

## Diffuse Einträge in das Grundwasser – internationale und regionale Studien

*Diffuse Inputs into the Groundwater – International and Regional Studies*

L. ALLETO, M. BACH, B. BEUDERT, A. P. BLASCHKE, L. BREUER,  
 St. BÜRGER, M. CASPER, Y. COQUET, P. VAN DIJK, U. FRANKO, H.-G. FREDE,  
 H. FRIESE, M. GEBEL, H. GÖMANN, N. GRAVELINE, J. GRIMM-STRELE,  
 K. GRUNEWALD, Th. GUDERA, D. GUTKNECHT, St. HALBFASS, St. HANNAPPEL,  
 M. KAISER, B. KLÖCKING, S. KNOBLAUCH, Ch. KONRAD, St. KORTE, P. KREINS,  
 H. KROISS, R. KUNKEL, Ch. LABAT, H. LAMBRECHT, R. LIEDL, M. PÄTSCH,  
 V. PRASUHN, I. PRUTZER, M. PUHLMANN, Th. REIMANN, Ch. SCHILLING,  
 J. O. SKØIEN, E. SPIESS, F. SUCKOW, B. SZYSKA, J. ULLRICH, K. B. VACHÉ,  
 H.-J. VOIGT, W. WALTHER, R. WELL, F. WENDLAND, R. WOLTER,  
 M. ZESSNER & M. ZWEIG

### Inhalt

	Seite
1. Indikatoren für eine nachhaltige Landnutzung – Modellkopplung zur Abschätzung von N-Emissionen aus der Pflanzenproduktion (B. SZYSKA, M. BACH, L. BREUER, H.-G. FREDE & K. B. VACHÉ).....	150
1.1. Einleitung.....	150
1.2. Methoden.....	151
1.3. Ergebnisse.....	152
1.4. Diskussion.....	156
Zusammenfassung.....	157
Literatur.....	157
Summary.....	158
Dank.....	158
2. Using Plot Measurement Data for the Validation of an Eco-Hydrological River Basin Model (B. KLÖCKING, B. BEUDERT, S. KNOBLAUCH & F. SUCKOW).....	159
2.1. Introduction.....	159
2.2. Model.....	159
2.3. Validation on agricultural measurement plots in Thuringia.....	160
2.4. Validation at a beech stand in the Bavarian Forest Park.....	163
2.5. Conclusions.....	163
Summary.....	164
References.....	164
Zusammenfassung.....	165
3. Prognosis of Diffuse Nitrogen Fluxes into Groundwater from the Agricultural Used Areas in Saxony-Anhalt (U. FRANKO, I. PRUTZER & M. PUHLMANN).....	165

3.1. Introduction .....	165	7.1. Einleitung.....	189
3.2. Definition of scenarios.....	165	7.2. Stoffflussmodell MODIFFUS .....	190
3.3. Regionalisation – GIS.....	166	7.3. Resultate und Diskussion .....	190
3.4. Simulation runs and evaluation of results.....	167	Zusammenfassung .....	192
3.5. Results and discussion .....	167	Literatur .....	193
Summary .....	169	Summary .....	193
References.....	169	8. The Influence of Diffuse Pollution on Groundwater Content Patterns for the Groundwater Bodies of Germany (R. KUNKEL, St. HANNAPPEL, H.-J. VOIGT, F. WENDLAND & R. WOLTER).....	194
Zusammenfassung .....	169	8.1. Introduction .....	194
Acknowledgements .....	169	8.2. Method .....	195
4. Modellierung diffuser Stickstoffeinträge in die Grundwasserkörper des Freistaates Sachsen (M. GEBEL, St. BÜRGER, H. FRIESE, K. GRUNEWALD, St. HALBFASS, M. KAISER, J. ULLRICH & M. ZWEIG) .....	170	8.3. Data base.....	196
4.1. Einleitung.....	170	8.4. Selected results.....	196
4.2. Methodik der Bilanzierung.....	170	8.4.1. Potassium .....	196
4.3. Ergebnisse.....	172	8.4.2. Nitrate.....	198
4.4. Diskussion .....	172	8.5. Discussion and conclusions .....	198
Zusammenfassung .....	173	Summary .....	200
Literatur.....	173	References.....	200
Summary .....	174	Zusammenfassung .....	201
Dank .....	174	9. Identification of Denitrification by Measurement of N <sub>2</sub> , Ar and N <sub>2</sub> O as Aid for the Modelling of the Nitrate Transport in Groundwater (W. WALTHER, Ch. KONRAD, Th. REIMANN & R. WELL) .....	201
5. Impacts of Limiting Nutrient Surpluses within an Intensive Livestock Region Taking Supra-Regional Manure Transports into Account (P. KREINS, H. GÖMANN, R. KUNKEL & F. WENDLAND) .....	174	9.1. Introduction .....	201
5.1. Introduction and problem .....	174	9.2. Elimination of nitrate in the groundwater.....	202
5.2. Integrated agricultural economic and hydrological modeling .....	175	9.3. Direct and indirect method to identify the denitrification .....	202
5.3. Reference situation in the study area .....	177	9.4. Application of the methods .....	204
5.4. Scenarios.....	179	9.5. Conclusion .....	206
5.5. Aggregate impacts of the implementation of maximum nitrogen surpluses .....	179	Summary .....	206
5.6. Regional impacts of the implementation of maximum nitrogen surpluses .....	181	References.....	207
5.7. Conclusions and outlook.....	181	Zusammenfassung .....	207
Summary .....	182	Acknowledgements .....	207
References.....	182	10. Heterogenität des Abbaus von Nitrat im Grundwasser – Berücksichtigung bei der Modellierung (M. PÄTSCH & W. WALTHER).....	207
Zusammenfassung .....	183	10.1. Einleitung.....	207
6. Prognosis of Future Nitrate Input into the Upper Rhine Aquifer (M. CASPER, P. VAN DIJK, N. GRAVELINE, J. GRIMM-STRELE, Th. GUDERA, St. KORTE & H. LAMBRECHT) .....	183	10.2. Untersuchungsgebiet .....	208
6.1. Introduction .....	183	10.3. Ergebnisse.....	209
6.2. Modeling concept.....	185	10.3.1. Tiefenprofile .....	209
6.3. Results .....	186	10.3.2. Gestein – Tiefenprofile .....	210
6.4. Discussion and conclusion.....	187	10.3.3. Gestein – Untersuchungen zum Umsatz.....	210
Summary .....	188	10.4. Modellierung.....	211
References.....	188	10.5. Schlussfolgerung.....	211
Zusammenfassung .....	189	Zusammenfassung .....	212
7. Ausmaß und Ursachen der sinkenden Nitratgehalte im Grundwasser des Kantons Bern (E. SPIESS & V. PRASUHN) .....	189	Literatur .....	212
		Summary .....	212
		11. Denitrification in Groundwater – Results from Investigations in two Austrian Case Study Regions (Ch. SCHILLING, A. P. BLASCHKE, D. GUTKNECHT, H. KROISS, J. O. SKØIEN & M. ZESSNER).....	213

11.1. Introduction .....	213
11.2. Methods .....	213
11.3. Results and discussion .....	214
11.4. Conclusions.....	216
Summary .....	216
References.....	217
Zusammenfassung .....	217
Acknowledgements .....	217
12. Transport of Solutes in the Transition Zone of Saturated and Unsaturated Subsurface (Th. REIMANN, R. LIEDL & W. WALTHER) .....	218
12.1. Fluid flow and transport within the Saturated-Unsaturated Interface Region .....	218
12.1.1. Object of investigation.....	218
12.1.2. Hydraulic and transport processes – state of the art .....	219
12.2. Impact of the Saturated-Unsaturated Interface Region on water quality.....	219
12.3. Conclusion .....	222
Summary .....	223
References.....	223
Zusammenfassung .....	224
13. Fate of Isoxaflutole and its Diketonitrile Metabolite under Conventional and Conservation Tillage in an Irrigated Continuous-Maize Field (L. ALLETO, Y. COQUET & Ch. LABAT).....	224
13.1. Introduction .....	224
13.2. Materials and methods .....	225
13.3. Results and discussion .....	226
13.3.1. Persistence of isoxaflutole.....	226
13.3.2. Distribution in soil .....	227
13.3.3. Water and herbicide leaching.....	227
13.4. Conclusion .....	229
Summary .....	229
References.....	229
Zusammenfassung .....	230
Acknowledgments.....	230
Zusammenfassung (J. FANK) .....	230
Summary (J. FANK).....	231

## 1. Indikatoren für eine nachhaltige Landnutzung – Modellkopplung zur Abschätzung von N-Emissionen aus der Pflanzenproduktion

(B. SZYSKA, M. BACH, L. BREUER, H.-G. FREDE & K. B. VACHÉ)

### 1.1. Einleitung

Um die Nachhaltigkeit landwirtschaftlicher Betriebssysteme beurteilen zu können, benötigen Landwirte wie auch die Betriebsberatung geeignete Instrumente. Die Software REPRO (Reproduktion der organischen Bodensubstanz) von K. J. HÜLSBERGEN (2002) stellt eines

dieser Beratungsinstrumente dar. Zu dem derzeitigen Stand der Entwicklung können mit REPRO noch nicht alle Umweltbelastungen erfasst werden. Gerade der Beitrag der Landwirtschaft zur Klimaveränderung hat bisher noch keine Berücksichtigung gefunden, obwohl z. B. Emissionen von N<sub>2</sub>O (Lachgas) aus landwirtschaftlichen Flächen in den 90er Jahren in den Blickpunkt gerückt sind (S. E. MACHEFERT et al., 2002 und A. MOSIER et al., 1998).

Ziel ist es, im Rahmen des DBU(Deutsche Bundesstiftung Umwelt)-Projekts „Indikatoren für eine nachhaltige Landnutzung“ einen neuen Indikator (klimarelevante N<sub>2</sub>O-Emissionen) zur Bewertung der Nachhaltigkeit von Landwirtschaftsbetrieben für das Programm REPRO zu entwickeln. Dieses soll durch die Kopplung von REPRO mit dem Denitrification Decomposition (DNDC) Modell ermöglicht werden. Vor der Kopplung von REPRO und DNDC muss das DNDC Modell kalibriert und seine Ergebnisse unter mitteleuropäischen Boden- und Klimaverhältnissen validiert werden. Das Vorgehen und die Ergebnisse der Kalibrierung des DNDC Modells werden am Beispiel des Bodenklimamoduls in diesem Beitrag dargestellt.

### 1.2. Methoden

DNDC wurde schrittweise überprüft, um die Teilmodule Bodenklima, Mineralisation und Nitrifikation/Denitrifikation einzeln zu kalibrieren und validieren. Das verwendete Kalibrierungsverfahren basiert auf einer Monte-Carlo (MC) Simulation und ist dem von K. J. BEVEN & A. M. BINLEY (1992) entwickelten „Generalised Likelihood Uncertainty Estimation (GLUE)“ Verfahren ähnlich. Mittels dieses Ansatzes soll ein optimaler Satz von Parametern herausgearbeitet werden.

Zunächst wurde mit allen in den jeweiligen Modulen befindlichen Parametern eine Sensitivitätsanalyse vorgenommen. Sämtliche Parameter wurden gleichzeitig variiert und ihre Werte mittels einer MC Simulation aus einer uniformen Verteilung gezogen (siehe A. SALTELLI et al., 2004). Die Anzahl der Modellläufe belief sich bei den Sensitivitätsanalysen für jedes Modul auf n = 200. Mit Hilfe einer multiplen linearen Regression und einer ANOVA (Varianzanalyse) wurden die sensitiven Parameter identifiziert. Diese Parameter wurden für die anschließende Kalibrierung herangezogen.

Für die Kalibrierung wurde eine MC Simulation mit 10.000 randomisierten und simultanen Ziehungen der Werte für die signifikanten Modellparameter durchgeführt. Die Evaluation der Modellergebnisse sowie die Auswahl des geeigneten Parametersatzes erfolgte mittels verschiedener Effizienzkriterien, die den Vergleich zwischen beobachteten und vorhergesagten Werten ermöglichten. Verwendete Effizienzkriterien: Index of Agreement d (C. J. WILLMOT, 1981), Nash-Sutcliffe-Efficiency E (J. E. NASH & J. V. SUTCLIFFE, 1970), Bestimmtheitsmaß r<sup>2</sup> und der Root Mean Square Error RMSE. Im Anschluss an die Kalibrierung wurden Validierungen durchgeführt. Dazu wurden die kalibrierten Module an einem anderen Standort getestet.

Für die Kalibrierung wurden Messungen von Untersuchungsflächen (Tab. 1.1) aus verschiedenen Regionen Deutschlands verwendet. Für diese Flächen standen neben den Eingangsdaten, Messungen der Bodentemperatur und Bodenwassergehalte (in verschiedenen Bodentiefen) sowie Messungen zu CO<sub>2</sub>- und N<sub>2</sub>O-Emissionen zur Verfügung. Die Kalibrierung des Bodenklimamoduls wurde für den Standort Gießen vorgenommen, die Mineralisation und die Nitrifikation/Denitrifikation wurden anhand von Versuchsflächen bei Göttingen kalibriert. Validierungen wurden auf den Flächen in Göttingen/Niedersachsen und Siggen/Baden-Württemberg durchgeführt.

Tab. 1.1: Übersicht der zur Kalibrierung und Validierung verwendeten Standorte.  $C_{org}$  – organischer Kohlenstoffgehalt im Boden, N – Stickstoff,  $NH_4NO_3$  – salpetersaures Ammoniak.  
Overview of the sites used for calibration and validation.  $C_{org}$  – organic carbon content of the soil, N – nitrogen,  $NH_4NO_3$  – nitric ammonia.

Standort/ Autor	Boden		Jahres- niederschlag [mm]	Jahresmittel- temperatur [°C]	Kultur	Düngung [kg N ha <sup>-1</sup> ]
	Ton [%]	$C_{org}$ [%]				
Göttingen, Niedersachsen F. SCHMÄDEKE (1998)	30,4	1,5	635	8,6	Winterraps Winterweizen Wintergerste	90 und 55 als $NH_4NO_3$
Gießen, Hessen C. KAMMANN (2001)	16,0	2,8	644	9,9	Grünland/ Schnitt- nutzung	40 als $NH_4NO_3$
Siggen, Baden- Württemberg S. N. GLATZEL (1999)	28,9	4,7	1400	6,5	Grünland/ Schnitt- nutzung	167 als Gülle

### 1.3. Ergebnisse

Durch die Kalibrierung des Bodenklimamoduls konnten die Berechnungen der Temperatur und des Wassergehaltes im Boden deutlich verbessert werden. Zwar zeigen die Effizienzkriterien für die Berechnung der Bodentemperatur vor und nach der Kalibrierung keine allzu großen Veränderungen bezogen auf das gesamte Jahr (unkalibriertes Modul:  $d = 0,97$ ,  $E = 0,87$ ,  $r^2 = 0,92$  und  $RMSE = 2,26$  vs. kalibriertes Modul:  $d = 0,96$ ,  $E = 0,87$ ,  $r^2 = 0,94$  und  $RSME = 2,33$ ). Dennoch sind im Jahresverlauf deutliche Verbesserungen festzustellen. Zum einen werden die teilweise sehr starken Schwankungen der berechneten Bodentemperatur verringert und dem natürlichen Temperaturverlauf angepasst und zum anderen konnten die starken Unterschätzungen der Bodentemperatur in den Wintermonaten durch die Kalibrierung korrigiert werden (Fig. 1.1 und Fig. 1.2, Beispiel Gießen). Werden die Effizienzkriterien für die Zeiträume von Anfang Dezember bis Mitte Februar der Messperiode verglichen, so zeigt sich eine deutliche Steigerung der Modellgüte von  $d = 0,79$ ,  $E = -0,47$ ,  $r^2 = 0,62$  und  $RMSE = 2,61$  auf  $d = 0,90$ ,  $E = 0,62$ ,  $r^2 = 0,71$  und  $RMSE = 1,35$  (Fig. 1.2).

Die Validierung der kalibrierten Bodentemperatur zeigt sowohl auf dem Versuchsstandort in Siggen/Baden-Württemberg als auch auf dem bei Göttingen/Niedersachsen in Teilen eine Verbesserung der Effizienzkriterien der Modellergebnisse nach der Kalibrierung. Siggen: unkalibriert:  $d = 0,97$ ,  $E = 0,88$ ,  $r^2 = 0,91$  und  $RSME = 2,30$  vs. kalibriert:  $d = 0,96$ ,  $E = 0,88$ ,  $r^2 = 0,94$  und  $RSME = 2,28$  und Göttingen: unkalibriert:  $d = 0,88$ ,  $E = 0,45$ ,  $r^2 = 0,66$ ,  $RMSE = 4,99$  vs. kalibriert:  $d = 0,88$ ,  $E = 0,58$ ,  $r^2 = 0,58$  und  $RMSE = 4,34$ . Auch bei den Validierungsflächen konnte eine deutlich verbesserte Anpassung der Bodentemperatur im Winter erreicht werden (Werte hier nicht gezeigt).

Die Berechnung des Bodenwassergehaltes konnte durch die Kalibrierung ebenfalls verbessert werden. Vor der Kalibrierung zeigte das Modell eine deutliche Unterschätzung der Feuchtigkeit im Boden, was auch durch die Effizienzkriterien verdeutlicht wurde ( $d = 0,50$ ,  $E = -1,91$ ,  $r^2 = 0,32$  und  $RSME = 0,27$ ). Nach der Anpassung konnten die Unterschätzung des berechneten Wassers im Boden vermindert wie auch die zeitlichen Verläufe von Was-

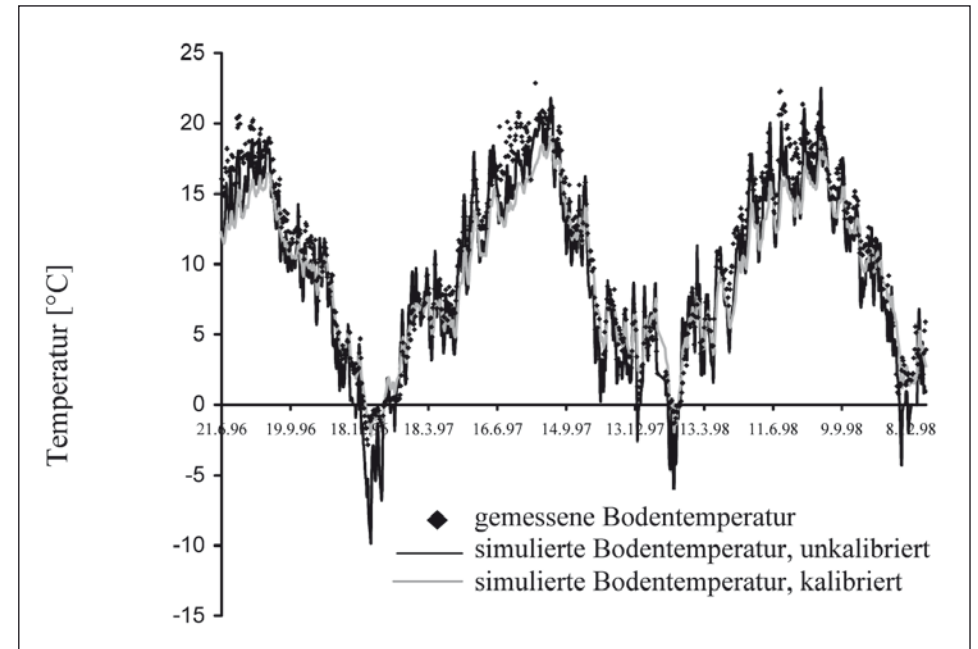


Fig. 1.1: Gemessene und simulierte Bodentemperatur für die Jahre 1996 bis 1998 am Standort Gießen.  
Measured and simulated soil temperature for 1996 to 1998 at Gießen.

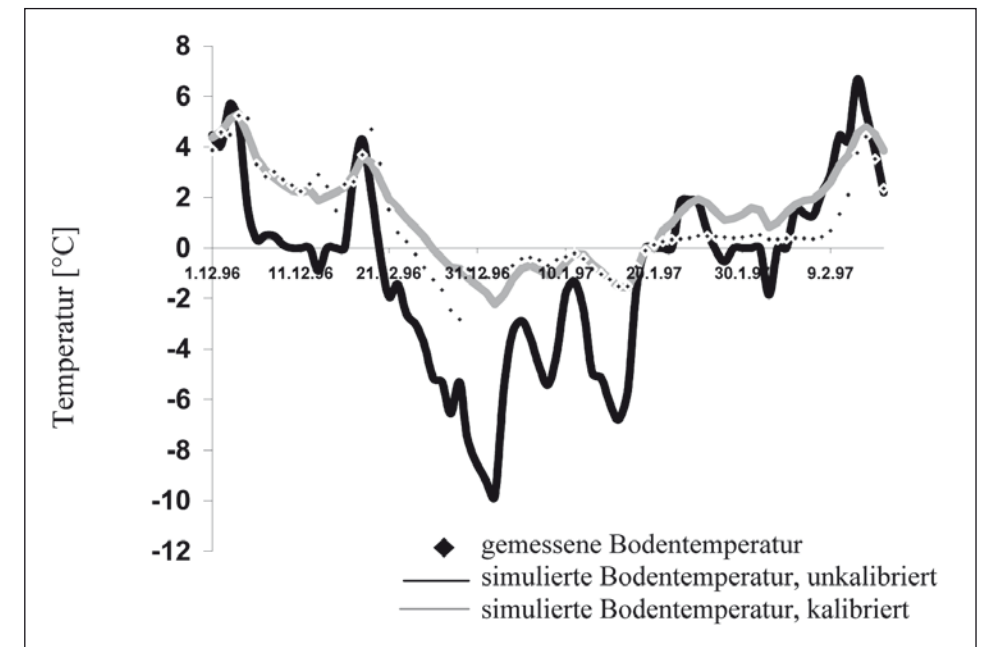


Fig. 1.2: Gemessene und simulierte Bodentemperatur im Winter 1996/97 am Standort Gießen.  
Measured and simulated soil temperature during wintertime 1996/97 at Gießen.

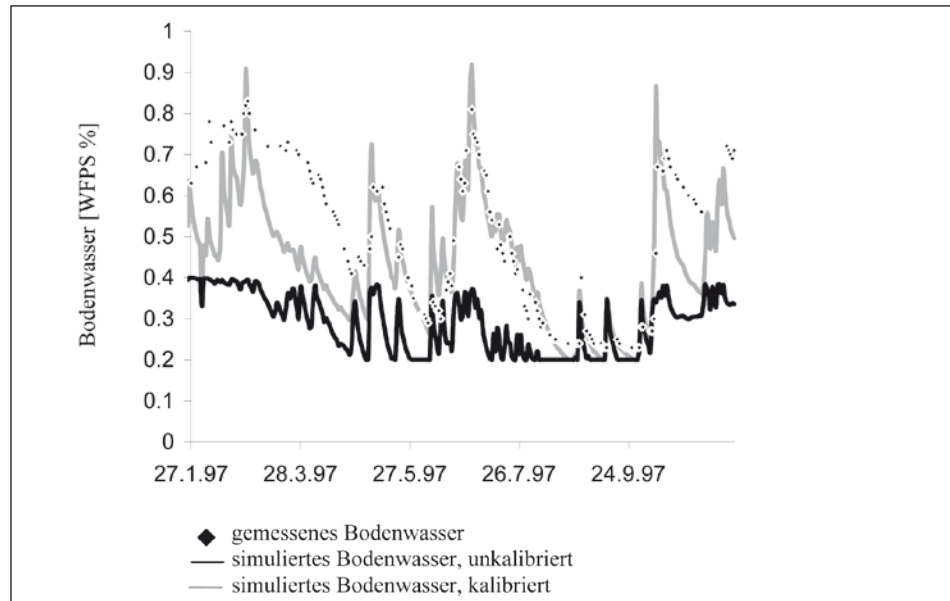


Fig. 1.3: Gemessener und simulierter Bodenwassergehalt für das Jahr 1997 am Standort Gießen. WFPS – wassergefülltes Porenvolumen (%).  
Measured and simulated soil moisture content in 1997 at Gießen. WFPS – water filled pore space (%).

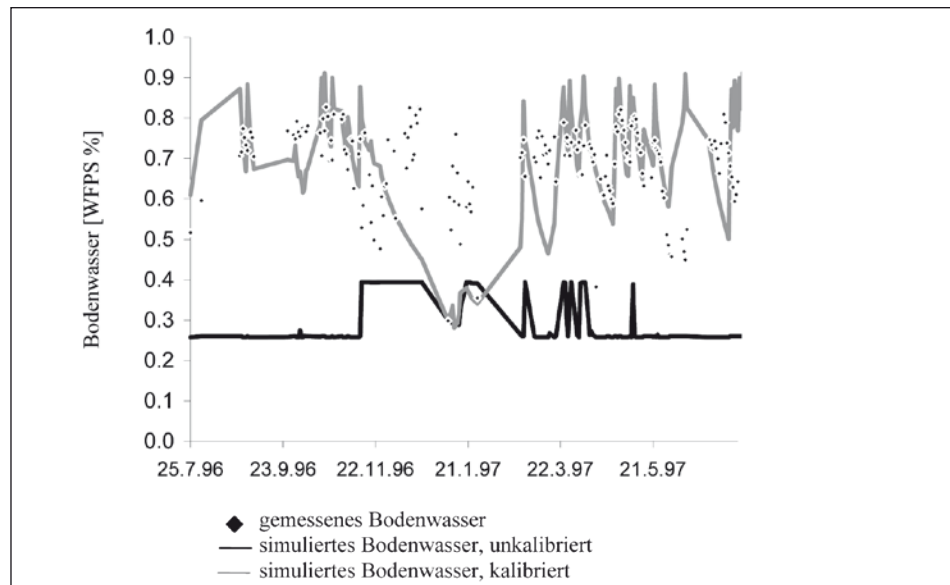


Fig. 1.4: Gemessener und simulierter Bodenwassergehalt für das Jahr 1997 am Standort Siggen. WFPS – wassergefülltes Porenvolumen (%).  
Measured and simulated soil water content in 1997 at Siggen. WFPS – water filled pore space (%).

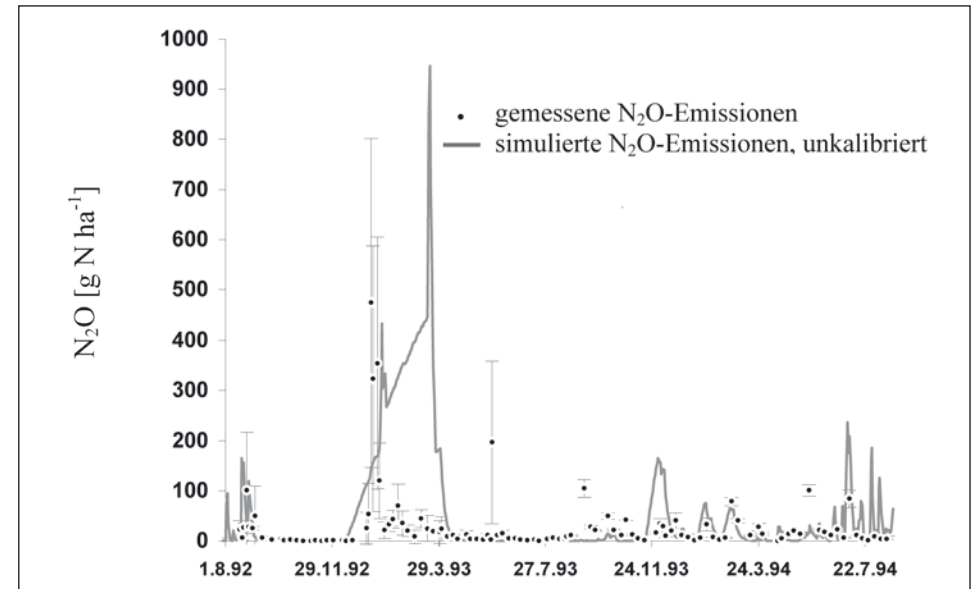


Fig. 1.5: Gemessene und simulierte N<sub>2</sub>O-Emissionen des unkalibrierten Modells am Standort Scheyern.  
Measured and simulated N<sub>2</sub>O emissions of the not calibrated model at Scheyern.

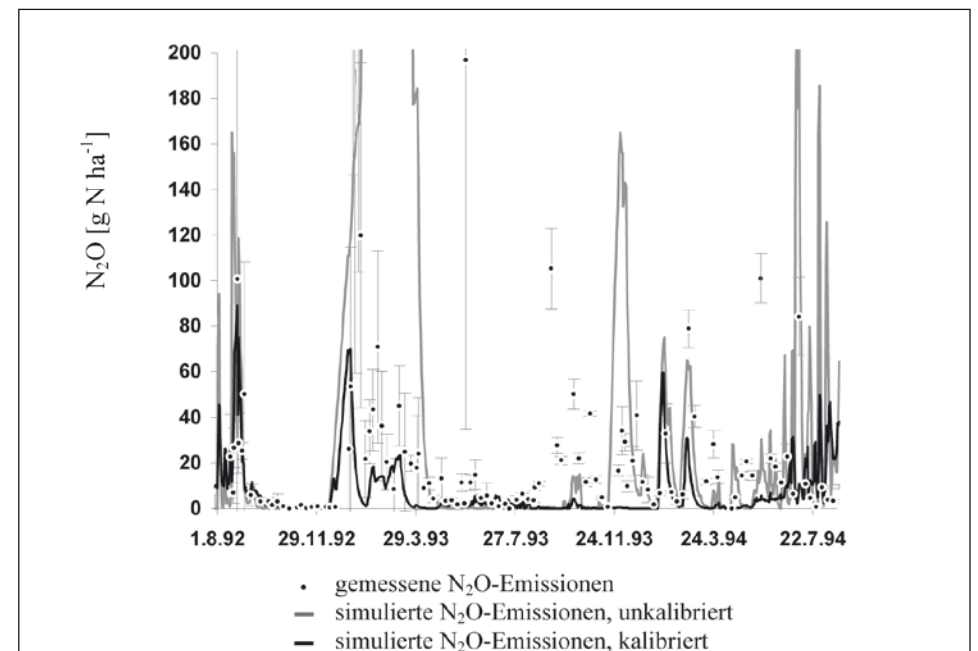


Fig. 1.6: Gemessene und simulierte N<sub>2</sub>O-Emissionen des unkalibrierten und kalibrierten Modells am Standort Scheyern. (Schnitt der y-Achse bei 200 g N ha<sup>-1</sup>.)  
Measured and simulated nitrous oxide emissions (N<sub>2</sub>O) of the not calibrated and calibrated model at Scheyern. (Extent up to 200 g N ha<sup>-1</sup>.)

sättigung und Austrocknung des Bodens besser dargestellt werden ( $d = 0,68$ ,  $E = -0,47$ ,  $r^2 = 0,39$  und  $RSME = 0,18$ ; Fig. 1.3). Die Übertragung der angepassten Bodenfeuchteberechnung des Bodenklimamoduls zeigte ebenfalls eine eindeutig verbesserte Vorhersage des Bodenwassergehaltes verglichen mit dem unkalibrierten Modul. Auch bei der Validierung ist zu sehen, dass das Niveau des berechneten Bodenwassergehaltes dem der Messung entspricht (unkalibriert:  $d = 0,28$ ,  $E = -13,89$ ,  $r^2 = 0,02$  und  $RSME = 0,40$  vs. kalibriert:  $d = 0,51$ ,  $E = -3,60$ ,  $r^2 = 0,17$  und  $RSME = 0,22$ ). Abweichungen ergeben sich teilweise bei dem Austrocknungsgrad des Bodens (Fig. 1.4).

Die Kalibrierung des Bodenklimamoduls hat deutlichen Einfluss auf die Berechnung der  $N_2O$ -Emissionen. Die vor der Anpassung modellierten Lachgasemissionen werden von DNDC deutlich überschätzt. Darüber hinaus werden nicht alle Emission-Peaks von dem Modell abgebildet (Fig. 1.5). Dieses spiegelt sich auch in den berechneten Modellgütemaßen wider, die für DNDC, bezogen auf die tägliche Auflösung der  $N_2O$ -Emissionen, recht gering ausfallen ( $E = -1,6$ ,  $RSME = 160$ ,  $r^2 = 0,05$  und  $d = 0,38$ ).

Nach der Kalibrierung zeigt sich, dass die Überschätzungen der  $N_2O$ -Emissionen (gerade in den Wintermonaten) verringert wurden (Fig. 1.6). Weiterhin sind im Einzelnen Emissionsereignisse vom Modell nicht abgebildet, jedoch hat die Kalibrierung der Berechnung von Bodentemperatur und -feuchte insgesamt positive Auswirkungen auf die modellierten Emissionen. Die Gütemaße wurden dadurch überwiegend verbessert:  $E = -0,03$ ,  $RSME = 67$ ,  $r^2 = 0,07$  und  $d = 0,31$ .

#### 1.4. Diskussion

Nach den ersten Validierungsergebnissen konnte die Berechnung von Bodentemperatur und -wassergehalt durch eine automatische Kalibrierung eindeutig verbessert werden. Die veränderten Parameter in den Berechnungsschritten im Bodenklimamodul zeigen sowohl für die Kalibrierungsflächen als auch für die Validierungsflächen hohe bzw. gute Modelleffizienzen. Die Simulationen der Bodentemperatur während des Winters konnten deutlich optimiert werden.

Die gerade in dieser Jahreszeit vorkommenden kurz aufeinander folgenden Frost-Tau-Wechsel spielen eine bedeutende Rolle bei der Freisetzung von  $N_2O$ . Bei Temperaturwechsel um den Gefrierpunkt können  $N_2O$ -Verluste entstehen, die bis zu 50% der gesamten Jahresemission ausmachen können (H. FLESSA et al., 1998, R. RUSER et al., 2001, C. MÜLLER et al., 2002). Ausschlaggebend für die hohen Verluste an  $N_2O$  bei kurzzeitigem Auftauen des Bodens sind hohe Gehalte an leicht umsetzbaren organischen Stickstoff- und Kohlenstoffverbindungen der Böden, die während der Frostperiode angereichert wurden und dann sehr schnell von anwachsenden Mikroorganismenpopulationen umgesetzt werden können. Da das Modell zuvor in den Wintermonaten latent zu geringe Bodentemperaturen berechnet hatte, konnte es somit diese Frost-Tau-Wechsel im Boden nicht immer befriedigend abbilden. Analog zu den Frost-Tau-Wechseln bedingen auch Unterschiede in der Bodenfeuchte (Trocken-Nass-Zyklen) einen wesentlichen Einfluss auf die  $N_2O$ -Emissionen (K. R. REDDY & W. H. PATRICK, 1975). Gerade die denitrifikatorische  $N_2O$ -Produktion ist abhängig von der Größe der anaeroben Bereiche im Boden. Somit tragen falsch berechnete Bodenwassergehalte ebenfalls zu einer ungenauen Abbildung der  $N_2O$ -Emissionen in DNDC bei. DNDC hatte vor der Kalibrierung zu geringe Bodenwassergehalte für die Böden berechnet.

Bei Betrachtung der Auswirkungen der Kalibrierung des Bodenklimamoduls auf die  $N_2O$ -Emissionen sind zwar insgesamt durch die Anpassungen die vorhergesagten  $N_2O$ -Emissionen verbessert worden, jedoch scheint dadurch das gesamte Emissionsniveau herabgesetzt worden zu sein. Dieses zeigt sich an den teilweise zuvor nicht auftauchenden Unterschätzungen der

$N_2O$ -Emissionen. Wie die Überprüfung der Emissionsmodellierung in DNDC zeigt, können durch die alleinige Anpassung des Bodenklimamoduls nicht alle Prozesse korrigiert oder erfasst werden. Demnach müssen im weiteren Kalibrierungsverfahren neben den wichtigen Steuergrößen der  $N_2O$ -Emission, Temperatur und Wassergehalt des Bodens, ebenso die Kohlen- und Stickstoffumsatzprozesse überprüft und angepasst werden.

#### Zusammenfassung

Im Rahmen des DBU(Deutsche Bundesstiftung Umwelt)-Projekts „Entwicklung von Indikatoren für eine nachhaltige Landnutzung“ wird REPRO, ein landwirtschaftliches Beratungs- und Bewertungsprogramm, welches auf Umweltindikatoren basiert, erweitert. Treibhausgasemissionen aus landwirtschaftlichen Flächen, wie z. B.  $N_2O$  (Lachgas), werden in REPRO für die Beurteilung eines Betriebes hinsichtlich seiner nachhaltigen Bewirtschaftungsweise bisher nicht berücksichtigt. Um solch einen Nachhaltigkeitsindikator in das Bewertungssystem von REPRO aufnehmen zu können, werden die beiden Modelle REPRO und DNDC (Denitrification Decomposition) miteinander gekoppelt, wobei mit DNDC die N-Treibhausgasemissionen für jeden Betrieb schlagbezogen berechnet werden. Vor der Kopplung der Modelle muss jedoch das DNDC Modell für mitteleuropäische Bedingungen angepasst werden.

Der Struktur des DNDC Modells folgend, wurde eine schrittweise Kalibrierung durchgeführt, indem für jedes Modellmodul mittels einer automatischen Kalibrierungstechnik eine Anpassung erfolgte. Im ersten Schritt wurde eine Sensitivitätsanalyse, basierend auf einer Monte-Carlo Simulation ( $n = 200$ ) für sämtliche modellinterne Parameter durchgeführt. Sensitive Parameter konnten mittels einer multiplen linearen Regression und einer ANOVA (Varianzanalyse) ermittelt werden. Eine darauf folgende weitere Monte-Carlo Simulation ( $n = 10.000$ ) diente der Kalibrierung des Modells. Alle Ergebnisse der gezogenen Parameterwerte wurden mit Hilfe verschiedener Modelleffizienzkriterien evaluiert.

Hier dargestellt sind die Ergebnisse der Kalibrierung für das Bodenklimamodul des DNDC Modells. Die Berechnung der Bodentemperatur während der Wintermonate konnte durch die Kalibrierung verbessert werden. Gerade zu dieser Jahreszeit stellt die Temperatur im Boden, bezogen auf die Emission von  $N_2O$ , eine wichtige Größe dar. Unterschätzungen der Bodentemperatur während der Frost-Tau-Zyklen im Winter führen zu Unterschätzungen der vorhergesagten N-Treibhausgasemissionen. Angepasste Parameter in den Berechnungen für die Bodentemperatur zeigen hohe Effizienzkriterien und eine gute Anpassung an die beobachteten Werte.

