unter Verwendung von Messwerten zum C_{org} -Gehalt vom Schwarzbracheversuch des „Statischen Düngungsversuches“ Bad Lauchstädt (s. Kap. 3.2.1), bei dem der Einfluss frischer organischer Substanz ausgeschlossen werden konnte. In Abb. 4.12 ist ersichtlich, dass nach Änderung von k_{ROM} von $0,0012 \text{ d}^{-1}$ auf $0,0011 \text{ d}^{-1}$ eine Verbesserung des Simulationsergebnisses (– Sim_Anpassung) erreicht wurde. Der Korrelationskoeffizient zwischen Messwerten und Simulationsergebnissen hat sich nach der Parameteroptimierung von $r=0,939$ auf $r=0,941$ erhöht.

Um die verschiedene Zersetzbarkeit von organischer Substanz aus organischen Düngern und aus Ernte- und Wurzelrückständen zu berücksichtigen, wurden unterschiedliche η -Parameter für den FOM-Pool eingeführt. Zur Ermittlung der η_{L} - und η_{R} -Parameter erfolgte die Anpassung der Simulationsergebnisse an die Messergebnisse der Volldüngungsvariante des „Statischen Düngungsversuches“ Bad Lauchstädt. Die Abb. 4.13 zeigt das Simulationsergebnis nach Einführung unterschiedlicher η -Werte für organische Dünger $\eta_{\text{LOM}}=0,4$ und $\eta_{\text{ROM}}=0,55$ bzw. Ernte- und Wurzelrückstände $\eta_{\text{LCrop}}=0,5$ und $\eta_{\text{RCrop}}=0,7$.

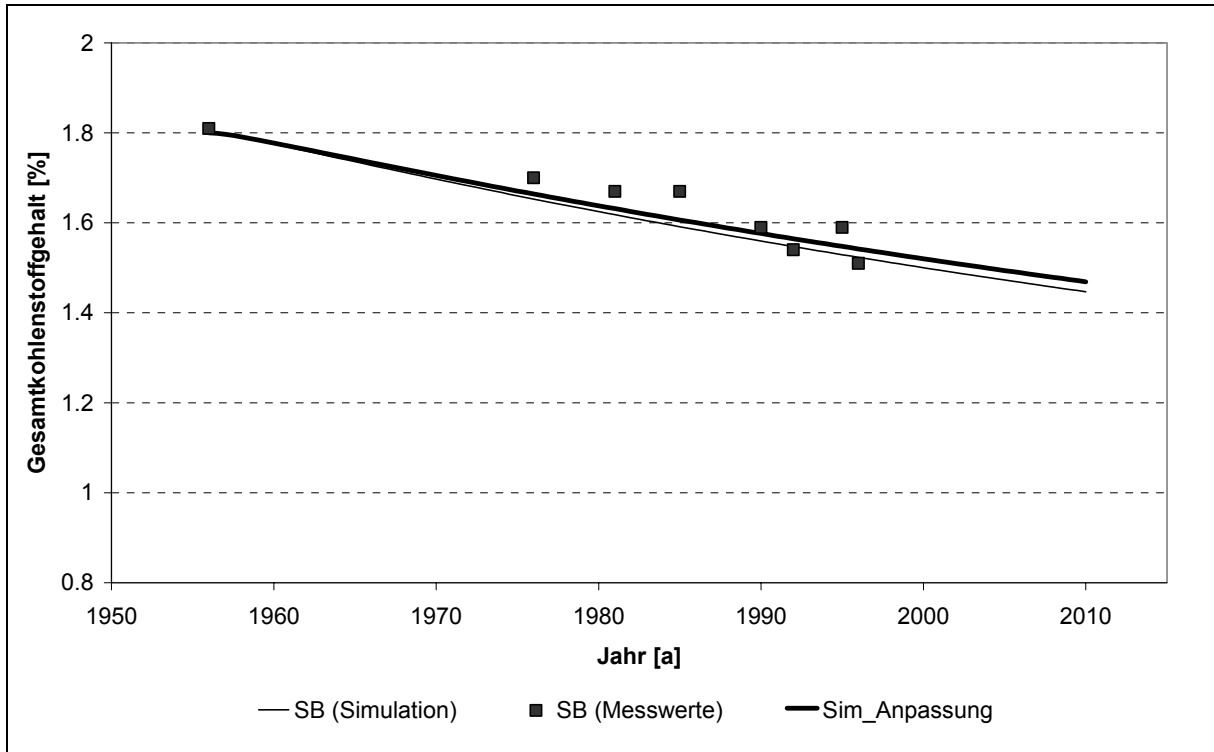


Abb. 4.12: Simulationsergebnis des Schwarzbracheversuches (SB) Bad Lauchstädt nach Parameteroptimierung von k_{ROM} von $0,0012 \text{ d}^{-1}$ auf $0,0011 \text{ d}^{-1}$

