

Forschungsbericht FZKA-BWPLUS

**Modellgestützte Optimierung des Einsatzes
finanzieller Mittel zur Verbesserung des
Sauerstoffhaushalts im Neckar**

von

B. Westrich, I. Haag

Universität Stuttgart
Institut für Wasserbau

Förderkennzeichen: BWC 99013

Die Arbeiten des Programms Lebensgrundlage Umwelt und ihre Sicherung werden mit Mitteln des Landes Baden-Württemberg gefördert

Juli 2002

INHALTSVERZEICHNIS

Verzeichnis der Abbildungen	IV
Verzeichnis der Tabellen	XI
Zusammenfassung	XIV
Summary	XIX
1 Einführung	1
1.1 Problemstellung	1
1.2 Zielsetzung und Vorgehensweise	1
2 Grundlagen des Stoffhaushalts in staugeregelten Flüssen	3
2.1 Einführung	3
2.2 Strömung und Transport	3
2.2.1 Strömung	3
2.2.2 Ausbreitung und Transport	5
2.3 Stoffaustausch über die Grenzflächen	6
2.3.1 Gasaustausch mit der Atmosphäre	6
2.3.2 Der Austausch mit dem Sediment	6
2.4 Gewässerinterne Stoffumsetzungen	9
2.4.1 Grundlagen des gewässerinternen Stoffhaushalts	9
2.4.2 Abbau toter organischer Substanz und Stickstoffkreislauf	14
2.4.3 Phytoplankton	18
2.5 Anthropogene Beeinflussung des Stoffhaushalts	24
2.5.1 Stoff- und Wärmeeintrag	24
2.5.2 Auswirkungen der Stauregulierung auf den Stoffhaushalt	26
3 Untersuchungsgebiet	29
3.1 Grundlegendes	29
3.2 Hydrologie	30
3.3 Gewässergütedaten	32
4 Historische Entwicklung des Sauerstoffhaushalts im Neckar	33
4.1 Motivation	33
4.2 Datengrundlage	33
4.3 Statistische Methoden	34
4.4 Ergebnisse und Diskussion	36
4.4.1 Entwicklung der Abwasserreinigung	36
4.4.2 Sauerstoff	37
4.4.3 Zehrstoffe, Nährstoffe und Chlorophyll	45
4.4.4 Zusammenfassende Diskussion der Ergebnisse	48
5 Aktueller Zustand des Stoffhaushalts im Neckar	50
5.1 Einleitung	50
5.2 Allgemeine Charakterisierung des Stoffhaushalts	50
5.3 Identifikation und Bewertung der maßgeblichen Prozesse	64
5.3.1 Methodik	64
5.3.2 Ergebnisse und Diskussion	65
5.4 Folgerungen aus der empirischen Analyse des Stoffhaushalts	73

6 Gasaustausch mit der Atmosphäre	75
6.1 Motivation und Zielsetzung	75
6.2 Untersuchungsgebiet und experimentelle Methoden	75
6.3 Gasaustausch auf der Fließstrecke	77
6.3.1 Theorie des Stoffübergangs an der freien Wasseroberfläche	77
6.3.2 Wiederbelüftungsformeln	81
6.3.3 Befunde zum Gasaustausch auf der Fließstrecke	84
6.4 Gasaustausch beim freien Wehrüberfall	92
6.4.1 Theorie des Gasaustauschs an freien Überfällen	92
6.4.2 Vorhersageformeln für den Sauerstoffeintrag und deren Bewertung	96
6.4.3 Ableitung eines mechanistischen Modells für den Gasübergang an freien Überfällen	101
6.4.3 Experimentelle Befunde zum Gasaustausch am Wehr Esslingen	110
7 Stoffübergang an der Grenzfläche Sediment-Wasser	117
7.1 Motivation	117
7.2 Theoretische Grundlagen	117
7.2.1 Empirische Ansätze zur Sauerstoffzehrung des Sediments	117
7.2.2 Maßgebende Prozesse im Sediment	118
7.2.3 Der Einfluss der wasserseitigen Grenzschicht	122
7.2.4 Quantitative Bedeutung der Einflussfaktoren	124
7.3 Methoden	126
7.3.1 Experimentelle Bestimmung des Stoffübergangs	126
7.3.2 Simulationsmodell für die Stoffflüsse über die Grenzfläche Sediment-Wasser	131
7.4 Ergebnisse und Diskussion	132
7.4.1 Bedeutung des wasserseitigen Widerstands für den Stoffübergang	132
7.4.2 Begleitende Simulation der in situ-Messungen	133
7.4.3 Experimentelle Befunde bei der in situ-Messung des Stoffübergangs	137
7.4.4 Diskussion der in situ-Messungen	143
8 Simulationsmodelle für den Stoffhaushalt: Beschreibung, Kalibrierung und Bewertung	148
8.1 Einleitung	148
8.4.1 Problemstellung	148
8.4.2 Zielsetzung und Vorgehensweise	148
8.2 Verfügbare Modellansätze	150
8.3 Modellgebiet	153
8.4 Das Basismodell zur Simulation des Stoffhaushalts: BWQM	154
8.4.1 Strömungs- und Transportmodell	154
8.4.2 Das Stoffhaushaltsmodell in BWQM	155
8.4.3 Sensitivitätsanalyse, Parameteridentifikation und Kalibrierung des BWQM	159
8.4.4 Überprüfung und Bewertung des BWQM	169
8.5 Das um Primärkonsumenten erweiterte Modell: EWQM	174
8.5.1 Grundlegendes	174
8.5.2 Das Stoffhaushaltsmodell im EWQM	174
8.5.3 Wahl der Parameterwerte im EWQM	177
8.5.4 Simulationsergebnisse mit dem EWQM	180
8.6 Das Gewässergütesimulationsmodell ATV-FGSM	183
8.6.1 Aufbau und Funktionalitäten des Modells	184
8.6.2 Implementierung des Modells und Anpassung der Parameter	186
8.6.3 Simulationsergebnisse mit dem ATV-FGSM	189
8.7 Bewertender Vergleich der Simulationsmodelle	193

9 Modellgestützte Analyse des Stoffhaushalts im mittleren Neckar	196
9.1 Auswirkungen der Wärmeeinleitungen.....	196
9.2 Sauerstoffhaushalt und Phytoplankton.....	198
9.2.1 Steuergrößen der Sauerstoffkonzentrationen.....	198
9.2.2 Steuergrößen der Phytoplanktodynamik.....	203
9.3 Nährstoffretention.....	210
9.3.1 Motivation.....	210
9.3.2 Ergebnisse und Diskussion.....	210
10 Modellgestützte Prognosen zur Verbesserung des Sauerstoffhaushalts	215
10.1 Einzuhaltende Sauerstoffkriterien.....	215
10.2 Grundlegende Szenarien.....	216
10.3 Nährstofflimitierung.....	219
10.3.1 Simulationsergebnisse.....	219
10.3.2 Diskussion.....	224
10.4 Zehrstoffemissionen auf der Modellstrecke.....	225
10.5 Veränderung der Stauziele.....	228
10.6 Belüftungsmaßnahmen und deren Optimierung.....	230
10.6.1 Sauerstoffeintragspotenziale durch Turbinen- und Wehrbelüftung.....	230
10.6.2 Ökologisch-ökonomische Optimierung von Turbinen- und Wehrbelüftung.....	235
10.6.3 Bewertung von Belüftungsstrategien anhand von Simulationsszenarien.....	237
10.6.4 Diskussion der Belüftungsmaßnahmen.....	243
10.7 Folgerungen und Ausblick.....	244
Literaturverzeichnis	245
Anhang	
A Simulationsmodell für Stoffumsatz und Transport im Sediment.....	262
B Basic Water Quality Model (BWQM).....	267
C Extended Water Quality Model (EWQM).....	280
D Gewässergütesimulationsmodell der ATV-DVWK (ATV-FGSM).....	290
E Nomogramme zur Wehrbelüftung.....	295
F Liste der aus diesem und dem Vorgängerprojekt seit 1999 hervorgegangenen Publikationen.....	302