#### Literatur

- BEVEN, K. J. & A. M. BINLEY (1992): The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction.– *Hydrol. Process*, **6**, 279–298.
- FLESSA, H., U. WILD, M. KLEMISCH & J. PFADENHAUER (1998): Nitrous oxide and methane fluxes from organic soils under agriculture.– *Eur. J. Soil Sci.*, **49**, 327–335.
- GLATZEL, S. N. (1999): The greenhouse gas exchange of grassland agroecosystems (Umsatz klimarelevanter Gase in Agrar-Ökosystemen unter Grünland).– In: KANDELER, E., M. KAUPENJOHANN & K. STAHR (Hrsg., 1999): Hohenheimer bodenkundliche Hefte.– H. **52**, 184 S.
- HÜLSBERGEN, K. J. (2002): Entwicklung und Anwendung eines Bilanzierungsmodells zur Bewertung der Nachhaltigkeit landwirtschaftlicher Systeme.– 278 S., Aachen (Shaker).
- KAMMANN, C. (2001): Die Auswirkung steigender atmosphärischer  $CO_2$ -Konzentrationen auf die Flüsse der Klimaspurengase  $N_2O$  und  $CH_4$  in einem Grünlandökosystem.– Dissertation an den Naturwissenschaften (Fachbereich Biologie) der Julius-Liebig-Universität Gießen, 224 S., Gießen.

- MACHEFERT, S. E., N. B. DIESE & K. W. T. GOULDING (2002): Nitrous oxide emission from a range of land uses across Europe.– *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, **6** (3), 325–337.
- MOSIER, A., C. KROEZE & C. NEVISON (1998): Closing the global N<sub>2</sub>O budget: nitrous oxide emissions through the agricultural nitrogen cycle – OECD/IPCC/IEA phase II development of IPCC guidelines for national greenhouse gas inventory methodology.– *Nutri. Cycl. Agroecosyst.*, **52** (2-3), 225–248.
- MÜLLER, C., M. MARTIN, R. J. STEVENS, R. J. LAUGHLIN, C. KAMMANN, J. C. G. OTTOW & H.-J. JÄGER (2002): Processes leading to N<sub>2</sub>O emissions in grassland soil during freezing and thawing.– *Soil Biol. Biochem.*, **34**, 1325–1331.
- NASH, J. E. & J. V. SUTCLIFFE (1970): River flow forecasting through conceptual models, Part I – A discussion of principles.– *J. Hydrol.*, **10**, 282–290.
- REDDY, K. R. & W. H. PATRICK (1975): Effect of alternate aerobic and anaerobic conditions on redox potential, organic matter decomposition and nitrogen loss in a flooded soil.– *Soil Biol. Biochem.*, **7**, 87–94.
- RUSER, R., H. FLESSA, R. SCHILLING, F. BEESE & J. C. MUNCH (2001): Effect of crop-specific field management and N fertilization on N<sub>2</sub>O emissions from a fine-loamy soil.– *Nutri. Cycl. Agroecosyst.*, **59**, 177–191.
- SALTELLI, A., K. CHAN & E. M. SCOTT (2004): Sensitivity Analysis.– 447 S., Weinheim (Wiley – VCH Verlag GmbH).
- SCHMÄDEKE, F. (1998): Lachgas- und Methanflüsse eines Gley-Auenbodens unter dem Einfluß einer Rapsfruchtfolge und in Abhängigkeit von der N-Düngung.– Dissertation am Institut der Agrikulturchemie der Georg-August Universität Göttingen, 139 S., Göttingen.
- WILLMOT, C. J. (1981): On the validation of models.– *Phys. Geogr.*, **2**, 184–194.

## Summary

In the DBU (German Federal Environmental Foundation) project “Development of Environmental Indicators for Sustainable Land Use” the REPRO model (reproduction of the soil organic matter), which is based on environmental indicators, is under improvement. Trace gas emissions such as N<sub>2</sub>O (nitrous oxide) as indicators for sustainable agriculture are not yet included in the model. Hence, the REPRO model will be linked with the DNDC (Denitrification Decomposition) model, to estimate (among others) N trace gas emissions for every specific field of a farm. Before the two models can be linked, DNDC must be calibrated for Mid-European conditions. According to the structure of DNDC the calibration of the model was done stepwise by calibrating each sub-model with an automatic calibration technique. At first a sensitivity analysis for all internal sub-model parameters based on a Monte Carlo (n = 200) simulation was done. The most sensitive parameters were selected with the help of multiple linear regression and ANOVA (Analysis of Variance). In a second Monte Carlo simulation (n = 10,000) randomised simultaneously for the calibration process. All model results of the sampled parameter values were evaluated by using different efficiency criteria. The results for the soil climate sub model of DNDC are shown in this presentation. Changes of the parameters for the calculation of soil temperature show high model efficiencies and a good fit to the observed values. The simulation of the soil temperature during winter could be enhanced. In this season soil temperature is important for modelling N trace gas emissions during frost-thawing cycles. Underestimations of soil temperature during these cycles lead to underestimations of predicted N-trace gases.

## Dank

Dieses Projekt wurde unterstützt von der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU). Besonderer Dank gilt Heiner FLESSA, Stefan GLATZEL, Hermann JUNGKUNST, Claudia KAMMANN, Carola LAMPE, Henry NEUFELDT und Herrn Frank SCHMÄDEKE, die so freundlich waren, Daten für dieses Projekt zur Verfügung zu stellen.

Schlüsselwörter: N<sub>2</sub>O, N-Treibhausgasemissionen, Kalibration, Modellierung, Denitrification Decomposition Modell.

Keywords: N<sub>2</sub>O, N trace gas emissions, calibration, modelling, Denitrification Decomposition model.

## 2. Using Plot Measurement Data for the Validation of an Eco-Hydrological River Basin Model

(B. KLÖCKING, B. BEUDERT, S. KNOBLAUCH & F. SUCKOW)

### 2.1. Introduction

The development and use of complex river basin models which describe beside the regional water budget also the vegetation dynamics and the carbon/nitrogen budget become increasingly important in the context of river basin management. ArcEGMO ([www.arcegmo.de](http://www.arcegmo.de)) with the involved Plant-Soil-Carbon-Nitrogen Model PSCN is one of these models. The usual validation way of such complex models by comparing simulated and observed catchment discharges is not without problems because river discharges are highly integrated values for itself. Therefore, some efforts have to be done to validate the sub-models in a reasonable way. Measurement series from experimental monitoring sites under different land use and environmental conditions can be used as a solid basis for both model validation and development if they are sufficient long with a process adapted temporal resolution. Ideally such monitoring sites are part of an intensively observed catchment.

### 2.2. Model

ArcEGMO-PSCN is a GIS-based, multi-scale modelling system for spatially distributed simulation of hydrological sub-processes in river catchments. Beside the usual model approaches for describing the lateral surface and subsurface water flows at river basin scales (A. BECKER et al., 2002 and B. PFÜTZNER, 2003) it contains complex growth models for forest and agricultural areas and a detailed soil model (water, heat, carbon/nitrogen budget). Through implementation of a crop rotation generator, the agricultural land use structure of a region can be exactly reproduced. Air temperature, precipitation, humidity and global radiation in daily resolution are the required climatic driving variables. The spatial resolution is carried out on the basis of hydrotopes. Each hydrotope is characterised by a particular land use, topography, and soil profile and is associated with a fixed space within the study area.

Vegetation dynamics are simulated in dependence on land use in the individual hydrotopes. Four different plant models have been integrated into the model:

- forest growth model 4C (P. LASCH et al., 2005),
- vegetation model for agricultural crops according to SWAT 2000 (S. L. NEITSCH et al., 2001),
- general dynamic plant model on the basis of time series for describing the inner annual or long term dynamic of the plant parameters LAI (Leaf Area Index) and rooting depth (without carbon/nitrogen dynamics),
- general static model (water budget only without carbon/nitrogen dynamics).

The modelling of the soil processes took into account the soil profile with horizontal layers down to the C-horizon. For sites influenced by groundwater, temporarily saturated layers and the current depth of the groundwater surface were also considered. A detailed description of the PSCN module is given by B. KLÖCKING et al. (2005) and B. KLÖCKING (2008).

### 2.3. Validation on agricultural measurement plots in Thuringia

The Thuringian State Institute of Agriculture operates two lysimeter sites in the central German dry region. The mean annual temperature here is 8.2°C; the mean annual precipitation is 550 mm. The research station Butteltstedt consists a number of weighable lysimeters (TLL, 2005). The two lysimeters used in our studies are 2.5 m deep with a surface area of 2 m<sup>2</sup>. They are monolithically filled (Haplic Phaeozem soils with silty-loamy texture developed from loess) and installed in an agricultural field to avoid oasis effects. To measure precipitation and evaporation they are weighed continuously with an accuracy of 0.05 mm. The percolating water is collected by ceramic suction cups with suction up to 0.03 mPa at a depth of 230 cm. From 1983 to 1994 field plants were planted. This period was used for model validation. As well the plant development (canopy cover and rooting depth) as the evapotranspiration and seepage rates could be sufficiently described with the model (Fig. 2.1 and 2.2).

An additional detailed monitoring network for water and material flows was set up in the Altengottenschen Ried, a flood plain area of the River Unstrut in Thuringia/Germany in 1997. In connection with the measurement of groundwater dynamics and quality these measurements aimed to produce a comprehensive description of the water and material flows in an agricultural used flood plain and its recharge areas. This project was mainly funded by the German Federal Ministry of Education and Research during the research projects "Revitalisation of the Unstrut" and "GLOWA-Elbe". The different monitoring sites consist of a lysimeter group and a surrounding measurement field. The monolithically filled lysimeters have a surface area of 2 m<sup>2</sup> and – according to the amount of roots at the site – a depth of 1.3 m (lysimeter A3, Vertisol) to 2.5 m (lysimeter A4, Fluvisol in the flood plain). The lysimeter in the flood plain is open at the bottom to allow the interaction with the groundwater. At the suction-probe measurement sites, five sets of ceramic suction cups were set up at depths of 50, 90 and 140 cm to derive the vertical gradients for the percolation and groundwater quality (S. KNOBLAUCH, 2003).

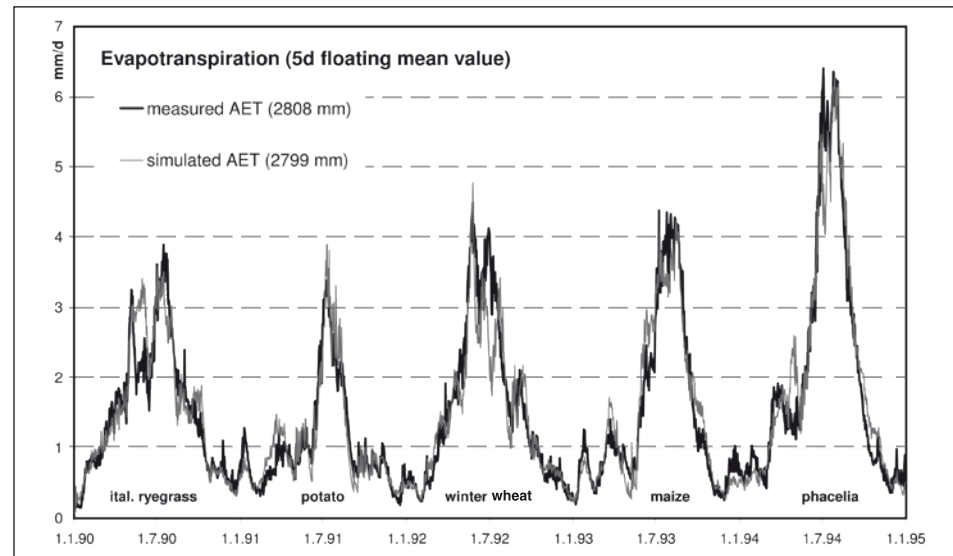


Fig. 2.1: Simulated and measured evapotranspiration rates (AET) of the lysimeter Butteltstedt. Simulierte und gemessene Evapotranspirationsraten (AET) beim Lysimeter Butteltstedt.

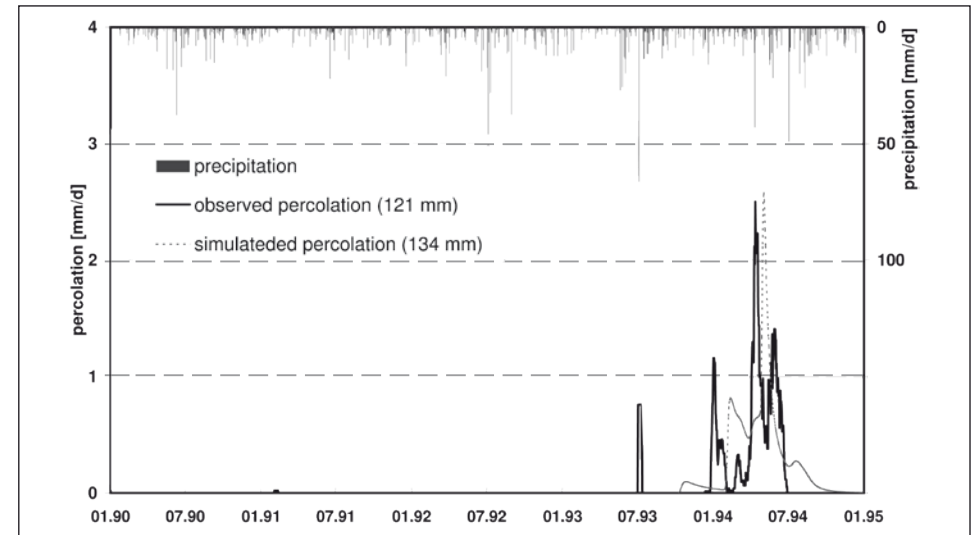


Fig. 2.2: Simulated and observed percolation rates of the lysimeter Butteltstedt. Simulierte und gemessene Sickerwasserspende des Lysimeters Butteltstedt.

For model validation observed phenological crop data, harvest amounts, percolation rates and soil moisture measurements are used. With the chosen crop model, a simplified version of the EPIC (Erosion Productivity Impact Calculator) plant growth model basing on daily accumulated heat units for simulation of the phenological plant development, we got a good agreement between the predicted and the observed development and yields like it is shown in tab. 2.1. Satisfying results could also be reached for simulating the percolation rates and the leached nitrogen amounts like it is shown in fig. 2.3 and 2.4 for the Vertisol (lysimeter A4) in the source area.

Tab. 2.1: Simulated (sim) and observed (mean, max, min) yields and nitrogen contents (N) in the harvest residues of the lysimeter A3 and A4. Simulierte (sim) und gemessene (mean, max, min) Erträge und Stickstoffgehalte (N) in den Ernterückständen der Lysimeter A3 und A4.

Year	Lysimeter	Crop	Crop yield [dt/ha]				Biomass [dt/ha]		N in yield [kg/ha]		N in straw [kg/ha]		N <sub>root</sub> [kg/ha]
			mean	max	min	sim	mean	sim	mean	sim	mean	sim	
1997	A3	winter wheat	85	96	72	86	155	148	180	176	81	41	55
1997	A4	winter wheat	59	73	46	66	104	120	148	144	31	33	45
1998	A4	spring barley	45	61	37	43	77	74	103	78	21	18	24
1998	A3	field bean	32	44	20	42	57	79	168	175	39	37	53
1999	A4	winter rape	41	60	23	35	116	108	145	112	54	44	48
1999	A3	spring wheat	70	76	65	58	153	152	164.8	122	38	42	41
2000	A4	winter wheat	47	61	34	63	119	119	134.7	142	43	33	44
2000	A3	spring barley	46	52	34	43	79	78	78.7	76	22	20	24
2001	A3	winter rape	29	40	16	49	78	145	101.5	104	33	57	49
2001	A4	winter wheat	64	80	34	60	132	120	166.7	142	38	34	45



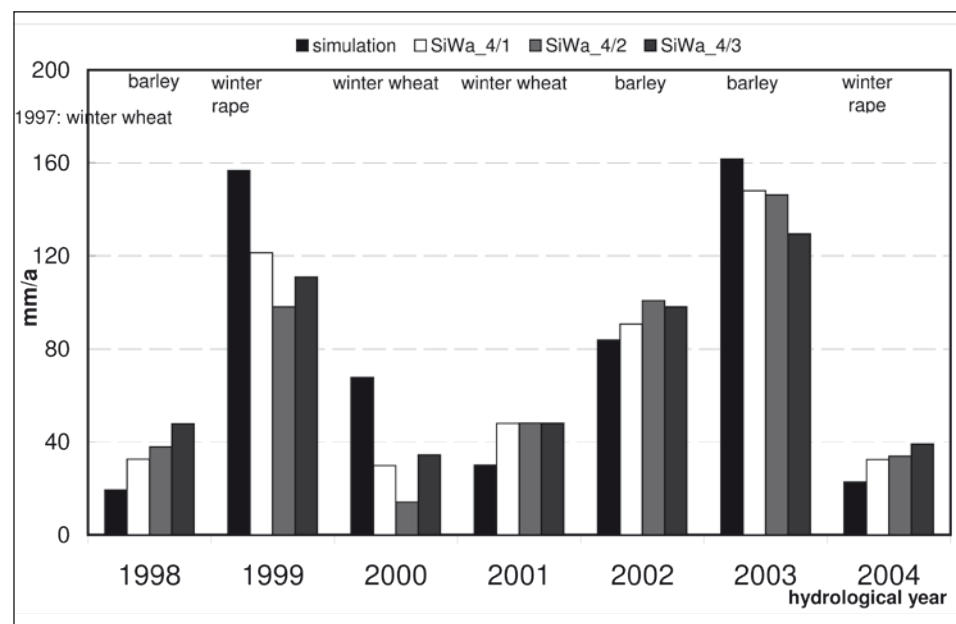


Fig. 2.3: Simulated (simulation) and observed (SiWa\_4/1–3) yearly percolation rates of the lysimeter A4. Simulierte (simulation) und gemessene (SiWa\_4/1–3) jährliche Sickerwasserspense des Lysimeters A4.

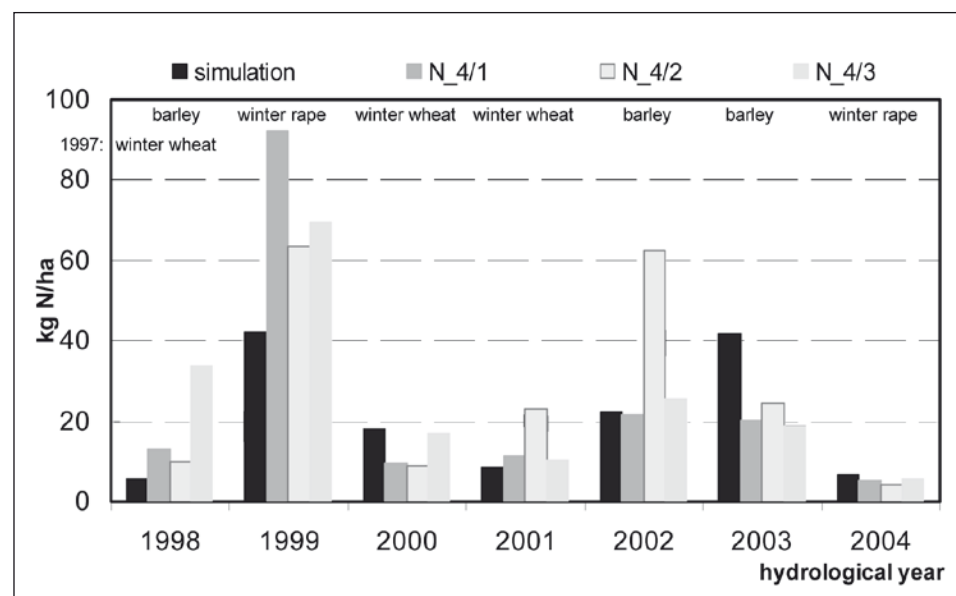


Fig. 2.4: Simulated (simulation) and observed (N\_4/1–3) yearly amounts of nitrogen [kg N/ha] in the seepage of the lysimeter A4. Simulierte (simulation) und gemessene (N\_4/1–3) jährliche Stickstofffrachten im Sickerwasser [kg N/ha] des Lysimeters A4.

## 2.4. Validation at a beech stand in the Bavarian Forest Park

The Forellenbach area (0.7 km<sup>2</sup>) in the Bavarian Forest National Park is part of the “International Cooperative Programme on Integrated Monitoring of Air Pollution Effects on Ecosystems (UN/ECE ICP-IM)”. The purpose of this programme is to document the state of ecosystems and changes caused by anthropogenic impacts, such as atmospheric pollutants and climate change. In the frame of these project the water and element cycling in beech and spruce stands and on catchment scale have been observed since 1990 (B. BEUDERT & W. BREIT, 2004).

Data series particularly suitable for the validation of the water, snow and vegetation sub-models of ArcEGMO-PSCN are available for one beech/spruce stand (about 100 years old, elevation of 820 m, mean precipitation: 1600 mm/a, mean temperature 6.2 °C), growing on a Dystric Cambisol which is acidified and low in exchangeable cations. Parallel measurements of soil water contents and vertical flows on plot scale and of lateral flows on catchment scale (Forellenbach gauging station) are valuable to test and to improve distributed eco-hydrological models. The simulated biomass increment of the tree stand (B. KLÖCKING et al., 2005) as well as the soil water content and its variability in different soil layers (Fig. 2.5) agree well with the measurements.

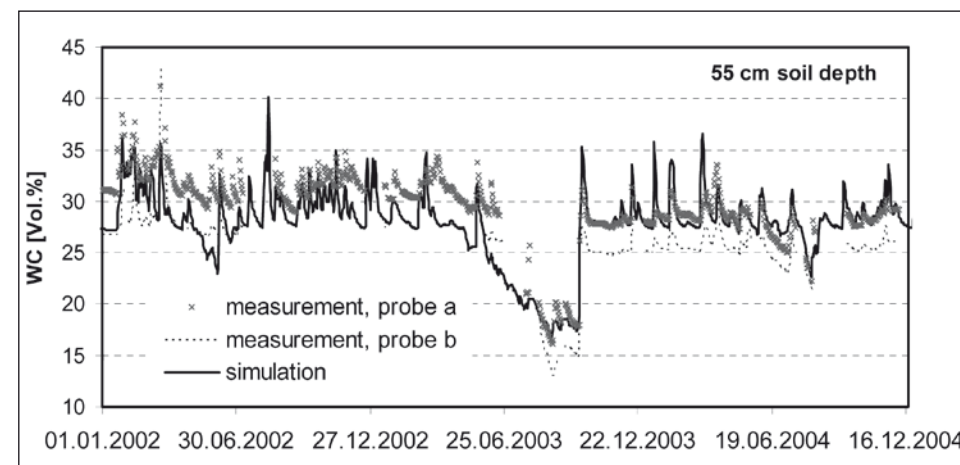


Fig. 2.5: Water content (WC), simulated and observed by TDR-measurements of the beech/spruce stand. Bodenfeuchteverlauf (WC), Simulationswerte und TDR-Messungen im Buchen-/Fichtenbestand.

## 2.5. Conclusions

The test of the distributed river basin model ArcEGMO-PSCN with plot measurement data confirmed the suitability of the involved sub models for describing the vegetation dynamics, the water and the nitrogen budgeted. Weighable lysimeters offer a solid data base for model development as well as for model validation. Plot measurements are suitable too with some constraints. On the one hand, it is not always possible to limit or to pinpoint side effects. On the other hand, the frequency of data sampling and the quality of the measurements is often not sufficient for model parametrisation and validation. Therefore, a closely co-operation between “modellers” and “field scientists” is very important to fill the yet existing gaps in ecosystem models.

## Summary

Distributed eco-hydrological models are increasingly used in the context of river basin management. One example is the simulation tool-box ArcEGMO ([www.arcegmo.de](http://www.arcegmo.de)). It includes the module PSCN (Plant-Soil-Carbon-Nitrogen Model), which describes the vegetation dynamics, the water, heat, carbon, and nitrogen budget of the singular hydrotopes deterministically.

Measurement data from intensive agricultural and forest monitoring sites are used for the parameterisation and validation of the sub-modules. The Thuringian State Institute of Agriculture operates two lysimeter sites in the central German dry region. The here sampled measurement data were particularly used for the test of the plant development, yield, evapotranspiration, and seepage simulations. High annual precipitation rates, abundant snow cover, and low mean annual temperatures are characteristic for the beech/spruce stand in the Bavarian Forest National Park. The here collected data series are a solid basis especially for the validation of the soil water, snow and forest growth sub-models. The agreement between simulation results and observations was satisfying for all three sites.

## References

- BECKER, A., B. KLÖCKING, W. LAHMER & B. PFÜTZNER (2002): The Hydrological Modelling System ArcEGMO.– In: SINGH, V. P. & D. K. FREVERT (Eds., 2002): *Mathematical Models of Large Watershed Hydrology*.– 321–384, Littleton/Colorado (Water Resources Publications, ISBN 1-887201-34-3).
- BEUDERT, B. & W. BREIT (2004): Zwölf Jahre Integrated-Monitoring-Programm an der Messstelle Forelenbach im Nationalpark Bayerischer Wald (FKZ 351 01 012).– 307 p., Nationalparkverwaltung Bayerischer Wald, Grafenau.
- KLÖCKING, B. (Ed., 2008): Das ökohydrologische PSCN-Modul innerhalb des Flussgebietsmodells ArcEGMO.– 28 p., [online available: [http://arcegmo.de/PSCN\\_2008.pdf](http://arcegmo.de/PSCN_2008.pdf), 20. 12. 2008].
- KLÖCKING, B., Th. SOMMER & B. PFÜTZNER (2005): Das Unstrutgebiet – Modellierungen des Wasser- und Stoffhaushalts unter dem Einfluss des Globalen Wandels.– In: WECHSUNG, F., A. BECKER & P. GRÄFE (Eds., 2005): *Auswirkungen des globalen Wandels auf Wasser, Umwelt und Gesellschaft im Elbegebiet*.– 198–207, Weißensee Verlag (ISBN 3-89998-062-X).
- KLÖCKING, B., R. SCHWARZE, B. BEUDERT, F. SUCKOW, P. LASCH, F. BADECK & B. PFÜTZNER (2005): Auswirkungen des Borkenkäferbefalls auf den Wasser- und Stoffhaushalt zweier Gewässereinzugsgebiete im Nationalpark Bayerischer Wald.– Schriftenreihe „Wasserhaushalt und Stoffbilanzen im naturnahen Einzugsgebiet der Großen Ohe“, Bd. 8, 170 p., Nationalparkverwaltung Bayerischer Wald, Grafenau (ISSN 0937-0056).
- KNOBLAUCH, S. (2003): Dynamik der Stickstoffverlagerung in einem Flusseinzugsgebiet der Unstrut und Schlussfolgerungen für die Landnutzung.– *Landnutzung und Landentwicklung*, Vol. 44 (3), 122–128, Berlin (Blackwell).
- LASCH, P., F.-W. BADECK, F. SUCKOW, M. LINDNER & P. MOHR (2005): Model-based analysis of management alternatives at stand and regional level in Brandenburg (Germany).– *Forest Ecology and Management*, 207 (1-2), 59–74, Amsterdam (Elsevier).
- NEITSCH, S. L., J. G. ARNOLD, J. R. KINIRY, J. R. WILLIAMS & K. W. KING (2002): Soil and Water Assessment Tool – Theoretical Documentation Version 2000.– TWRI Report TR-191, 506 p., Texas Water Resources Institute, College Station, Texas, [online available: <http://www.brc.tamus.edu/swat/downloads/doc/swat2000theory.pdf>, 29. 08. 2008].
- PFÜTZNER, B. (Ed., 2003): *Modelldokumentation ArcEGMO*.– Url: <http://www.arcegmo.de> [29. 08. 2008], ISBN 3-00-011190-5.
- TLL – THÜRINGER LANDESANSTALT FÜR LANDWIRTSCHAFT (2005): Wasserhaushaltsgrößen von Kulturpflanzen unter Feldbedingungen – Ergebnisse der TLL-Lysimeterstation.– Schriftenreihe Landwirtschaft und Landschaftspflege in Thüringen, H. 1/2005, 159 p., Jena (ISSN 0944-0348).

## Zusammenfassung

In der modernen Flussgebietsbewirtschaftung sind neben den Wasserflüssen auch Wasserinhaltsstoffe wie z. B. gelöste Stickstoffkomponenten zu berücksichtigen. Dazu wurde im Rahmen des Flussgebietsmodells ArcEGMO ([www.arcegmo.de](http://www.arcegmo.de)) das Modul PSCN (Plant-Soil-Carbon-Nitrogen Model) entwickelt, welches neben der Wasserdynamik auch den Kohlenstoff- und Stickstoffhaushalt im System Vegetation/Boden simuliert. Bei der Modellentwicklung wird zusätzlich zum Test des Gesamtmodells in unterschiedlichsten Naturräumen großer Wert auf die Validierung der Teilmodelle gelegt. Detaillierte stofflich orientierte Monitoringprogramme auf land- und forstwirtschaftlichen Dauerbeobachtungsflächen bieten gute Möglichkeiten zur Überprüfung und Weiterentwicklung der Modellteile zur Simulation des Pflanzenwachstums sowie des Wasserhaushaltes und des Stickstoffumsatzes in der ungesättigten Zone.

Hierfür wurden unter anderem die Messergebnisse zweier unterschiedlich ausgerichteter Monitoringprogramme in zwei klimatischen Regionen Deutschlands genutzt, die Lysimeteranlagen Buttstedt und Altengottern auf landwirtschaftlich hoch produktiven Standorten im Thüringer Becken und die Buchen-Fichten-Dauerbeobachtungfläche im Nationalpark Bayerischer Wald. Für beide Standorte konnte bei Vegetationsentwicklung und Wasserhaushalt eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen Simulation und Beobachtung/Messung erzielt werden.

Keywords: ArcEGMO, river basin model, water budget, nitrogen budget, plant development  
Schlüsselwörter: ArcEGMO, Flussgebietsmodell, Wasserhaushalt, Stickstoffhaushalt, Pflanzenwachstum

## 3. Prognosis of Diffuse Nitrogen Fluxes into Groundwater from the Agricultural Used Areas in Saxony-Anhalt

(U. FRANKO, I. PRUTZER & M. PUHLMANN)

### 3.1. Introduction

The execution of the EU Water Framework Directive draws the attention to the reduction of diffuse nitrogen fluxes into ground and surface waters where we don't have sufficient knowledge about possible extensification strategies concerning their potential and their behaviour in time. Modelling may help to answer the related questions if the scenarios are well defined and the model has been adapted to the special conditions of the investigated region. Within this project a methodology for modelling nitrogen leaching from arable fields and grassland areas as well as the prediction of their trends has been developed and applied to the territory of Saxony-Anhalt, Germany. The following paper describes how the simulation scenarios have been defined, how the geographic information system (GIS) has been constructed and how the simulation runs have been organised.

### 3.2. Definition of scenarios

The data of 22 soil monitoring plots have been used to calibrate the CANDY model (U. FRANKO et al., 1995; CANDY: Carbon And Nitrogen DYNamics) for the site conditions of Saxony-Anhalt. Beside data about climate, soil physical and chemical parameters as well as agricultural management we used detailed data for soil moisture and mineral

nitrogen dynamics from 1996 to 2003. Within this working step we mainly adapted the crop related parameters concerning root growth and soil organic matter (SOM) reproduction and verified the proper use of soil physical parameters. The crop parameters from this calibration step as well as the information about site specific management technologies have later been used within the scenario simulations.

Land use has been modelled using the agricultural statistics data from 2003. They have been rearranged from administrative districts to soil regions representing the main pedologic units on landscape level in Saxony-Anhalt. The next step was the construction of “virtual farms” consisting of up to five crop rotations and usually two grassland types. Depending on the farm type and the local intensity of husbandry each of these virtual plots was related to a number of manure units, discriminating cattle and pigs as well as the application of slurry or farmyard manure. A final optimisation step calculated the area represented by each plot to give the best fit to the known statistical data including the relation between arable field and grassland as well as cattle grazing days.

For all crops have been defined management templates containing all information about tillage, cropping and fertilisation required from the CANDY model. Like a building block system these templates were compiled to a management sequence according to the crop rotation and linked to a certain climate in order to represent the simulation scenario. Crop yields have been extracted from the statistical data and the amount of applied manure was calculated from the animal number represented by the given crop rotation. Similar to the actual methods of fertiliser recommendations used by farmers the amount of mineral nitrogen fertiliser was calculated at runtime using the dynamic fertilisation routine implemented in CANDY basing on the simulated amount of mineral nitrogen in soil and the expected yields. This routine generates the amounts of fertiliser application for up to four different dates. The parameters related to crops, manure and soils required by this special routine have to be provide additional to the usual parameter set of CANDY and where in this case extracted from the description of the recommendation procedures. The grassland simulation covers meadow as well as pasture including cattle driving (T. SCHMIDT, 2004).

The scenario simulation started in fall of 1990 firstly representing the actual land use until 2003. After that point the simulation went on as “baseline” scenario until 2030 assuming the continuation of the business as usual. The soil specific contents of mineral nitrogen at this time have been estimated basing on results from M. KÖRSCHENS et al. (1988) whereas the organic matter state could be derived from another project (U. FRANKO et al., 1997).

In order to study the impact of potential land use changes alternative scenarios were implemented from 2003 to 2030 covering setting land aside, grassland extensification, the extension of organic farming and a reduced application of mineral fertilisers.

### 3.3. Regionalisation – GIS

The basic subdivision of the investigation area in five soil regions followed the natural site conditions only as given by the map of soil landscapes of Saxony-Anhalt on the scale of 1 : 200,000 because soil and climate parameters are the main indicators of site conditions within the CANDY system. Depending on the share of a soil landscape within an administrative district the agricultural statistics have been up-scaled to the soil regions providing representative area and average yield of the main crops, representative area of different economic types of the agricultural enterprises and aggregated values of husbandry. The actual soil parameters where derived from the map of soil

types BÜK200 (LAGB, 1997) also on the scale of 1 : 200,000 (where each soil unit is defined by a defined soil profile by means of the parameters required by the CANDY model. Above the soil layer we defined seven climate regions each represented by one climate station with daily values of rainfall, air temperature and global radiation from 1973 to 2003. Basing on this information we parameterised a weather generator that has been used for the simulations until 2030. For a more realistic description of rainfall heterogeneity each soil unit was characterised by a factor that modifies the rainfall intensity at runtime. This factor has been calculated from a raster map provided by the German meteorological service (DWD) representing long term averages of rainfall intensity on a grid of 1×1 km. As a last processing step the geometry of the climate regions has been adapted to that of the soil map in order to reduce artefacts in the overlay.

### 3.4. Simulation runs and evaluation of results

A statistic database holds all information about the agriculture structure of the considered soil regions are stored within a data base. From these data the structural information for the virtual farms is generated using simple optimisation techniques. Each simulation scenario is represented as an ACCESS database containing management data, GIS objects and tables to collect the simulation results. By means of a special interface all input data required by CANDY are generated at runtime from the content of the scenario database. CANDY writes the simulation results aggregated to annual values directly to this database which can afterwards be connected to the GIS or the creation of result maps. After a simulation run the model can produce a binary representation of the system state. For each simulation object this state was created in the end of 2003 and has been used as initial state for all alternative scenarios.

Beside the annual rates of nitrogen leaching we calculated for each alternative scenario the changes of specific costs of the reduced nitrogen leaching for the economic evaluation. These specific costs show the amount lost profit connected with the reduction of one unit nitrogen leaching, both in relation to the baseline scenario.

### 3.5. Results and discussion

The analysis of the baseline scenario revealed for the most site conditions high leaching losses partly also with a positive trend. The impact of the scenarios on the reduction of nitrogen leaching is strongly dependent from the considered site conditions. Not in every case the land use conversion to organic farming or the reduction of applied mineral fertilisers did lead to a reduction of nitrogen leaching. On average the organic farming scenario showed only 50% of the nitrogen leaching in the baseline scenario (Fig. 3.1) and is additionally connected with an increase of SOM. If the application of mineral nitrogen is reduced by 30% the nitrogen leaching is reduced to 75% at average but with a large heterogeneity. At some places there was no significant effect to be observed whereas at other places the leaching nearly stopped. The reduced application of fertilisers did also reduce the SOM storage in soil because of the reduction of crop residues and by-products. But for the many site conditions this scenario was considered as the most effective way from an economic point of view (Fig. 3.2).

The developed methodology connects point related model calibration at the long term monitoring sites with a regional scenario simulation and is considered as very useful also for other purposes like assessment of future SOM dynamics

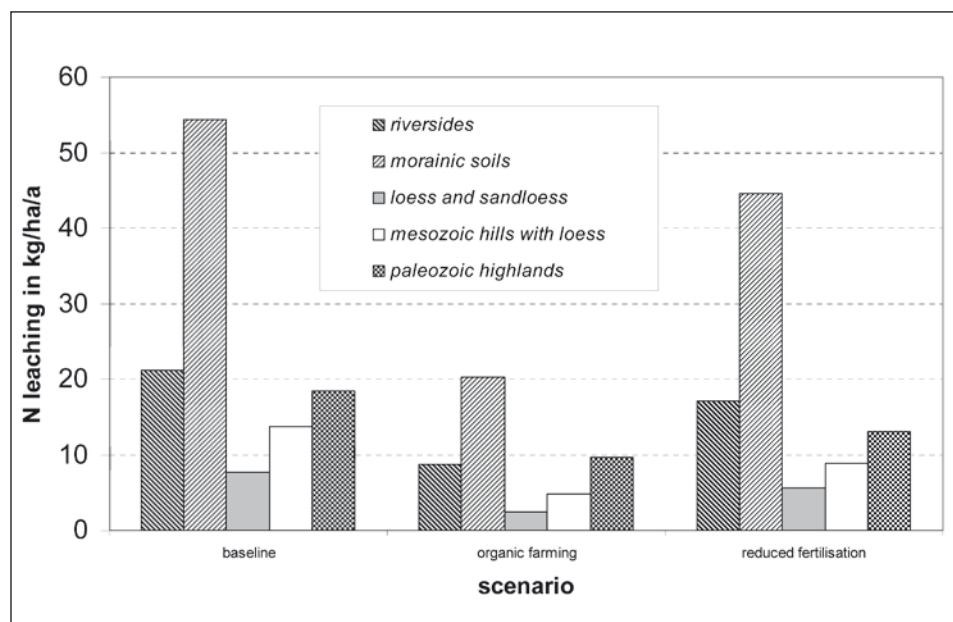


Fig. 3.1: Average nitrogen leaching rates of the simulated scenarios for the individual soil landscapes. Mittelwerte der Stickstoffauswaschung der für die einzelnen Bodenlandschaften untersuchten Szenarien.