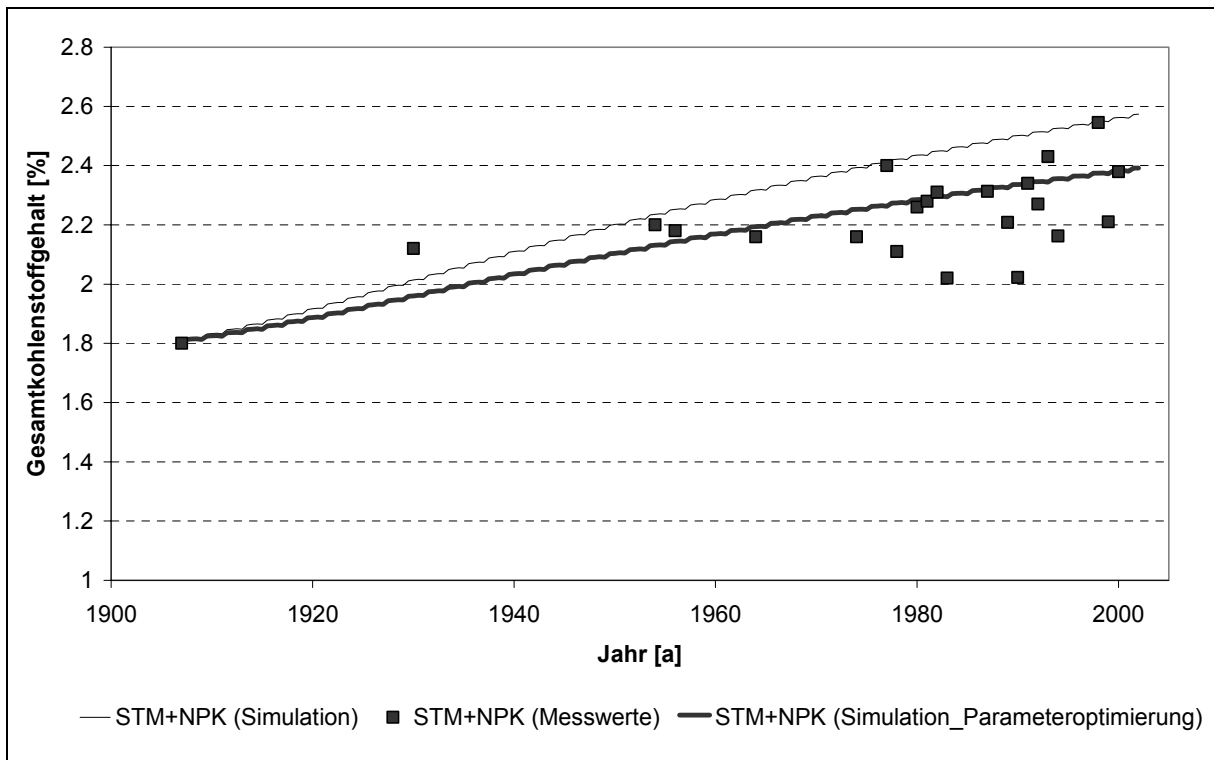


Abb. 4.13: Simulationsergebnisse nach Einführung unterschiedlicher η_L und η_R für Anbaufrucht und Organische Dünger

Die Tabelle 4.7 beinhaltet die endgültigen Parameterwerte für das CIPS-Modell, um Simulationsrechnungen für Freilandversuche durchführen zu können. Dieser Parametersatz gilt für alle Porenklassen und kommt für alle Simulationsrechnungen zur Anwendung. Der Kohlenstoffumsatz unterscheidet sich infolge der für den Standort bzw. Versuch gültigen BAT und der BAT-Verteilung (s. Kap 2.3) auf die Porenklassen.

Tabelle 4.7: Parameterwerte von CIPS

Parameterbezeichnung	Parameter	Wert
Dekompositionskoeffizient der AOM	α_{AOM}	0,3
Synthesekoeffizient der ROM	η_{ROM}	0,65
Synthesekoeffizient des DOM	η_{DOC}	0,77
Synthesekoeffizient des labilen Anteils von der Anbaufrucht ¹	η_{LCrop}	0,5
Synthesekoeffizient des stabilen Anteils von der Anbaufrucht ¹	η_{RCrop}	0,7
Synthesekoeffizient des labilen Anteils von Organischen Düngern ²	η_{LOM}	0,4
Synthesekoeffizient des stabilen Anteils von Organischen Düngern ²	η_{ROM}	0,55
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von AOM	k_{AOM}	0,055 d ⁻¹
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von ROM	k_{ROM}	0,0011 d ⁻¹
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante von DOM	k_{DOM}	0,429 d ⁻¹
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante des labilen Anteils von FOM ⁽¹⁺²⁾	k_L	0,25 d ⁻¹
Reaktionsgeschwindigkeitskonstante des stabilen Anteils von FOM ⁽¹⁺²⁾	k_R	0,008 d ⁻¹