VERZEICHNIS DER ABBILDUNGEN

<i>Abb. 2.1:</i>	Schematische Darstellung der für den Stoffhaushalt staugeregelter Flüsse maßgeblichen Prozesse.	3
<i>Abb. 2.2:</i>	Grundlegendes Prinzip des internen Stoffhaushalts und der anthropogenen Beeinflussung durch Einleitungen von Nähr- und Zehrstoffen.	9
<i>Abb. 2.3:</i>	Schematische Darstellung der Flüsse von mineralischen Nährstoffen (gestrichelte Linie), Energie (durchgezogene Linie) und Biomasse inklusive gespeicherter Energie und Nährstoffe (Blockpfeile) beim Übergang zwischen zwei trophischen Stufen.	13
<i>Abb. 2.4:</i>	Schematische Darstellung der für den Sauerstoffhaushalt relevanten Prozesse beim biochemischen Abbau toter organischer Substanz und der nachfolgenden Stickstoffumsetzung.	14
<i>Abb. 2.5:</i>	Relative Anteile des Ammoniaks an der Gesamtkonzentration von $\text{NH}_3 + \text{NH}_4^+$ in Abhängigkeit vom pH-Wert und der Wassertemperatur (links), sowie Gesamtkonzentrationen bei denen 0,01 mg/L NH_3 in Abhängigkeit vom pH-Wert überschritten werden (rechts).	16
<i>Abb. 2.6:</i>	Beziehung zwischen verfügbarer Strahlung und dem Hemmfaktor des Algenwachstums infolge nicht optimaler Lichtbedingungen F_{PAR} .	19
<i>Abb. 2.7:</i>	Hemmfaktor für nicht optimale Temperaturbedingungen als Funktion der Wassertemperatur für vier typische Algengesellschaften (nach Messungen von Pöhlmann et al. 1989).	20
<i>Abb. 2.8:</i>	Schematische Darstellung der Vorgänge beim Fraß von Phytoplankton durch Filtrierer.	23
<i>Abb. 3.1:</i>	Bundeswasserstraße Neckar mit Bezeichnung der Stauhaltungen und Lage der Messstellen.	29
<i>Abb. 3.2:</i>	Abflussregime des Neckars bei Plochingen. Datengrundlage: Tagesabflüsse während der Jahre 1970 bis einschließlich 1998.	31
<i>Abb. 4.1:</i>	Entwicklung des Anschlussgrads der Wohnbevölkerung an die öffentliche Kanalisation und der Art der Abwasserreinigung in Baden-Württemberg. Daten nach Baden-Württemberg (1998).	36
<i>Abb. 4.2:</i>	Entwicklung der in Baden-Württemberg jährlich behandelten Abwassermenge und der emittierten ATH-BSB ₅ Fracht. Daten nach Baden-Württemberg (1998).	37
<i>Abb. 4.3:</i>	Ergebnisse der parametrischen statistischen Modelle 1 (oben) und 2 (unten) für Sauerstoff an der Station Poppenweiler.	39
<i>Abb. 4.4:</i>	Ergebnisse des robusten statistischen Modells 3 für Sauerstoff an der Station Poppenweiler.	40
<i>Abb. 4.5:</i>	Ergebnisse des robusten statistischen Modells 4 für Sauerstoff an der Station Poppenweiler.	41
<i>Abb. 4.6:</i>	Ergebnisse des robusten statistischen Modells 3 für Sauerstoff an der Station Poppenweiler während der Zeitabschnitte vor und nach dem 1.1.1987. (Dargestellt sind nur die Kendall-Theil-Trendgeraden für die verbleibenden Residuen).	43
<i>Abb. 4.7:</i>	Jährliche Maxima, Medianwerte und Minima der Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen an der Station Poppenweiler sowie berechnete Trendgeraden für die Jahresminima.	44

<i>Abb. 4.8:</i>	Ergebnisse des robusten statistischen Modells 3 für BSB ₅ , N-NH ₄ , N-NO ₃ , P-PO ₄ und Chl-a an der Station Poppenweiler. (Dargestellt sind nur die Kendall-Theil-Trendgeraden für die verbleibenden Residuen).	47
<i>Abb. 5.1:</i>	Relative Anteile der Hauptkationen bzw. Hauptanionen an der positiven respektive negativen Ladung im Neckarwasser bei Poppenweiler.	51
<i>Abb. 5.2:</i>	Box-und-Whisker-Plots der elektrischen Leitfähigkeit, des pH-Wertes, der Wassertemperatur, der Sauerstoffkonzentration und der Sauerstoffsättigung an verschiedenen Messstellen im Neckar. Dargestellt sind 5-, 10-, 25-, 50-, 75-, 90- und 95-Perzentile.	52
<i>Abb. 5.3:</i>	Box-und-Whisker-Plots des BSB ₅ , der Ammonium-Stickstoff, der Nitrat-Stickstoff, der Gesamtorthosphosphat-Phosphor und der Chl-a Konzentrationen an verschiedenen Messstellen im Neckar. Dargestellt sind 5-, 10-, 25-, 50-, 75-, 90- und 95-Perzentile.	53
<i>Abb. 5.4:</i>	Anzahl der Tage und Ereignisse je Jahr an denen die Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen unter 6 mg/L lagen (links) bzw. die Sauerstoffsättigung 120% überschritt (rechts).	55
<i>Abb. 5.5:</i>	Mittlere Dauerlinien der Sauerstoffkonzentrationen der Jahre 1993 bis 1998 sowie Dauerlinien der Einzeljahre an den Registrierstationen Poppenweiler, Rockenau und Mannheim.	57
<i>Abb. 5.6:</i>	Tagesabflüsse am Pegel Plochingen während der Jahre 1995 bis 1998.	58
<i>Abb. 5.7:</i>	Zeitlich-räumliche Strukturen der Sauerstoffgehalte im Neckar in den Jahren 1995 (oben) und 1996 (unten).	59
<i>Abb. 5.8:</i>	Zeitlich-räumliche Strukturen der Sauerstoffgehalte im Neckar in den Jahren 1997 (oben) und 1998 (unten).	60
<i>Abb. 5.9:</i>	Tagesmittelwerte und Schwankungsbreiten der Sauerstoffkonzentrationen sowie Chl-a Gehalte im Neckar bei Poppenweiler und tägliche Niederschlagshöhen an der Klimastation Stuttgart-Neckartal im Jahr 1997.	62
<i>Abb. 5.10:</i>	Tagesmittelwerte und Schwankungsbreiten der Sauerstoffkonzentrationen sowie Chl-a Gehalte im Neckar bei Poppenweiler und tägliche Niederschlagshöhen an der Klimastation Stuttgart-Neckartal im Jahr 1998.	63
<i>Abb. 5.11:</i>	Ladungsmuster der vier extrahierten Hauptkomponenten bei der HKA der gepoolten Daten von allen sechs Stationen (breite fett umrandete Balken) und bei der HKA an den einzelnen Probenahmestellen (schmale gemusterte Balken).	66
<i>Abb. 5.12:</i>	Jahresgänge der Faktorwerte von HK3 (<i>saisonale Komponente</i>).	68
<i>Abb. 5.13:</i>	Ladungsmuster der beiden nach der Eliminierung externer Einflüsse verbleibenden Hauptkomponenten. HKA der gepoolten Daten von allen sechs Stationen (breite fett umrandete Balken) und HKA an den einzelnen Probenahmestellen (schmale gemusterte Balken).	69
<i>Abb. 5.14:</i>	Faktorwerte der HK1 (<i>biologische Komponente</i>) als Funktion der Jahreszeit. Die grau dargestellte Ausgleichslinie wurde über LOWESS ermittelt.	71
<i>Abb. 5.15:</i>	Korrelation der Faktorwerte für Kochendorf mit zeitgleichen Faktorwerten der fünf anderen Probenahmestellen.	72
<i>Abb. 6.1:</i>	Beim Gastracerexperiment untersuchter Abschnitt des Neckars.	76
<i>Abb. 6.2:</i>	Schematische Darstellung des Zwei-Schicht-Modells.	78
<i>Abb. 6.3:</i>	Schematische Darstellung des Gangs eines Wasserpakets im Penetrationsmodell.	79
<i>Abb. 6.4:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und mit dem Transportmodell berechneten Durchbruchskurven des konservativen Tracers ARG.	87