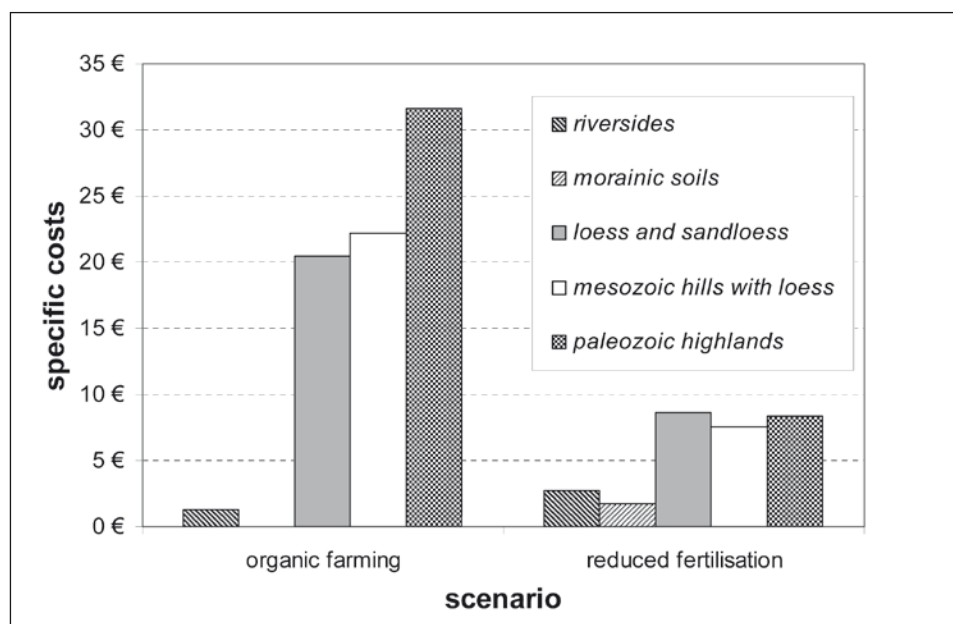


Fig. 3.2: Comparison of economic costs for Biofarming and reduction of mineral fertiliser. Kostenvergleich von Ökolandbau und Reduktion der Minereraldüngung für die einzelnen Bodenlandschaften.

## Summary

This paper gives an overview about the methodology used to determine the potentials for a reduction of diffuse nitrogen export from arable soils into groundwater in the federal country "Saxony-Anhalt" in central Germany using the CANDY model that has been calibrated for this study with data sets from long term monitoring sites. Besides the standard baseline scenario (business as usual) a number of alternatives have been simulated in order to find site specific solutions to reduce nitrogen losses into groundwater. The task required the completion of the CANDY model with a module to simulate the application of mineral fertilisers and another module for grassland dynamics including cattle grazing. Results show that the solutions are very much site specific. Biological farming has on all sites a very low rate of nitrogen leaching but this strategy has also very limited possibilities for a further expansion. From an economical point of view a reduced input of mineral fertilisers provides the most effective opportunity to reduce nitrogen leaching and nitrate concentration in the percolation water.

## References

- FRANKO, U., B. OELSCHLÄGEL & S. SCHENK (1995): Simulation of temperature-, water- and nitrogen dynamics using the model CANDY.– *Ecological Modelling*, **81** (1995), 213–222.
- FRANKO, U., S. SCHENK, D. DEBEVC, P. PETERSOHN & G. SCHRAMM (1997): Einfluß von Standort und Bewirtschaftung auf den N-Austrag aus Agrarökosystemen.– *UFZ-Bericht*, **10/1997**, Leipzig.
- KÖRSCHENS, M., B. WITTER, R. WÄCKERNAGEL & D. EICH (1988): Die Abhängigkeit der  $N_{an}$ -Gehalte im Frühjahr von Bodenart, Witterungsverlauf und Vorfrucht.– *Arch. Acker- Pflanzenbau Bodenkd.*, **32** (1988) 2, 107–114, Berlin.
- SCHMIDT, T. (2004): Integrierte Methodik zur ökologischen und ökonomischen Analyse von Agrarsystemen unter Berücksichtigung von Unsicherheiten.– *UFZ-Bericht*, **20/2004**, Leipzig.
- LAGB (1997): Bodenübersichtskarte von Sachsen-Anhalt 1:200 000 (BÜK200).– Landesamt für Geologie und Bergwesen Sachsen-Anhalt (bodenkundliche Bearbeitung: SCHRÖDER, KNAUF, KAINZ HALLE).

## Zusammenfassung

Diese Arbeit gibt eine Übersicht über die benutzte Methodik zur Bestimmung des Potenzials zur Reduktion der diffusen Stickstoffausträge aus den landwirtschaftlich genutzten Böden im Bundesland Sachsen-Anhalt in das Grundwasser. Dafür wurde das CANDY-Modell genutzt, das für diese Untersuchungen an Datensätzen von Bodendauerbeobachtungsflächen kalibriert wurde. Neben dem Standardszenario (baseline), das die Weiterführung der bisherigen Bewirtschaftung unterstellt, wurden mehrere Alternativszenarien simuliert, um standortspezifische Lösungen zur Reduktion des Nitratreintrags in das Grundwasser zu finden. Diese Aufgabe erforderte die Ergänzung des CANDY-Modells mit je einem Modul zur Simulation der Minereraldüngungsempfehlung und zur Abbildung der Grünlanddynamik einschließlich der Beweidung. Die Ergebnisse zeigen, dass die Wahl der jeweils besten Alternative in hohem Maße standortabhängig ist. Der ökologische Landbau zeigt im Mittel nur geringe Stickstoffausträge, besitzt aber nur begrenztes Potenzial für die weitere Ausdehnung. Aus ökonomischer Sicht ist die Reduktion der Minereraldüngung der effektivste Weg, um die Stickstoffauswaschung und die Konzentration von Nitrat im Sickerwasser zu reduzieren.

## Acknowledgements

This research work was funded by the Ministry of Agriculture and Environment of Saxony-Anhalt with resources of the European Regional Development Fund (ERDF) and the Ministry of Economic Affairs and Employment of Saxony-Anhalt.

Keywords: Nitrate leaching, modelling, land use impact

Schlüsselwörter: Nitratauswaschung, Modellierung, Bewirtschaftungseinfluss

#### 4. Modellierung diffuser Stickstoffeinträge in die Grundwasserkörper des Freistaates Sachsen (M. GEBEL, St. BÜRGER, H. FRIESE, K. GRUNEWALD, St. HALBEASS, M. KAISER, J. ULLRICH & M. ZWEIG)

##### 4.1. Einleitung

Mit der Realisierung des FuE-Vorhabens „Atlas der diffusen Nährstoffeinträge in sächsische Gewässer“ im Auftrag des Sächsischen Landesamtes für Umwelt und Geologie (LfUG) unter Nutzung des Web-GIS-basierten Modells STOFFBILANZ.i (siehe K. GRUNEWALD et al., 2008) konnte das gegenwärtige Eintragsgeschehen für Sediment-, Stickstoff- und Phosphorfrachten von der Fläche in die Gewässersysteme aufgezeigt werden. Die Bilanzergebnisse auf Rasterebene (500×500 m-Raster für Sachsen) stellen eine der Grundlagen zur Konzipierung von Bewirtschaftungsmaßnahmen im Rahmen der sich aus der EU-Wasserrahmenrichtlinie (EU-WRRRL) ergebenden Aufgaben und Anforderungen dar. Im Fokus des vorliegenden Beitrages steht die Modellierung diffuser gelöster Stickstoffeinträge von der Fläche in die Grundwasserkörper sowie die sich daran anschließende Betrachtung der grundwasserbürtigen Einträge in die Oberflächengewässer.

##### 4.2. Methodik der Bilanzierung

Der flächendifferenziert zu ermittelnde N-Austrag aus dem Boden ist abhängig von anthropogen bedingten Nutzungseinflüssen sowie der jeweiligen Ausprägung der naturräumlichen Faktoren. Auf der ackerbaulich genutzten Fläche, auf die hier detaillierter eingegangen werden soll, wird als Grundlage der Berechnung zunächst eine möglichst differenzierte N-Bilanz aufgestellt (Fig. 4.1), die neben den Input- und Outputparametern auch Faktoren des N-Umsatzes im Boden einschließt (M. GEBEL et al., 2007, B. MARY & J. GUÉRIF, 1994). Dies hat den Vorteil, dass Bewirtschaftungsmaßnahmen sowie deren Veränderung besser

	Input	Mobilisierung	Output	Immobilisierung
Bilanz-jahr	Mineraldünger Anorganischer N-Anteil aus Wirtschaftsdüngern N-Fixierung durch Leguminosen	N-Mineralisierung aus organischem Anteil des Wirtschaftsdüngers Nachlieferung aus Bodenmatrix im Frühjahr/Sommer Nachlieferung aus Ernte- und Wurzelrückständen Nachlieferung aus Bodenmatrix im Herbst/Winter	Ernteentzug	Ernte- u. Wurzelrückstände
Bilanz-jahr	Atmosphärische Deposition		Denitrifikation	

Fig. 4.1: Bilanzglieder für Ackerflächen zur Modellierung diffuser N-Austräge in STOFFBILANZ.i. Components of balance on arable land for modelling of diffuse N leaching in STOFFBILANZ.i.

abgebildet werden können. Eine schlagbezogene Erhebung der Bewirtschaftungsdaten ist bei der angestrebten mittelmaßstäbigen Betrachtungsweise nicht möglich, sodass hinsichtlich des Fruchtartenspektrums und des Viehbesatzes auf die gemeindebezogenen Agrarstatistiken zurückgegriffen werden musste. Die berechneten N-Bilanzen sind somit mittlere Austräge aus dem Boden pro Gemeinde, die in ihrer Ausprägung durch naturräumliche Einflussfaktoren auf Rasterebene differenziert sind. Eine Verlagerung der aus der Fläche ausgetragenen Emissionen erfolgt aus der durchwurzelten Bodenzone über den Oberflächenabfluss, Dränabfluss, Zwischenabfluss und Grundwasserabfluss. Die gelösten N-Frachten der verschiedenen Abflusspfade berechnen sich nach dem jeweiligen Anteil des Pfades an der zuvor berechneten Wasserbilanz. In Folge von Denitrifikationsprozessen während der Abflusspassage im Grundwasserleiter können die bisher betrachteten flächenbezogenen Emissionen deutlich reduziert werden. Im Modell wird eine vereinfachende Abschätzung der Denitrifikation im Grundwasserleiter in Abhängigkeit von der Grundwasser führenden Gesteinseinheit vorgenommen. Dabei wird die Denitrifikationsleistung im Grundwasserleiter anhand der gewählten Halbwertszeit der Denitrifikation und der Grundwasserverweilzeit bestimmt. Der Ansatz greift auf Arbeiten von F. WENDLAND & R. KUNKEL (1999) bzw. R. KUNKEL & F. WENDLAND (1999) und R. SCHWARZE (2004) zurück.

Eine Regionalisierung für Sachsen erfolgte durch J. ULLRICH (2006) anhand des hydrochemischen Milieus im Grundwasser sowie vorliegender Isotopendaten zu dessen Altersbestimmung. Im Ergebnis erhält man die grundwasserbürtigen N-Einträge in die Oberflächengewässer, die sich um die während der Grundwasserpassage zurückgehaltenen Anteile verringert haben.

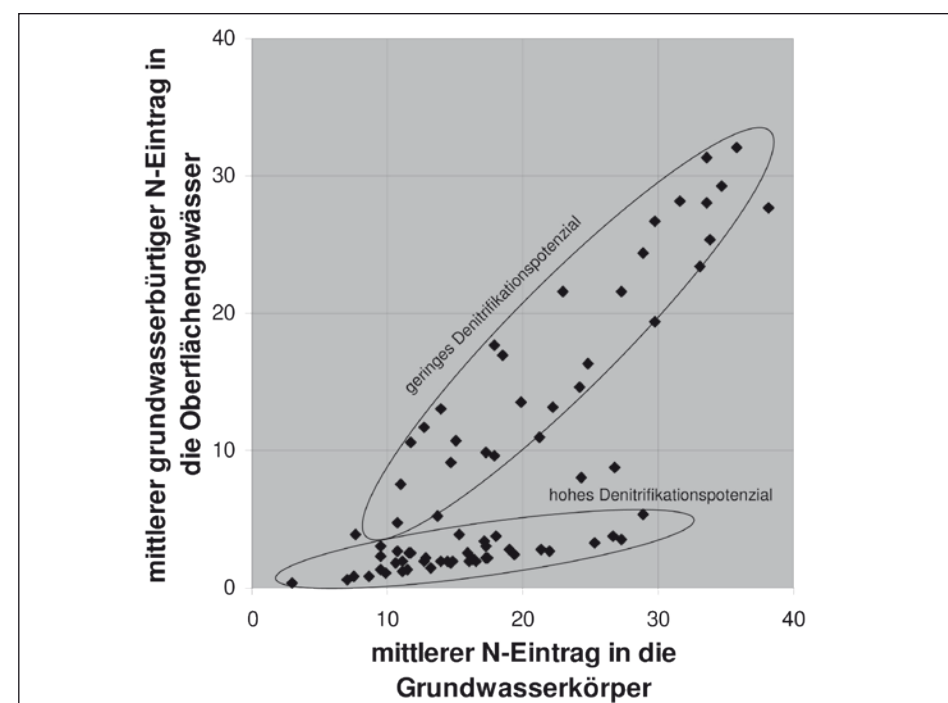


Fig. 4.2: Stickstoffeinträge von Ackerflächen in die Gewässersysteme des Freistaates Sachsen [kg N · ha⁻¹ · a⁻¹]. Nitrogen input into waters from arable land in the area of Saxony [kg N · ha⁻¹ · a⁻¹].

### 4.3. Ergebnisse

Auf den Ackerflächen ergeben sich in den Lössgebieten vor allem aufgrund der guten Ertragsituation relativ enge Bilanzsalden und damit vergleichsweise geringe N-Austräge aus dem Boden bzw. N-Einträge in die Grundwasserkörper. Höhere Frachten werden dagegen in den nördlich angrenzenden Heide- und Teichlandschaften sowie im südlich gelegenen Mittelgebirge und Vorland erreicht. Der den Ackerflächen zugeordnete mittlere grundwasserbürtige N-Eintrag von den Grundwasserkörpern in die Oberflächengewässer verringert sich dagegen in den Heide- und Teichlandschaften erheblich, während die Einträge in den Regionen des Mittelgebirges und Vorlandes eine deutlich geringere Reduzierung erfahren. Grund sind die höheren Denitrifikationspotenziale aufgrund längerer Verweilzeiten des Grundwassers und kürzerer Halbwertzeiten der Denitrifikation in den nördlichen Landesteilen. Die Mittelgebirge und Vorländer sind dagegen durch kurze Halbwertzeiten und geringere Verweilzeiten gekennzeichnet. Die Übergangsbereiche mit gering mächtigem Lockergestein über Festgestein (u. a. Lössgürtel) vermitteln zwischen beiden Extremen (Fig. 4.2).

### 4.4. Diskussion

Angesichts der im Berechnungsansatz enthaltenen Unschärfen müssen die Ergebnisse kritisch hinterfragt und plausibilisiert werden. Dies bereitet in der einzugsgebietsbezogenen, emissionsbasierten Modellierung auf der vorliegenden Mesoskala allerdings größere Probleme. Ein direkter Vergleich von modellierten Einträgen in die Oberflächengewässer (Emissionen) und gemessenen Werten (Immissionen) ist nicht möglich, da entsprechende Frachtmessungen an Pegelstationen erfolgen, die das Integral der Einträge aus dem darüberliegenden Einzugsgebiet, einschließlich der im Oberflächengewässer bis dahin aufgetretenen Stoffretentionen, erfassen. Um trotzdem eine größenordnungsmäßige Ergebnisüberprüfung vornehmen zu können, wurde ein Modell zur Abschätzung der Retention in Abhängigkeit von der Abflussspende für die in Sachsen ausgewählten Messstellen entwickelt. Der sich dabei ergebende Zusammenhang erscheint im Vergleich mit Literaturwerten plausibel (S. P. SEITZINGER et al., 2002). Auch ein direkter Vergleich des modellierten grundwasserbürtigen N-Eintrages mit Grundwassermessdaten, die in aufbereiteter Form im Rahmen weiterer Forschungsvorhaben am LfUG vorliegen (K. KUHN et al., 2007, und J. DEHNERT et al., 2006) ist nur sehr eingeschränkt sinnvoll. Insbesondere in Gebieten mit hohen Verweilzeiten ist mit größeren Abweichungen zu rechnen, was für die Lockergesteinsbereiche des Projektgebietes auch bestätigt werden kann. In den Gebieten mit kurzen Verweilzeiten ergibt sich dagegen eine deutlich höhere Annäherung von Modellierungsergebnissen und Messnetzdaten. Ein weiteres Unschärfepotenzial kann bereits in der Aufstellung der Bilanz gesehen werden. Um diese Unsicherheiten möglichst gering zu halten, wurde bei der Ableitung der Ertragszahlen und Düngerwerte sowie der Einstellung der weiteren Bewirtschaftungsparameter auf das Expertenwissen der Landwirtschaftsseite zurückgegriffen.

Abschließend muss darauf hingewiesen werden, dass sowohl die „Mesoskaligkeit“ des Modells als auch die nur in begrenzter Auflösung verfügbaren Bewirtschaftungsdaten der Landwirtschaft „fachlich plausible“ Auflösungsgrenzen bilden, die bei der weiteren Aggregation, Interpretation und fachlichen Weiterverwendung der Eingangsdaten und Ergebnisse zu beachten sind. Mit der Erstellung des Stoffatlas liegt eine flächendeckende Planungsgrundlage im Sinne der WRRL für Sachsen vor, die gemäß dem Stand von Wissenschaft und Technik in den kommenden Jahren weiterentwickelt

und fortgeschrieben werden soll. In einem bereits laufenden Pilotprojekt im Einzugsgebiet der Jahna (Sachsen) werden mögliche Bewirtschaftungsszenarien und Maßnahmen zur Verringerung der N-Einträge in Zusammenarbeit mit der Landesanstalt für Landwirtschaft auf ihre Eignung überprüft und in das Modell integriert (z. B. Effekte von verstärktem Zwischenfruchtanbau auf die Bilanz).

### Zusammenfassung

In den Jahren 2005 und 2006 erfolgte die Modellierung von diffusen Stickstoff- und Phosphoreinträgen in die Oberflächengewässer des Freistaates Sachsen im Rahmen der Erstellung eines landesweiten Stoffatlas. Die Modellierungsergebnisse dienen zur Abschätzung der gegenwärtigen und zukünftig zu erwartenden Nährstoffbelastungssituation im Grund- und Oberflächengewässer. Die Berechnungen erfolgten mit Hilfe des Modells STOFFBILANZ.i, das an die naturräumlichen und bewirtschaftungsspezifischen Rahmenbedingungen im Projektgebiet angepasst wurde. Der vorliegende Beitrag beschäftigt sich mit der Modellierung diffuser N-Einträge über den Grundwasserpfad. Dies erfordert zunächst eine möglichst realistische Beschreibung der Managementpraxis (z. B. Düngung, Ertrag) sowie der Prozesse der Mobilisierung und Immobilisierung anhand der angebauten Fruchtarten und Standortgegebenheiten. Der berechnete N-Überschuss kann dann über die verschiedenen Abflusspfade ausgewaschen werden. Für die Grundwasserpassage wurde eine Abschätzung des Potenzials der Denitrifikation im Grundwasserleiter vorgenommen, die zu einer Reduzierung des Nitratreintrages in die Oberflächengewässer über den Grundwasserabfluss führt.

### Literatur

- DEHNERT, J., G. IHLING, C. LEVEN, R. TRABITZSCH, S. STADLER & B. MERKEL (2006): Quantifizierung von Nitratgehalten in Grundwasserkörpern.– In: VOIGT, H.-J., R. KAUFMANN-KNOKE, Ch. JAHNKE & R. HERD (Hrsg., 2006): Indikatoren im Grundwasser. Kurzfassungen der Vorträge und Poster, Tagung der Fachsektion Hydrogeologie in der DGG, 24. bis 28. Mai 2006, Cottbus.– Schriftenreihe der Dt. Ges. für Geowiss., H. 43, S. 87, Hannover.
- GEBEL, M., S. HALBFASS, K. GRUNEWALD, K. KAISER & M. BÜRGER (2007): STOFFBILANZ – Modellerläuterung.– Url: [http://www.galf-dresden.de/s1/dl/programmerlaeuterung\\_2007.pdf](http://www.galf-dresden.de/s1/dl/programmerlaeuterung_2007.pdf) [17. 09. 2008].
- GRUNEWALD, K., J. DEHNERT, M. GEBEL, S. HALBFASS, M. KAISER, S. BÜRGER & H. FRIESE (2008): Nährstoffmodellierung zur Aufstellung der Maßnahmenprogramme nach der EU-Wasserrahmenrichtlinie in Sachsen.– Wasser und Abfall, 3 (10), 15–19, Wiesbaden.
- KUHN, K., B. GABRIEL & S. HANNAPEL (2007): Grundwassermonitoring in Sachsen gemäß den Anforderungen der WRRL.– Wasser und Abfall, 9 (1-2), 14–19, Wiesbaden.
- KUNKEL, R. & F. WENDLAND (1999): Das Weg-/Zeitverhalten des grundwasserbürtigen Abflusses im Elbeinzugsgebiet.– Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Umwelt/Environment, Bd. 19, 122 S., Jülich.
- MARY, B. & J. GUÉRIF (1994): Intérêts et limites des modèles de prévision de l' évolution des matières organiques et de l'azote dans le sol.– Cahiers Agricultures, 3, 247–257, Paris.
- SCHWARZE, R. (2004): Regionalspezifische Analysen in der Festgesteinsregion.– In: BECKER, A. & W. LAHMER (Hrsg., 2004): Wasser- und Nährstoffhaushalt im Elbegebiet und Möglichkeiten zur Stoffeintragsminderung.– 1. Aufl., 183–224, Berlin (Weißensee).
- SEITZINGER, S. P., R. V. STYLES, E. W. BOYER, R. B. ALEXANDER, G. BILLEN, R. W. HOWARTH, B. MAYER & N. VAN BREEMEN (2002): Nitrogen retention in rivers: model development and application to watersheds in the northeastern U.S.A.– Biogeochemistry, 57/58, 199–237, Netherlands (Springer).

ULLRICH, J. (2006): Berücksichtigung von Stickstoffumsatzprozessen im Grundwasserleiter mit dem Modell STOFFBILANZ.– Unveröff. Diplomarbeit, TU Dresden, Institut für Geographie, 109 S., Dresden.

WENDLAND, F. & R. KUNKEL (1999): Das Nitratabbauvermögen im Grundwasser des Elbeinzugsgebietes.– Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Umwelt/Environment, Bd. 13, 166 S., Jülich.

### Summary

From 2005 to 2006 we modelled diffuse input of nitrogen and phosphorus in surface waters in the area of the Federal State of Saxony (Germany). The model results are an important component in elucidating the present situation of nutrient loads in groundwater and surface water as well as its future development. Calculations were performed by means of the STOFFBILANZ.i model, adjusted to the project area. The present contribution focuses to the modelling of diffuse N loads in surface waters via groundwater pathway. This requires first a realistic description of management practices (fertilising, yields), of processes of mobilisation and immobilisation as induced by the respective types of fruit and of local conditions. The computed N surplus will be washed out by the different runoff components. In this context we tried to make an estimation about the potential of denitrification in groundwater and the resulting reduction of nitrate, that will be emitted into surface waters.

### Dank

Für die Bereitstellung und Aufbereitung von Daten und für die kooperative Zusammenarbeit im Rahmen einer projektbegleitenden Arbeitsgruppe möchten wir uns bei allen beteiligten Kolleginnen und Kollegen des Sächsischen Landesamtes für Umwelt und Geologie, der Landesanstalt für Landwirtschaft, des Staatsbetriebs Sachsenforst, der Landestalsperrenverwaltung sowie dem Staatsministerium für Umwelt und Landwirtschaft herzlich bedanken.

Schlüsselwörter: diffuser Stickstoffeintrag, Grundwasser, Mesoskala, Modellierung  
 Keywords: diffuse nitrogen input, groundwater, mesoscale, modelling

## 5. Impacts of Limiting Nutrient Surpluses within an Intensive Livestock Region Taking supra-Regional Manure Transports into Account (P. KREINS, H. GÖMANN, R. KUNKEL & F. WENDLAND)

### 5.1. Introduction and problem

In recent decades, purchased feed has allowed regions such as the southwest Netherlands and northwest Germany, Belgium, Denmark, Brittany (France) and Catalonia (Spain) to become sites of concentrated animal production. However, the utilization of farmyard manure brings about higher unavoidable nutrient surpluses since nutrients are less accessible by plants than nutrients from mineral fertilizer. Hence, regions with intensive livestock farming typically display the highest nutrient surpluses.

Intensive land use and the application of farm manure close to water bodies pollute river catchments in northwest Germany. The Ems and the Vechte are considered critically polluted (LOWER SAXONY STATE OFFICE FOR ECOLOGY, 2001, p. 31 et sqq.). From the perspective of water protection, the manure application limits determined in the German “Düngerverordnung” (BGBl. I Nr. 7/2007) of 210 and 170 kg total N/ha for grassland

and arable land respectively are considered too high. To reach the environmental policy goal of reducing nitrogen charges by 50 %, a reduction in nitrogen surpluses to 50 kg N/ha is necessary (GERMAN ENVIRONMENTAL AGENCY, 2001, p. 50).

In this study the effects on water quality as well as the economic impacts of lowering the permissible nitrogen balances are analyzed taking into account supra-regional transports of farmyard manure within the study area of Lower Saxony. The analysis takes place using an interdisciplinary model network made up of the agricultural economic Regional Agricultural and Environmental Information System RAUMIS (W. HEINRICHSMAYER et al., 1996) and the hydro-geological model GROWA98 – Großräumiges Wasserhaushaltsmodell (R. KUNKEL & F. WENDLAND, 2002) and WEKU (F. WENDLAND & R. KUNKEL, 1999).

### 5.2. Integrated agricultural economic and hydrological modeling

The model network consistently links-up well the established, operational agricultural economics model RAUMIS and the hydro(geo)logical models GROWA/WEKU that comprehensively considers meso- to macroscale catchments of 1.000–100.000 km<sup>2</sup>. Within the model network nutrient inputs (nitrogen and phosphorus) via all relevant diffuse input pathways are quantified. The methodological design of the model network that is displayed in Fig. 5.1 allows for area differentiated status quo and impact analyses of policies aiming at reducing diffuse pollution of ground and surface waters.

RAUMIS is designed for continuous usage in the scope of medium and long-term agricultural and environmental policy impact analyses. It comprises more than 50 agricultural products, 40 inputs with exogenously determined prices, and reflects the whole

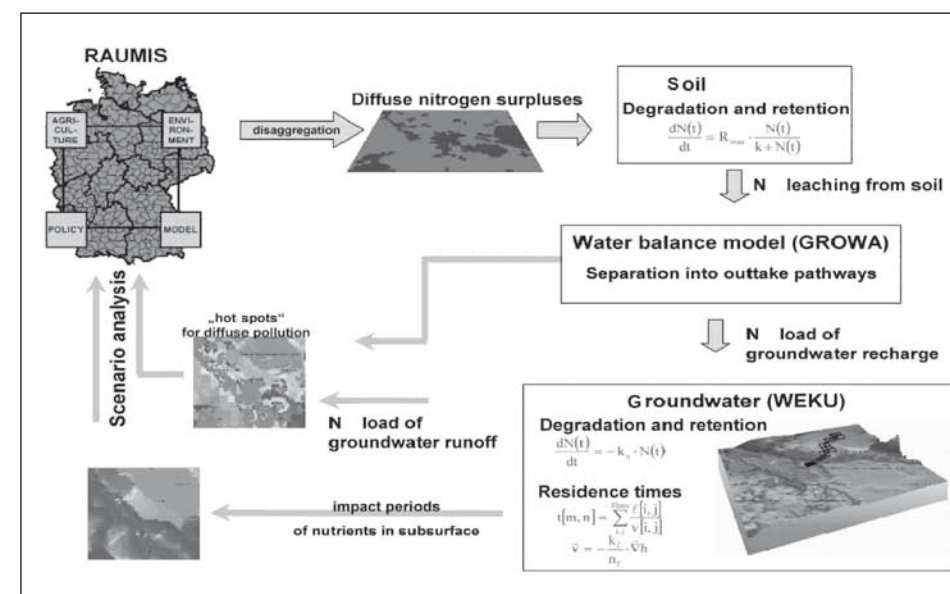


Fig. 5.1: Methodological design of the integrated agro-economic and hydro(geo)logic model network RAUMIS and GROWA/WEKU.  
 Methodischer Aufbau des integrierten agrarökonomischen und hydrogeologischen Modellverbundes RAUMIS und GROWA/WEKU.

German agricultural sector with its sector linkages. The model consolidates various agricultural data sources and generates base model data with the national agricultural accounts as a framework of consistency. Due to data availability, the spatial differentiation is currently based on administrative bodies on NUTS III level (“Landkreise”). Some 326 regions are treated as single “region farms” that typically reach their production decisions autonomously. Hence, adjustments of production at the national level are based on aggregated responses of region farms.

Regarding diffuse water pollution, the indicator “nitrogen surplus” is of particular importance. The concept of balancing nitrogen (Fig. 5.2) follows PARCOM Guidelines (PARCOM, 1993) where the soil surface represents the system border. The long-term nitrogen balance averaged over several vegetation periods is calculated following the methodology developed by M. BACH et al. (1997). In order to satisfy nutritional demands of plants, nitrogen is supplied by mineral fertilizer. Further exogenous sources are symbiotic and asymbiotic nitrogen fixation, as well as atmospheric deposition. An internal fertilizer source is the nitrogen content in manure that is applied in plant production. The primary demand for nitrogen is based on the nutrient uptake of plants that are removed from the soil during the harvest. A further reduction of nitrogen occurs as a loss of ammonia ( $\text{NH}_3$ ) during storage and application.

The listed positions of the nitrogen balance are calculated by the activity-based framework in RAUMIS. In order to obtain regional input and output positions, activity-specific coefficients are multiplied with the level of each activity, e.g. area harvested or livestock units (LUs). Nutrient requirements for each crop and region are based on expected crop-specific yields as well as soil and climate conditions. Nitrogen use for individual crops is calculated by linear yield-dependent requirement functions. The loss of ammonia during storage and application is based on the assumption that 40% of the nitrogen in manure that is inaccessible by plants is converted to ammonia during storage and application.

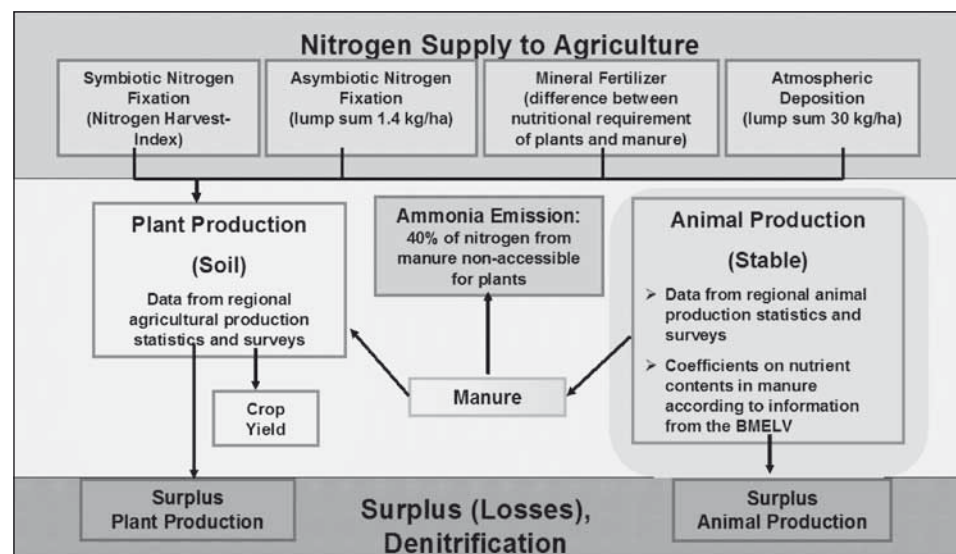


Fig. 5.2: Nitrogen balancing in RAUMIS.  
Stickstoffbilanzierung in RAUMIS.

The nitrogen surplus represents a risk potential since it indicates the amount of nitrogen potentially leaching into ground and surface water. The nitrogen balance surplus provided from RAUMIS is the input data for calculating diffuse nitrogen inputs into rivers that is assumed to take place via two runoff pathways: direct runoff and groundwater runoff. This nitrogen surplus is related to the groundwater recharge/total runoff ratio. Thus, a calculation of the groundwaterborne nitrate inputs into surface waters requires knowledge of the groundwater flow paths, the total residence time of the nitrate and the denitrification kinetics in the upper aquifer. These processes are considered by different models. The GROWA model is used to carry out area differentiated water balance analyses. The mean long term total runoff is modeled as a function of the regional interaction of climate, soil, geology, topography and land use conditions. The model separates the total runoff into the direct runoff (interflow and surface runoff) and groundwater runoff (groundwater recharge). The ratio between groundwater recharge and total runoff was taken as a measure for the extent to which diffuse nitrogen surpluses are displaced from soil to groundwater.

WEKU models the reactive nitrate transport in groundwater. In the first step groundwater velocities are calculated according to DARCY's law from hydraulic conductivity, effective yield of pore space of the aquifer and the slope of groundwater surface (hydraulic gradient). Residence times of groundwater runoffs are calculated in a second step. The WEKU model has been extended by a module quantifying nitrate degradation in groundwater.

For wide area coverage, the coupled models provide a regionally differentiated, consistent link between the Driving Force Indicator “Nitrogen Balance Surplus”, the State Indicator “Nitrogen (Nitrate) Concentration” and Response Indicators (H. GÖMANN et al., 2004). In this study a restriction on the maximum permissible nitrogen balance surplus was introduced that forces agriculture represented by region farms to adjust. The assumption that region farms reach their production decisions independently from each other cannot be maintained because supra-regional manure transport might result in interaction between regions. This interaction is implemented into RAUMIS by adding a manure transport module to the input output matrix of each region farm (P. KREINS et al., 2007). The manure transport module allows region farms to dispose of excess manure while other region farms fulfill nutritional requirements via manure imports.

### 5.3. Reference situation in the study area

The study area is the German federal state of Lower Saxony that encompasses a very diverse spatial structure and specialization of agricultural production. On the one hand, one of the most intensive livestock areas in Europe is in the “Weser-Ems region”, in the western regions of Lower Saxony. This region's significantly above-average share of specialized pigs and poultry farms as well as an above-average share of specialized grazing livestock farms result in excess manure supply that needs to be exported. On the other hand, the eastern regions are predominated by field crop farms and below-average livestock densities, meaning they have high potential for importing farmyard manure. A scenario of reference is necessary for assessing impacts of an implementation of maximum nitrogen balances taking supra-regional manure transports into account. In this study the reference scenario is a projection to the target year 2010 under the Common Agricultural Policy (CAP) regime “Agenda 2000” – assuming no major CAP-reforms following the Mid-Term-Review. Figure 5.3 gives an overview about regional nitrogen surpluses in Lower Saxony that mainly reflect the distribution of intensive animal production across the state.

Furthermore, Lower Saxony features a variety of soil and hydrological site conditions that exhibit different properties in regard to the leaching of nitrogen. The aggregated effect



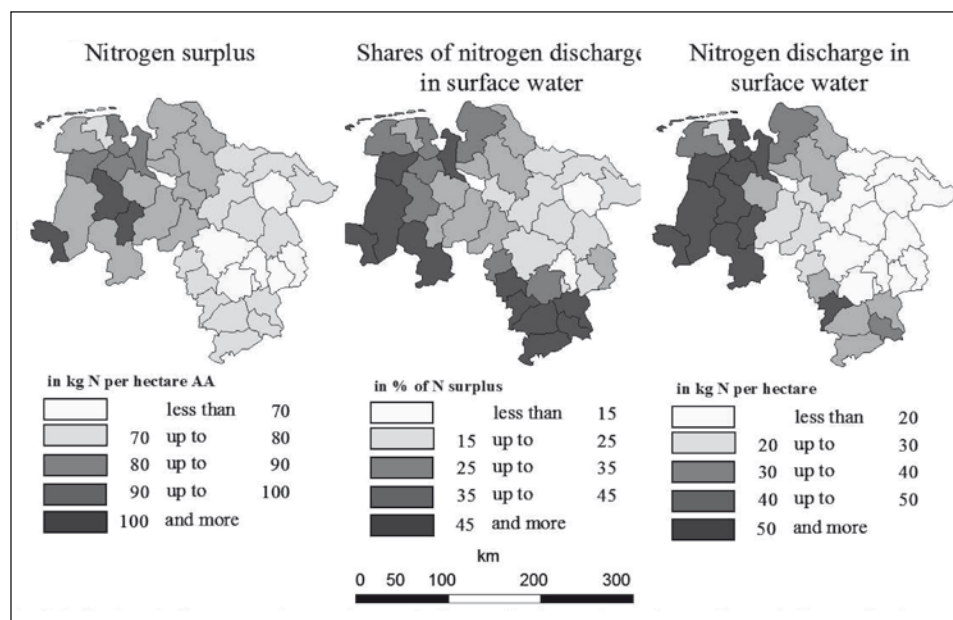


Fig. 5.3: Regional nitrogen surpluses, shares of nitrogen discharges in surface water and nitrogen discharges in surface water in Lower Saxony in 2010. RAUMIS calculations of P. KREINS et al. (2007). AA – agricultural area.

Regionale Stickstoffbilanzüberschüsse, Anteile von Stickstoffeinträgen in Oberflächengewässer und Stickstoffeinträge in Oberflächengewässer im Jahr 2010. Berechnungen mit RAUMIS von P. KREINS et al. (2007). AA – landwirtschaftlich genutzte Fläche.

of the natural conditions can be displayed as a share of nitrogen surpluses that is discharged in surface water. The heterogeneity of the natural site conditions in Lower Saxony in different regional shares of discharged nitrogen surplus (Fig. 5.3). Due to the different natural site conditions the “hot spots” of diffuse pollution must not only coincide with the regions showing the highest nutrient surpluses. The spatial distribution of animal production and different natural site conditions are prerequisites to adequately consider the different environmental impacts of an increase in supra-regional manure transports as a consequence of a limitation of nitrogen surpluses.

Above-average shares of nitrogen surplus leach into surface water in western and southern regions. In western regions this is chiefly due to artificial drainages that result in fast runoff with very short residence time. Hence, a large fraction of the nitrogen load in the total runoff is discharged directly into surface water. Only a smaller fraction of the nitrogen load is discharged into deeper soils and aquifers with the groundwater recharge. Thus, even though high denitrification capacities prevail in the groundwater in these regions, the degradation of high nitrogen surpluses is relatively limited. Southern regions of Lower Saxony fall within the highlands of the rivers Weser and Leine with high total area runoff levels, dominated by fast (direct) runoff components. Here, large fractions of the nitrogen surplus are discharged directly into surface water, too. The lowest share of 11 % is calculated for the fertile soil region of Peine. In western regions of Lower Saxony, high nitrogen surpluses coincide with high shares of nitrogen discharges into surface water, an unfavorable overlap. Changing this allocation via supra-regional manure transports might ease water pollution problems in these so called “hot-spot areas” at the expense of impairments in other regions.

## 5.4. Scenarios

In order to demonstrate the impacts of restricting the permissible nutrient surpluses in the context of supra-regional manure transports, three different variants, all of which aim to reduce the total nitrogen discharges throughout Lower Saxony by the same magnitude (about 17%), are analyzed and compared to the reference scenario for the target year 2010 (Fig. 5.4):

- a uniform (area wide) maximum nitrogen surplus level of 100 kg N/ha AA; supra-regional manure transports are not accounted for (acronym: UniNbalNoTrans);
- a uniform (area wide) maximum nitrogen surplus level of 80 kg N/ha AA, supra-regional manure transports are taken into account (acronym: UniNbalWithTrans);
- area differentiated nitrogen balance surplus is derived on the basis of the shares of nitrogen surpluses that are discharged into surface water, supra-regional manure transports are taken into account (acronym: DiffNbalWithTrans).

The measure is defined on the farm level where some balance positions such as atmospheric depositions are not considered. Slight deviations may occur because the scenario simulations with RAUMIS apply the complete nitrogen balancing.

## 5.5. Aggregate impacts of the implementation of maximum nitrogen surpluses

In the reference scenario the total supply of farmyard manure in Lower Saxony amounts to about 35 mio. m<sup>3</sup> which contain 217,000 t of nitrogen. Total nitrogen surplus from agriculture is calculated at 241,000 t which corresponds to 93 kg/ha AA (Tab. 5.1.). The consequences, particularly on livestock, of restricting nitrogen surpluses without allowing for supra-regional manure transports are taken up in the scenario UniNbalNoTrans. Even though a higher nitrogen surplus level is permitted compared to the other variants, total agricultural nitrogen surplus in Lower Saxony is decreased by approximately 22 %

Tab. 5.1: Regional nitrogen surpluses, shares of nitrogen discharges in surface water and nitrogen discharges in surface water in Lower Saxony in 2010. AA – agricultural area, LFU – labour force unit, LU – livestock unit. Regionale Stickstoffbilanzüberschüsse, Anteile von Stickstoffeinträgen in Oberflächengewässer und Stickstoffeinträge in Oberflächengewässer im Jahr 2010. AA – landwirtschaftlich genutzte Fläche, LFU – Arbeitskrafteinheit, LU – Vieheinheit.

		Reference scenario	UniNbal-NoTrans 100 kg N/ha	UniNbal-WithTrans 80 kg N/ha	DiffNbal-WithTrans 80 kg N/ha
Nitrogen surplus	tons kg/ha AA	241,155 93	201,760 78	210,951 81	222,320 85
Nitrogen discharges in surface water	tons kg/ha AA	89,045 34	73,262 28	74,152 28	73,871 28
Agricultural labour force	1,000 LFU	73.6	65.7	68.4	70.6
Livestock density	LU/ha AA	1.4	1.1	1.2	1.3
Supra-regional manure transports	mio. m <sup>3</sup>			10.3	14.3
Average transport costs	Euro/m <sup>3</sup>			-10.5	-9.8
Total transport costs	mio. Euro			-109	-141
Net agricultural value added	mio. Euro	2,606	2,393	2,463	2,469
Cost of nitrogen discharge reduction in surface water	Euro/kg N		13.5	9.6	9.0

to about 202,000 t (78 kg N/ha AA). The share of nitrogen surplus that leaches into surface water does not change in comparison to the reference scenario. The reduction is almost exclusively due to a cut back of livestock by about 860,000 LUs resulting in a livestock density of 1.1 LUs/ha AA. Abatement costs in terms of agricultural income losses amount to 13.5 Euros/kg reduced nitrogen discharge into surface water.

Because of a substantial increase of supra-regional manure transports in the scenario UniNbalWithTrans and DiffNbalWithTrans to about 10 and 14 mio. m<sup>3</sup> at costs of 109 and 141 mio. Euros, respectively, ground and surface water problems are alleviated in exporting regions at the expense of impairments in importing regions. Total abatement costs, including both, transport costs and agricultural income losses, average 9.6 and 9.0 Euros/kg reduced kg nitrogen discharge, respectively (Tab. 5.1).

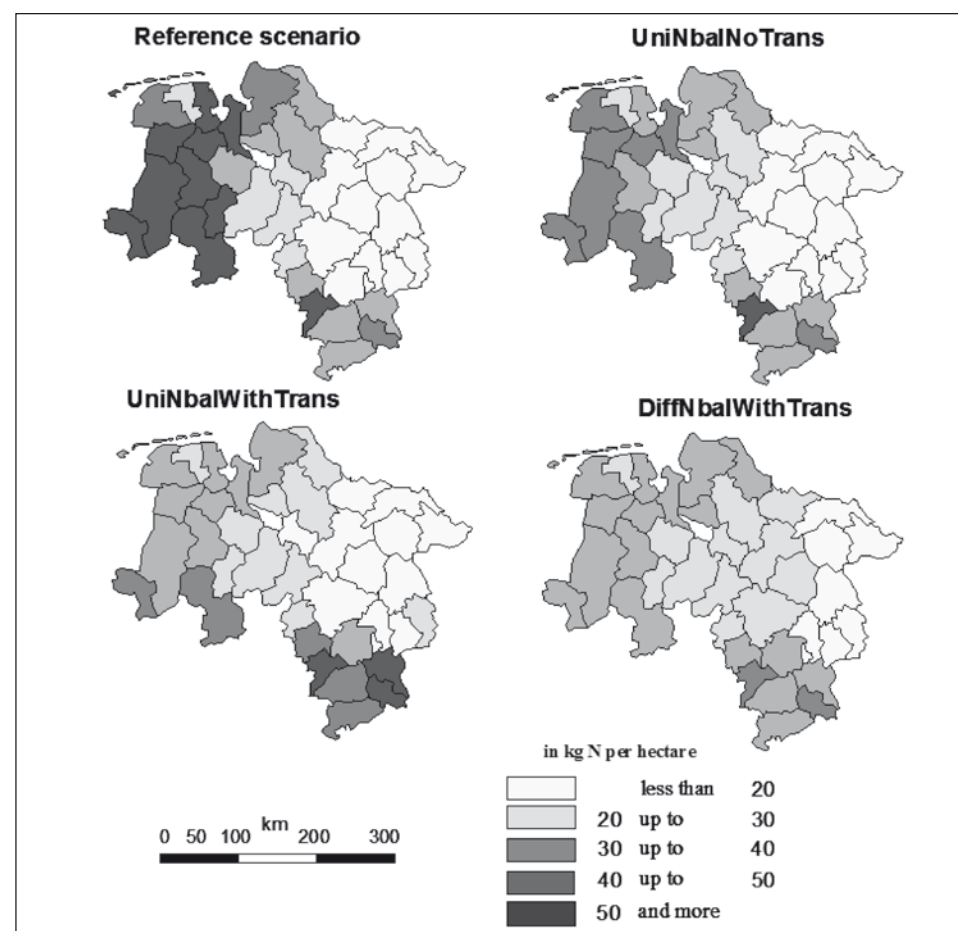


Fig. 5.4: Regional nitrogen discharges into surface water in the reference scenario and variants of nitrogen surplus limitations in Lower Saxony. RAUMIS, GROWA and WEKU calculations of P. KREINS et al. (2007). AA – agricultural area.

Regionale Stickstoffeinträge in Oberflächengewässer im Referenzszenario und Variationen einer Begrenzung von Stickstoffbilanzüberschüssen in Niedersachsen. Berechnungen mit RAUMIS, GROWA und WEKU von P. KREINS et al. (2007). AA – landwirtschaftlich genutzte Fläche.

## 5.6. Regional impacts of the implementation of maximum nitrogen surpluses

Without allowing for supra-regional manure transports (UniNbalNoTrans), nitrogen discharges into groundwater are reduced in problem regions without changing the situation in other regions (Fig. 5.4). However, some regions, particularly those with high nitrogen discharge fractions, still show elevated nitrogen discharges. Average cost figures do not display the regional distribution of income losses; in western intensive livestock regions income losses reach 28%.

Manure transports increase nitrogen discharges in manure importing regions which poses problems in regions where high shares of nitrogen surplus leach into surface water such as in the southern regions of lower Saxony. The implementation of area differentiated nitrogen surplus restrictions clearly removes hot-spot areas of diffuse nitrogen pollution and results in a more even spatial distribution of nitrogen discharges (Fig. 5.4).

## 5.7. Conclusions and outlook

The results indicate that impact assessments of agricultural diffuse nutrient reduction measures should not be based on nutrient surpluses alone but take into account nutrient discharges into ground and surface water as well. The study results show only a limited correlation between regional agricultural nitrogen surpluses and regional nitrogen discharges into ground and surface water: While hot-spot areas identified on the basis of nitrogen surplus do not necessarily display the highest nitrogen discharges into surface water, regions with relatively low nitrogen surplus levels have significantly above-average nitrogen discharges. This is due to spatially varying hydro(geo)logical conditions.

Supra-regional manure transports must be considered in evaluations of nutrient reduction measures. The implementation of measures aimed at reducing agricultural diffuse nitrogen pollution in hot-spot areas can lead to a substantial increase of supra-regional farmyard manure transports. While the value of nutrients in the manure only covers the costs for short local transports, long distance manure transports are chiefly triggered by high adjustment costs that can be partially avoided by exporting manure to other regions. Calculation of the marginal abatement costs arising from complying with the nutrient surplus constraint is only possible within an agricultural economic model framework such as RAUMIS. Diffuse nutrient reduction measures must be target specific. The measures analyzed in this study focused on reducing nitrogen leaching into surface water. In this regard the implementation of area differentiated maximum nitrogen surpluses appear to be a cost effective measure to mitigate hot-spot areas if supra-regional manure transports are allowed. While this is an appropriate measure for achieving environmental targets in surface water, the results show that quality standards for groundwater might not be achieved the same way. Hence, groundwater specific measures are advisable.

The coupling of RAUMIS, GROWA, and WEKU established an integrated agricultural hydro(geo)logical model network that goes beyond the driving force indicator (e.g. nitrogen balance surplus) and calculates a metric (diffuse nitrogen discharges into surface water) closer to the environmental good ("water"). Detection, classification and monitoring of areas with nitrogen problems are more specific on the basis of this improved indicator because natural conditions are taken into account. The model network makes possible an integrated assessment of various agricultural and environmental policies in regard to social and economic consequences for agriculture that are required according to Art. 9 of the Water Framework Directive (DIRECTIVE 2000/60/EC).

Based on the achieved level of model integration, further developments of the model network should address the following issues:

- a) a further regionalization to describe the units under the county level (i.e., with the help of community statistics, ICAS – Integrated Administration and Control System, GIS data (remote sensing, soil),
- b) the integration of further models in the model network e.g. MONERIS – MOdelling Nutrient Emissions in RIver Systems (H. BEHRENDT et al., 2000) to implement further environmental processes in particular point sources, which enables the validation of the model network based on measured values.

### Summary

An interdisciplinary model network consisting of the regional agricultural economic model RAUMIS and the hydro(geo)logical models GROWA/WEKU is used to analyze the effect of different scenarios of maximum agricultural nitrogen balance surplus on water quality. The study area is the federal state of Lower Saxony, Germany, which features heterogeneous natural site conditions as well as agricultural production structures. The study takes supra-regional manure transports into account that, according to the model's results, considerably increase due to a lowering of maximum nitrogen balance surpluses. The assessment of the nitrogen reduction measures reveals that adequate indicators have to be applied. In this regard the model results show that even though the analyzed measure leads to a substantial overall reduction of agricultural nitrogen surpluses, nitrogen discharges into surface and groundwater can regionally increase.

### References

- BACH, M., H.-G. FREDE & G. LANG (1997): Entwicklung der Stickstoff-, Phosphor- und Kalium-Bilanz der Landwirtschaft in der Bundesrepublik Deutschland.– Studie im Auftrag des Bundesarbeitskreises Düngung (BAD) Frankfurt am Main.– 77 p., Gesellschaft f. Boden- und Gewässerschutz e.V., Wettenberg (Selbstverlag).
- BEHRENDT, H., P. HUBER, M. KORNMILCH, D. OPITZ, O. SCHMOLL, G. SCHOLZ & R. UEBE (2000): Nutrient balances of German river basins.– UBA-Texte, 23/2000, pp. 261, Umweltbundesamt Berlin.
- BGBI. I Nr. 7/2007: Verordnung über die Anwendung von Düngemitteln, Bodenhilfsstoffen, Kultursubstraten und Pflanzenhilfsmitteln nach den Grundsätzen der guten fachlichen Praxis beim Düngen (Düngerverordnung – DüV) vom 27. Februar 2007.– Bundesgesetzblatt, Jahrgang 2007, Teil I Nr. 7, ausgegeben 5. März 2007, Bonn.
- DIRECTIVE 2000/60/EC (EU Water Framework Directive 2000): Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy.– Official Journal of the European Communities, L 327, 72 p., Brussels.
- GERMAN ENVIRONMENTAL AGENCY (2001): Environmental Policy. Water Management in Germany. Part 2 – The water quality of inland surface waters.– 7–9, Berlin.
- GÖMANN, H., P. KREINS, R. KUNKEL & F. WENDLAND (2003). The coupling of agricultural economic and hydrological models.– *Agrarwirtschaft*, 53 (4), 195–203, Frankfurt am Main.
- GÖMANN, H., P. KREINS, R. KUNKEL & F. WENDLAND (2004). Model based impact analysis of policy options aiming at reducing diffuse pollution by agriculture a case study for the river Ems and a sub-catchment of the Rhine.– In: R. A. LETCHER & C. GIUPPONI (Eds., 2004): Policies and Tools for Sustainable Water Management in the European Union.– *Environmental Modelling and Software*, special issue, 20 (2), 93–98.
- HENRICHSMAYER, W., C. CYPRI, W. LÖHE, M. MEUDT, R. SANDER, F. VON SOTHEN, F. ISERMEYER, A. SCHEFSKI, K.-H. SCHLEEF, E. NEANDER, F. FASTERDING, B. HELMCKE, M. NEUMANN, H. NIEBERG, D. MANEGOLD & T. MEIER (1996). Entwicklung eines gesamtdeutschen Agrarsektormodells RAUMIS96. Endbericht zum Kooperationsprojekt.– Forschungsbericht für das BML (94 HS 021), vervielfältigtes Manuskript, 362 p., Institut für Agrarpolitik, Bonn, Braunschweig.

- KREINS, P., H. GÖMANN, S. HERRMANN, R. KUNKEL & F. WENDLAND (2007). Integrated agricultural and hydrological modelling within an intensive livestock region.– In: ERICKSON, J., F. MESSNER & I. RING (Eds., 2007): Ecological Economics of Sustainable Watershed Management. *Advances in the Economics of Environmental Resources*.– Vol. 7, 119–151, Amsterdam (Elsevier).
- KUNKEL, R., & F. WENDLAND (2002). The GROWA98 model for water balance analysis in large river basins – the river Elbe case study.– *Journal of Hydrology*, 259, 152–162.
- LOWER SAXONY STATE OFFICE FOR ECOLOGY (2001). Water Quality Report 2000. Surface water bodies.– 13/2001, 1. Ed. (2), Hildesheim.
- PARCOM (Paris Convention for the Prevention of Marine Pollution) (1993): PARCOM guide lines for calculating mineral balances. Meeting of the ad hoc working group on measures to reduce the nutrient load from agriculture 3.– The Hague, The Netherlands.
- WENDLAND, F. & R. KUNKEL (1999). The nitrate decomposition ability in ground water in the Elbe area.– *Schriften des Forschungszentrum Jülich, Environmental Series*, 13, Jülich.

### Zusammenfassung

Zur Analyse der Auswirkungen verschiedener Szenarien maximaler landwirtschaftlicher Stickstoffbilanzüberschüsse auf die Wasserqualität wird ein interdisziplinärer Modellverbund bestehend aus dem regionalisierten agrarökonomischen Modell RAUMIS und dem (geo)hydrologischen Modell GROWA/WEKU angewendet. Das Untersuchungsgebiet ist das Bundesland Niedersachsen in Deutschland, das sehr heterogene natürliche Standortbedingungen sowie landwirtschaftliche Produktionsstrukturen aufweist. In dieser Studie werden überregionale Wirtschaftsdüngertransporte berücksichtigt, die den Modellergebnissen zu Folge bei einer Reduzierung maximaler Stickstoffbilanzüberschüsse deutlich zunehmen. Die Bewertung der untersuchten Maßnahmen zur Verminderung von Stickstoffeinträgen verdeutlicht die Notwendigkeit, geeignete problemadäquate Indikatoren zu verwenden. In diesem Zusammenhang zeigen die Modellergebnisse, dass, obwohl die untersuchten Maßnahmen zu einer erheblichen Minderung landwirtschaftlicher Stickstoffüberschüsse führen, die Stickstoffausträge in Oberflächen- und Grundwasser regional zunehmen können.

Keywords: diffuse pollution, agricultural economic and hydrological modeling, manure transports

Schlüsselwörter: diffuse Nährstoffeinträge, agrarökonomische und hydrologische Modellierung, Wirtschaftsdüngertransporte

## 6. Prognosis of Future Nitrate Input into the Upper Rhine Aquifer

(M. CASPER, P. VAN DIJK, N. GRAVELINE, J. GRIMM-STRELE, Th. GUDERA, St. KORTE & H. LAMBRECHT)

### 6.1. Introduction

In many places, the groundwater of the Upper Rhine Valley aquifer shows high nitrate concentrations. This is mainly due to intensive agriculture in this region. Locally, the threshold of 50 mg/l, set by the Drinking Water Regulation, is clearly exceeded. Especially the Vosges and Black Forest foothill regions are sources of nitrate, causing nitrate plumes in the groundwater (Fig. 6.1, dark areas). The project MONIT – “Modelling of the groundwater contamination by nitrate in the Upper Rhine Valley” brought together partners from Alsace/France, the two Swiss cantons of Basel as well as from the German federal state of Baden-Württemberg. The project area was the Upper Rhine Valley south of Karlsruhe between Basel, Mulhouse and Rastatt (Fig. 6.1).

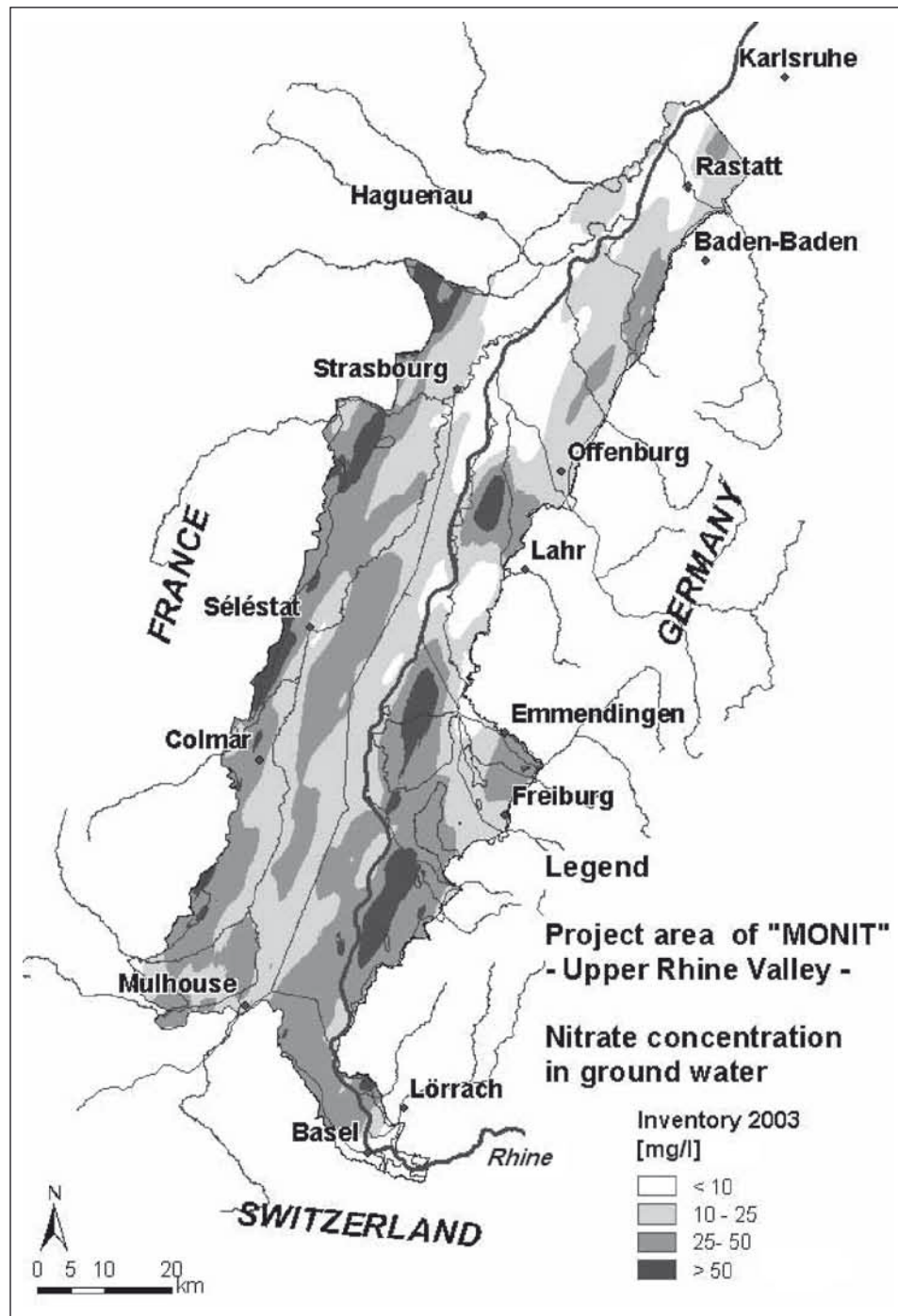


Fig. 6.1: Project area and nitrate concentrations (2003) in groundwater (LUBW, 2006).  
Projektgebiet und Nitratkonzentrationen (2003) im Grundwasser (LUBW, 2006).

The project provided a tool for assessing the effectiveness of different options for action to reduce the groundwater contamination in the Upper Rhine Valley aquifer. It focused explicitly on diffuse leaching from agriculture. The quantification of the impact of the EU's Common Agricultural Policy (CAP) and of local measures on the nitrate contamination of the Upper Rhine Valley aquifer groundwater was the main objective of this project (LUBW, 2006).

A trans-national database has been set up. Precisely determining agricultural practice (amounts of fertilizer used, methods of cultivation, livestock, crop rotations etc.) in the participating countries is central to the quality of the nitrate leaching simulation. A great part of the collected data is available for the first time in an international context. Thus, the project contributes substantially to trans-national data homogenization, as called for by the EU Water Framework Directive (WFD; DIRECTIVE 2000/60/EC). This project has been co-financed by the European Regional Development Fund (ERDF).

## 6.2. Modeling concept

A number of submodels at different spatial and temporal scales were used. These models were loosely coupled at project coordination level (Fig. 6.2). In detail, these models are:

1. Model to interpolate climatic data and to calculate the groundwater recharge (GWN\_BW).
2. Socio-economic models (SEM) to assess changes in land use practice as a result of changing conditions (e.g. reform of the CAP, ordinance on fertilization, world market prices).

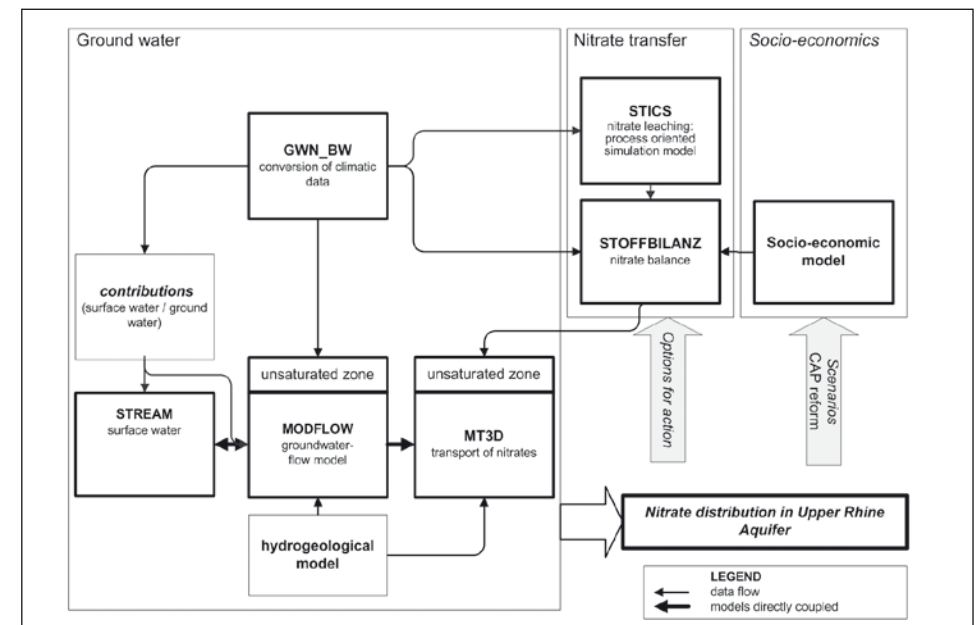


Fig. 6.2: Integrated modeling concept and simplified data flow in MONIT.  
Konzept der integrierten Modellierung und vereinfachter Datenfluss in MONIT.

3. Large scale nitrate balance model (STOFFBILANZ; M. GEBEL, 2003).
4. Process-oriented nitrate input model at plot scale (soil-plant-model STICS; see N. BRISSON et al. 1998) to determine the nitrate input into the groundwater as function of crop type, management practice, fertilizing practice and climate.
5. Groundwater flow model coupled with a transport model to simulate on a large scale and in a three-dimensional way the groundwater flow and transport, including first order decay of nitrate in the groundwater (MODFLOW, STREAM and MT3D, A. W. HARBAUGH et al., 2000).

In a first step, the nitrate concentrations of the groundwater for the years 1950, 1980, 1990 and 2000 were reconstructed (Fig. 6.4). Here, the GWN\_BW and STOFFBILANZ models were used to produce the input data sets for MODFLOW/MT3D. By the use of measured data the groundwater flow and transport model could be calibrated and verified. Fig. 6.2 gives a simplified outline of the coupling of partial models and data flow within the project.

### 6.3. Results

In MONIT three different scenarios (J. ALCAMO, 2001) for 2050 were distinguished (LUBW, 2006). The most plausible scenario for the Upper Rhine Valley is the so called "tendency scenario". Based on assumptions of the IPCC emissions scenarios A1 and B2 (N. NAKICENOVIC & R. SWART, 2000), two alternative scenarios were developed: A1 accounts for a higher degree of liberalization of markets, B2 takes into consideration fast growing of energy costs which causes a strong extension of the bioenergy sector. Using the coupled models the resulting nitrate distributions in

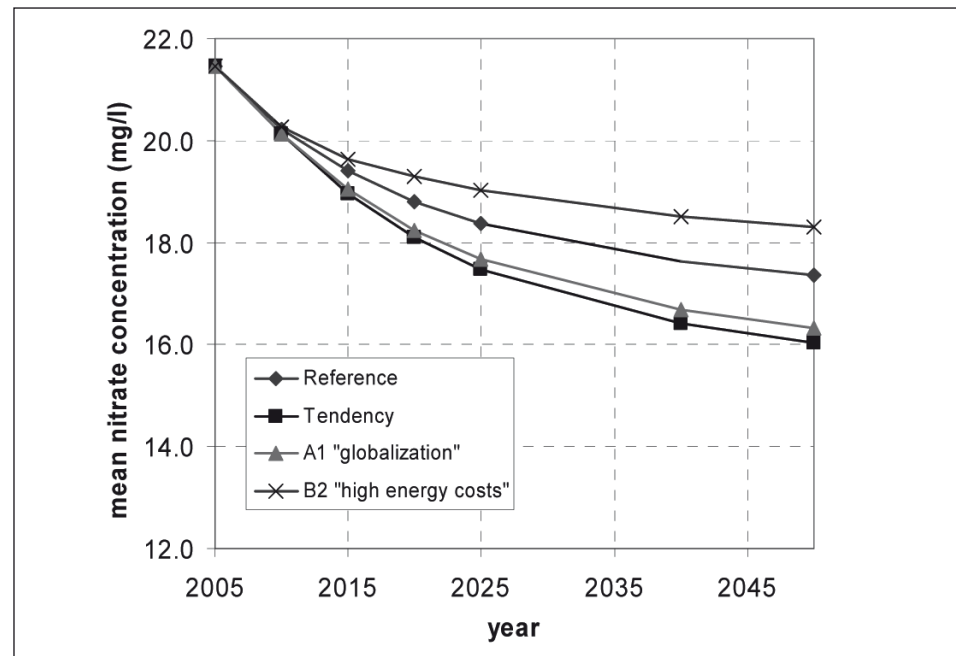


Fig. 6.3: Development of mean nitrate concentration between 2005 and 2050.  
Entwicklung der mittleren Nitratkonzentration zwischen 2005 und 2050.

the Upper Rhine Aquifer were calculated until the year 2050. Figure 6.3 shows the evolution of mean nitrate concentration in groundwater in comparison to a reference run ("no changes in input since 2000"). The tendency scenario and the scenario A1 ("globalization") show a similar decrease in nitrate concentration. Scenario B2 ("high energy costs") shows a slight increase in nitrate concentration compared to the base run. This can be explained by a much higher percentage of energy crops needing higher fertilizer gifts.

A detailed description of project results can be found in LUBW (2006).

### 6.4. Discussion and Conclusion

Several sources of modeling uncertainty can be distinguished: (a) different model scales, (b) incomplete process representation and (c) missing or sparse data. This leads to some model limitations that have to be taken into account when the simulation results are interpreted. The main sources of uncertainty were:

- (a) Model scale
  1. SEM works on 13 agricultural regions, disaggregation to municipal level is necessary.
  2. Different temporal scales: (a) daily time step (plant growth model), (b) monthly time step (groundwater model), (c) annual mean (nitrogen balance model).
- (b) Incomplete process representation
  3. Process oriented plant models are only available for the major crops (corn or winter wheat), plant models for energy crops like colza could not be

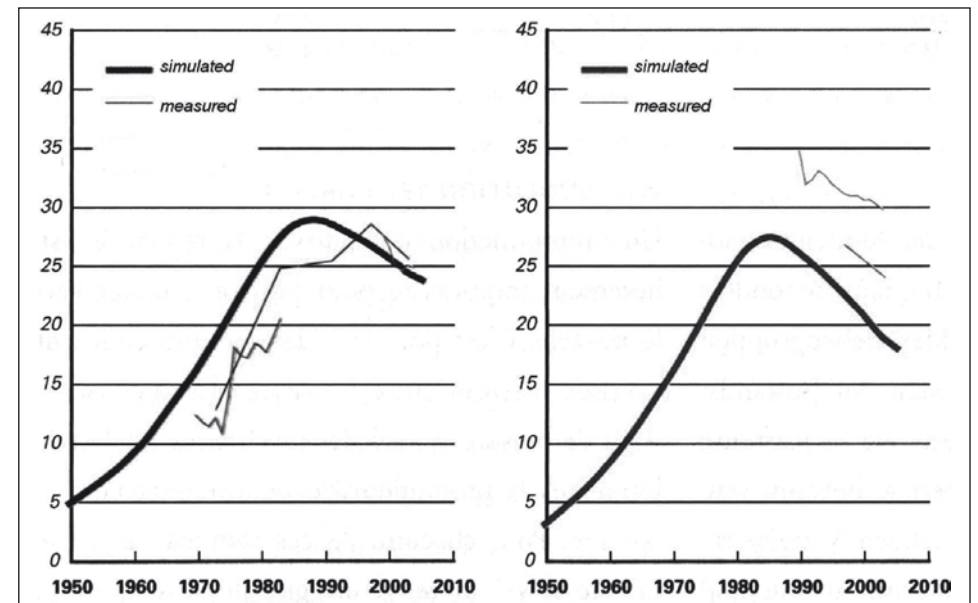


Fig. 6.4: Simulated (bold line) vs. measured (thin lines) nitrate concentrations [mg/l] for the period 1950 to 2005. Left: France; right: Germany.  
Simulierte (fette Linie) vs. gemessene (dünne Linie) Nitratkonzentration [mg/l] für den Zeitraum 1950 bis 2005. Links: Frankreich; rechts: Deutschland.

adapted to climatic conditions of the Upper Rhine Valley. All models show systematic underestimation of harvest for soils with high stone content.

4. Effect of nitrate decay in the unsaturated zone could not be considered in detail (modeling concept and appropriate data are not available).
- (c) Data availability
5. Real amount of fertilizer applied by the farmers is unknown; especially in Germany the estimated input for nitrate for the period 1995 to 2000 seems not to be realistic: The fast recession for the simulation could not be validated by measured nitrate concentrations (Fig. 6.4).
  6. Land use data is not available below municipal scale.
  7. Nitrogen balances are different from country to country (e.g. winter wheat, vineyards).

In the near future further refinements concerning model structure and parameterization (spatial resolution and precise fertilizer inputs) are necessary. Additional extensive measurements of nitrate concentrations are inevitable within the next few years in order to validate the predicted fast recession of nitrate concentrations (Fig. 6.4).

### Summary

Within the multi-national EU-INTERREG-III-project MONIT – “Modeling of the groundwater contamination by nitrate in the Upper Rhine Valley” a simulation tool was developed that allows the assessment of future nitrate load in an integrative way. Five different models were coupled and a large number of simulations runs were carried out. Due to limitations in data availability and the modeling concept, several sources of uncertainty could be distinguished.

### References

- ALCAMO, J. (2001): Scenarios as tools for international environmental assessments.– Environmental Issue, report No. 24, European Environment Agency, Copenhagen.
- BRISSON, N., B. MARY, D. RIPOCHE, M.-H. JEFFROY, F. RUGET, P. GATE, F. DEVIENNE, R. ANTONIOLETTI, C. DURR, B. NICOLLAUD, N. BEAUDOIN, S. RECOUS, X. TAYOT, D. PLENET, G. RICHARD, P. CELLIER, J.-M. MACHET, J.-M. MEYNARD & R. DELÉCOLLE (1998): STICS: a generic crop simulation model with water and nitrogen balance. Application to wheat and maize. I. Theory and parameterization.– *Agronomie*, 22, 1, 69–92, Les Ulis.
- DIRECTIVE 2000/60/EC (EU Water Framework Directive 2000): Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy.– Official Journal of the European Communities, L 327, 72 p., Brussels.
- GEBEL, M. (2003): Die Berücksichtigung von N-Umsatzprozessen auf Ackerflächen bei der Quantifizierung von Stickstoffeinträgen in Flussgebieten mit dem Modell STOFFBILANZ.– *Geoökodynamik*, 24 (3-4), 249–259, Bensheim, Darmstadt.
- HARBAUGH, A. W., E. R. BANTA, M. C. HILL & M. G. McDONALD (2000): MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model – User Guide to Modularization Concepts and the Ground-Water Flow Process.– U.S. Geological Survey Open-File Report 00-92, 121 p.
- LUBW (Ed., 2006): Prognosen zur Entwicklung der Nitratbelastung – INTERREG III A-Projekt MoNit „Modellierung der Grundwasserbelastung durch Nitrat im Oberrheingraben“ (Endbericht).– 154 p., Landesanstalt für Umwelt, Messungen und Naturschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe.
- NAKICENOVIC N. & R. SWART (Eds., 2000): Special Report on Emission Scenarios.– IPCC Special Reports on Climate Change, 570 p., New York (Cambridge University Press), [online available: <http://www.ipcc.ch/ipccreports/sres/tectran/index.htm>, 18. 09. 2008].

### Zusammenfassung

Innerhalb des multinationalen EU-INTERREG-III-Projektes MONIT – „Modellierung der Grundwasserbelastung durch Nitrat im Oberrheingraben“ wurde ein Simulationswerkzeug entwickelt, das eine Prognose der zukünftigen Nitratbelastung erlaubt. Dabei wurden fünf Simulationsmodelle gekoppelt und mehrere Simulationsläufe durchgeführt. Unsicherheiten in den Ergebnissen ließen sich durch eine begrenzte Datenverfügbarkeit und Limitierungen im Modellkonzept erklären.

Keywords: CAP, diffuse pollution, nitrate, water resources, Upper Rhine Valley  
 Schlüsselwörter: GAP, diffuse Verschmutzung, Nitrat, Wasserressourcen, Oberrheingraben

## 7. Ausmaß und Ursachen der sinkenden Nitratgehalte im Grundwasser des Kantons Bern (E. SPIESS & V. PRASUHN)

### 7.1. Einleitung

In der zweiten Hälfte des letzten Jahrhunderts kam es infolge der Intensivierung in der schweizerischen Landwirtschaft zu einem starken Anstieg der Nitratgehalte im Grundwasser (BUWAL, 1993). Dieser führte dazu, dass der Nitratgehalt des Trinkwassers in den achtziger Jahren an vielen Orten über dem Anforderungswert der GEWÄSSERSCHUTZVERORDNUNG (1998) von 25 mg NO<sub>3</sub>/l lag. Bei einigen Wasserfassungen wurde auch der in der FREMD- UND INHALTSSTOFFVERORDNUNG (1995) festgelegte Toleranzwert für Trinkwasser von 40 mg NO<sub>3</sub>/l überschritten.

Mit den 1993 eingeführten Direktzahlungen und den damit verbundenen Ökomaßnahmen hat sich das Bundesamt für Landwirtschaft unter anderem zum Ziel gesetzt, den Nitratgehalt des Grundwassers zwischen den Referenzjahren 1990/92 und dem Jahr 2005 um durchschnittlich 5 mg NO<sub>3</sub>/l zu reduzieren.

Zum Bezug von allgemeinen Direktzahlungen sind Landwirte berechtigt, die den „ökologischen Leistungsnachweis“ (vergleichbar mit „Cross Compliance“ in der EU) erfüllen. Dieser beinhaltet unter anderem eine ausgeglichene Stickstoffbilanz, eine gezielte Fruchtfolge, einen angemessenen Anteil an ökologischen Ausgleichsflächen und einen geeigneten Bodenschutz. Ökobeiträge werden auch für verschiedene Typen von ökologischen Ausgleichsflächen, den extensiven Anbau von Getreide und Raps sowie für den Biolandbau ausgerichtet (DIREKTZAHLUNGSVERORDNUNG, 1998).