<i>Abb. 6.5:</i>	Verteilung der normierten differentiellen Fehler und der multiplikativen Fehler für die untersuchten Wiederbelüftungsformeln. Multiplikative Fehler für MJ2 und MJ3 nicht dargestellt, da diese kleiner $-0,4$ sind.	89
<i>Abb. 6.6:</i>	Vergleich zwischen berechneten und gemessenen SF_6 -Konzentrationen für die optimale konstante Gasübergangsrate $k_{2,\text{SF}_6}=\text{const.}$, sowie die Wiederbelüftungsformeln OD2 und WO.	90
<i>Abb. 6.7:</i>	Abhängigkeit des Luftpfeils von der Eintauchgeschwindigkeit des Wasserstrahls für verschiedene theoretisch begründete und empirische Ansätze.	93
<i>Abb. 6.8:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Austauscheffizienzen für drei Formeln.	100
<i>Abb. 6.9:</i>	Vergleich der mit unterschiedlichen Modellansätzen berechneten Austauscheffizienzen für Sauerstoff und Schwefelhexafluorid.	105
<i>Abb. 6.10:</i>	Relative Sensitivität der Austauscheffizienz von den Parametern in Gleichung 6.43 in Abhängigkeit vom Henrykoeffizient.	106
<i>Abb. 6.11:</i>	Konturplot der Austauscheffizienz E an Luftblasen in Abhängigkeit von H und D_w . Berechnet mit Gleichungen 6.43 und 6.45 mit $Q_l/Q=0,7$ und $PM_b=87950$.	107
<i>Abb. 6.12:</i>	Isobare ($E_{\text{O}_2,\text{ib}}$) und klassische Austauscheffizienz (E_{O_2}) für Sauerstoff an einem Wehrüberfall (Tabelle 6.7, $z_{\text{eff}}=1$ m) in Abhängigkeit vom Sättigungsgrad des Oberwassers.	109
<i>Abb. 6.13:</i>	Effektive Tiefe der Luftblasen als Funktion des spezifischen Abflusses am Wehr Esslingen.	112
<i>Abb. 6.14:</i>	Isobarer Defizitquotient von Sauerstoff als Funktion des spezifischen Abflusses am Wehr Esslingen.	113
<i>Abb. 6.15:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und mit Gleichung 6.56 berechneten Sauerstoffsättigungen im Unterwasser des Wehres Esslingen.	114
<i>Abb. 6.16:</i>	Zu erwartende prozentuale Sauerstoffsättigungen im Unterwasser des Wehres Esslingen in Abhängigkeit vom spezifischen Abfluss und der Sättigung im Oberwasser (Gleichung 6.56).	115
<i>Abb. 6.17:</i>	Konturplot der Differenzen der mit Gleichung 6.56 und der Formel nach Avery & Novak (1978) vorhergesagten Sauerstoffsättigungen im Unterwasser des Wehres Esslingen.	115
<i>Abb. 7.1:</i>	Frühdiaogenetische Prozesse und deren Wirkung auf die Stoffflüsse im Sediment.	118
<i>Abb. 7.2:</i>	Turbulenter Diffusionskoeffizient als Funktion des Abstandes von der Sediment-Wasser Grenzfläche (nach Gleichung 7.7).	123
<i>Abb. 7.3:</i>	Theoretisches Sauerstoffkonzentrationsprofil in der diffusiven Grenzschicht und dessen lineare Approximation.	124
<i>Abb. 7.4:</i>	Theoretisch zu erwartende Abhängigkeit des SSB von Zehrungsrate und effektiver Diffusivität im Sediment, sowie von der Sohlschubspannungsgeschwindigkeit.	125
<i>Abb. 7.5:</i>	Versuchsstand zur Ermittlung des Einflusses der wasserseitigen Grenzschicht auf den SSB.	127
<i>Abb. 7.6:</i>	In situ-Gerät zur Ermittlung der Stoffflüsse über die Grenzfläche Sediment-Wasser.	130
<i>Abb. 7.7:</i>	Experimentell ermittelte Abhängigkeit des SSB von der Schubspannungsgeschwindigkeit.	133
<i>Abb. 7.8:</i>	Simulierte Porenwasserkonzentrationsprofile zu Beginn des Modellszenarios, nach 6 und nach 12 Stunden Versuchsdauer.	134
<i>Abb. 7.9:</i>	Zeitlicher Verlauf der Massenstromdichten im Modellszenario. Positive Massenstromdichten sind in das Freiwasser gerichtet.	135

<i>Abb. 7.10:</i>	Simulierter zeitlicher Verlauf der Stoffkonzentrationen im Feiwasser des in situ-Geräts.	136
<i>Abb. 7.11:</i>	Gemessene Verläufe der Sauerstoffkonzentrationen im Freiwasser des in situ-Geräts.	139
<i>Abb. 7.12:</i>	Simulierter Verlauf der Sauerstoffkonzentration im Freiwasser des in situ-Geräts bei unterschiedlichen durch die Messmethode bedingten Artefakten.	141
<i>Abb. 7.13:</i>	Bei den in situ-Messungen ermittelte Abhängigkeit des SSB vom BSB_{Sed} (A) und mit dem Simulationsmodell berechneter Zusammenhang zwischen abbaubarem organischem Material im Porenwasser und dem SSB (B).	144
<i>Abb. 7.14:</i>	Konzeptionelles Modell der Stoffflüsse in den untersuchten Neckarsedimenten.	145
<i>Abb. 8.1:</i>	Vorgehensweise bei der Wahl eines geeigneten Modells zur Simulation, Analyse und Prognose des Sauerstoffhaushalts im mittleren Neckar.	149
<i>Abb. 8.2:</i>	In den Simulationen berücksichtigter Abschnitt des Neckars.	153
<i>Abb. 8.3:</i>	Strukturen des zur Simulation des Stoffhaushalts im Neckar entwickelten deterministischen Basismodells (BWQM) und dessen Erweiterung (EWQM).	156
<i>Abb. 8.4:</i>	Ranking der Modellparameter nach ihrer Sensitivität für die Berechnung aller Messdaten von O_2 , Chl-a, NH_4 , NO_3 , PO_4 und Si an den Stationen Hofen, Aldingen und Poppenweiler.	165
<i>Abb. 8.5:</i>	Ranking der Modellparameter nach ihrer Sensitivität für die Berechnung der Messdaten von O_2 und Chl-a an den Stationen Hofen, Aldingen und Poppenweiler.	165
<i>Abb. 8.6:</i>	Ranking der Modellparameter nach ihrer Sensitivität für die Berechnung der Messdaten von O_2 und Chl-a an der Station Poppenweiler.	166
<i>Abb. 8.7:</i>	Kollinearitätsindices bei sukzessiver Erweiterung des zu identifizierenden Parametersatzes auf Grundlage der Messdaten der Varianten 2 und 3.	167
<i>Abb. 8.8:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und mit dem BWQM simulierten Chl-a und O_2 Konzentrationen im Neckar für das Sommerhalbjahr 1997.	171
<i>Abb. 8.9:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und simulierten BSB_5 , N- NH_4 , N- NO_3 , P- PO_4 und Si Konzentrationen im Neckar bei Poppenweiler für das Sommerhalbjahr 1997.	172
<i>Abb. 8.10:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und simulierten BSB_5 , N- NH_4 , N- NO_3 , P- PO_4 und Si Konzentrationen im Neckar bei Besigheim für das Sommerhalbjahr 1997.	173
<i>Abb. 8.11:</i>	Häufigkeit von Muscheln der Gattungen <i>Dreissena</i> und <i>Corbicula</i> bei der Benthosuntersuchung im Juni 1998 (Daten der LfU Baden-Württemberg).	179
<i>Abb. 8.12:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und mit dem EWQM simulierten Chl-a und O_2 Konzentrationen im Neckar für das Sommerhalbjahr 1997.	181
<i>Abb. 8.13:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und mit EWQM simulierten Konzentrationen herbivoren Zooplanktons im Neckar bei Poppenweiler für das Sommerhalbjahr 1996.	182
<i>Abb. 8.14:</i>	Simulierte Entwicklungen der Muschelbiomassen an spezifischen Querschnitten der Stauhaltungen Poppenweiler und Besigheim.	183
<i>Abb. 8.15:</i>	Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Wassertemperaturen im Neckar bei Poppenweiler (km 165) während des Sommerhalbjahres 1997.	187
<i>Abb. 8.17:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und mit dem ATV-FGSM simulierten Chl-a und O_2 Konzentrationen im Neckar für das Sommerhalbjahr 1997.	191
<i>Abb. 8.18:</i>	Vergleich zwischen gemessenen und mit dem ATV-FGSM simulierten Konzentrationen herbivoren Zooplanktons im Neckar bei Poppenweiler für das Sommerhalbjahr 1996.	192
<i>Abb. 8.19:</i>	Simulierte Entwicklung der Muschelbiomassen 1997 an Querschnitten der Stauhaltungen Hofen und Besigheim.	193

<i>Abb. 9.1:</i>	Mittlere Dauerlinien der Aufwärmspannen von 3 Wärmekraftwerken im Modellgebiet für die Monate April bis einschließlich Oktober der Jahre 1996 bis 1998.	196
<i>Abb. 9.2:</i>	Räumlich und zeitlich gemittelte Verteilungen der Temperaturerhöhungen infolge von Wärmeeinleitungen im Modellgebiet während der Monate April bis einschließlich Oktober. Dargestellt sind 5-, 10-, 25-, 50-, 75-, 90- und 95-Perzentile.	197
<i>Abb. 9.3:</i>	Vergleich der mit dem ATV-FGSM mit und ohne Wärmeinleitung simulierten Sauerstoffkonzentrationen 1997.	197
<i>Abb. 9.4:</i>	Mit BWQM simulierte Tagesmittelwerte der lokalen Sauerstoffumsatzraten an zwei spezifischen Querschnitten während der Sommermonate 1997.	199
<i>Abb. 9.5:</i>	Mit BWQM ermittelte relative Anteile verschiedener Prozesse an den lokalen Sauerstoffumsatzraten an zwei spezifischen Querschnitten zu drei Zeitpunkten.	200
<i>Abb. 9.6:</i>	Vergleich der mit dem BWQM simulierten Sauerstoffgehalte für den Sommer 1997, mit und ohne Primärbelastung durch Ammonium und BSB.	201
<i>Abb. 9.7:</i>	Vergleich der mit dem ATV-FGSM simulierten Sauerstoffgehalte für den Sommer 1997, mit und ohne Primärbelastung durch Ammonium und BSB.	202
<i>Abb. 9.8:</i>	Mit EWQM simulierte Tagesmittelwerte der lokalen Änderungsraten von Chl-a an zwei spezifischen Querschnitten während der Sommermonate 1997.	204
<i>Abb. 9.9:</i>	Mit EWQM ermittelte relative Anteile verschiedener Prozesse an den lokalen Umsatzraten von Chl-a an zwei spezifischen Querschnitten zu drei Zeitpunkten.	205
<i>Abb. 9.10:</i>	Mit dem EWQM erzielte Simulationsergebnisse im Neckar bei Besigheim (km 136,8), mit und ohne Berücksichtigung von herbivorem Zooplankton.	206
<i>Abb. 9.11:</i>	Mit dem EWQM erzielte Simulationsergebnisse im Neckar bei Besigheim (km 136,8), mit und ohne Berücksichtigung der benthischen Filtrierer.	207
<i>Abb. 9.12:</i>	Vergleich der mit dem BWQM für den Frühsommer 1997 erzielten Simulationsergebnisse mit gemessenen bzw. konstant bei 10 µg/L belassenen Chl-a Konzentrationen als Randbedingungen am oberen Modellrand und an den Nebenflüssen.	208
<i>Abb. 9.13:</i>	Vergleich der mit dem ATV-FGSM für den Frühsommer 1997 erzielten Simulationsergebnisse mit gemessenen bzw. konstant bei 10 µg/L belassenen Chl-a Konzentrationen als Randbedingungen am oberen Modellrand und an den Nebenflüssen.	209
<i>Abb. 9.14:</i>	Gesamtmassen der während der Simulationszeiträume in das Modellgebiet eingetragenen Nährstoffe und Aufschlüsselung nach ihrer Herkunft.	211
<i>Abb. 10.1:</i>	Zeitliche Verläufe der Globalstrahlung und Wassertemperatur sowie die daraus resultierenden Chl-a und Sauerstoffkonzentrationen im Neckar bei Poppenweiler für die beiden zugrunde gelegten Szenarien.	218
<i>Abb. 10.2:</i>	Längsverlauf der PO ₄ -P und Chl-a Gehalte für verschiedene Varianten des Szenarios 1 während der Zeit maximaler Algengehalte vor der Sauerstoffdepression.	220
<i>Abb. 10.3:</i>	Längsverlauf der PO ₄ -P und Chl-a Gehalte für verschiedene Varianten des Szenarios 1 während der Zeit minimaler Algengehalte in der Sauerstoffdepression.	221
<i>Abb. 10.4:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration zur Zeit der Sauerstoffdepression für verschiedene Phosphorlimitierungsvarianten von Szenario 1.	222
<i>Abb. 10.5:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration zur Zeit der Sauerstoffdepression für verschiedene Phosphorlimitierungsvarianten von Szenario 2.	224
<i>Abb. 10.6:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Emissionsvarianten von Szenario 1.	227
<i>Abb. 10.7:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Emissionsvarianten von Szenario 2.	227