Tab. 7.1: Höhenlage, Bodennutzung und Nitratgehalte in den vier Regionen des Kantons Bern. <sup>1)</sup> Messwerte aus Grundwasserfassungen (E. SPIESS & V. PRASUHN, 2006, und unveröffentlichte Werte).  
 Altitude, land use and nitrate contents in the four regions of the canton of Berne. <sup>1)</sup> Measured values from groundwater wells (E. SPIESS & V. PRASUHN, 2006, and unpublished data).

Region	Höhe (m ü.A.)	Bodennutzung (in %)				Nitratgehalt <sup>1)</sup> (in mg NO <sub>3</sub> /l)		
		Wald	Acker	Dauerwiesen	Rest	1990–92	2002–04	Differenz
Alpen	550–4200	27	0	33	39	2,3	2,6	0,3
Voralpen	500–1500	36	24	33	7	20,6	16,2	–4,4
Mittelland	400–900	25	41	12	21	28,8	24,4	–4,4
Jura	450–1600	53	11	30	6	9,0	7,9	–1,1

Im Rahmen der Evaluation der Ökomaßnahmen (F. HERZOG & W. RICHNER, 2005), die aufgrund der NACHHALTIGKEITSVERORDNUNG (1998) durchzuführen ist, wurden die Auswirkungen verschiedener Einflussfaktoren auf die Reduktion der Nitratauswaschung zwischen 1990 und 1999 in den vier Regionen des Kantons Bern (Alpen, Voralpen, Mittelland und Jura; Tab. 7.1) mittels des Stoffflussmodells MODIFFUS untersucht und mit Messwerten aus Grundwasserfassungen verglichen (E. SPIESS & V. PRASUHN, 2006).

## 7.2. Stoffflussmodell MODIFFUS

MODIFFUS ist ein Modell zur Abschätzung der diffusen Einträge von Stickstoff und Phosphor in die Gewässer und wurde detailliert in V. PRASUHN & R. MOHNI (2003) beschrieben. Für die vorliegende Arbeit wurden nur die Module „Wasserhaushalt“ und „Nitratauswaschung“ von MODIFFUS verwendet. Das Modell beruht auf diversen naturräumlichen, klimatischen, pedologischen und landwirtschaftlichen Eingangsdaten, welche mittels eines geographischen Informationssystems miteinander verknüpft werden. Als räumliche Einheit dienten Rasterzellen von einem Hektar Größe. In einem ersten Schritt wurden die Wasserflüsse für jede der 573.548 Rasterzellen berechnet. Die Sickerwassermenge ergab sich aus der Differenz zwischen dem Niederschlag einerseits und der Evapotranspiration, dem Oberflächenabfluss und dem Drainageabfluss andererseits. Infolge der Verwendung von langjährigen Mittelwerten wurde für 1990 und 1999 mit den gleichen Sickerwassermengen gerechnet. In einem zweiten Schritt erfolgte die Berechnung der ausgewaschenen Nitratmenge aufgrund von nutzungsspezifischen Ausgangswerten für die Nitratauswaschung. Im Ackerbau wurden hauptsächlich aus Lysimeterversuchen abgeleitete Ausgangswerte für Kulturkombinationen (= Vorkultur – Zwischenkultur – Nachkultur) verwendet (V. PRASUHN & E. SPIESS, 2003). Die Ausgangswerte wurden dann mit Korrekturfaktoren für Unterschiede in der Sickerwassermenge, der Höhenlage, des Bodens, der Wirtschaftsdüngermenge, der Denitrifikation und der Drainage verrechnet.

## 7.3. Resultate und Diskussion

Die Abschätzungen mit dem Stoffflussmodell MODIFFUS ergaben, dass eine bedeutende Reduktion der ausgewaschenen Nitratmenge zwischen 1990 und 1999 vor allem unter den Ackerflächen im Mittelland und in den Voralpen erreicht worden ist (Fig. 7.1).

Fünf Einflussfaktoren (Tab. 7.2), welche sich zwischen 1990 und 1999 verändert haben, konnten in MODIFFUS berücksichtigt werden. Nach der Modellrechnung haben die veränderten Kulturanteile im Ackerbau, der geringere Einsatz von Stickstoffdüngern im Ackerbau sowie der vermehrte Anbau von Zwischenkulturen am meisten zu den tieferen Nitratgehalten im Grundwasser beigetragen. Die Auswirkungen der restlichen Faktoren waren dagegen gering. Insgesamt dürfte über die Hälfte der 12%igen Reduktion der Nitratauswaschung zwischen 1990 und 1999 eine Folge der verschiedenen Ökomaßnahmen sein, während der Rest vor allem auf die veränderten agrarpolitischen und wirtschaftlichen Rahmenbedingungen zurückgeführt werden kann.

Die Einflussfaktoren lassen sich im Detail wie folgt beschreiben:

- Veränderung der Kulturanteile im Ackerbau  
Während die Ackerfläche zwischen 1990 und 1999 nahezu konstant blieb, traten bei einzelnen Kulturen z.T. große Flächenänderungen auf. Bezogen auf den gesamten

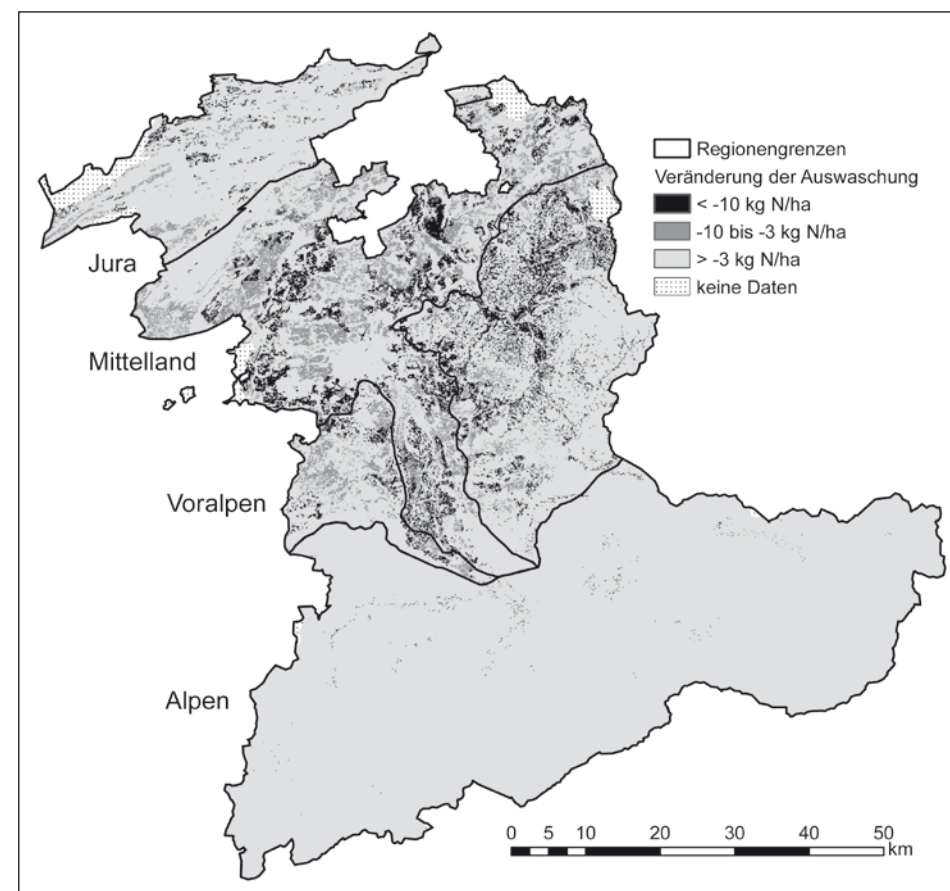


Fig. 7.1: Veränderung der mit MODIFFUS berechneten ausgewaschenen Nitratmengen im Kanton Bern zwischen 1990 und 1999 (in kg N/ha).  
Variation in the amount of nitrate leaching calculated with MODIFFUS for the canton of Berne between 1990 and 1999 (in kg N/ha).

Kanton verzeichneten das Getreide (–16 %) sowie die Kartoffeln (–27 %) bedeutende Abnahmen, Zunahmen wurden dagegen vor allem bei den ein- und mehrjährigen Ansaatwiesen (+18 %) und den Rüben (+32 %) beobachtet. Die Nitratauswaschung wurde durch diese Entwicklung reduziert. Bei der Kartoffelernte wird der Boden intensiv bearbeitet und viel Sauerstoff gelangt in die oberste Bodenschicht. Dies fördert die Stickstoffmineralisierung. Da im Spätherbst die Stickstoffaufnahme durch die Nachkultur häufig gering ist, können hohe Stickstoffverluste entstehen. Dies ist z. B. bei Wintergetreide nicht nur nach Kartoffeln, sondern auch nach dem Umbruch einer Ansaatwiese der Fall. Zuckerrüben dagegen nehmen bis spät in den Herbst Stickstoff auf und hinterlassen nach der Ernte geringe Mengen an mineralischem Stickstoff im Boden. Die größere Ansaatwiesenfläche dürfte die bedeutendste Auswirkung auf die Nitratauswaschung gehabt haben. Durch den dauernden Bodenbewuchs wird wenig Nitrat ausgewaschen. Zu größeren Verlusten kommt es erst nach dem Umbruch der Ansaatwiese.

Tab. 7.2: Geschätzte Reduktion der Nitratauswaschung zwischen 1990 und 1999 durch verschiedene Einflussfaktoren (in % der 1990 unter der gesamten Fläche ausgewaschenen Stickstoffmenge).  
Estimated reduction in nitrate leaching between 1990 and 1999 due to various influencing factors (in % of the amount of nitrogen leached from the whole surface of the canton of Berne in 1990).

Einflussfaktor	Beitrag
veränderte Kulturanteile im Ackerbau	4 %
geringerer Stickstoffdüngereinsatz im Ackerbau	4 %
vermehrter Anbau von Zwischenkulturen	3 %
geringere Stickstoffdeposition	1 %
Extensivierung im Futterbau	< 1 %
Total	12 %

- Geringerer Stickstoffdüngereinsatz im Ackerbau  
Lysimeterversuche zeigen, dass die Nitratauswaschung unter Ackerkulturen mit steigender Stickstoffdüngung zunimmt (J. NIEVERGELT, 2002, W. STAUFFER & E. SPIESS, 2005). Durch die Anforderung einer ausgeglichenen Stickstoffbilanz im ökologischen Leistungsnachweis wird die Höhe der Stickstoffdüngung begrenzt. Seit der Einführung der Ökomaßnahmen hat deshalb der Einsatz von Stickstoffmineraldüngern (–23 % in der Schweiz zwischen 1990 und 1999) und die Wirtschaftsdüngeremenge (–9 % im Kanton Bern) weiter abgenommen.
- Vermehrter Anbau von Zwischenkulturen  
Die Fläche mit Zwischenkulturen war 1990 und 1999 fast gleich groß. Da aber die Fläche der im Frühjahr gesäten Kulturen, vor denen Zwischenkulturen normalerweise angebaut werden, abnahm, war dies mit weniger Winterbrache und einer geringeren Nitratauswaschung verbunden. Dies ist vermutlich zu einem großen Teil auf die Anforderungen des ökologischen Leistungsnachweises in Bezug auf die Bodenbedeckung zurückzuführen.
- Geringere Stickstoffdeposition  
Die Stickstoffdeposition aus der Luft geht seit 1980 kontinuierlich zurück, weil die Tierbestände und die damit verbundenen Ammoniakverluste abgenommen haben und die Stickoxidemissionen aus Verkehr und Industrie reduziert werden konnten. Dadurch verminderte sich der atmosphärische Stickstoffeintrag in den Boden.
- Extensivierung im Futterbau  
Durch die Förderung der ökologischen Ausgleichsflächen wird auf vielen Wiesen weniger oder kein Stickstoffdünger ausgebracht. Dies dürfte mit einer geringeren Nitratauswaschung verbunden sein, wobei die Reduktion pro Flächeneinheit vermutlich wesentlich geringer ausfällt als bei der Extensivierung im Ackerbau.

### Zusammenfassung

Im Jahre 1993 wurden in der schweizerischen Landwirtschaft Direktzahlungen eingeführt, die an Ökomaßnahmen gebunden sind. Im Rahmen der Evaluation dieser Ökomaßnahmen wurden die zeitliche Entwicklung des Nitratgehaltes im Grundwasser und die Ursachen des Rückgangs in einer Fallstudie untersucht. In den vier geographischen Regionen des Kantons Bern wurden Modellrechnungen für die Jahre 1990 und 1999 mit Hilfe des Stoffflussmodells MODIFFUS durchgeführt. In einem ersten Schritt wurden die Wasserflüsse für jede Rasterzelle von einem Hektar Größe mittels langjähriger

Durchschnittswerten berechnet. Danach erfolgte die Abschätzung der ausgewaschenen Nitratmenge, indem ein nutzungsspezifischer Ausgangswert für die Nitratauswaschung, welcher aus Lysimeterversuchen und Literaturwerten hergeleitet wurde, mit Korrekturfaktoren für Unterschiede in der Sickerwassermenge, der Höhenlage, des Bodens, der Hofdüngermenge, der Denitrifikation und der Drainage verrechnet wurde.

Die Resultate zeigen eine durchschnittliche Abnahme der Nitratgehalte um 12 %. Im Mittelland und in den Voralpen trug der Rückgang der Getreide- und Kartoffelfläche, der größtenteils durch den vermehrten Anbau von Kunstwiesen und Rüben kompensiert wurde, wesentlich zur Verminderung der Nitratauswaschung bei. Neben der Veränderung der Kulturanteile haben im gesamten Kanton Bern der geringere Stickstoffdüngereinsatz im Ackerbau sowie der vermehrte Anbau von Zwischenkulturen am meisten zur Verringerung der Nitratgehalte im Grundwasser beigetragen. Etwa die Hälfte der Reduktion dürfte eine Folge der Ökomaßnahmen sein.

### Literatur

- BUWAL – Bundesamt für Umwelt, Wald und Landschaft (1993): Situation der Trinkwasserversorgung.– Schriftenreihe Umweltschutz, Nr. 212, 128 S., Bern.
- DIREKTZAHLUNGSVERORDNUNG (1998): SR 910.13 Verordnung über die Direktzahlungen an die Landwirtschaft (Direktzahlungsverordnung, DZV) vom 7. Dezember 1998 (Stand am 1. Oktober 2008).– 50 S., Bern, [online verfügbar: <http://www.admin.ch/ch/d/sr/9/910.13.de.pdf>, 14. 10. 2008].
- FREMD- UND INHALTSSTOFFVERORDNUNG (1995): SR 817.021.23 Verordnung des EDI über Fremd- und Inhaltsstoffe in Lebensmitteln (Fremd- und Inhaltsstoffverordnung, FIV) vom 26. Juni 1995 (Stand am 1. April 2008).– 170 S., Bern [online verfügbar: <http://www.admin.ch/ch/d/sr/8/817.021.23.de.pdf>, 14. 10. 2008].
- GEWÄSSERSCHUTZVERORDNUNG (1998): SR 814.201 Gewässerschutzverordnung (GSchV) vom 28. Oktober 1998 (Stand am 1. Juli 2008).– 60 S., Bern, [online verfügbar: <http://www.admin.ch/ch/d/sr/8/814.201.de.pdf>, 14. 10. 2008].
- HERZOG, F & W. RICHNER (Hrsg., 2005): Evaluation der Ökomaßnahmen – Bereich Stickstoff und Phosphor.– Schriftenreihe der FAL, Nr. 57, 132 S., Agroscope FAL Reckenholz, Zürich.
- NACHHALTIGKEITSVERORDNUNG (1998): SR 919.118 Verordnung über die Beurteilung der Nachhaltigkeit in der Landwirtschaft vom 7. Dezember 1998 (Stand am 26. Januar 1999).– 4 S., Bern, [online verfügbar: <http://www.admin.ch/ch/d/sr/9/919.118.de.pdf>, 14. 10. 2008].
- NIEVERGELT, J. (2002): Nitrat und Fruchtfolgen 20 Jahre lang beobachtet.– Agrarforschung, 9, 28–33, Posieux.
- PRASUHN, V. & R. MOHNI (2003): GIS-gestützte Abschätzung der Phosphor- und Stickstoffeinträge aus diffusen Quellen in die Gewässer des Kantons Bern.– Interner Bericht, Eidg. Forschungsanstalt für Agrarökologie und Landbau, Zürich-Reckenholz, 223 S., Zürich, [online verfügbar: <http://www.art.admin.ch/themen/00544/00813/index.html?lang=de>, 14. 10. 2008].
- PRASUHN, V. & E. SPIESS (2003): Regional differenzierte Abschätzung der Nitratauswaschung über Betriebszählungsdaten.– Bericht der BAL über die 10. Gumpensteiner Lysimetertagung vom 29.–30. April 2003, HBLA Raumberg, 55–57, Irdning.
- SPIESS, E. & V. PRASUHN (2006): Weniger Nitrat im Grundwasser dank Ökomaßnahmen.– Agrarforschung, 13, 4–9, Posieux.
- STAUFFER, W. & E. SPIESS (2005): Einfluss unterschiedlicher Nutzung und Düngung auf Sickerwassermenge und Nitratauswaschung.– Bericht der BAL über die 11. Gumpensteiner Lysimetertagung „Lysimetrie im Netzwerk der Dynamik von Ökosystemen“ vom 5. bis 6. April 2005, HBLFA Raumberg-Gumpenstein, 213–215, Irdning.

### Summary

In 1993, direct payments bound to ecological measures were introduced into Swiss agriculture. Within the framework of the evaluation of these ecological measures temporal trends of nitrate contents in groundwater and the reasons for declining contents were investigated in a case study. In the four geographic regions of the canton of Berne calculations with the substance flow model MODIFFUS



were carried out for the years 1990 and 1999. In a first step water flows were calculated for each grid cell of 1 ha in size by means of long-term average values. The following assessment of the amount of nitrate leaching was made by multiplication of a crop-specific standard value for nitrate leaching based on lysimeter trials and values from literature with correction factors for differences in the volume of percolating water, altitude, soil type, the quantity of animal manure, denitrification and drainage system.

Results show nitrate contents decreasing by 12 % on average. In the Central Plain and in the Prealps of the canton of Berne, nitrate contents declined considerably due to decreasing areas with cereals and potatoes and larger areas with temporary grassland and sugar beets. Apart from varying crop areas a lower nitrogen fertilizer use and more intensive cover cropping contributed most to decreasing nitrate contents in groundwater. Half of the reduction could be due to ecological measures.

Schlüsselwörter: Auswaschung, Grundwasser, Nitrat

Keywords: leaching, groundwater, nitrate

## 8. The Influence of Diffuse Pollution on Groundwater Content Patterns for the Groundwater Bodies of Germany

(R. KUNKEL,  
St. HANNAPPEL, H.-J. VOIGT, F. WENDLAND & R. WOLTER)

### 8.1. Introduction

The solution content of groundwater is determined by a variety of factors, such as the properties of the vadose zone and the groundwater bearing rocks as well as the hydrological and hydrodynamical conditions. Apart from these “natural” factors groundwater quality is influenced by anthropogenic inputs mainly from diffuse sources (e.g. agriculture, atmosphere). Whereas some of these inputs (e.g. pesticides) are a direct indicator of human impact, most inorganic contents occurring in the groundwater originate both from natural and anthropogenic sources. This makes it difficult to decide whether the observed groundwater concentration pattern in a certain area is influenced by diffuse pollution intakes or still represents an (almost) natural state.

Because of the omnipresence of human impacts especially in high developed countries like Germany, strictly “natural” groundwater occurs at best at regionally limited locations. In particular, groundwater from aquifers taking part in the active water cycle (surface-near aquifers), in most cases those aquifers which are also used for water supply, are influenced since decades and centuries by anthropogenic activities, e.g. soil cover induced changes of percolation water quality or fertilizer inputs. In Germany, this situation is true for more than 99% of the federal territory.

Against this background a pragmatically understanding of the term “natural background value”, which considers the human impacts on groundwater to a certain degree as inevitable, needs to be used. Therefore, we define “natural background value” as “the concentration of a given element, species or chemical substance present in solution which is derived by not significant anthropogenic influenced processes from geological, biological or atmospheric sources”. There is still some “mixing” between natural and anthropogenic influences because e.g. groundwater from areas under agricultural use or from areas where land cover changes occurred over the last centuries is regarded as being “natural” (V. SCHENK, 2003). This “definition of background” is different to other definitions like geochemical background, ambient or baseline background and pre-industrial background since these terms rely much more to purely natural conditions (C. REIMANN & R. G. GARRETT, 2005).

Diffuse anthropogenic intakes usually lead to an increase of groundwater solution content. Thus, by looking at a number of groundwater quality data, a number of typical groundwater parameters like Na, K, pH, SO<sub>4</sub>, NH<sub>4</sub>, NO<sub>3</sub> will display raised concentrations. To quantify the influence of diffuse pollution intakes on the groundwater solution concentration patterns, a procedure has been developed, which is able to separate the “natural” groundwater concentration pattern from the influence of diffuse pollution intakes to groundwater. This is done by representing the observed concentration distribution of a certain groundwater parameter by two distribution functions, describing the natural and the influenced component. The natural situation as well as the influence of diffuse pollution is characterized by confidence intervals of the individual distribution function (F. WENDLAND et al., 2005).

### 8.2. Method

Due to the fact that in Germany strictly “natural” groundwater taking place in the active water cycle is practically not present anymore, the solute content of a typical groundwater is usually affected both by natural and anthropogenic factors. Anthropogenic inputs of a certain substance of content into groundwater lead to a concentration increase of this substance. Because of the variability both of natural and anthropogenic influences it is not possible to separate these two influencing factors just by looking at one single groundwater sample (R. SCHLEYER & H. KERNDORFF, 1992). Therefore, it is necessary to evaluate a number of groundwater samples from different locations within a homogeneous hydrogeological unit.

Because of the natural variability concentration measurements of a certain groundwater parameter from a number of sampling point within a homogeneous groundwater unit lead to a concentration distribution. In case no anthropogenic intakes to the groundwater are present, the shape of this distribution is determined exclusively by the natural variability of reactive exchange of groundwater with the aquiferous rocks. Typically, right-skewed asymmetric concentration distributions were observed in these cases. Several statistical tests performed in this study showed that the shape of the concentration profiles can be described by lognormal distributions (R. KUNKEL et al., 2004). If the whole aquifer is ubiquitarily affected by anthropogenic intakes the concentration profile of a certain parameter is modified. Because the concentration rise of the anthropogenic intakes is independent of the natural solution content of the groundwater, the concentration distribution of the ubiquitarily affected aquifer can be regarded as a result of the convolution of the natural content distribution and the distribution of anthropogenic intakes (F. WENDLAND et al., 2005). Compared to the individual contributing concentration distributions the convoluted influenced distribution is broadened and shifted toward higher concentrations. If the evaluated monitoring data contain both natural, i.e. unaffected, and influenced groundwater samples, the observed concentration profile consists of a superposition of these two components. In this case the observed concentration distribution (fobs) can be described as the sum of two distribution functions, representing the natural and the influenced component:

- Evaluation of the observed concentration profile allows a separation of the two components and the identification of both the natural and the influenced component. However, the shape of the two distribution functions is not known from a priori. An analysis of the observed concentration patterns using statistical tests show that both component distributions can be satisfyingly expressed by lognormal distributions (R. KUNKEL et al., 2004).

- Characterization of natural groundwater conditions as well as the effects of anthropogenic impacts can be done by any two independent parameters characterizing the distribution function of the components. For the lognormal distribution, median and variance are the most common parameters given. However, these parameters don't give a very transparent measure to specify the groundwater conditions. Therefore, the distribution is characterized by a concentration range defined by the 10% and the 90% percentiles of the concentration distribution.

### 8.3. Data base

Natural groundwater quality has been derived for 17 lithogenetical different groundwater typologies occurring throughout Germany with high relevance for water supply (e.g. limestones, sandstones, loose-rock sediments). Before assessing natural groundwater concentrations the individual heterogeneous data sets provided by the Federal States needed to be joined together in one data base with unified structure and referenced to the groundwater typologies. In addition, a number of consistency checks, e.g. the elimination of analyses with incorrect ion balances, salt affected stations and elimination of time series by median averaging had to be performed. At the end, a total data from ca. 25,000 monitoring stations with one representative groundwater analysis each were used for the analysis (for details see R. KUNDEL et al., 2004). For each of the different groundwater bodies 30 to 40 hydrochemical (inorganic) parameters were evaluated including redox parameters, summary parameters, main substances, adjoining substances and trace elements. The number of evaluated observations for each parameter in each typology was in the range between 5,000 and about 25,000, allowing a statically relevant analysis.

### 8.4. Selected results

According to the procedure described above, the ranges of natural groundwater concentrations in the groundwater typologies occurring in Germany were identified for all 30 (to 40) parameters. In the following sections selected results for different parameters and different groundwater typologies are presented and discussed.

#### 8.4.1. Potassium

As an example, fig. 8.1 shows the potassium concentrations in the Triassic limestones and the loose rock sediments of the North German plane (depths < 10 m). In both cases the observed distributions consist of one peak at about the same concentration (~ 2 mg K/l). The width of the distributions, however, is quite different: the potassium concentration range in the loose rock sediments is almost twice the range of the Triassic limestones potassium concentrations.

As can be seen from the correlation coefficients ( $r^2$ : ~ 0.97), the observed concentration distributions can be separated very satisfyingly into a natural and influenced component. As a typical behavior, obtained also for most other evaluated hydrochemical parameters (e.g. Na, Cl,  $\text{SO}_4$ ,  $\text{HCO}_3$ , DOC), the natural component is dominating while the influenced component contributes as a broad background.

The natural groundwater component of the potassium concentration distribution in the Triassic limestones shows a relatively small scatter in the range between 0.6 and 2.1 mg K/l. This can be addressed to the lack of potassium containing minerals. An influenced component is obvious in a broad, high concentration range. This indicates the impact of potassium containing fertilizers, which has also been confirmed by regional water authorities.

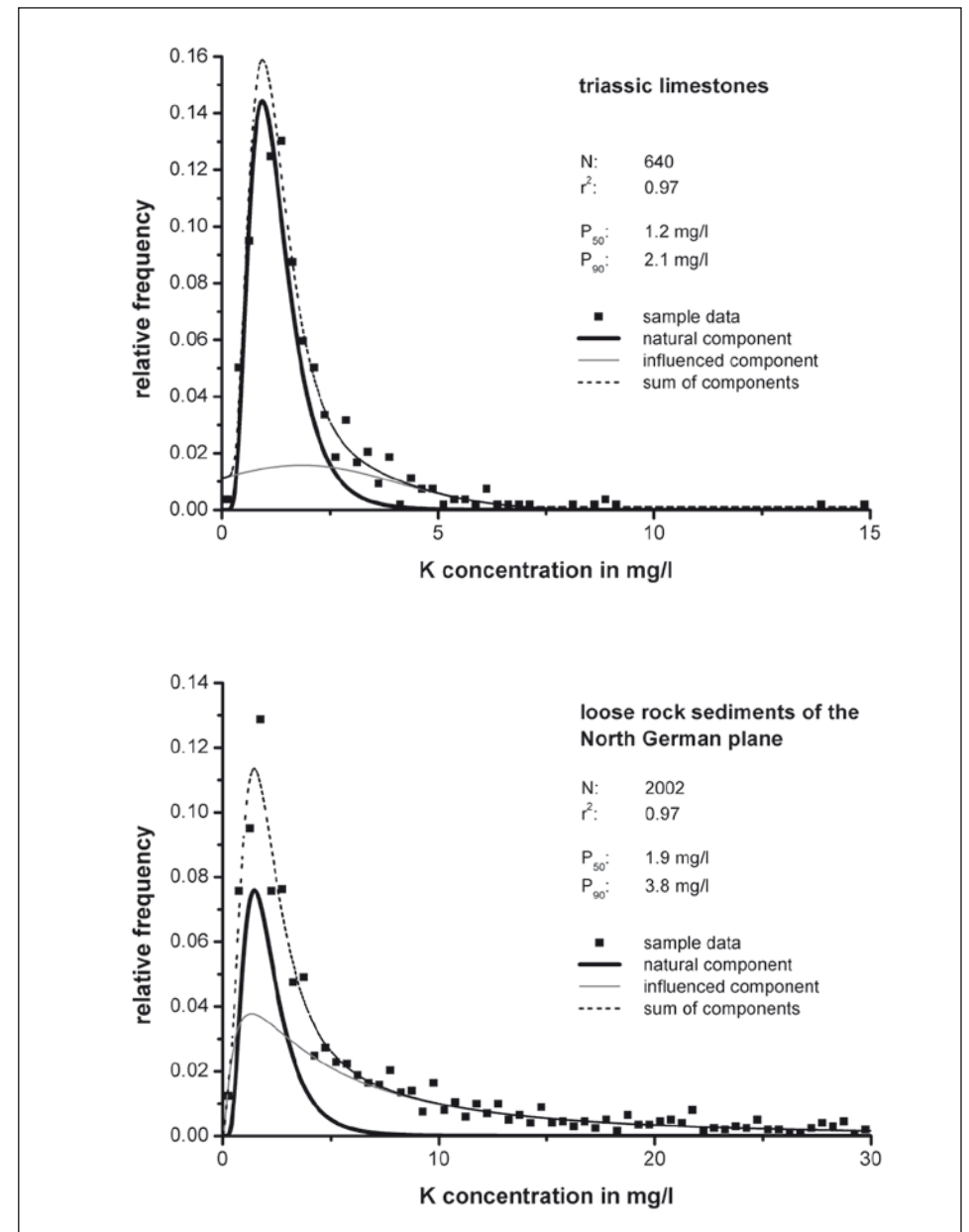


Fig. 8.1: Observed frequency distributions as well as the natural and influenced components of the potassium concentrations (K in mg/l) in the Triassic limestones (above) and the loose rock sediments of the North German plane (below). N – number of data points,  $r^2$  – coefficient of determination,  $P_{50}$  – median value,  $P_{90}$  – 90 percentile.  
 Beobachtete Häufigkeitsverteilungen sowie die natürlichen und beeinflussten Komponenten der Kaliumkonzentrationen (K in mg/l) in den Muschelkalk- (oben) und den Norddeutschen Lockergesteinsaquiferen (unten). N – Anzahl Beobachtungen,  $r^2$  – Bestimmtheitsmaß,  $P_{50}$  – Median,  $P_{90}$  – 90 Perzentil.

The range of the natural potassium concentrations in the groundwater of the loose rock sediments is broader compared to the natural groundwater concentrations in the Triassic limestones, which is a consequence of the more heterogeneous minerals in this typology. The portion of the influenced component is relatively high. Here two natural factors, i.e. the rise of the high mineralized waters from deeper aquifers and the influence of sea water intrusion in the north and the western part of the groundwater unit as well as one anthropogenic factor, the impact of potassium containing fertilizers are determinative.

#### 8.4.2. Nitrate

Compared to the other groundwater parameters evaluated in this study, nitrate is an exception. The geogenic fraction of nitrate in groundwater is low. The reason for this is that all nitrate minerals are very water soluble, so that in the course of geological history no nitrate rocks were formed from which nitrate could be solved by circulating water. The most important source of nitrate in groundwater are fertilizers and to a minor extent atmospheric nitrate inputs. Many studies have shown, that nitrate concentrations above 5 mg NO<sub>3</sub>/l are a reliable indication of anthropogenic influences.

Figure 8.2 shows the observed nitrate concentrations distributions in the Jurassic limestones and the loose rock sediments of the North German plane. The nitrate concentrations in the Jurassic limestones cover a wide range between 0 and about 80 mg NO<sub>3</sub>/l. Two widespread components may be identified. Even the natural display relatively large concentrations, which is due to the presence of typically oxidized groundwater conditions. The second, influenced, component dominates the observed concentration pattern and reaches to concentrations up to 75 mg NO<sub>3</sub>/l. This behavior can be addressed to the presence of groundwater conditions, which are mostly influenced by nitrate inputs from agriculture. Nevertheless, it can be concluded that natural nitrate concentration below about 20 mg NO<sub>3</sub>/l can be regarded as being natural for this groundwater typology.

In other groundwater typologies, however, nitrate can be degraded to molecular nitrogen by microbial controlled redox reactions. If a groundwater is largely free of dissolved oxygen, certain micro organisms are able to satisfy their oxygen demand by reducing nitrate. An important prerequisite for this reaction is the presence of organic carbon compounds or pyrite (FeS<sub>2</sub>) in the aquifer acting as reducing substances. As could be shown by the example of the iron concentration distributions, this hydrochemical groundwater condition may occur in the loose rock sediments of the North German plane. The observed nitrate concentrations show that a component at very small concentrations dominates the observed concentration pattern by far. As most of the samples fall into the lowest class it may be tempting to conclude that the groundwater in these aquifers is almost free from anthropogenic nitrate inputs, thus representing “natural” groundwater concentrations.

However, this interpretation is misleading. Due to denitrification processes in reduced aquifers, it may be possible that a groundwater appears to be almost nitrate free, although the nitrate inputs with the percolation water were high. Hence, the range of nitrate contents in the loose rock sediments of the Saale glaciation reflects on the hydrogeochemical conditions in the aquifer, which result in “natural” nitrate concentrations below 1 mg NO<sub>3</sub>/l.

#### 8.5. Discussion and Conclusions

Natural groundwater concentrations were defined for groundwater typologies occurring in Germany, i.e. groups of aquifers, which were regarded as homogenous according to their petrographical and hydrodynamical properties using a large number

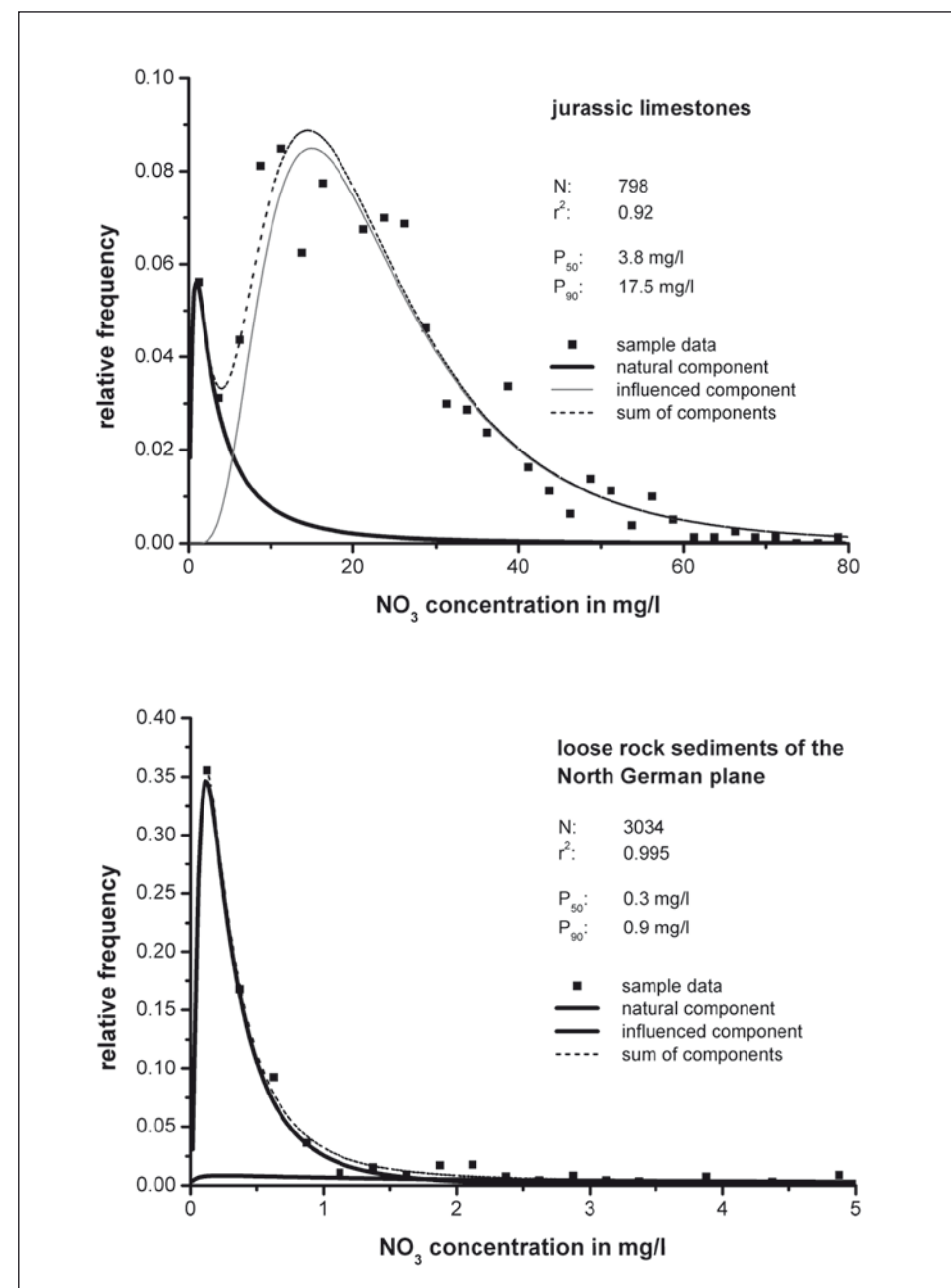


Fig. 8.2: Observed frequency distributions as well as the natural and influenced components of the nitrate concentrations (NO<sub>3</sub> in mg/l) in the Jurassic limestones (above) and the loose rock sediments of the North German plane (below). Abbreviations see fig. 8.1. Beobachtete Häufigkeitsverteilungen sowie die natürlichen und beeinflussten Komponenten der Nitratkonzentrationen (NO<sub>3</sub> in mg/l) in den verkarsteten Jurakalk- (oben) und den Norddeutschen Lockergesteinsaquiferen (unten). Abkürzungen siehe Fig. 8.1.

of groundwater monitoring data provided by the Federal States of Germany. The basic approach of separating the natural and influenced component from observed groundwater concentration distributions based on statistical distribution functions was applied consistently to 30 to 40 investigated groundwater parameters in the investigated groundwater typologies. It could be shown, that the natural groundwater concentration ranges differ considerably amongst the investigated groundwater typologies, reflecting the different properties of the vadose zone and the groundwater bearing rocks as well as the hydrological and hydrodynamic conditions. The study showed that natural groundwater concentrations should not be defined based on fixed threshold values as being "valid for the whole groundwater". Instead, the results study showed the importance to assess natural groundwater concentrations according to individual groundwater typologies. In this sense, this study contributes to the definition of the "good groundwater chemical status" according to the requirements of the EU Water Framework Directive (DIRECTIVE 2000/60/EC).