<i>Abb. 10.8:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Stauhöhenvarianten von Szenario 1.	229
<i>Abb. 10.9:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Stauhöhenvarianten von Szenario 2.	230
<i>Abb. 10.10:</i>	Isolinien der maximal möglichen Sauerstoffaufstockung in mg/L, die am Wehr Poppenweiler durch Wehrüberfall erzielt werden kann.	231
<i>Abb. 10.11:</i>	Bei einem Abfluss von 12 m ³ /s durch Wehrbelüftung maximal erreichbare Sauerstoffkonzentrationen im Unterwasser der Wehranlagen.	232
<i>Abb. 10.12:</i>	Beziehung zwischen dem auf 20°C normierten Defizitquotienten und dem prozentualen Leistungsverlust bei der Turbinenbelüftung in Poppenweiler. Daten nach Wagner (1958).	233
<i>Abb. 10.13:</i>	Isolinien der Sauerstoffaufstockung in mg/L, die durch Turbinenbelüftung in Abhängigkeit von der Oberwasserkonzentration und dem Leistungsverlust bei 20°C erzielt wird.	233
<i>Abb. 10.14:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration bei Szenario 2 für verschiedene Dauerbelüftungsvarianten.	234
<i>Abb. 10.15:</i>	Leistungsbedarf je eingetragenen kg Sauerstoff am Wehr Poppenweiler, bei 20°C und einem Zielwert von 6 mg/L für das Unterwasser.	236
<i>Abb. 10.16:</i>	Regelschema zur Wahl des Belüftungsverfahrens.	236
<i>Abb. 10.17:</i>	Für die Wasserkraftanlagen Cannstatt, Hofen und Poppenweiler bei 20°C empfohlenes Belüftungsverfahren in Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration im Oberwasser und der zu erreichenden Zielkonzentration im Unterwasser.	237
<i>Abb. 10.18:</i>	Zeitlicher Verlauf der Sauerstoffkonzentration im Oberwasser der Stauanlagen Poppenweiler und Besigheim für zwei Variante von Szenario 1.	238
<i>Abb. 10.19:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Belüftungsvarianten von Szenario 1.	239
<i>Abb. 10.20:</i>	Zeitlicher Verlauf der Sauerstoffkonzentration im Oberwasser der Stauanlagen Hofen, Poppenweiler und Besigheim für drei Variante von Szenario 2.	241
<i>Abb. 10.21:</i>	Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Belüftungsvarianten von Szenario 2.	242
<i>Abb. B1:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1996.	274
<i>Abb. B2:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1996.	275
<i>Abb. B3:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1997.	276
<i>Abb. B4:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1997.	277
<i>Abb. B5:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1998.	278
<i>Abb. B6:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1998.	279

<i>Abb. C1:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1996.	284
<i>Abb. C2:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1996.	285
<i>Abb. C3:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1997.	286
<i>Abb. C4:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1997.	287
<i>Abb. C5:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1998.	288
<i>Abb. C6:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1998.	289
<i>Abb. D1:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1996.	290
<i>Abb. D2:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1996.	291
<i>Abb. D3:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1997.	292
<i>Abb. D4:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1997.	293
<i>Abb. D5:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1998.	294
<i>Abb. D6:</i>	Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1998.	295

VERZEICHNIS DER TABELLEN

<i>Tab. 2.1:</i>	Vergleich zwischen den von Burns und Rosa (1980) gemessenen und theoretisch mit Gleichung 2.5 ermittelten Sinkgeschwindigkeiten.	8
<i>Tab. 2.2:</i>	Charakteristische Werte für die BSB Abbauraten organischer Substanz unterschiedlicher Herkunft (Zusammengestellt nach Chapra 1997 und ATV 1998).	15
<i>Tab. 2.3:</i>	Halbsättigungskonzentrationen von Stickstoff, Phosphor und Silizium (nur Kieselalgen) nach Angaben unterschiedlicher Autoren.	21
<i>Tab. 3.1:</i>	Wesentliche Kenngrößen des Neckars und seines Einzugsgebiets. Daten nach LfU (2000) und Borchardt und Geffers (1999).	30
<i>Tab. 3.2:</i>	Gewässerkundliche Hauptwerte an den Neckarpegeln Plochingen und Rockenau. (Daten nach LfU (2000)).	31
<i>Tab. 3.3:</i>	Messstellen am Neckar und dort verfügbare Daten, die in dieser Arbeit verwendet wurden.	32
<i>Tab. 4.1:</i>	Für die Zeitreihenanalyse verwendete Messstellen und die an ihnen verfügbaren Daten.	34
<i>Tab. 4.2:</i>	Zur Zeitreihenanalyse der Stoffkonzentrationen verwendete statistische Modelle.	34
<i>Tab. 4.3:</i>	Ergebnisse der Trendanalysen für 14-tägliche Mediane der Sauerstoffkonzentrationen.	38
<i>Tab. 4.4:</i>	Mit dem statistischen Modell 1 berechnete mittlere Jahresamplituden sowie die Tage der minimalen bzw. maximalen Sauerstoffkonzentrationen; Ergebnisse der Tests bezüglich der Gültigkeit der Grundannahmen für die parametrischen Modelle 1 und 2.	38
<i>Tab. 4.5:</i>	Ergebnisse der Trendanalysen für 14-tägliche Mediane der Sauerstoffkonzentrationen mit dem robusten Modell 3, für Zeiträume vor und nach dem 1.1.1987.	42
<i>Tab. 4.6:</i>	Ergebnisse der Trendanalysen für Jahresminima der Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen mit der Regressionsanalyse.	44
<i>Tab. 4.7:</i>	Ergebnisse der Zeitreihenanalysen mit den robusten Modellen 3 und 4 für die Konzentrationen von Zehr- und Nährstoffen, sowie von Chl-a im Neckar. Die Einheiten für bt_1 sind für Chl-a in $\mu\text{g/L/a}$, für alle anderen Stoffe in mg/L/a .	46
<i>Tab. 5.1:</i>	Ladungsmatrix und weiterführende Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse der gepoolten Originaldaten. Ladungen $<0,3$ sind nicht dargestellt, Ladungen $>0,6$ sind fett gedruckt.	65
<i>Tab. 5.2:</i>	Stationsweiser prozentualer Anteil der Varianz, die durch die anhand der gepoolten Originaldaten extrahierten Hauptkomponenten erklärt wird.	70
<i>Tab. 5.3:</i>	Korrelationen der Faktorwerte von Proben die zeitgleich an unterschiedlichen Probenahmestellen entnommen wurden. Proben die innerhalb von zwei Tagen entnommen wurden, wurden als zeitgleich erachtet.	72
<i>Tab. 6.1:</i>	In dieser Arbeit auf ihre Anwendbarkeit im Neckar untersuchte Wiederbelüftungsformeln.	82
<i>Tab. 6.2:</i>	Henry- und Diffusionskoeffizienten von Sauerstoff und SF_6 in Wasser, sowie Skalierungsfaktoren zur Umrechnung der Gasaustauschrate von O_2 auf SF_6 für verschiedene Wassertemperaturen und konzeptionelle Modelle.	85
<i>Tab. 6.3:</i>	Fehlermaße für die beim Gastracerversuch am Neckar untersuchten Wiederbelüftungsformeln. Datengrundlage: 46 SF_6 -Mehrfachmessungen an den 5 Wehren zwischen Untertürkheim und Poppenweiler.	88