### Summary

Commissioned by Germany's Working Group of the Federal States on Water Problems (LAWA) the authors developed a procedure to define natural groundwater conditions from groundwater monitoring data. The distribution pattern of a specific groundwater parameter observed by a number of groundwater monitoring stations within a petrographical comparable groundwater typology is reproduced by two statistical distribution functions, representing the "natural" and "influenced" component. The range of natural groundwater concentrations is characterized by confidence intervals of the distribution function of the natural component. The applicability of the approach was established for 17 hydrochemical different groundwater typologies occurring throughout Germany. Based on groundwater monitoring data from ca. 26,000 groundwater monitoring stations, 40 different hydrochemical parameters were evaluated for each groundwater typology. For all investigated parameters the ranges of natural groundwater concentrations have been identified. According to the requirements of the EU Water Framework Directive (article 17) this study is a basis for the German position to propose criteria for assessing a reference state for a "good groundwater chemical status".

### References

- DIRECTIVE 2000/60/EC (EU Water Framework Directive 2000): Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy.– Official Journal of the European Communities, L 327, 72 p., Brussels.
- KUNKEL, R., H. J. VOIGT, F. WENDLAND & S. HANNAPPEL (2004): Die natürliche, ubiquitär überprägte Grundwasserbeschaffenheit in Deutschland.– Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Umwelt/Environment, Bd. 47, Jülich.
- REIMANN, C. & R. G. GARRETT (2005): Geochemical background: Concept and reality.– Science of the Total Environment, 350, 12–27.
- SCHENK, V. (2003): Natürliche Grundwasserbeschaffenheit. Definition und Abgrenzung gegen verwandte Begriffe.– Grundwasser, 8 (2), 122–124, Hannover.
- SCHLEYER, R. & H. KERNDORFF (1992): Die Grundwasserqualität westdeutscher Trinkwasserressourcen.– 245 p., Weinheim (Verlag VCH).
- WENDLAND, F., S. HANNAPPEL, R. KUNKEL, R. SCHENK, H. J. VOIGT & R. WOLTER (2005): A procedure to define natural groundwater conditions of groundwater bodies in Germany.– Water Science and Technology, 51 (3–4), 249–257, London (IWA Publishing).

### Zusammenfassung

Im Rahmen eines von der Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) beauftragten Vorhabens wurde ein Verfahren entwickelt, mit dem die natürliche Grundwasserbeschaffenheit abgeleitet werden kann. Für einen bestimmten Grundwasserinhaltsstoff wird hierzu dessen Konzentrationsverteilung, die sich aus der Auswertung einer größeren Anzahl von Entnahmepunkten in einer petrographisch homogenen Grundwassertypologie ergibt, durch zwei statistische Verteilungsfunktionen, welche die „natürliche“ und die „beeinflusste“ Komponente repräsentieren, beschrieben. Die Anwendbarkeit des Ansatzes wurde flächendeckend für Deutschland für 17 Grundwassertypologien demonstriert. Auf Grundlage von Grundwasserbeschaffenheitsdaten von ca. 26.000 Entnahmestellen wurde die natürliche Grundwasserbeschaffenheit für insgesamt 40 hydrochemische Parameter abgeleitet und als Konzentrationsspannbreiten ausgewiesen. Die Ergebnisse dieser Studie bilden eine Basis zur im Artikel 17 der EU-Wasserrahmenrichtlinie erforderlichen Definition des „guten Grundwasserstatus“.

Keywords: groundwater condition, groundwater quality, diffuse pollution, monitoring  
Schlüsselwörter: Grundwasserbeschaffenheit, Grundwasserqualität, Stoffeintrag, Monitoring

## 9. Identification of Denitrification by Measurement of N<sub>2</sub>, Ar and N<sub>2</sub>O as Aid for the Modelling of the Nitrate Transport in Groundwater (W. WALTHER, Ch. KONRAD, Th. REIMANN & R. WELL)

### 9.1. Introduction

Many catchment areas of groundwater resources are agriculturally used in Europe. If below agriculturally used soils low concentrations of nitrate are measured in groundwater and in the raw water of a waterworks then a process of nitrate elimination as denitrification is the main reason for this favourable situation. For water supply frequently the following questions are important:

- When will raised nitrate concentrations be expected in the wells of the waterworks?
- How will measures, which decrease the emission of nitrate from the soil zone, influence the water quality at different points in the groundwater body?

Models, that depict the water and nitrogen cycle of the unsaturated and saturated zone are valuable tools for planning soil and water management. The following conditions should be considered when applying such models:

- realistic simulation of the water balance and groundwater flow,
- sufficient knowledge about the kinetics of nitrogen metabolism (equation, characteristic values of reaction) and about their distribution in the subterranean space.

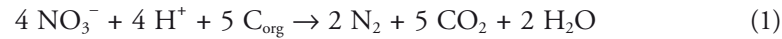
The knowledge about the metabolism often does not exist at all or is only inadequately available. In such cases, the kind of kinetics and their characteristics need to be based on assumptions.

In this contribution, the application of the indirect method for the identification of denitrification will be presented. In addition, the article will explain the use and the meaning of determining the gases N<sub>2</sub>, Ar and N<sub>2</sub>O in groundwater. The investigations were carried out in three North German aquifers, which belong to the Pleistocene formation, and which are hydrogeologically different. The groundwater catchment areas are used for the drinking water extraction.

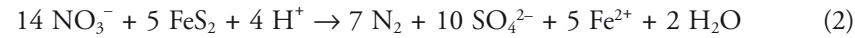
## 9.2. Elimination of nitrate in the groundwater

Several types of processes may participate in the decrease of nitrate in groundwater. In the North German unconsolidated sediments, the denitrification is the most effective process according to own investigations, W. WALTHER (1999), M. PÄTSCH (2007). Both the heterotrophic denitrification, equation (1), and the autotrophic denitrification, equation (2), were observed. The latter process is encountered most frequently.

Heterotrophic:



First partial reaction of the autotrophic denitrification:



The denitrification occurs in steps from  $\text{NO}_3^-$  over  $\text{NO}_2$ ,  $\text{NO}^-$  and  $\text{N}_2\text{O}$  up to the molecular nitrogen  $\text{N}_2$  if the reaction can progress completely (e.g. R. WELL et al., 2005). Organically bound carbon or sulphidic compounds act as reducing agents. The agents are distributed as fine particles in the hydraulically active parts of the aquifers as sand layers or at the edges of layers as clay which are only slight permeable.

## 9.3. Direct and indirect method to identify the denitrification

For the modelling of the transport it is necessary to mark off the zones of the aquifer in which a denitrification occurs. On the basis of this knowledge the characteristic values of the reactions, e.g. of equation (3), reaction of 1<sup>st</sup> order, shall be assigned to the cells of the three-dimensional model net.

$$c(t) = c_0 \cdot e^{(-\lambda \cdot t)} \quad (3)$$

with:

$c(t)$  = concentration at time  $t$ ,  
 $c_0$  = concentration at time  $t_0$  = starting time,  
 $\lambda$  = reaction constant of denitrification.

Different ways for the identification of denitrification are possible. It is important that as far as possible gauging stations of groundwater quality are included in the investigation that consider the three-dimensional subterranean space of the groundwater body which is object of modelling.

A step-by-step procedure is reasonable. In a first step dates of the water quality are mostly used as indication for a denitrification, which were either already measured or still need to be measured. As indications are to be named:

- No denitrification is expected at oxygen contents  $\geq 5 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$  in the pore water.
- If the concentration of  $\text{O}_2$  and  $\text{NO}_3^-$  is low or zero, a rise of  $\text{HCO}_3^-$  indicates a heterotrophic denitrification according to equation (1), in comparison with gauging stations in the closer neighbourhood at which no denitrification occurs.
- A rise of the concentrations of  $\text{SO}_4^{2-}$ , partly  $\text{Fe}^{2+}$  and  $\text{Mn}^{2+}$  can be an indicator for autotrophic denitrification, according to equation (2).

These dates of water quality do not supply, however, any secure proof since the concentrations can be influenced by several other processes in the aquifer.

In a second step, measurements of the gases  $\text{N}_2$ , Ar and  $\text{N}_2\text{O}$  should be carried out at the gauging station, at which a denitrification is expected. In the atmosphere, the ratio of  $\text{N}_2/\text{Ar}$  is fixed at 83. In rainwater and in groundwater at the equilibrium with the atmosphere the ratio of the gases  $\text{N}_2$  and Ar lies between 37.1 and 38.6 (Fig. 9.1).

If the denitrification runs in the groundwater,  $\text{NO}_3^-$  is converted in parts or fully to  $\text{N}_2$ . Due to this fact, the increase of  $\text{N}_2$  causes an increase of the ratio of  $\text{N}_2/\text{Ar}$ . The concentration of Ar remains unchanged in this case (G. BLICHER-MATHIESSEN et al., 1998). The difference between the ratio of  $\text{N}_2/\text{Ar}$  calculated from measured values and the ratio that is determined by the temperature-dependent balance with the atmosphere is called "excess nitrogen". The determination of the ratio  $\text{N}_2/\text{Ar}$  and of the "excess nitrogen" is a relatively secure proof of whether denitrification occurs on the flow path between the groundwater table and the screen of the gauging station (C. KONRAD, 2007).

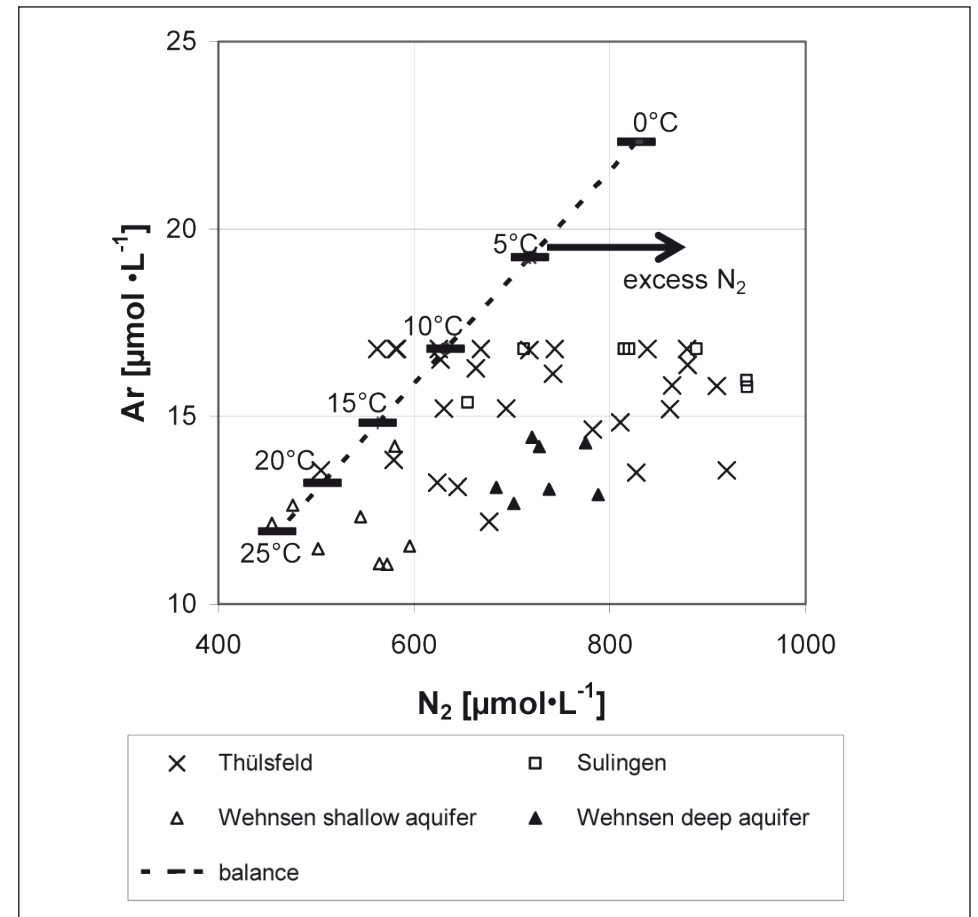


Fig. 9.1: Ratio of the measured concentrations of  $\text{N}_2$  and Ar in the investigation areas Thülsfeld, Sulingen and Wehnsen.

Verhältnis der gemessenen Konzentrationen von  $\text{N}_2$  und Ar in den Untersuchungsgebieten Thülsfeld, Sulingen und Wehnsen.

If, for example,  $\text{NO}_2^-$  and the gas  $\text{N}_2\text{O}$  are measured, this is an indication of an incompletely running denitrification in the local neighbourhood of the gauging station. The gas  $\text{N}_2\text{O}$  may then also occur when the concentration of oxygen is  $> 5 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$  in the pore water. But the relationship between  $\text{N}_2\text{O}$  and  $\text{O}_2$  is not completely clear yet.

#### 9.4. Application of the methods

In the areas Thülsfeld, Sulingen and Wehnsen the hydraulically active zones consist of sand formations. The hydraulic conductivity lies between  $10^{-6}$  and  $10^{-2} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . The areas Sulingen and Wehnsen are vertically subdivided into storeys through silt and clay. The share of the agriculturally used area varies between 56% in the area Thülsfeld and 90% in Sulingen. The residual part to 100% is used mainly by forests.

In these three areas, oxygen lies between  $< 0.1$  and  $10.9 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ . That means, an oxidic zone is to be encountered in the upper part of the aquifer followed from a non-oxidic zone. The reactive material is very heterogeneously distributed in the hydraulically active sands. According to that distribution, the nitrate concentration changes on a narrow distance between low and high values. The span is between  $< 0.1$  and  $298 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ . Denitrification was observed in the areas Thülsfeld and Sulingen up to depths of about 40m and in Wehnsen up to a depth of 80m below ground.

The procedure defining the zones with denitrification will be demonstrated at the catchment area of the well field A of the waterworks Thülsfeld in an exemplary pattern. Sixteen observation wells were selected in such a manner that the area and the edges of the area were grasped:

- On the basis of the dates of water quality as a first step a “preassessment” was carried out, whether a denitrification is possible on the flow path onto the screen of the gau-

Tab. 9.1: Investigation area Thülsfeld, observation wells, preassessment on denitrification, ratio  $\text{N}_2/\text{Ar}$ , concentration of  $\text{N}_2\text{O}$ . <sup>1)</sup> FUK – trailing edge of the screen in meter altitude above sea level (m a.s.l.); the ground level lies between 21 and 42 m a.s.l.; <sup>2)</sup> presumed reaction in accordance with dates of the groundwater quality; <sup>3)</sup> ratio  $\text{N}_2/\text{Ar} = 37.6$  at  $10^\circ\text{C}$  in balance with the atmosphere; <sup>4)</sup> average of concentration; 1–7 – numbering of columns.  
 Untersuchungsgebiet Thülsfeld, Grundwassermessstellen, Vorprüfung auf Denitrifikation,  $\text{N}_2/\text{Ar}$ -Verhältnis, Messwerte  $\text{N}_2\text{O}$ . <sup>1)</sup> FUK – Filterunterkante in m NN; die Geländehöhe liegt zwischen 21 und 42 m; <sup>2)</sup> eingeschätzte Art der Denitrifikation gemäß der Daten der Beschaffenheit des Grundwassers; <sup>3)</sup> Verhältnis  $\text{N}_2/\text{Ar} = 37,6$  bei  $10^\circ\text{C}$  im Gleichgewicht mit der Atmosphäre; <sup>4)</sup> mittlere Konzentration; 1–7 – Spaltennummerierung.

Observation well	FUK <sup>1)</sup> [m NN]	Denitrification according to water quality <sup>2)</sup>	$\text{N}_2/\text{Ar}$ <sup>3)</sup> [-]	Denitrification on flow path according to $\text{N}_2/\text{Ar}$	$\text{N}_2\text{O}$ <sup>4)</sup> [ $\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$ ]	Denitrification near the screen
1	2	3	4	5	6	7
248	24.95	no	41.84	no	48.21	exist
336	8.24	auto-, heterotrophic	67.82	exist	0.63	low
353	7.47	heterotrophic	33.47	no	0.66	low
368	11.31	possible	87.24	exist	0.79	low
369	22.13	no	37.20	no	21.01	exist
372	10.64	possible	37.92	no	4.22	low

- After this “preassessment” the gases  $\text{N}_2$ , Ar and  $\text{N}_2\text{O}$  were measured. The table contains the ratio  $\text{N}_2/\text{Ar}$  in column 4. The ratio in the balance is equal to 37.6 ( $10^\circ\text{C}$ ). The “preassessment” written in column 3 could not be confirmed due to the raised  $\text{N}_2/\text{Ar}$  ratio for three stations, see stations 353 and 372 as examples. Column 5 states the new assessment.
- In 12 of 16 observation wells  $\text{N}_2\text{O}$  was measured, column 6. In six of 12 observation wells higher concentrations were observed. That means that an incomplete denitrification runs in the local neighbourhood of the screen of the observation wells. As an example, see stations no. 248 and 369. Column 7 contains the results of the appraisal.
- In observation wells no. 248 an oxygen content of  $6.8 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$  was measured and in station no. 369 a content of  $8.3 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$  in the pore water. Column 5 shows that no denitrification was assumed. In spite of that higher  $\text{N}_2\text{O}$  contents were observed. Therefore, it must be presumed that in the local neighbourhood of the screen an incomplete denitrification occurs, in spite of raised oxygen content.

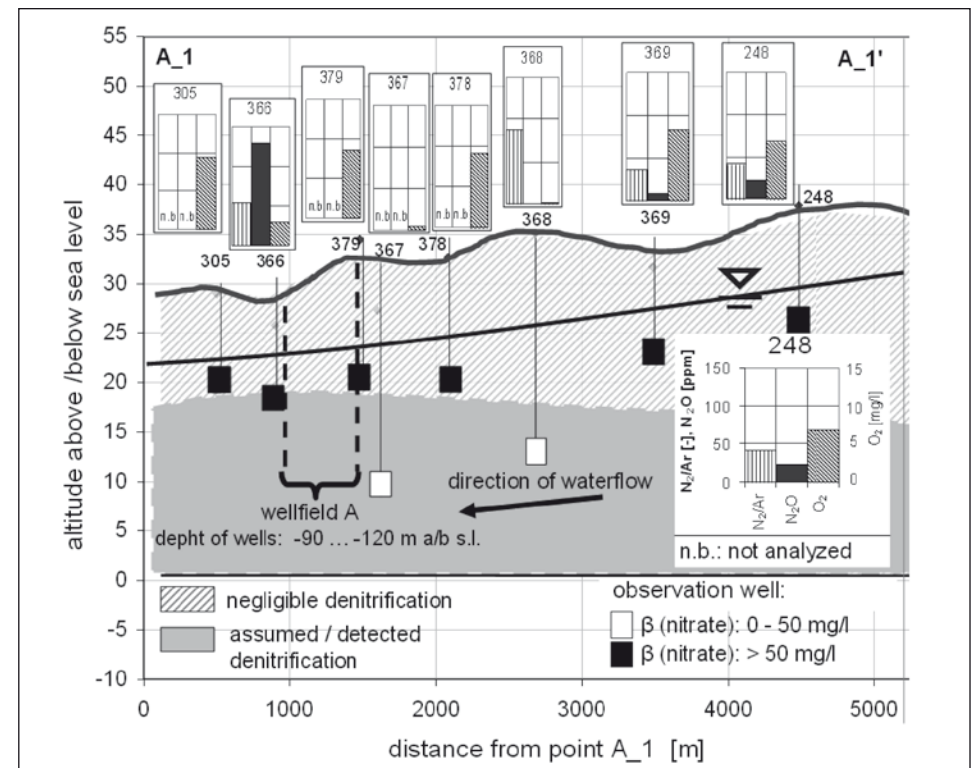


Fig. 9.2: Investigation area waterworks Thülsfeld, abstraction field A, cross section A<sub>1</sub>–A<sub>1</sub>’, identification of zones with denitrification.  
 Untersuchungsgebiet Wasserwerk Thülsfeld, Fassung A, Schnitt A<sub>1</sub>–A<sub>1</sub>’, Abgrenzung denitrifizierender Zonen.

Figure 9.2 shows an abridged cross section through the catchment area in north-south direction, laying at the west edge. In the cross section the level of depth of the screens of eight stations is indicated. The screens marked in black indicate nitrate contents  $> 50 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$  while the white marked screens show contents between 0 and  $50 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ . With the help of the dates of the water quality and by the measurements of the gases, the zones with and without denitrification were separated from each other. The zone without or with just insignificant denitrification lies about 10 to 20 m below ground. There, either too high oxygen contents can be observed or the reactive material is consumed by former denitrification.

In detail fig. 9.2 shows the following results:

- Above each observation well, a bar graph is drawn for the ratio  $\text{N}_2/\text{Ar}$ ,  $\text{N}_2\text{O}$  and  $\text{O}_2$ . Only for the observation wells no. 366, 368, 369 and 248 the ratio  $\text{N}_2/\text{Ar}$  and the concentration of  $\text{N}_2\text{O}$  could be determined.
- For the observation wells 305, 379, 378, 369, 248 an oxygen content  $> 5 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$  was observed, so that no denitrification can be expected. At contents of  $\text{O}_2 > 5 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$  the ratio  $\text{N}_2/\text{Ar}$  is near the balance ratio and the value of the “excess dinitrogen” is close to zero. The value of excess dinitrogen is not shown here.
- On the one hand, the bar graph for the observation wells 366, 369 and 248 show due to the raised ratio of  $\text{N}_2/\text{Ar}$  and the perceptible concentration of  $\text{N}_2\text{O}$ , that in the flow path to the screen of the observation well the denitrification runs obviously more or less incompletely. On the other hand, nitrate values may still be  $> 50 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ . This indicates that the local decomposition process is not able to completely convert the nitrate flux coming from the soil into the gaseous form.

## 9.5. Conclusion

Models that depict the metabolism and transport of nitrate in a groundwater catchment area of a waterworks are still seldom built up by the enterprises of water supply until today. For the application of a model, it is necessary to know how the denitrification is distributed in the subterranean space. The zones with denitrification can be surely determined by investigations about the  $\text{N}_2/\text{Ar}$  ratio, excess dinitrogen and about the occurrence of  $\text{N}_2\text{O}$  in a screen field of a observation well in the deeper groundwater. Further information on the nitrate metabolism as kinetic characteristics can be derived with the aid of these data. Such investigations were carried out up to now mainly from scientifically oriented institutions. The determination of these parameters should become an indispensable aid during the development of transport models in future.

### Summary

Models that replicate the metabolism and transport of nitrate in groundwater can be used as decision aid for the application of agricultural cultivation forms with low emissions. One prerequisite for model application is the knowledge about the distribution of the denitrification in the subterranean space. Dates of the groundwater quality are frequently used for the delimitation of the zones with denitrification. These dates provide indications but without secure proof. The determination of the ratio  $\text{N}_2/\text{Ar}$  and of the nitrogen excess investigated for the screen field of a gauging station is a secure way. Then on this basis, the cells of a model net can be occupied with information about the reaction. The ratio  $\text{N}_2/\text{Ar}$  is shown for three aquifers located in Northern Germany. At one catchment area, the application of two methods to identify denitrification is demonstrated.

## References

- BLICHER-MATHIESEN, G., G. W. McCARTY & L. P. NIELSEN (1998): Denitrification and degassing in groundwater from dissolved dinitrogen and argon.– *Journal of Hydrology*, **208**, 16–24.
- KONRAD, C. (2007): Identifikation des Umsatzes von Stickstoff in drei pleistozänen Aquiferen Norddeutschlands auf der Grundlage von Studien im Labor und im Gelände.– *Dissertation*, 157 p., Technische Universität Dresden, Institut für Grundwasserwirtschaft.
- PÄTSCH, M. (2007): Analyse des Depots des Nitratumsatzes und dessen Heterogenität im quartären Grundwasserleiter des Wasserwerkes Thülsfeld/Emsland. Berücksichtigung bei der Modellierung des Transportes.– *Dissertation*, 285 p., Technische Universität Dresden, Institut für Grundwasserwirtschaft.
- WELL, R., H. HÖPER, O. MEHRANFAR & K. MEYER (2005): Denitrification in the saturated zone of hydromorphic soils – laboratory measurement, regulating factors and stochastic modelling.– *Soil Biology and Biochemistry*, **37**, 1822–1836.
- WALTHER, W. (1999): *Diffuser Stoffeintrag in Böden und Gewässer*.– 310 p., Stuttgart, Leipzig (Teubner Verlag).

## Zusammenfassung

Modelle, die den Umsatz und Transport von Nitrat im Grundwasser nachbilden, können als Entscheidungshilfe für den Einsatz emissionsarmer Bewirtschaftungsformen landwirtschaftlich genutzter Böden herangezogen werden. Eine Voraussetzung sind Kenntnisse über die Verteilung der Denitrifikation im unterirdischen Raum. Zur Abgrenzung der Zonen mit Denitrifikation werden häufig Daten der Wasserbeschaffenheit herangezogen. Sie liefern zwar Indizien aber keinen sicheren Nachweis. Die Ermittlung des  $\text{N}_2/\text{Ar}$ -Verhältnisses und des Stickstoffüberschusses für den Filterbereich einer Messstelle ist ein sicherer Weg. Auf dieser Grundlage können die Zellen eines Modellnetzes dann mit Information über die Denitrifikation belegt werden. Für drei Aquifere Norddeutschlands wird das Verhältnis von  $\text{N}_2/\text{Ar}$  gezeigt. An einem Gebiet wird dann der Einsatz von zwei Methoden zur Identifikation der Denitrifikation vorgestellt.

## Acknowledgements

We would like to thank the Wasserverband Peine, the Oldenburgisch-Ostfriesischer Wasserverband, the Wasserverband Sulinger Land and the state of Lower Saxony, Germany, for their financial support of this studies.

Keywords: agriculture, groundwater, denitrification, identification, model of transport  
 Schlüsselwörter: Landwirtschaft, Grundwasser, Denitrifikation, Identifikation, Transportmodellierung

## 10. Heterogenität des Abbaus von Nitrat im Grundwasser – Berücksichtigung bei der Modellierung

(M. PÄTSCH & W. WALTHER)

### 10.1. Einleitung

Um die Belastungen der Gewässer durch die Landwirtschaft zu reduzieren, sind Maßnahmen auf der administrativen wie auf der technischen Seite notwendig. Die Voraussetzung für ein Gebietsmanagement und damit z. B. die Ausweisung der Vulnerabilität von bewirtschafteten Flächen, ist die Kenntnis der Einträge, der Transportwege und -zeiten sowie der Art und des Potenzials von Umsatzprozessen. Hier ist der Wissensstand jedoch häufig noch zu gering, um gesicherte Prognosen für die Wasserwirtschaft abzugeben.

Das Institut für Grundwasserwirtschaft hat in Zusammenarbeit und mit Unterstützung durch den Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverband (OOWV) in einem Einzugsgebiet eines Wasserwerkes in Norddeutschland Untersuchungen zur Art des Umsatzes von Nitrat im Grundwasser, zum Umsatzpotenzial und zu seiner Verteilung im Grundwasserleiter ausgeführt (W. WALTHER et al., 2002, M. PÄTSCH et al., 2004, M. PÄTSCH, 2007, H. OSTER & M. PÄTSCH, 2001).

## 10.2. Untersuchungsgebiet

Das Untersuchungsgebiet befindet sich in der Region Cloppenburg-Vechta, einer Region mit intensiver Pflanzenproduktion und Tierhaltung (Fig. 10.1). Dies führt unter anderem zu hohen Stickstoffemissionen und in der Folge davon zu Nitratkonzentrationen zwischen  $<1\text{--}300\text{ mg/l NO}_3^-$  im Grundwasser. Nach etwa 40 Jahren intensiver Bewirtschaftung reicht die Nitratfront zum gegenwärtigen Zeitpunkt bis in eine Tiefe von bis zu 30 m unter Geländeoberkante (GOK). Bis zur Vertiefung im Zuge einer Revision der Entnahmebrunnen im Jahr 2002 enthielt das Rohwasser der Brunnen im Schnitt weniger als  $1\text{ mg/l NO}_3^-$  (Entnahme von Wasser aus 30–80 m unter GOK).

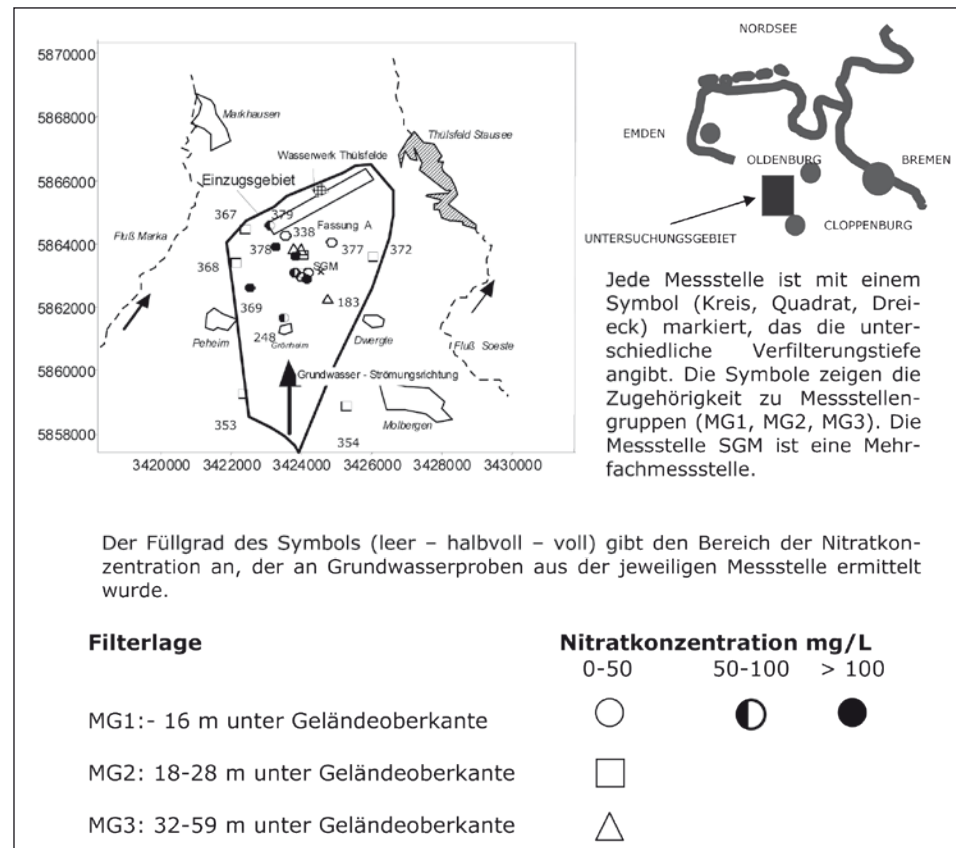


Fig. 10.1: Untersuchungsgebiet.  
Investigation area.

## 10.3. Ergebnisse

### 10.3.1. Tiefenprofile

Das Tiefenprofil der Nitratkonzentrationen ist in Fig. 10.2 für ausgewählte Messstellen ersichtlich. Die Auswertung weiterer redox-sensitiver Parameter ( $O_2$ ,  $Mn^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ,  $SO_4^{2-}$ ) der Grundwasserbeschaffenheit zeigte im Ergebnis eine scharfe Untergliederung des Grundwasserleiters. Für die nachfolgende Modellierung des Nitrattransportes wurden so reduzierte und oxidierte Zonen im Grundwasserleiter ausgewiesen.

Mittels der Fluorchlorkohlenwasserstoff(FCKW)-Methode wurde für den Grundwasserleiter im Einzugsgebiet die Grundwasseraltersverteilung ermittelt (Fig. 10.2, unten). Die vertikale Abstandsgeschwindigkeit konnte zu  $1\text{ m/a}$  abgeschätzt werden (horizontale Abstandsgeschwindigkeit  $80\text{--}100\text{ m/a}$ ).

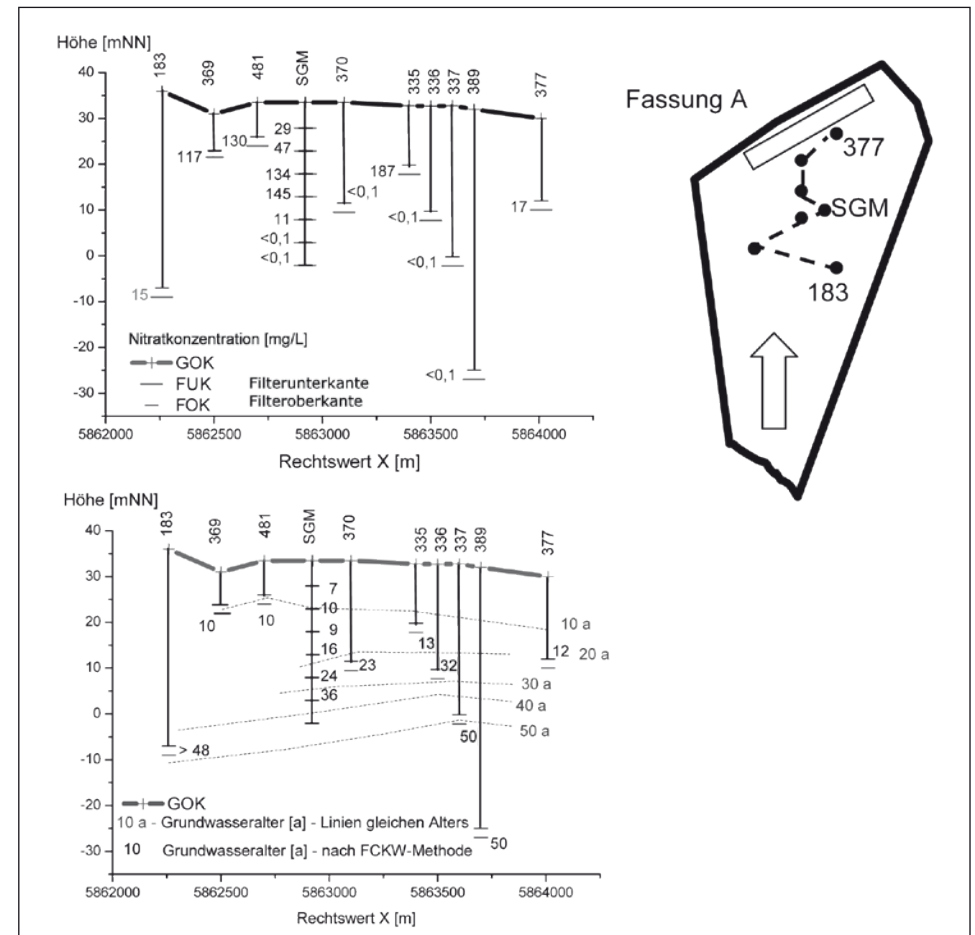


Fig. 10.2: Längsschnitte der Nitratkonzentrationen (oben) und Grundwasseraltersverteilung (unten) an ausgewählten Messstellen.  
Longitudinal section of nitrate concentrations (above) and distribution of groundwater age (below) of selected observation wells.



### 10.3.2. Gestein – Tiefenprofile

Gezeigt werden Ergebnisse aus Gesteins- und Abbauuntersuchungen von Probenmaterial aus 11 flachen Bohrungen (bis 20 m unter GOK) sowie einer tiefen Bohrung (40 m unter GOK). Physikalische und geochemische Parameter, wie z. B. hydraulische Leitfähigkeit (K-Wert) oder Kohlenstoff- und Schwefelspezies sind heterogen im Untergrund verteilt. Die analysierten Parameter folgen dabei entweder der Normal- oder der log-Normal-Verteilung. Mit zunehmender Tiefe wurden im Mittel signifikant höhere Massenkonzentrationen Gesamtschwefel und sulfidischer Schwefel gefunden (Fig. 10.3).

### 10.3.3. Gestein – Untersuchungen zum Umsatz

Die Ergebnisse von Versuchen zum Umsatz von Nitrat in Batch- und Säulenversuchen zeigten, dass der dominierende Abbauprozess die autotrophe Denitrifikation durch Sulfidschwefel ist. Zusammenfassend konnte festgestellt werden, dass im oberen Horizont des Grundwasserleiters (zwischen 33–18 m NN) für die untersuchten Lokationen kein

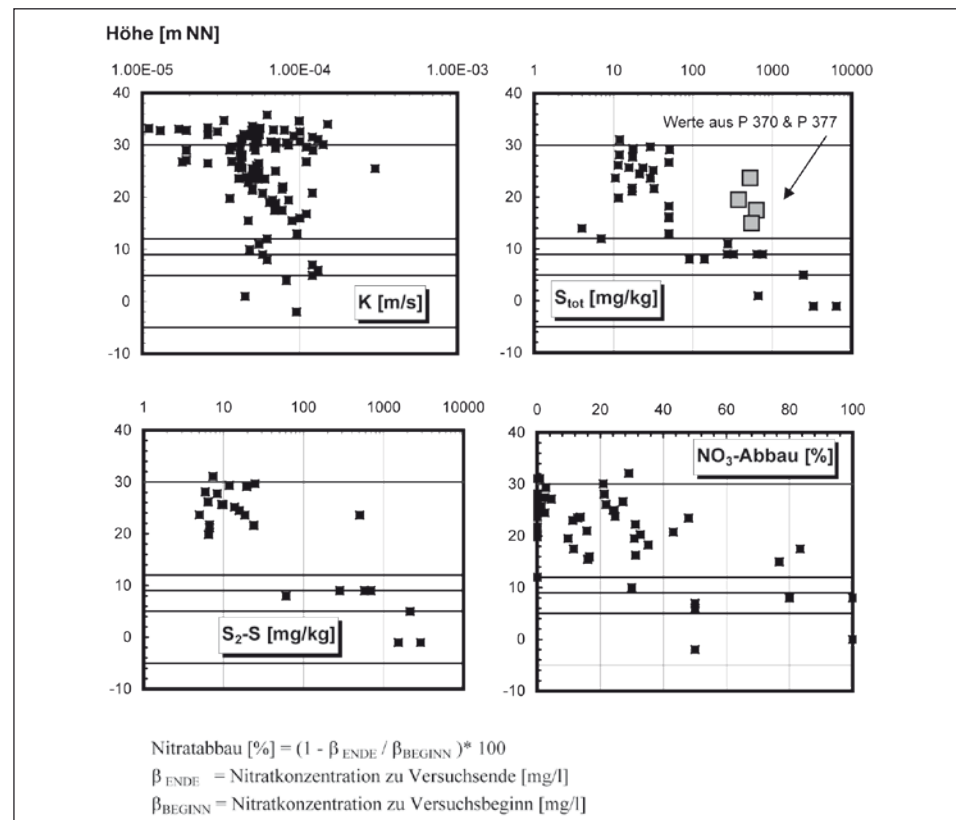


Fig. 10.3: Tiefenprofile von Parametern des Grundwasserleiters wie hydraulische Leitfähigkeit (K-Wert), Schwefelspezies (Gesamtschwefel ( $S_{tot}$ ) und sulfidischer Schwefel ( $S_2-S$ )); schwarz = Mischproben, hellgrau = bänderartige Einlagerungen reiner Holzkohle und Nitratabbau. Depth profile of aquifer parameters K-Value (hydraulic conductivity), sulfur species (total sulphur ( $S_{tot}$ ), disulphide sulfur ( $S_2-S$ )); black = average sample, light grey = small lense of wooden charcoal and nitrate reduction.

oder nur geringfügiger bzw. unvollständiger Abbau von Nitrat stattfindet. Nitratabbauleistungen über 50 % werden generell erst ab einer Tiefe von 18 m NN (entspricht im Mittel 20 m unter GOK) identifiziert (Fig. 10.3).

Mit zunehmender Tiefe stiegen die beobachteten Abbauraten an. Dieser Anstieg korrelierte positiv mit den Massenkonzentrationen von Gesamtschwefel.

Aus der gemeinsamen Betrachtung der Daten zur Grundwasserbeschaffenheit, den Ergebnissen aus den Gesteinsuntersuchungen und den Abbauversuchen wurde für den Modellraum eine Zonierung der Reaktionsräume vorgenommen.

### 10.4. Modellierung

Die gemeinsame Betrachtung aller erhobenen Informationen ermöglichte die Abbildung einer ausgeprägten vertikalen Zonierung des Umsatzes von Nitrat im Grundwasserleiter. Mit einem Strömungs- und Transportmodell wurden unterschiedliche Landnutzungsszenarien durchgespielt. Dabei wurde die Verteilung reaktiven Materials sowie der Verbrauch durch den Prozess der Denitrifikation im Modell berücksichtigt. Die Berücksichtigung erfolgte auf einfache Art und Weise (M. PÄTSCH, 2007):

- Das Modell wurde in Schichten mit 1 m Schichtdicke eingeteilt.
- Jeder Schicht wurde eine Massenkonzentration reaktiven Materials (hier: Pyrit) zugeordnet (entsprechend den Ergebnissen aus den Gesteinsuntersuchungen).
- Denitrifikation wurde als Nitratsenke überall im Einzugsgebiet angenommen.
- Der Nitratreintrag wurde für unterschiedliche Szenarien (Landnutzung) festgelegt.
- In Abhängigkeit der mittleren Grundwasserneubildung wurde für jede Schicht eine stöchiometrisch ermittelte Verfügbarkeit bzw. die Geschwindigkeit der Nitratfront berechnet.
- Stand in einer betrachteten Schicht kein reaktives Material mehr zur Verfügung, wurde sie als reaktive Schicht im nächsten Betrachtungszeitraum nicht mehr berücksichtigt.

Die Ergebnisse zeigen die teilweise signifikanten Einflüsse auf die zu erwartende Qualität des Rohwassers:

- Für das Szenario 1 wurde in einer Worst-Case-Betrachtung von einem gleich bleibend hohen Nitratreintrag in das Grundwasser (Anfangsbedingung aus inverser Modellierung, im Mittel im Gebiet: 228 mg/l  $NO_3^-$ ) ausgegangen. Dies führte in den folgenden Jahren zu dem starken Anstieg der Nitratkonzentrationen im Fassungsbrunnen (Oberkante Fassungsbrunnen).
- Im Szenario 2 wurde ausgehend von der gleichen Anfangskonzentration der Nitratreintrag verringert (im Mittel im Gebiet: 110 mg/l  $NO_3^-$ ). Die Dämpfungswirkung reaktiver Schichten führte zu einem starken Absinken der Nitratkonzentrationen auf Werte um 50 mg/l  $NO_3^-$ .
- In Szenario 3 führt diese Dämpfungswirkung in Verbindung mit einer durch ökologische Bewirtschaftung erreichten Verminderung des Nitratreintrages in das Grundwasser auf im Mittel 52 mg/l  $NO_3^-$  und zu einem Absinken der Nitratkonzentrationen im Fassungsbrunnen auf unter 50 mg/l  $NO_3^-$ .

### 10.5. Schlussfolgerung

Die Ergebnisse der Studien zeigen summarisch den möglichen Einfluss einer berücksichtigten Nitratsenke im Grundwasserleiter. Es zeigte sich, dass Gesteinsparameter heterogen über die Tiefe verteilt sind. Mit zunehmender Tiefe wurden höhere Massenkonzentrationen gefunden. Der Nitratabbau zeigt sich heterogen über die Tiefe verteilt, mit zunehmender Tiefe wurden höhere Abbaugrade ermittelt. Ein maßgeblicher Abbau

ist im Untersuchungsgebiet erst ab einer Tiefe von etwa 20 m unter GOK zu erwarten. Als maßgeblicher Prozess wurde die autotrophe Denitrifikation identifiziert, für die Abbaureaktionen wurden Reaktionen 1. und 0. Ordnung angepasst. Die im Modell eingebauten reaktiven Schichten haben eine dämpfende Wirkung; sind sie aufgebraucht, steigen die Nitratkonzentrationen stark an.

Es bleibt aufgrund der Datenlage für das Untersuchungsgebiet weiterhin unsicher, über welchen Zeitraum Grundwasser in hoher Qualität gefördert werden kann.

### Zusammenfassung

Das Institut für Grundwasserwirtschaft der TU Dresden hat in Zusammenarbeit und mit Unterstützung durch den Oldenburgisch-Ostfriesischen Wasserverband (OOVV) in einem Einzugsgebiet eines Wasserwerkes in Norddeutschland Untersuchungen zur Art des Umsatzes von Nitrat im Grundwasser, zum Umsatzpotenzial und zu seiner Verteilung im Grundwasserleiter ausgeführt. Die Ergebnisse von Feld- und Laborversuchen werden vorgestellt.

Die Bedeutung der räumlichen und zeitlichen Heterogenität der Umsatzprozesse für die Prognose von Nitratkonzentrationen im Grundwasser wird diskutiert.

Vorgelegt werden die Tiefenprofile von Nitratkonzentrationen und zum Grundwasseralter sowie Gesteinsuntersuchungen (physikalisch und chemisch) und Untersuchungen zum Umsatz von Nitrat.

Die gemeinsame Betrachtung aller erhobenen Informationen ermöglichte die Abbildung einer ausgeprägten vertikalen Zonierung des Umsatzes von Nitrat im Grundwasserleiter. Mit einem Strömungs- und Transportmodell wurden unterschiedliche Landnutzungsszenarien durchgespielt, wobei der Verbrauch von reaktivem Material im Modell berücksichtigt wurde. Die Ergebnisse zeigen die teilweise signifikanten Einflüsse auf die zu erwartende Qualität des Grundwassers.

### Literatur

- WALTHER, W., W. MIODUSZEWSKI, Z. DIANKOV, E. QUERNER, M. PÄTSCH, M. FIC, G. VELKOVSKY, F. REINSTORF, D. MARINOV, D. WELLER, A. SLESICKA, S. J. RADOSLAVOV, O. NITCHEVA, J. ROELSMA, (2002): Development of tools needed for an impact analysis for groundwater quality due to changing of agricultural soil use.– Final Report, 4<sup>th</sup> Framework Programme INCO-COPERNICUS of EU, Contract number IC 15-CT98-0131, Dresden.
- PÄTSCH, M., W. WALTHER, F. REINSTORF & D. WELLER (2004): Development of suitable tools for the management of nitrogen emissions out of soils into groundwater in agriculturally used catchment areas, northern low plain of Germany.– In: Proceedings, RBHP-Congress, 22–31 March, Hefei City (Anhui), China.
- PÄTSCH, M. (2007): Analyse des Depots des Nitratumsatzes und dessen Heterogenität im quartären Grundwasserleiter des Wasserwerkes Thülsfeld/Emsland. Berücksichtigung bei der Modellierung des Transportes.– Dissertation, 285 S. Technische Universität Dresden, Institut für Grundwasserwirtschaft.
- OSTER, H. & M. PÄTSCH (2001): Grundwasseraltersbestimmungen mit Fluorchlorkohlenwasserstoffen im Einzugsgebiet des Wasserwerks Thülsfeld.– Unveröff. Forschungsbericht OOVV vom 30. 8. 2001, pp. 32, Dresden.

### Summary

Investigations in a catchment area of a water works in Northern Germany relating to the turnover of nitrate and turnover-potential of nitrate in groundwater and to its distribution were achieved in co-operation and with support by the Oldenburgisch Ostfriesischer Wasserverband (OOVV) from the Institute for Groundwater Management, TU Dresden, Germany. The results of field and lab tests are presented.

The meaning of the spatial and temporal heterogeneity of the turnover processes for the prognosis of nitrate concentrations in the groundwater is discussed. The depth profiles of nitrate concentrations and groundwater age are presented, as well as soil investigations (physical and chemical) and investigations of the turnover of nitrate. The common view of all raised information leads to a vertical zoning of the turnover of nitrate in groundwater. In a flow- and transport model different land use scenarios were simulated taking into consideration the consumption of reactive material in groundwater. The results show the partial significant influences on the quality of raw water.

Schlüsselwörter: Nitrat, Grundwasser, Heterogenität, Nitratabbau, Denitrifikation

Keywords: nitrate, groundwater, heterogeneity, nitrate turnover, denitrification

## 11. Denitrification in Groundwater – Results from Investigations in two Austrian Case Study Regions (Ch. SCHILLING, A. P. BLASCHKE, D. GUTKNECHT, H. KROISS, J. O. SKØIEN & M. ZESSNER)

### 11.1. Introduction

In the second half of the past century, bioavailability of nitrogen due to fertiliser application in terrestrial ecosystems increased considerably. Advancements in agricultural and residential development resulted in serious ecological problems by massive point and diffuse loads of nitrogen (and phosphorus) to groundwater and surface waters. Oxygen depletion and excessive algae blooms (eutrophication) in surface and coastal water bodies were recognised (L. B. MEE, 1992) and raised the awareness and the necessity for a sustainable management of nutrient sources. To derive measures for an effective management of nitrogen (and phosphorus) emissions from catchments, the main sources of emissions and the emission pathways to the surface waters have to be identified with consideration of all transformation and retention processes at the catchment scale.

The daNUbs project EVK-CT-2000-00051 (2-2001/1-2005) “Nutrient Management in the Danube River Basin and its Impact on the Black Sea” (H. KROISS, 2005) focussed on the identification of the main sources and pathways of nitrogen and phosphorus emissions from subcatchments and their impacts on the Western Black Sea. In frame of the daNUbs project, investigations were carried out in two Austrian case study regions, the Ybbs and the Wulka catchment. Both catchments were selected forwards representing different conditions within the Austrian part of the Danube basin in terms of climate, hydrology, geology and land use practices. Water and nutrient balance calculations were performed using different models. Since in-situ measurements of denitrification rates in soil and groundwater are highly uncertain, denitrification in groundwater can be identified establishing nitrogen balances at the catchment scale. That denitrification in groundwater is an important process reducing diffuse nitrogen loads to surface waters significantly, could be shown using groundwater and surface water quality data for both catchments and will be presented in this paper. As a consequence, reflection of denitrification processes in groundwater in modelling approaches estimating nitrogen emissions to surface waters is a requirement for correct estimations at the catchment scale.

### 11.2. Methods

Groundwater and surface water quality was observed in the Ybbs and the Wulka catchment for the period 2001 to 2003. Additionally, existing observations from the beginning of 1994 were used to evaluate the groundwater and surface water quality in terms of nitrogen transformation and transport at the catchment scale. Water balance calculations

were performed using the conceptual continuous time model SWAT 2000 (J. G. ARNOLD et al., 1999). Mean water balances were calculated with daily time step on the subcatchment level for the period 1992 to 1999 and 1991 to 2000, for the Wulka catchment and the Ybbs catchment respectively. Emphasis was on identification of main water balance components in respect to morphological and climatic conditions as well as on individual catchment-specific contribution of runoff components to the river discharge.

Nitrogen emissions from both catchments were calculated using the empirical emission model MONERIS (H. BEHRENDT et al., 1999) with focus on identification of main emission pathways. Calculated total nitrogen emissions to the surface waters were compared to calculated loads from nitrogen surplus and to observed nitrogen instream river loads to identify nitrogen losses in groundwater and surface water by denitrification.

Groundwater residence time distributions were calculated based on a modified approach (D. TARBATON, 1997) using interpolated groundwater surface information. Based on calculated groundwater residence times distributions, nitrogen emissions by groundwater to the surface water with consideration of denitrification using reported half life times (see F. WENDLAND & R. KUNKEL, 1999) could be estimated at the catchment scale for the Ybbs and the Wulka catchment.

### 11.3. Results and discussion

Groundwater observation wells have been grouped in respect to their distances to the surface water. Following the groundwater flow along the flowpath towards the surface water, total inorganic nitrogen (TIN) concentrations in groundwater decreased significantly from areas with large distances to the surface water (> 100 m distance) towards riparian, surface water near groundwater (< 100 m distance) in both catchments (Tab. 11.1). Further decreasing TIN concentrations were observed from riparian groundwater to the concentrations, which were observed in surface water. Since observed chloride concentrations of the Wulka catchment remained constant, decreases in TIN concentrations from groundwater to surface water can be attributed to denitrification in groundwater and partly in surface water. For the Ybbs catchment, chloride concentrations decreased from groundwater to surface water as well indicating reduction in TIN levels beside denitrification in groundwater (and surface water) by dilution with surface water low in TIN levels from upstream catchment areas. Generally, TIN and chloride levels in groundwater and surface water of the Ybbs catchment were considerably lower (Tab. 11.1) compared to those observed in the groundwater and surface water of the Wulka catchment. Water balance calculations

Tab. 11.1: Observed mean total inorganic nitrogen (TIN) and chloride (Cl) concentrations in groundwater and surface water of the Ybbs and the Wulka catchment (1994 to 2003).

Gemessene mittlere Konzentrationen des gesamten anorganischen Stickstoffs (TIN) und Chlorids (Cl) im Grund- und Oberflächenwasser der Einzugsgebiete Ybbs und Wulka (1994 bis 2003).

Location of observation point	YBBS		WULKA	
	TIN [mg N/l]	Cl [mg/l]	TIN [mg N/l]	Cl [mg/l]
Groundwater wells with > 100 m distance to surface water	7.0	9.9	22.3	56
Groundwater wells with < 100 m distance to surface water	2.4	7.2	7.4	48
Surface water	1.4	3.6	5.6	50

indicated remarkable differences in mean annual precipitation and groundwater recharge, respectively between the Ybbs catchment ( $1377 \text{ mm} \cdot \text{a}^{-1}$  and  $494 \text{ mm} \cdot \text{a}^{-1}$ ) and the Wulka catchment ( $699 \text{ mm} \cdot \text{a}^{-1}$  and  $118 \text{ mm} \cdot \text{a}^{-1}$ ). Elevated annual groundwater recharge of the Ybbs catchment results in dilution of nitrogen concentrations in percolation water as well as in lower substrate availability (nitrate) for subsurface denitrification (compared to the Wulka catchment). Additionally, groundwater residence time in the Ybbs catchment is likely to be considerably lower due to larger subsurface specific discharges.

Load calculations and emission estimations supported these assumptions. Despite lower TIN levels in groundwater, due to larger groundwater recharge nitrogen emissions to the surface water of the Ybbs catchment exceeded the calculated emissions to the surface water of the Wulka catchment approximately by factor 4 (Fig. 11.1, grey bars). Since both catchments are characterised by almost equal area-specific nitrogen surpluses, nitrogen losses in soil and groundwater of the Wulka catchment by denitrification are considerably larger.

Differences between calculated nitrogen emissions to surface water and observed instream nitrogen load indicated nitrogen losses via denitrification in river (Fig. 11.1), what is compared to denitrification in soil and groundwater of minor importance in both catchments. Calculated groundwater residence time distributions for selected parts of both catchments confirmed, that the Ybbs catchment is characterised in average by noticeably shorter groundwater residence times in comparison to the Wulka catchment. This fact gave evidence that also denitrification in groundwater of the Ybbs catchment is less compared to denitrification in groundwater of the Wulka catchment. For both catchments it could be shown, that particularly areas with short distances to the surface water and low groundwater residence times (< 9 to 10 years) are responsible for most of the nitrogen emissions (> 90% of total nitrogen emissions), which are emitted by groundwater to the surface water. Using a half life time of

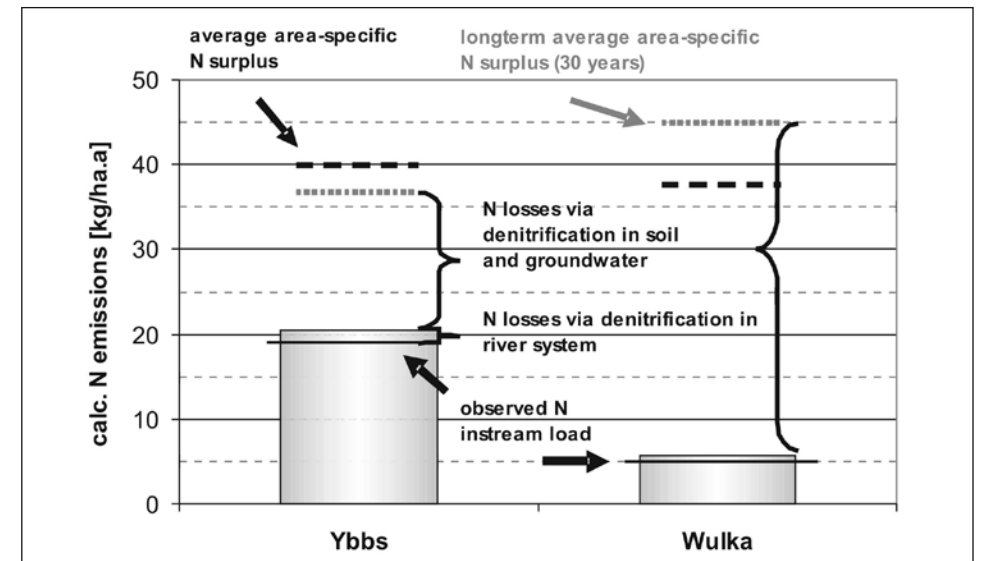


Fig. 11.1: Calculated nitrogen emissions (in  $\text{kg/ha} \cdot \text{a}$ ) to the surface water using the MONERIS model for the Ybbs catchment and the Wulka catchment.

Berechnete Stickstoffeinträge (in  $\text{kg/ha} \cdot \text{a}$ ) in das Oberflächenwasser anhand von MONERIS für die Einzugsgebiete Ybbs und Wulka.

four years to characterise denitrification resulted in calculated diffuse emissions, which were comparable to calculated diffuse nitrogen emissions using the MONERIS model as well as to load calculations from observation for the Wulka catchment. For the Ybbs catchment, calculated diffuse nitrogen emissions were underestimated using a half life time of four years, what indicated once more less denitrification in the groundwater of the Ybbs catchment.

#### 11.4. Conclusions

Investigations in the Ybbs and the Wulka catchment provided information about comprehensive connections between catchment hydrology and morphology, observable concentration levels in groundwater and surface water and consequently, the magnitude of emission being contributed to surface waters. Denitrification in groundwater could be observed in both catchments, but site specific denitrification in groundwater is a function of local environmental conditions and differs considerably between the Ybbs and the Wulka catchment. Groundwater residence times are the result of hydrological and hydrogeological conditions and largely determine nitrogen fluxes through biologically active micro sites, in which conditions are favourable for denitrification to prevail.

Using modelling approaches to estimate nitrogen emissions at the catchment scale, denitrification in groundwater is a crucial process determining the level of diffuse nitrogen emissions to surface waters, and therefore it has to be considered and implemented in modelling approaches conveniently. Knowing about the spatially diverse contributions of catchment areas to diffuse nitrogen emissions to surface waters, strategies can be derived for a sustainable management of agricultural areas without affecting surface water nitrogen loads. In contrast, particularly areas under agricultural use and with large distances to surface waters are highly vulnerable in respect to elevated nitrogen concentrations in groundwater. So, sustainable management of catchment areas has to take into account both aspects of water protection depending on protection goals focussing either on groundwater and/or on surface water protection.

#### Summary

In frame of the daNUbs project EVK-CT-2000-00051 (2-2001/1-2005) "Nutrient Management in the Danube River Basin and its Impact on the Black Sea" investigations were carried out in two selected Austrian case study regions, the Ybbs catchment and the Wulka catchment. Denitrification in groundwater could be observed based on nitrogen surplus assessments in relation to groundwater and surface water quality observations. Differences between the selected case study regions in respect to nitrogen fluxes and denitrification activity could be attributed to hydrogeological circumstances, which were characterised by water balance calculations using the conceptual SWAT 2000 model. Using the empirical emission model MONERIS the total nitrogen emissions were calculated for both case study areas with consideration of the individual emission pathways.

An approach was developed for the calculation of diffuse nitrogen emissions to surface water with consideration of denitrification processes in the groundwater based on calculated groundwater residence times. This approach enabled the identification of catchment areas, which are responsible for most of diffuse nitrogen emissions to the surface water and which are therefore highly sensitive in terms of controlling diffuse nitrogen emissions to the receiving coastal waters of the Black Sea. These areas could be clearly distinguished from areas, which are important for local groundwater protection and revealed the contrarious effects of measures related to specific protection goals with focus on either the reduction of nitrogen levels in groundwater or the reduction of nitrogen emissions to surface waters.

#### References

- ARNOLD, J. G., R. SRINIVASAN, R. S. MUTTIAH & P. M. ALLEN (1999): Continental scale simulation of the hydrologic balance.– *Journal of the American Water Resources Association*, **35** (5), 1037–1051.
- BEHRENDT, H., P. HUBER, D. OPITZ, O. SCHMOLL, G. SCHOLZ & R. UEBE (1999): Nutrient Emissions into River Basins of Germany.– *Texte*, **23/00**, pp. 261, Umweltbundesamt Berlin.
- KROISS, H. (Coord., 2005): EU-RP-5: Nutrient management in the Danube Basin and its impact on the Black Sea (daNUbs EVK1-CT-2000-00051). daNUbs Final Report.– Unpubl. Report, March 2005, 78 p., Institute for Water Quality and Waste Management, Vienna University of Technology, [online available: <http://danubs.tuwien.ac.at/danubs%20final.pdf>, October 2008].
- MEE, L. B. (1992): The Black Sea in crisis.– *Ambio*, **21**, 278–286.
- TARBATON, D. (1997): A new method for the determination of flow directions and upslope areas in grid digital elevation models.– *Water Resources Research*, **33** (2), 309–319.
- WENDLAND, F. & R. KUNKEL (1999): Das Nitratabbauvermögen im Grundwasser des Elbeinzugsgebietes. Analyse von Wasserhaushalt, Verweilzeiten und Grundwassermilieu im Flusseinzugsgebiet der Elbe (Deutscher Teil). Abschlussbericht Teil 2.– *Schriften des Forschungszentrums Jülich, Reihe Umwelt/Environment*, Bd. **13**, 166 p., Jülich.

#### Zusammenfassung

Im Rahmen des daNUbs-Projektes EVK-CT-2000-00051 (2-2001/1-2005) „Nutrient Management in the Danube River Basin and its Impact on the Black Sea“ wurden Untersuchungen in zwei ausgewählten österreichischen Einzugsgebieten, dem Ybbs-Einzugsgebiet und dem Wulka-Einzugsgebiet, durchgeführt. Denitrifikation im Grundwasser konnte anhand von Messungen der Grundwasser- und Fließgewässergüte im Verhältnis zu berechneten Nährstoffbilanzen festgestellt werden. Unterschiede zwischen beiden Gebieten in Hinblick auf die emittierten Stickstofffrachten sowie auf Denitrifikationsraten im Grundwasser wurden maßgeblich durch die lokalen, hydrologischen und hydrogeologischen Bedingungen in den Einzugsgebieten beeinflusst. Die hydrologischen Verhältnisse in beiden Gebieten wurden mit dem konzeptionellen Modell SWAT 2000 charakterisiert. Das empirische Emissionsmodell MONERIS wurde zur Berechnung der Gesamtstickstoffemissionen aus den Einzugsgebieten in die Fließgewässer mit Berücksichtigung der jeweiligen Emissionspfade verwendet.

Es wurde ein flächendifferenzierter Ansatz zur Abschätzung diffuser Stickstoffemissionen mit Berücksichtigung von Denitrifikationsprozessen im Grundwasser basierend auf berechneten Grundwasseraufenthaltszeiten entwickelt. Dieser Ansatz erlaubte die Identifikation von Flächen, welche maßgeblich zu diffusen Stickstoffemissionen in die Fließgewässer beitragen. Diese Flächen sind von maßgebender Bedeutung für die Einflussnahme auf Stickstoffemissionen, welche über die Fließgewässer bis in die Küstengewässer und das Schwarze Meer transportiert werden. Diese Flächen konnten klar von denen abgegrenzt werden, welche für den lokalen Grundwasserschutz von Bedeutung sind und verdeutlichten die gegensätzliche Relevanz der Flächen für Maßnahmen, welche entweder auf eine Reduktion der Stickstoffkonzentrationen im Grundwasser oder auf eine Reduktion der Stickstoffemissionen in das Schwarze Meer abzielen.

#### Acknowledgements

Results presented stem from the project "Nutrient Management in the Danube Basin and its Impact on the Black Sea" (daNUbs) supported under contract EVK1-CT-2000-00051 by the Energy, Environment and Sustainable Development (EESD) Programme of the 5<sup>th</sup> EU Framework Programme. Details about the project can be found on the project homepage: <http://danubs.tuwien.ac.at/>.

Keywords: denitrification in groundwater, water balance, nitrogen emissions, groundwater residence time  
Schlüsselwörter: Denitrifikation im Grundwasser, Wasserbilanz, Stickstoffemissionen, Verweilzeit des Grundwassers

## 12. Transport of Solutes in the Transition Zone of Saturated and Unsaturated Subsurface (Th. REIMANN, R. LIEDL & W. WALTHER)

### 12.1. Fluid flow and transport within the Saturated-Unsaturated Interface Region

#### 12.1.1. Object of investigation

The input of substances affecting groundwater quality predominantly occurs through the upper surface of the groundwater body which is embedded in an interface region between the unsaturated and saturated zone covering an area of approximately  $130 \times 10^6 \text{ km}^2$  worldwide (D. RONEN & S. SOREK, 2005).

Above the phreatic water table the capillary fringe is localised. It is associated with higher water saturation than the remaining vadose zone. Quantitatively, the extension of the capillary fringe is a function of the capillary forces between water and soil matrix, which increase with decreasing grain size. Therefore the capillary fringe ranges in the field roughly from two centimetres for gravel up to several meters for clay.

Below the phreatic water table a significant amount of gas (trapped air) is recognised by a few actual studies (D. RONEN et al., 2000). Possible reasons for this situation are groundwater table fluctuations as well as gas production due to microbiological activity.

Therefore, the characteristics of the upper part of the aquifer differ from the fully saturated region (e.g. hydraulic conductivity, degradation potential). In order to simultaneously

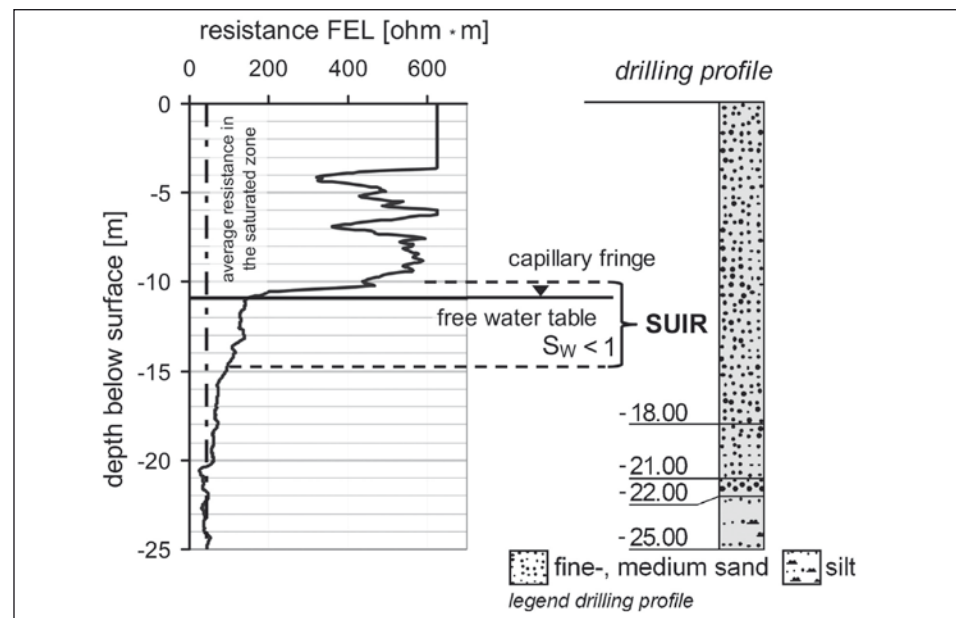


Fig. 12.1: Geophysical observation from a drilling event (Northern Germany; sandy gravel sediments with silt inclusions). The resistance FEL (focussed electrical log) is a measure for the water content;  $S_w$  – water saturation.

Geophysikalische Untersuchung an einer Bohrung in Lockersediment. FEL (fokussierter Elektrolog) ist ein Maß für den Wassergehalt;  $S_w$  – Wassersättigung.

address, both, the capillary fringe as well as the upper layer of the phreatic aquifer, the term Saturated-Unsaturated Interface Region (SUIR) was created (D. RONEN et al., 2000).

Figure 12.1 shows the existence of the SUIR in the field (Northern Germany; sandy gravel sediments with silt inclusions). From this the SUIR could be estimated to extend from roughly 4 m below to 1 m above the free water table.

#### 12.1.2. Hydraulic and transport processes – state of the art

Flow of water and transport of substances is commonly conceptualised to be predominantly in vertical downward direction in the vadose zone and predominantly in some horizontal direction in the saturated zone. The influence of the SUIR on flow and transport processes is almost neglected in literature and textbooks (B. BERKOWITZ et al., 2004).

Flow within the SUIR can be understood via multiphase hydraulics involving water and air as fluids. To identify lateral flow processes, experiments in a 2D laboratory tank ( $0.5 \text{ m} \times 0.3 \text{ m} \times 0.1 \text{ m}$ ; see fig. 12.2) were conducted. With two constant head boundary cells on the left and right side of the tank, a gradient of about 0.01–0.004 [–] was established – corresponding groundwater flow velocity was around  $1 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$ . To visualise lateral flow processes in the capillary fringe region we used a colouring agent. Figure 12.2 gives an overview about the experimental observations.

Experimental results lead to the conclusions that

- there is a significant lateral flow component in the capillary fringe (Fig. 12.2, above),
- local heterogeneities strongly influence the flow paths (Fig. 12.2, below),
- the flow behaviour within the SUIR strongly depends on sediment characteristics.

The authors E. SILLIMAN et al. (2002) confirmed upward vertical flow with laboratory tank experiments. This contradicts the actual state of the art reflected in literature. In addition, hysteresis as well as water and gas storage due to capillary barriers (A. DUNN et al., 2005) affect transport processes. The SUIR region can be concluded to act as a 3D flow and transport domain above the water table (D. RONEN & S. SOREK, 2005).

Regarding transport processes transverse dispersion is most relevant. Dispersivities in the capillary fringe region were larger than in the fully saturated aquifer due to the entrapped gas enlarging the tortuosity of flow paths. References in literature indicate an increasing decomposition capacity in the SUIR, which is proven by enhanced concentration of degradation products e.g.  $\text{N}_2\text{O}$  or  $\text{CO}_2$  (H. P. AFFEK et al., 1998).

From these remarks the influence of the SUIR on mass transfer is obvious. Water table fluctuations combined with the hysteretic character as well as the flow behaviour will strongly influence the mass transfer across the SUIR. Based on its specific characteristics (existing gas phase, gas exchange, high water saturation) the SUIR constitutes a biologically and geochemically active zone in the subsurface (D. RONEN & S. SOREK, 2005).

### 12.2. Impact of the Saturated-Unsaturated Interface Region on water quality

The influence of the SUIR on water quality is demonstrated in this section by numerical experiments. Based on the results, requirements for measurement techniques are highlighted. For the numerical simulation of flow processes in the

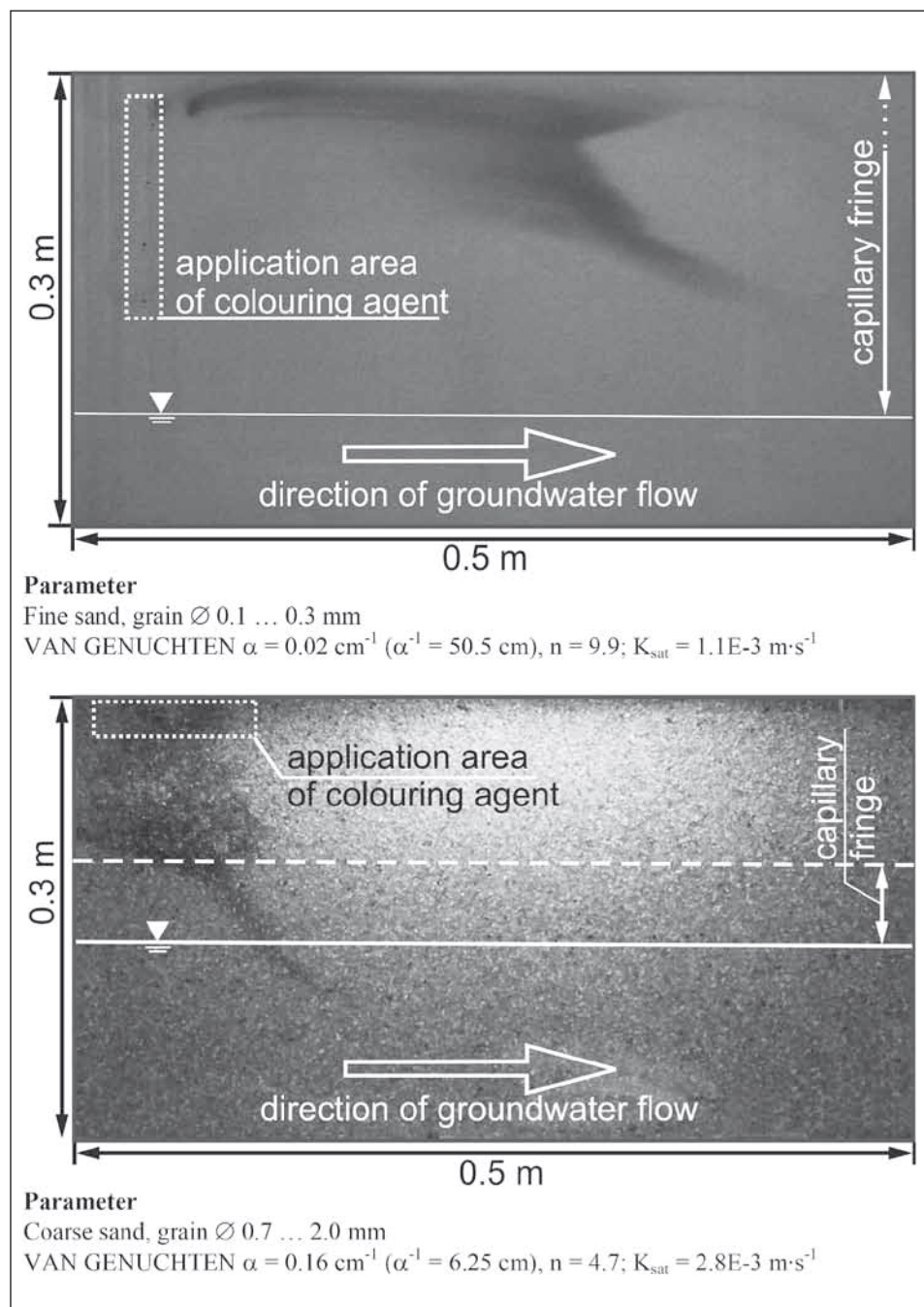


Fig. 12.2: 2D laboratory tank experiments to visualise lateral flow within the SUIR. Parameters after M. T. VAN GENUCHTEN (1980).  
 2D-Gerinneversuche visualisieren laterale Fließvorgänge im Kapillarsaum. Parameter nach M. T. VAN GENUCHTEN (1980).

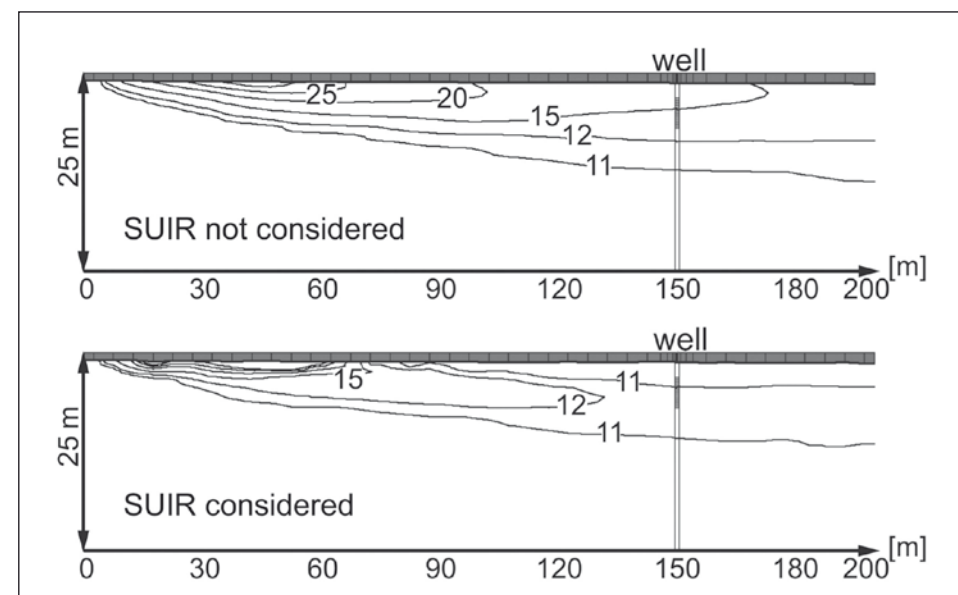


Fig. 12.3: 2D numerical groundwater model to investigate the influence of the SUIR on groundwater quality (calculated nitrate concentration in  $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ).  
 Numerisches 2D-Grundwassermodell zur Untersuchung des Einflusses des SUIR auf die Wasserbeschaffenheit (berechnete Nitratkonzentration in  $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ).