<i>Tab. 6.4:</i>	Gebräuchliche Vorhersageformeln für den Sauerstoffeintrag an freien Überfallwehren, die in der vorliegenden Arbeit anhand von Literaturdaten auf ihre Eignung überprüft wurden.	97
<i>Tab. 6.5:</i>	Literaturdaten, die zur Bewertung der Vorhersageformeln für die Wehrbelüftung verwendet wurden.	98
<i>Tab. 6.6:</i>	Güte der Formeln zur Vorhersage des Sauerstoffeintrags an freien Überfällen.	99
<i>Tab. 6.7:</i>	Parameterwerte und Randbedingungen des Szenarios, mit dem die unterschiedlichen Modellvarianten verglichen wurden.	104
<i>Tab. 6.8:</i>	Ergebnisse der SF ₆ -Messungen am Wehr Esslingen.	110
<i>Tab. 6.9:</i>	Ergebnisse der zeitgleichen Sauerstoff und SF ₆ Messungen am Wehr Esslingen.	111
<i>Tab. 7.1:</i>	Reaktionsgleichungen frühdiagenetischer Prozesse, die den Sauerstoffverbrauch der Sedimente unmittelbar oder mittelbar beeinflussen. Die gewählte Stöchiometrie beruht auf dem Redfield-Verhältnis.	119
<i>Tab. 7.2:</i>	Hydraulische Eigenschaften des Laborversuchsstandes in dem für die Versuche gewählten Durchflussbereich.	128
<i>Tab. 7.3:</i>	Vergleich zwischen den tatsächlichen Massenstromdichten im Modellszenario und den Massenstromdichten, die aus den Stoffkonzentrationen im Freiwasser des Versuchssystems ermittelt wurden.	137
<i>Tab. 7.4:</i>	Beschreibung der Messstellen zur in situ-Messung des Stoffübergangs an der Grenzfläche Sediment-Wasser.	138
<i>Tab. 7.5:</i>	Auswertung der in situ-Messungen zum SSB mit 3 Varianten des Regressionsansatzes. SSB auf 20°C normiert, sowie Bestimmtheitsmaß (R ²) und Standardfehler (SF) der Regressionen. Die als repräsentativ erachteten SSB-Werte sind fett gedruckt.	142
<i>Tab. 7.8:</i>	Aus der Differenzenbetrachtung ermittelte Massenstromdichten bei den in situ-Versuchen zum Stoffübergang an der Grenzfläche Sediment-Wasser.	143
<i>Tab. 7.9:</i>	Korrelationsmatrix der mit der Differenzenmethode ermittelten Massenstromdichten. Rechts oben: Korrelationskoeffizienten nach Pearson. Links unten: zugehörige Irrtumswahrscheinlichkeiten.	146
<i>Tab. 8.1:</i>	Gebräuchliche Simulationsmodelle für den Stoffhaushalt von Fließgewässern.	152
<i>Tab. 8.2:</i>	Parameter des BWQM, ihre für die Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse verwendeten Werte sowie die angenommene prozentuale Unsicherheit der Parameterwerte.	163
<i>Tab. 8.3:</i>	Kollinearitätsindices (rechtes oberes Eck) und lineare Korrelationskoeffizienten (linkes unters Eck) für die Sensitivitätsfunktionen von Parameterpaaren.	168
<i>Tab. 8.4:</i>	Kollinearitätsindices für unterschiedliche Parameterkombinationen.	168
<i>Tab. 8.5:</i>	Bei der Kalibrierung ermittelte Parameterwerte. Alle anderen, nicht kalibrierten Parameter behielten die in Tab. 8.2 enthaltenen Werte.	169
<i>Tab. 8.6:</i>	Werte der zusätzlichen Parameter des EWQM und gegenüber dem BWQM geänderte Parameterwerte.	178
<i>Tab. 8.7:</i>	Bausteine des ATV-FGSM (ATV 1998, modifiziert).	184
<i>Tab. 8.8:</i>	Mögliche Bausteinkombinationen im ATV-FGSM (ATV 1998, modifiziert).	185
<i>Tab. 8.9:</i>	Für die Simulation mit dem ATV-FGSM festgelegte Simulationsvarianten und konstante Randbedingungen.	188
<i>Tab. 8.10:</i>	Gegenüber den Voreinstellungen veränderte Parameterwerte (KE-Werte) für die Simulationsläufe mit dem ATV-FGSM.	189

<i>Tab. 9.1:</i>	Deskriptive Statistik der mit dem BWQM und dem ATV-FGSM ermittelten Veränderung der Sauerstoffkonzentrationen durch die Primärbelastung im Neckar bei Poppenweiler (km 165,0) und bei Besigheim (km 136,7).	201
<i>Tab. 9.2:</i>	Deskriptive Statistik der mit dem BWQM und dem ATV-FGSM ermittelten Veränderung der Sauerstoffkonzentrationen durch die Stoffeinleitungen der Kläranlagen auf der Modellstrecke im Neckar bei Poppenweiler (km 165,0) und bei Besigheim (km 136,7).	203
<i>Tab. 9.3:</i>	Mit dem BWQM erzielte Simulationsergebnisse hinsichtlich der Beiträge von Verlustprozessen und internen Quellen zum Stickstofftransport im Modellgebiet.	212
<i>Tab. 9.4:</i>	Mit dem BWQM erzielte Simulationsergebnisse hinsichtlich der Beiträge von Verlustprozessen zum Phosphortransport im Modellgebiet.	213
<i>Tab. 10.1:</i>	Rahmenbedingungen für die beiden untersuchten Szenarien.	217
<i>Tab. 10.2:</i>	Minimale Sauerstoffkonzentrationen in mg/L in den einzelnen Stauhaltungen bei unterschiedlichen Phosphorlimitierungsvarianten der beiden Szenarien.	223
<i>Tab. 10.3:</i>	Minimale Sauerstoffkonzentrationen in mg/L in den einzelnen Stauhaltungen bei unterschiedlichen Emissionsvarianten der beiden Szenarien.	226
<i>Tab. 10.4:</i>	Minimale Sauerstoffkonzentrationen in mg/L in den einzelnen Stauhaltungen bei unterschiedlichen Stauhöhenvarianten der beiden Szenarien.	229
<i>Tab. 10.5:</i>	Minimale Sauerstoffkonzentrationen in mg/L in den einzelnen Stauhaltungen bei unterschiedlichen Belüftungsvarianten der beiden Szenarien.	240
<i>Tab. A1:</i>	Variablen im Simulationsmodell für Stoffumsatz und Transport im Sediment.	262
<i>Tab. A2:</i>	Algebraische Gleichungen im Simulationsmodell für Stoffumsatz und Transport im Sediment.	264
<i>Tab. A3:</i>	Differentialgleichungen zur Beschreibung der Stoffumsätze in Sediment und Wasser.	265
<i>Tab. A4:</i>	Parameterwerte im Simulationsmodell für Stoffumsatz und Transport im Sediment.	266
<i>Tab. B1:</i>	Variablen im BWQM.	267
<i>Tab. B2:</i>	Algebraische Gleichungen im BWQM.	269
<i>Tab. B3:</i>	Differentialgleichungen zur Beschreibung der gewässerinternen Prozesse im BWQM.	271
<i>Tab. B4:</i>	Für die Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse verwendete Parameterwerte und deren angenommene Unsicherheit im BWQM.	272
<i>Tab. B5:</i>	Kalibrierter Parameterwerte im BWQM.	273
<i>Tab. C1:</i>	Zusätzliche Variablen des EWQM, die nicht im BWQM enthalten sind.	280
<i>Tab. C2:</i>	Zusätzliche algebraische Gleichungen des EWQM, die nicht im BWQM enthalten sind.	281
<i>Tab. C3:</i>	Zusätzliche bzw. gegenüber dem BWQM veränderte Differentialgleichungen im EWQM.	282