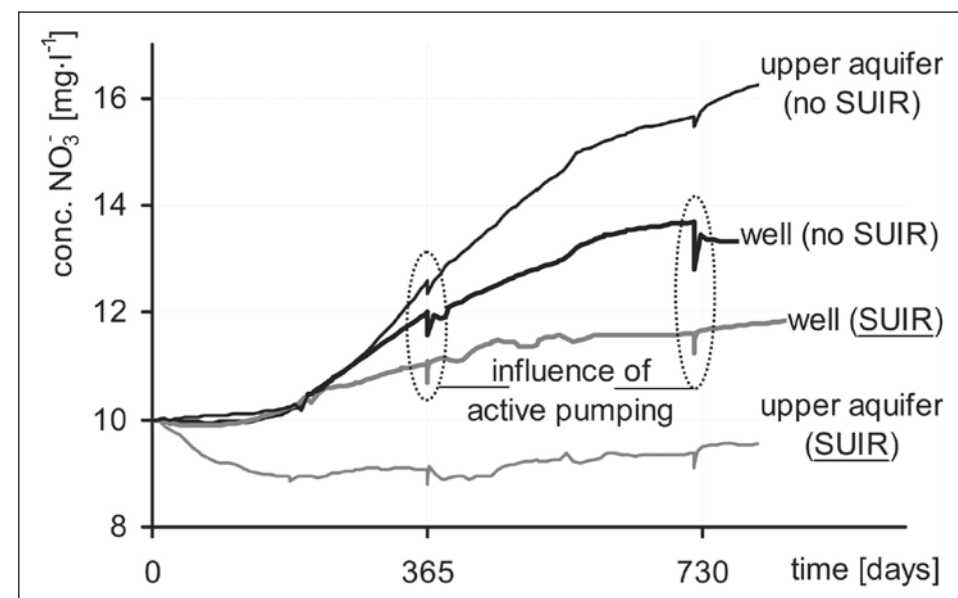


Fig. 12.4: Numerically calculated nitrate concentration (in  $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ) with and without consideration of the SUIR.  
 Numerisch berechnete Nitratkonzentrationen (in  $\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$ ) mit und ohne Berücksichtigung des SUIR.

capillary fringe the code HYDRUS-2D (RICHARDS-equation) seems appropriate (E. SILLIMAN et al., 2002). Furthermore, we use a groundwater model (MODFLOW; A. W. HARBAUGH & M.G. McDONALD, 1996) to study the influence of the SUIR on groundwater quality.

A 200 m long cut-out of a fictitious aquifer is parameterised with regard to field conditions for a typical north German glacial aquifer. The model considers two types of land use, agriculture (from  $x = 0$ –50 m) and forest (from  $x = 50$ –200 m). Nitrate, which is chosen because of its high practical relevance, is added at the agriculturally used area ( $300 \text{ mg} \cdot \text{l}^{-1}$ ). The SUIR is represented by:

- horizontal relocation of substance source because of lateral flow above phreatic water table,
- reduced mass input to the aquifer due to degradation in the capillary fringe,
- reduced hydraulic conductivity in the upper groundwater layer,
- enhanced degradation potential in the upper groundwater layer,
- enhanced transverse dispersivity in the upper groundwater layer.

The model investigations show the influence of the SUIR on water quality (Fig. 12.3 and 12.4). For the selected case study the processes in the transition area between the vadose zone and the aquifer clearly reduce nitrate concentrations (approximately one third, see fig. 12.4).

Furthermore, the demand on a measurement technique is outlined, which is necessary to observe these processes. There are two ways to achieve water from the region below the phreatic water table – active and passive sampling. Regarding active sampling, M. D. VARLJEN et al. (2006) demonstrate for low flow purging that the actually monitored zone exceeds the screened area. Also they show a very large increase of inflow to the well adjacent to soil layers with enlarged permeability. These effects can be assumed to be even more enhanced in the SUIR due to its highly complex hydraulic behaviour. For SUIR-related investigations a high vertical measurement resolution is necessary because of spatial variations of hydraulics, reaction potential and metabolism.

Based on the existing numerical groundwater model, different sampling techniques could be evaluated regarding their influence on obtained concentration. Therefore, an observation well is included in the model. The pumping schedule (sampling) corresponds to purging twice a year for three hours with a rate of  $3 \text{ m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$ . The results clearly show the evidence for finely discretised passive sampling, see values for the upper aquifer and the well in fig. 12.4. Compared with the values obtained with conventional sampling (corresponding to the peaks in fig. 12.4) results from passive sampling are clearly different.

### 12.3. Conclusion

The SUIR represents a highly active 3D flow and transport region which considerably influences groundwater quality. Due to limitations of existing monitoring techniques the processes cannot be adequately observed. Passive groundwater sampling seems to be more appropriate than purging because the highly sensitive flow regime is not affected. Technically, the use of dialysis cells in a multi-layer sampler seems to be a feasible monitoring approach to analyse groundwater quality (R. W. PULS & C. PAUL, 1997). Further laboratory and field investigations regarding this topic are necessary to achieve rewarding process understanding.

### Summary

Fluid flow and transport processes in the transition zone of the saturated and unsaturated subsurface affect groundwater quality. The water saturation in the capillary fringe is clearly increased compared to the remaining vadose zone. Furthermore, the gas saturation in the upper groundwater is enhanced. Therefore, the whole interface region is of exceptional importance regarding the hydraulic properties. In addition, it represents a highly active reaction area. Till now the relevant processes are only partly understood. The actual literature documents investigations about:

- lateral flow within the capillary fringe,
- reduced flow velocity in the upper aquifer due to the enhanced gas saturation,
- influence of geological heterogeneities on fluid flow as well as storage behaviour,
- enhanced metabolism/degradation of substances in the interface region.

With the existing monitoring techniques the processes could be observed only with limitations or with high effort. Therefore, in most cases the interface region is neglected for management of groundwater resources (D. RONEN & S. SOREK, 2005).

With this contribution we centralise the actual state of art concerning fluid flow and transport processes within the interface region. By means of model studies the impact of the interface region on groundwater quality is clarified. Aside we investigate different types of groundwater sampling techniques by use of the models to assess their applicability to reliably detect the processes in the interface region.

### References

- AFFEK, H. P., D. RONEN & D. YAKIR (1998): Production of  $\text{CO}_2$  in the capillary fringe of a deep phreatic aquifer.– *Water Resources Research*, **34/5**, 989–996, Washington, D.C. (Am. Geophys. Union).
- BERKOWITZ, B., E. SILLIMAN & A. DUNN (2004): Impact of the Capillary-Fringe on Local Flow, Chemical Migration and Microbiology.– *Vadose Zone Journal*, **3/2**, 534–548, Madison (Soil Sci. Soc. of Am.).
- DUNN, A., S. E. SILLIMAN, S. DHAMWICHUKORN & Ch. F. KULPA (2005): Demonstration of microbial transport into the capillary fringe via advection from below the water table.– *Journal of Hydrology*, **306**, 50–58.
- VAN GENUCHTEN, M. T. (1980): A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils.– *Soil Science Society of America Journal*, **44**, 892–898, Madison (Soil Sci. Soc. of Am.).
- HARBAUGH, A. W. & M. G. McDONALD (1996): User's documentation for MODFLOW-96, an update to the U.S. Geological Survey Modular Finite-Difference Groundwater-Flow Model.– U.S. Geological Survey Open-File Report 96-485.
- PULS, R. W. & C. PAUL (1997): Multi-layer sampling in conventional monitoring wells for improved estimation of vertical contaminant distribution and mass.– *Journal of Contaminant Hydrology*, **25**, 85–111.
- RONEN, D. & S. SOREK (2005): The unsaturated zone – a neglected component of nature.– In: NÜTZMANN, G. (Hrsg., 2005): *Reactive transport in soil and groundwater: Processes and models.*– 3–15, Berlin, Heidelberg (Springer).
- RONEN, D., H. SCHER & M. BLUNT (2000): Field observations of a capillary fringe before and after rainy season.– *Journal of Contaminant Hydrology*, **44**, 103–118.

SILLIMAN, E., B. BERKOWITZ, J. SIMUNEK & M. T. VAN GENUCHTEN (2002): Fluid Flow and Solute Migration within the Capillary Fringe.– *Ground Water*, **40/1**, 76–84, Westerville, Ohio (Nat. Groundwater Assoc.).

VARLJEN, M. D., M. J. BARCELONA, J. OBEREINER & D. KAMINSKI (2006): Numerical Simulations to Assess the Monitoring Zone Achieved during Low-Flow Purging and Sampling.– *Ground Water Monitoring and Remediation*, **26/1**, 44–52, Westerville, Ohio (Nat. Groundwater Assoc.).

## Zusammenfassung

Strömungs- und Transportprozesse im Übergangsbereich zwischen ungesättigter und gesättigter Zone haben Einfluss auf die Beschaffenheit des Grundwassers. Der Kapillarsaum zeigt im Vergleich zur ungesättigten Zone eine deutlich gesteigerte Wassersättigung. Zusätzlich weist auch das oberflächennahe Grundwasser eine erhöhte Gassättigung auf. Der gesamte Übergangsbereich nimmt damit eine Sonderstellung hinsichtlich der hydraulischen Eigenschaften ein und stellt einen aktiven Reaktionsraum dar. Bisher sind die relevanten Prozesse nur teilweise bekannt. So sind in der jüngeren Literatur Untersuchungen unter anderem zu folgenden Phänomenen dokumentiert:

- horizontale Verlagerung im Kapillarsaum,
- verringerte Fließgeschwindigkeit im oberflächennahen Grundwasser,
- Einfluss geologischer Heterogenitäten auf das Fließ- und Speicherverhalten sowie
- erhöhtes Stoffumsatzpotenzial im Übergangsbereich.

Mit der vorhandenen Messtechnik sind die Prozesse nur eingeschränkt oder mit hohem Aufwand zu erfassen. Daraus resultiert, dass der Einfluss des Übergangsbereichs bei der Bewirtschaftung von Grundwasserkörpern weitestgehend vernachlässigt wird (D. RONEN & S. SOREK, 2005).

Der Beitrag fasst den aktuellen Stand zu den Strömungs- und Transportprozessen im Übergangsbereich zusammen. Anhand schematischer Modellstudien wird dessen Bedeutung für die Beschaffenheit des Grundwassers verdeutlicht. Mit den Ergebnissen der Modellierung kann quantifiziert werden, welchen Einfluss die Prozesse haben. Daneben werden mit den Modellen verschiedene Arten der Probenahme untersucht, um abzuschätzen, inwieweit mit diesen die Prozesse im Übergangsbereich zuverlässig erfasst werden können.

Keywords: capillary fringe, Saturated-Unsaturated Interface Region, area of groundwater fluctuation

Schlüsselwörter: Kapillarsaum, Übergangsbereich zwischen gesättigter und ungesättigter Zone, Grundwasserschwankungsbereich

## 13. Fate of Isoxaflutole and its Diketonitrile Metabolite under Conventional and Conservation Tillage in an Irrigated Continuous-Maize Field (L. ALLETTO, Y. COQUET & Ch. LABAT)

### 13.1. Introduction

Tillage practices can have a major effect on the physical, chemical and biological properties of soils which control the fate of applied chemicals. Conservation tillage is defined as any tillage operation that leaves  $\geq 30\%$  cover of the soil surface by plant residues after sowing (M. R. GEBHARDT et al., 1985). Accumulation of partially decomposed plant residues in conservation tillage and cover crop management systems can affect herbicide availability and its fate in soils (K. N. REDDY et al., 1997). Furthermore, the formation of undisturbed macropores under conservation tillage could enhance the leaching of pesticides to groundwater (A. R. ISENSEE et al., 1990, M.-A. LOCKE & S. S. HARPER, 1991).

Isoxaflutole, [5-cyclopropyl isoxazol-4-yl-2-mesyl-4-trifluoromethylphenyl ketone] (IFT) is a preemergence proherbicide used to control annual grasses and broad-leaves weeds in maize, in replacement of atrazine. In soil, plant and water, the hydrolysis of IFT forms the diketonitrile metabolite [2-cyclopropyl-3-(2-mesyl-4-trifluoromethylphenyl)-3-oxopropanenitrile] (DKN) which is the active principle (K. E. PALLETT et al., 2001). In-field degradation half-life ( $DT_{50}$ ) of IFT was found to range from 9–18 d (J. ROUCHAUD et al., 2002). The aqueous solubility of DKN is 50 times greater than that of IFT (326 vs. 6.2 mg·l<sup>-1</sup>) (E. BELTRAN et al., 2002) with a lower organic carbon normalized partition coefficient ( $K_{OC}$ ) than IFT (S. MITRA et al., 2000). It could thus be expected that DKN would have a higher mobility potential than IFT. A better understanding of tillage effects on the fate of IFT and DKN is needed to evaluate more fully their potential consequences on water quality. The objective of this research was to evaluate the leaching potential of IFT and DKN in conventional (CT) and conservation (MT) tillage practices with or without crop cover during the intercrop season in a maize monoculture plot located in the south of France.

### 13.2. Materials and methods

Field experiments were conducted in 2005 in an agricultural field situated in the alluvial corridor of the Garonne River (France). The soil was a Gleyic Luvisol with a loamy surface layer and an illuvial clay horizon appearing between 45 and 55 cm. The field was in continuous maize (*Zea mays*) production irrigated with a centre pivot.

Since 2000, the field was divided in two plots conducted with conventional tillage (CT) or conservation tillage (MT). During the intercrop period, each tillage plot was divided in two parts: one part conducted without cover crop (bare soil), the other part sown with oat (*Avena sativa*). The CT plot was mouldboard ploughed (working depth of 28–30 cm) followed by a cultivator combined with a roller (working depth of 8 cm) the first week of April. Seedbed preparation was done with two passages of a cultivator combined with a harrow and a roller (working depth of 8 cm). The MT plot was disked (working depth of 9–12 cm) the second week of November 2004. In March, a secondary operation was done with a cultivator combined with a harrow and a roller (working depth of 8 cm). For seedbed preparation, a single passage with a harrow combined with a roller was realised. In the CT plot, soil surface had no crop residue. In the MT plot, according to the intercrop management, soil surface was covered with only maize residues or with a mix of maize and oat residues. Both tillage treatments were planted the beginning of May 2005 with a six-row planter in 80-cm rows at a plant population of 75,000 plants per hectare.

Four days after sowing, isoxaflutole was applied at 1 l·ha<sup>-1</sup> with 75 g·l<sup>-1</sup> of active ingredient on both tillage treatments. Distribution and recovery of herbicide residues were determined from soil core analysis. Fractions of the soil profile were sampled to a depth of 80 cm before herbicide application and at 0, 2, 3, 5, 7, 11, 14, 21 and 28 days after treatment (DAT). For each plot, sampling time and depth, 10 soil samples were collected. These data were used to calculate degradation half-lives of the molecule ( $DT_{50}$ ) and migration depth under the different cropping systems. Under each tillage and intercrop management plots, two passive capillary fibreglass wick lysimeters (25 cm×25 cm) installed at 40-cm depth collected leachate volumes. Herbicide mass leached was calculated from herbicide concentrations in water and corresponding percolate volume. These data were used to calculate percentage loss of herbicides of each tillage system.



### 13.3. Results and discussion

#### 13.3.1. Persistence of isoxaflutole

Whatever the cropping system, isoxaflutole degradation was fast ( $\leq 1$  d), and 7 DAT, IFT was not detected in soil samples (Fig. 13.1). The amplitude of variation of IFT concentration at each sampling date was related to a spatial variability of spraying and of soil degradation capacities within each cropping system.

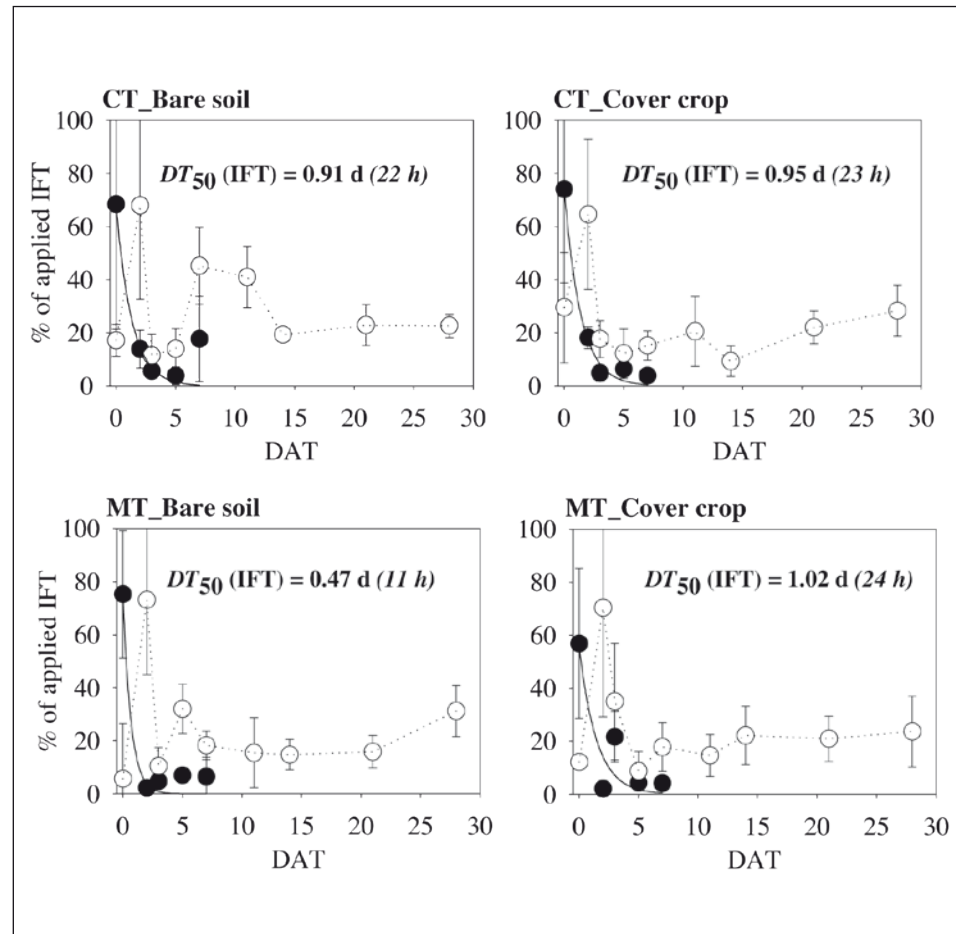


Fig. 13.1: Isoxaflutole (IFT) persistence under conventional tillage (CT) and conservation tillage (MT) with or without cover crop during the intercrop. Data of IFT concentration (black points) were fitted with first order kinetics. Open circles represent the diketonitrile metabolite (DKN) concentration and error bars represent 95 % confidence limits of the mean values. ( $DT_{50}$  is the degradation half-life of the molecule.)

Verbleib von Isoxaflutole bei konventioneller (CT) und konservierender (MT) Bodenbearbeitung, mit und ohne Zwischenfruchtanbau. Die Daten der IFT-Konzentration (schwarze Punkte) wurden nach Kinetik erster Ordnung angepasst. Die Kreise repräsentieren die Konzentrationen des Metaboliten DKN und die Fehlerindikatoren zeigen 95 % des Konfidenzbereiches der Mittelwerte. ( $DT_{50}$  ist die Abbau-Halbwertszeit des Moleküls.)

Half-life-periods of IFT were not significantly different between tillage practices without distinction of cover crop management (22–23 h for CT and from 11–24 h for MT; Fig. 13.1). In the MT system, we found a faster degradation of IFT on the plot without cover crop (11 vs. 24 h). Sorption of IFT was found to range from 25 (P. J. RICE et al., 2004) to  $7081 \cdot \text{kg}^{-1} \text{OC}$  (E. BELTRAN et al., 2002) and was correlated with organic matter content (S. MITRA et al., 1999). A more important interception on the MT plot with cover crop due to a higher amount of residues (maize plus oat) than under the bare soil plot (with only maize residues) may have occurred. On one side, some studies showed that IFT degradation was an abiotic process that was catalysed by retention on solid phase (P. J. RICE et al., 2004). On other side, J. ROUCHAUD et al. (2002) found that adsorption of IFT on the soil organic matter could increase its persistence. Our results were more in agreement with this second statement. On the CT plot, ploughing did not leave any residue on soil surface, and that could explain the similar values of  $DT_{50}$  under the two plots.

#### 13.3.2. Distribution in soil

The maximum migration depth in soil for IFT was 10 cm for all the cropping systems (data not shown). Under MT plots, 15 % of applied dose was found as DKN form in the seedbed layer 28 DAT and DKN reached a maximum of 17.5-cm depth. Under CT, migration was more important and in the bare soil plot, a peak of DKN was found at 12.5-cm depth with a maximum migration depth of 25 cm (Fig. 13.2). This faster migration could be attributed to the higher infiltration capacities under CT than MT due to ploughing.

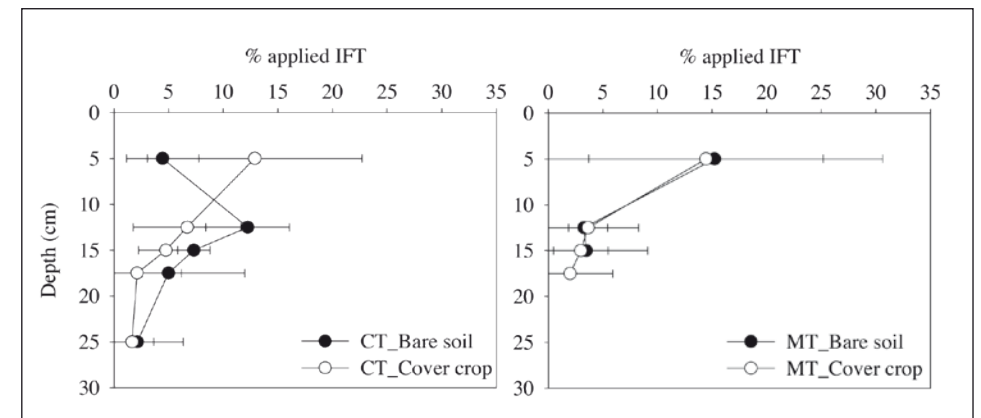


Fig. 13.2: Soil DKN distribution 28 days after treatment under the different cropping systems. The error bars represent 95 % confidence limits of the mean values. (Abbreviations see chap. 13.1. and 13.2.)

Verteilung von DKN im Boden 28 Tage nach Anwendung bei verschiedenen Bewirtschaftungssystemen. Die Fehlerindikatoren zeigen 95 % des Konfidenzbereiches der Mittelwerte. (Abkürzungen siehe Kap. 13.1. und 13.2.)

#### 13.3.3. Water and herbicide leaching

We found significantly lower leachate volumes under MT than under CT (Fig. 13.3) to the difference of what was observed in previous studies (A. R. ISENSEE et al., 1990).

Under CT, tillage operations were done few weeks before sowing while under MT, disk harrowing was realised seven months before sowing. Timing of tillage practices could explain these differences in leachate volumes.

Isoxaflutole has not been detected in water samples. Diketonitrile started to be quantified 50 DAT under CT with cover crop ( $1.34 \mu\text{g} \cdot \text{l}^{-1}$ ). Concentration peaks of DKN appeared earlier under CT plots than under MT plots. We reached a maximum of 8.5 % of applied IFT 64 DAT under CT with bare soil. Under MT with cover crop, concentrations of DKN were the lowest during the whole growing season. Cumulated losses of herbicide were almost 15 % of applied dose under CT. Under MT, more than 8 % of applied dose were found in water samples in the plot without cover crop while less than 2 % were found in the plot with cover crop. According to the lowest degradation found on this plot, we expected higher losses. The slowest migration measured on the MT plots compared to CT plots could have lead to

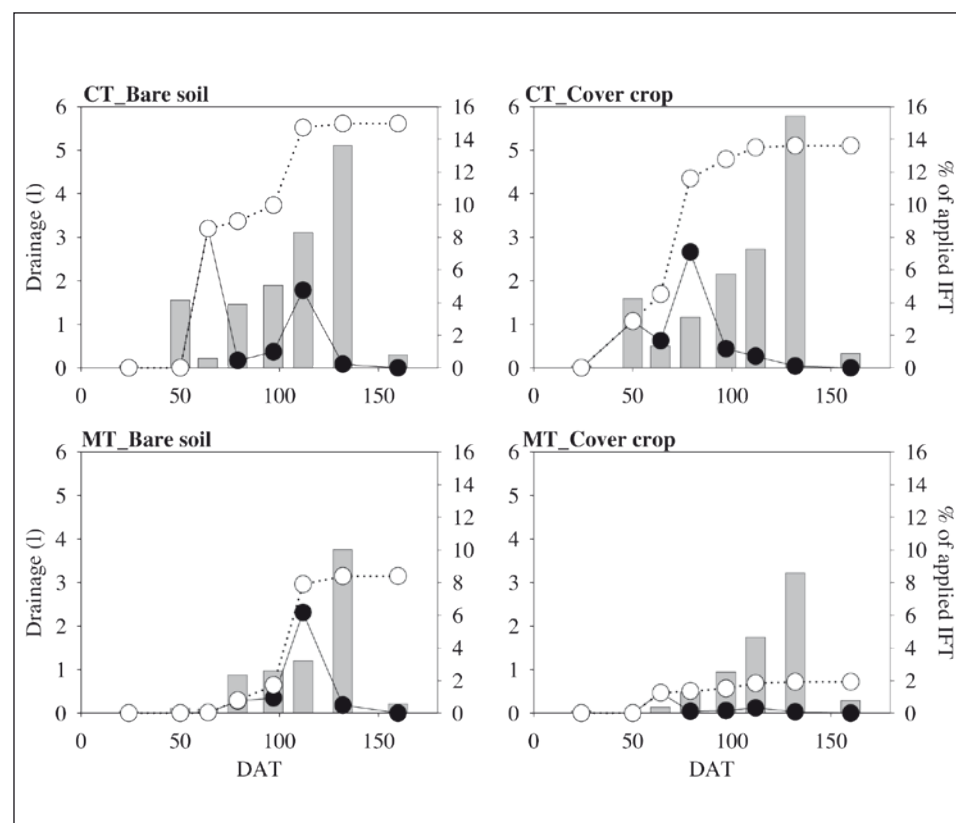


Fig. 13.3: Leachate volumes and DKN concentrations under the different cropping systems from sowing to harvest. Vertical bars are leachate volumes (in ml), black points are DKN concentrations expressed as % of applied IFT and open circles are cumulated loss of herbicide. (Abbreviations see chap. 13.1. and 13.2.)

Sickerwassermengen und DKN-Konzentrationen bei verschiedenen Bewirtschaftungssystemen vom Anbau bis zur Ernte. Die Säulen zeigen die Sickerwassermengen (in ml), die schwarzen Punkte verdeutlichen die DKN-Konzentrationen in % zum aufgetragenen IFT und die Kreise die kumulierte Menge des ausgewaschenen Herbizids. (Abkürzungen siehe Kap. 13.1. und 13.2.)

a more important degradation of the herbicide. We also believed that degradation capacities of the different soil layers in the two tillage systems were not equivalent and were maybe larger at depth under MT than under CT as found for fluometuron by R. M. ZABLOTOWICZ et al. (2000).

### 13.4. Conclusion

We studied the effect of tillage practices and intercrop management on the fate of isoxaflutole and its diketonitrile metabolite in a loamy soil. Isoxaflutole had a rapid degradation and a very limited migration in soil. Its metabolite had a more important mobility and was detected in soil solution. Conventional tillage system had the highest amount of herbicide that leached whatever the intercrop management. In our study, conservation technique seemed to reduce losses of herbicide and this effect was enhanced when intercrop was managed with a cover crop.

### Summary

The authors compared the effects of conventional tillage (CT) and conservation tillage (MT) on the fate of isoxaflutole (IFT), a maize herbicide, and its active metabolite diketonitrile (DKN) in an agricultural field located in the alluvial corridor of the Garonne river (France). Half-life of IFT was not different under the two tillage systems (ranging from 11–24 h). The maximum migration depth in soil for IFT was 10 cm for both tillage systems. Its DKN metabolite was found at a maximum depth of 15 cm under MT and 30 cm under CT 28 days after treatment (DAT). In water collected at 20 cm-depth with ceramic cups, we started to detect DKN 49 DAT with lower concentrations under MT than under CT. Water fluxes at 40 cm-depth were measured with fibreglass wick lysimeters. During the cropping season, more water was collected under CT than under MT. Under CT, the maximum DKN concentration ( $3.38 \mu\text{g} \cdot \text{l}^{-1}$ ) was reached 79 DAT with a cumulated drainage volume of 1,560 ml at that date. In MT, the maximum DKN concentration ( $0.80 \mu\text{g} \cdot \text{l}^{-1}$ ) was reached 97 DAT with a cumulated drainage volume of 1,090 ml.

### References

- BELTRAN, E., H. FENET, J. F. COOPER & C. M. COSTE (2002): Influence of the physical and chemical properties of soil on the retention process of isoxaflutole and its two main derivatives.– *Weed Res.*, **42**, 385–393, Oxford (Blackwell Publishing).
- GEBHARDT, M. R., T. C. DANIEL, E. E. SCHWEIZER & R. R. ALLMARAS (1985): Conservation tillage.– *Science*, **230**, 625–630, Washington (American Association for the Advancement of Science).
- ISENSEE, A. R., R. G. NASH & C. S. HELLING (1990): Effect of conventional vs. no-tillage on pesticide leaching to shallow groundwater.– *J. Environ. Qual.*, **19**, 434–440, Stanford University, American Society of Agronomy, Crop Science Society of America, Soil Science Society of America.
- LOCKE, M. A. & S. S. HARPER (1991): Metribuzin degradation in soil: II-Effects of tillage.– *Pest. Sci.*, **31**, 239–247, Bognor Regis (John Wiley & Sons, Ltd.).
- MITRA, S., P. C. BHOWMIK & B. S. XING (1999): Sorption of isoxaflutole by five different soils varying in physical and chemical properties.– *Pest. Sci.*, **55**, 935–942, Amsterdam (Elsevier).
- MITRA, S., P. C. BHOWMIK & B. XING (2000): Sorption and desorption of the diketonitrile metabolite of isoxaflutole in soils.– *Environ. Poll.*, **108**, 183–190, Amsterdam (Elsevier).

- PALLET, K. E., S. M. CRAMP, J. P. LITTLE, P. VEERASEKARAN, A. J. CRUDACE & A. E. SLATER (2001): Isoxaflutole: the background to its discovery and the basis of its herbicidal properties.– *Pest Manag. Sci.*, 57, 133–142, Bognor Regis (John Wiley & Sons, Ltd.).
- REDDY, K. N., M. A. LOCKE & L. A. GASTON (1997): Tillage and cover crop effects on cyanazine adsorption and desorption kinetics.– *Soil Sci.*, 162, 50–509, Philadelphia (Lippincott Williams & Wilkins).
- RICE, P. J., W. C. KOSKINEN & M. J. CARRIZOSA (2004): Effect of soil properties on the degradation of isoxaflutole and the sorption-desorption of isoxaflutole and its diketonitrile degradate.– *J. Agric. Food Chem.*, 52, 7621–7627, Washington (American Chemical Society).
- ROUCHAUD, J., O. NEUS, H. EELEN & R. BULCKE (2002): Soil metabolism of isoxaflutole in corn.– *Arch. Environ. Contam. Toxicol.*, 42, 280–285, New York (Springer).
- ZABLOTOWICZ, R. M., M. A. LOCKE, L. A. GASTON & C. BRYSON (2000): Interactions of tillage and soil depth on fluometuron degradation in a Dundee silt loam soil.– *Soil Till. Res.*, 57, 61–68, Amsterdam (Elsevier).

### Zusammenfassung

Die Autoren verglichen die Auswirkungen einer konventionellen (CT) und einer konservierenden (MT) Bodenbearbeitung auf einem mit Mais bestandenem Feld im Alluvial der Garonne (Frankreich) auf das Abbauverhalten von Isoxaflutole (IFT), einem Mais-Herbizid, und dessen aktiven Metaboliten Diketonitrile (DKN). Die Halbwertszeit des IFT zeigte bei den beiden Bodenbearbeitungsformen keinen deutlichen Unterschied (11–24 h). Unter beiden Bodenbearbeitungsformen erreichte das IFT eine maximale Verlagerungstiefe von 10 cm. Der Metabolit DKN trat 28 Tage nach Aufbringung (DAT) bei MT maximal in 15 cm, bei CT in 30 cm Tiefe auf. DKN wurde in mit Saugkerzen in einer Tiefe von 20 cm gesammelten Wasserproben erstmals nach 49 DAT in niedrigeren Konzentrationen bei MT als bei CT festgestellt.

In 40 cm Tiefe wurden mit Fiberglas-Docht-Sickerwassersammler die Wasserflüsse erfasst. Während der Vegetationszeit wurde unter konventioneller Bodenbearbeitung mehr Sickerwasser als unter konservierender Bodenbearbeitung erfasst. Bei CT wurde die maximale DKN-Konzentration ( $3.38 \mu\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$ ) nach 79 DAT bei einem kumulierten Sickerwasservolumen von 1560 ml, bei MT ( $0.80 \mu\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$ ) nach 97 DAT bei 1090 ml erreicht.

### Acknowledgments

The authors would like to thank Bayer CropScience for the technical grade DKN. This work was financially supported by the Agence de l'Eau Adour-Garonne (France).

Keywords: maize herbicide, isoxaflutole, diketonitrile, conventional tillage, conservation tillage

Schlüsselwörter: Mais-Herbizid, Isoxaflutole, Diketonitrile, konventionelle Bodenbearbeitung, konservierende Bodenbearbeitung

### Zusammenfassung (J. FANK)

Der langfristige Schutz des Grundwassers – und damit unseres Trinkwassers – kann nur im Zusammenspiel von Landwirtschaft, Wasserwirtschaft, Ökologie und Ökonomie stattfinden. Die internationale Konferenz mit dem Titel „Diffuse Einträge in das Grundwasser: Monitoring – Modellierung – Management. Landwirtschaft und Wasserwirtschaft im Fokus zu erwartender Herausforderungen“ betrachtete den aktuellen Forschungsstand in der Messtechnik und Datenerfassung, des Datenmanagements, verschiedene Modellansätze sowie künftige nachhaltige

ackerbauliche Bewirtschaftungsformen. Neben der Erarbeitung von grundwasser-verträglichen ackerbaulichen Bewirtschaftungsformen über seichtliegenden gering mächtigen Grundwasserleitern und Lysimetern als Werkzeug zur genauen Erfassung von Wasser- und Stoffkreislaufparametern wurden internationale und regionale Arbeiten zu den angesprochenen Themenkreisen vorgestellt. Letztere sind in diesem Beitrag zusammengefasst.

Schwerpunkte der Darstellung lagen insbesondere auf der Erweiterung eines bestehenden Modells zur Beurteilung einer nachhaltigen Bewirtschaftungsweise durch Koppelung mit einem Ansatz zur Berechnung von N-Treibhausgasemissionen und der Verwendung von Ergebnissen aus gut mit unterschiedlicher Messtechnik ausgestatteten Versuchsstandorten für die Validierung eines regional skalierten öko-hydrologischen Flussgebietsmodells.

Mehrere Arbeiten beschäftigten sich mit der modellbasierten Abschätzung des diffusen Stickstoffeintrages in das Grundwasser deutscher und schweizerischer Landschaftseinheiten. Im Zuge dessen wurden unterschiedliche Modellansätze vorgestellt, in denen neben naturwissenschaftlichen Parametern auch sozial- und wirtschaftswissenschaftliche Indikatoren Verwendung finden. Dabei wurde aber auch der Frage der Trennung der aktuellen Grundwasserbelastungssituation in eine „natürliche“ und eine „beeinflusste“ Komponente für unterschiedliche Qualitätsparameter Raum gegeben. Da die Grundwassersysteme nicht an nationalen Grenzen enden, wurde die Notwendigkeit internationaler Kooperation in den Vordergrund gestellt, was im Besonderen am Beispiel des Oberrheingraben dokumentiert werden konnte.

Eher prozessorientierte Beiträge beschäftigten sich mit der Frage der Erfassung und Modellierung der Denitrifikation und anderer Stickstoff-Umsatzprozesse. Die Probleme wurden anhand von Grundwasserleitern in Deutschland und Österreich diskutiert. Dabei wurde die hohe Bedeutung der Heterogenität in räumlicher und zeitlicher Hinsicht hervorgehoben und ein Defizit in ihrer Einbindung in Modellierungsvorhaben erkannt. Ein wesentliches Element stellt dabei auch die Unsicherheit der Prozesse im Übergangsbereich von der ungesättigten zur gesättigten Zone dar.

Die abschließende Arbeit beschäftigt sich mit dem Einfluss unterschiedlicher Bewirtschaftungssysteme auf das Abbauverhalten von Herbiziden am Beispiel eines Untersuchungsstandortes in Frankreich.

Die angesprochenen Themenkomplexe zeigen einerseits auch nach dem heutigen Untersuchungsstand noch immer die große Relevanz des diffusen Stickstoffeintrags in das Grundwasser, andererseits wird auch deutlich, dass die Modellierung eine maßgebliche Bedeutung bei der Ursachenfindung und der Problemlösung hat und dass in diesem Zusammenhang noch großer künftiger Forschungsbedarf sowohl auf der Prozessseite als auch in der regionalen Anwendung besteht.

### Summary (J. FANK)

Long-term protection of groundwater – and therefore of our potable water – can only take place in interaction between agriculture, water management, ecology, and economy. The international conference “Diffuse Inputs into the Groundwater: Monitoring – Modelling – Management. Agriculture and Water Management in the Light of Future Challenges” aimed at presenting measuring methods, data recording, data management, and various modelling approaches as well as future sustainable agricultural management systems. Beside the determination of groundwater protective agricultural

management systems at shallow aquifers and the presentation of lysimeters as a tool for precise evaluation of water balance and solute balance parameters, international and regional scaled contributions have been presented.

One focus of the presentations was on the extension of an existing model to evaluate sustainable agricultural management by coupling with a model to calculate N-greenhouse gas emission. The use of plot measurement data from well instrumented test sites for the validation of an eco-hydrological river basin model has been discussed.

Multiple papers dealt with model based estimation of diffuse nitrogen input in German and Switzerland aquifer systems. Different conceptual models have been presented, where social and economical indicators have been used beside natural scientific parameters. A procedure to define natural groundwater conditions from groundwater monitoring data has been developed. The distribution pattern of a specific groundwater parameter observed by a number of groundwater monitoring stations is reproduced by two statistical distribution functions, representing the "natural" and "influenced" component. On the example of the Upper Rhine aquifer the importance of international cooperation has been discussed. Groundwater systems and quality problems will not end at national boundaries.

Process oriented contributions were engaged in acquisition and modelling of denitrification and other N-transformation processes. Questions were discussed in German and Austrian aquifer systems. Heterogeneity in time scale and in areal distribution is of high relevance, and a deficit in model implementation is visible. The uncertainty at the saturated-unsaturated interface region is essential.

The final contribution focused on the influence of different agricultural management systems on the degradation of herbicides; results of a test field in France were shown.

The depicted topics show that diffuse impact of nitrogen into groundwater is relevant up to now. It has been shown that modelling is an essential tool on sourcing and troubleshooting. Actually a high need of research on process related topics as well as on regional scaled application has been detected.