ZUSAMMENFASSUNG

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit dem Sauerstoffhaushalt der Bundeswasserstraße Neckar. Der staugeregelte Neckar kann hierbei als Modell für andere, relativ tiefe stauregulierte Flüsse gelten. Insbesondere der erste Abschnitt der Bundeswasserstraße zwischen Deizisau und der Enzmündung bei Besigheim ist beispielhaft für andere Wasserstraßen mit geringen mittleren Abflüssen, wie Fulda oder Saar, in denen Probleme mit dem Sauerstoffhaushalt besonders häufig sind. Da der Sauerstoffgehalt durch zahlreiche Prozesse direkt oder indirekt beeinflusst wird, schließt der Sauerstoffhaushalt andere Wasserinhaltsstoffe wie Zehrstoffe, Nährstoffe, Algen und zum Teil Organismen höherer trophischer Stufen mit ein, wodurch eine umfassendere Betrachtung des Stoffhaushalts notwendig wird.

Die wesentlichen Ziele der vorliegenden Arbeit lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- (1) Der Stoffhaushalt des Neckars sollte auf Grundlage der vorliegenden Monitoringdaten in seiner historischen Entwicklung und hinsichtlich seines aktuellen Zustandes analysiert werden.
- (2) Für den Sauerstoffhaushalt relevante Aspekte des Stoffübergangs an den Grenzflächen Sediment-Wasser und Atmosphäre-Wasser, sollten mit Hilfe experimenteller Prozessstudien näher beleuchtet werden, da für diese nur unzureichende quantitative Erkenntnisse vorlagen.
- (3) Auf Grundlage der aus (1) und (2) gewonnenen Erkenntnisse sollte ein adäquates, verfügbares Simulationsmodell ausgewählt werden und/oder gegebenenfalls ein neues Modell entwickelt werden, um den Sauerstoffhaushalt zu simulieren, das Stoffhaushaltssystem quantitativ zu analysieren und Prognosen für Bewirtschaftungsszenarien zu treffen.

Nach einer Einführung in die Problemstellung und Zielsetzung werden hierfür zunächst die Grundlagen des Stoffhaushalts gestauter Flüsse dargestellt. Hierbei liegt der Schwerpunkt auf den gewässerinternen Umsätzen und somit auf biologischen Prozessen, da deren Verständnis im Bereich der Ingenieurwissenschaften nicht unbedingt vorausgesetzt werden kann. Auf die theoretischen Grundlagen der Austauschprozesse an den Grenzflächen wird hingegen erst in den entsprechenden Kapiteln zu den Prozessstudien detailliert eingegangen. Im nachfolgenden Kapitel 3 wird das Untersuchungsgebiet hinsichtlich seiner für die vorliegende Studie relevanten Eigenschaften charakterisiert.

Die historische Entwicklung des Sauerstoffhaushalts wird mit Hilfe von Zeitreihenanalysen der Monitoringdaten in Kapitel 4 untersucht. Hierbei wird deutlich, dass sich im vorliegenden Fall robuste, nicht parametrische Verfahren zumeist besser zur Quantifizierung zeitlicher Trends eignen, als die herkömmlichen Regressionsverfahren. Mit Hilfe der statistischen Analysen kann ein signifikanter Anstieg der mittleren Sauerstoffkonzentrationen zwischen 1975 und 1998 detektiert werden. Die mittleren Konzentrationserhöhungen waren im Zeitraum von 1975 bis 1986 wesentlich ausgeprägter als zwischen 1987 und 1998. Die jährlichen Minimalkonzentrationen des Sauerstoffs stiegen bis Ende der 1980er Jahre ebenfalls kontinuierlich an. Seit dieser Zeit liegen für die Jahresminima, bei starken Schwankungen von Jahr zu Jahr, keine signifikant positiven Trends mehr vor. Der Anstieg der mittleren Sauerstoffkonzentrationen wurde von einem signifikanten Rückgang der BSB-, Ammonium-, Nitrat- und Orthophosphatgehalte begleitet. Für Chl-a kann für die bis 1984 zurückreichenden Messreihen kein signifikanter Trend ermittelt werden. Die vor allem bis Ende der 1980er Jahre sehr deutliche Verbesserung des Sauerstoffhaushalts kann eindeutig auf die Reduktion der Zehrstoffemissionen (BSB und Ammonium) zurückgeführt werden. Dies unterstreicht den Erfolg der im Bereich des emissionsseitigen Gewässerschutzes getätigten Investitionen. Eine signifikante Reduktion des Algenwachstums kann jedoch trotz rückläufiger Nährstoffemissionen bislang nicht festgestellt werden.

Die in Kapitel 5 dargestellte empirische Analyse des aktuellen Zustands des Stoffhaushalts in der Bundeswasserstraße Neckar untermauert, dass der Sauerstoffhaushalt über weite Zeiträume stabil ist. Allerdings können während sommerlicher Niedrigwasserphasen sowohl extreme Sauerstoffübersättigungen als auch kurzzeitige Sauerstoffdepressionen bis auf 3 mg/L auftreten. Mit Hilfe explorativer statistischer Methoden kann gezeigt werden, dass die Extremwerte des Sauerstoffgehalts eng mit der zeitlichen Dynamik der Algen verknüpft sind: Der Aufbau von Algenblüten mit Chl-a Konzentrationen über 100 µg/L kann hohe Übersättigungen und ausgeprägte Tag-Nacht-Schwankungen bedingen. Beim Zusammenbruch dieser Algenblüten kann das frei werdende, gewässerintern aufgebaute Zehrungspotenzial zu ausgeprägten Sauerstoffdepressionen führen. Diese Prozesse sind wohl auch für die in Kapitel 4 detektierte Stagna-

tion der Jahresminima der Sauerstoffgehalte verantwortlich. Als wichtigstes Hindernis für eine weitergehende, nachhaltige Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts im Neckar, ist somit der eutrophe Zustand des Gewässers anzusehen.

In Kapitel 6 wird der Gasaustausch zwischen Wasser und Atmosphäre und insbesondere der Sauerstoffübergang näher beleuchtet. Zentraler Bestandteil dieser Analyse sind die Ergebnisse eines Gastracerexperiments, das bei Niedrig- bis Mittelwasser im Neckar zwischen Deizisau und Ludwigsburg-Poppenweiler durchgeführt wurde. Auf der Fließstrecke zwischen Obertürkheim und Poppenweiler wurden insgesamt 15 gebräuchliche Formeln hinsichtlich ihrer Eignung zur Vorhersage der Sauerstoffwiederbelüftung getestet. Hierbei erwiesen sich die von Wolf (1974) und die von O'Connor und Dobbins (1958) vorgeschlagenen Vorhersageformeln als am besten geeignet. Mit einem konstanten Stoffübergangskoeffizienten, der für Sauerstoff bei 20°C 0,9 m/d beträgt, können ähnlich gute Übereinstimmungen erzielt werden. Dies zeigt, dass die für den Gasaustausch maßgeblichen Faktoren im Neckar bei den untersuchten Niedrig- bis Mittelwasserbedingungen weder räumlich noch zeitlich stark variieren. Die Eignung von Wehrbelüftungsformeln wurde unter Verwendung von Literaturdaten überprüft. Hierbei erwies sich die von Avery und Novak (1978) vorgeschlagene Formel als am besten geeignet, um den Sauerstoffeintrag bei freien Überfällen zu prognostizieren. Diese Formel – wie auch alle anderen in der Literatur genannten Formeln – berücksichtigt die infolge des auf die eingetauchten Luftblasen wirkenden Drucks erhöhte Löslichkeit von Gasen jedoch nicht. Somit ist sie nicht geeignet, mögliche Übersättigungen im Unterwasser vorherzusagen. Aus diesem Grund wurde ein mechanistisches Modell abgeleitet, bei dem der Gasübergang an den eingetauchten Luftblasen explizit simuliert wird, wodurch auch der Überdruck berücksichtigt werden kann. Mit Hilfe des Modells kann gezeigt werden, dass der hydrostatische Druck infolge des Eintauchens den Stoffübergang von Atmosphärgasen wie Sauerstoff merklich erhöht. Das mechanistische Modell wurde auf die Ergebnisse des Gastracerexperiments am Wehr Esslingen angewandt. Der Ansatz scheint geeignet zukünftig eine allgemeingültige Formel für den Gasübergang an Wehren abzuleiten, die die Wirkung des hydrostatischen Drucks auf die untergetauchten Luftblasen berücksichtigt und somit auch Übersättigungen prognostizieren kann.

Kapitel 7 befasst sich mit dem Übergang von Sauerstoff und gelösten Nährstoffen an der Grenzfläche zwischen Wasser und Sediment. Auf Grundlage theoretischer Überlegungen, die die maßgeblichen frühdiagenetischen Prozesse, den Transport im Porenraum und die diffusive wasserseitige Grenzschicht berücksichtigen, wird gefolgert, dass bei typischen Neckarsedimenten der Sauerstoffverbrauch primär durch den Anteil abbaubarer organischer Substanz und den Einfluss der Bioturbation gesteuert wird. Mit Hilfe von Laborexperimenten kann untermauert werden, dass der Einfluss der wasserseitigen diffusiven Grenzschicht von untergeordneter Bedeutung für den Sauerstoffverlust an die Sedimente ist. Die Auswertung der mit einem in situ-Gerät durchgeführten Feldmessungen wird durch ein in AQUASIM entwickeltes numerisches Simulationsmodell unterstützt. In diesem Modell werden die maßgeblichen frühdiagenetischen Prozesse und der durch Bioturbation beeinflusste diffusive Stofftransport im Porenraum der Sedimente nachgebildet. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass die Massenstromdichten über die Grenzfläche aus der Konzentrationsveränderung der Stoffe im Freiwasser des in situ-Geräts ermittelt werden können. In Verbindung mit den Messergebnissen wird zudem aufgezeigt, dass die mit in situ-Methoden ermittelte Sauerstoffzehrung des Sediments insbesondere durch die erzwungene Sedimentation leicht abbaubarer organischer Substanz deutlich überschätzt werden kann. Für die untersuchten Neckarsedimente werden bei 20°C repräsentative Sauerstoffzehrungsraten von 0,7 g/m²/d für sandiges Material und bis zu 1,6 g/m²/d für schluffiges Material ermittelt. Im Einklang mit den Simulationsergebnissen nimmt die Sauerstoffverlustrate dabei in etwa mit der Quadratwurzel des BSB der untersuchten Sedimente zu. Darüber hinaus stellen die Sedimente durch die in ihnen stattfindenden Denitrifikationsprozesse ein Senke für Nitrat dar. Ammonium (und offenbar auch CO₂) werden hingegen infolge der Mineralisierung organischer Substanz freigesetzt. Überraschender Weise haben alle untersuchten Sedimente eine Senkenwirkung für Phosphat, was durch die Ausbildung einer oberflächennahen Oxidschicht mit einer hohen Dichte an Adsorptionsplätzen für Phosphat erklärt werden kann. Alle Befunde zu den Stoffflüssen können in einer konzeptionellen Modellvorstellung zusammengeführt werden.

Primäre Zielsetzung von Kapitel 8 ist die Auswahl, Bereitstellung, Anpassung und bewertende Überprüfung von numerischen Modellen zur Simulation des Sauerstoffhaushalts im Neckar. Hierzu wird zunächst ein Überblick über die zur Zeit verfügbaren Simulationsmodelle gegeben. Auf der Basis dieser Übersicht und der Erkenntnisse aus den empirischen Analysen werden grundsätzlich geeignete Modelle ausgewählt: (1) Ein Basismodell (BWQM), das einerseits die aus den empirischen Befunden abgeleiteten Mindestan-

forderungen an ein adäquates Simulationsmodell erfüllt, andererseits jedoch nur auf verfügbaren Eingangsdaten basiert. (2) Ein erweitertes Modell (EWQM), das auf dem Basismodell aufbaut und erkennbare Unzulänglichkeiten des BWQM beseitigt. Für das erweiterte Modell müssen jedoch Rand- und Anfangsbedingungen mancher Zielgrößen abgeschätzt werden. (3) Das Gewässergütemodell des ATV-DVWK (ATV-FGSM) als „state of the art“ Modell, in dem ein Großteil des aktuellen Expertenwissens bezüglich der Simulation des Sauerstoffhaushalts zusammengefasst ist. Auch bei der Anwendung des ATV-FGSM müssen Rand- und Anfangsbedingungen zum Teil abgeschätzt werden.

Die Simulationen beschränken sich grundsätzlich auf den Bereich des mittleren Neckars, zwischen dem Beginn der Bundeswasserstraße und der Mündung der Enz bei Besigheim. Zur Überprüfung der Modelle werden jeweils die Monate April bis einschließlich Oktober der Jahre 1996, 1997 und 1998 herangezogen. Das Basismodell wurde unter Verwendung von AQUASIM als Programmierplattform verwirklicht. Das entwickelte Stoffhaushaltsmodell lehnt sich in wesentlichen Zügen an die Prozessformulierungen von QUAL2E an. Allerdings wurden auf Grundlage der empirischen und experimentellen Erkenntnisse einige zusätzliche Prozesse mit aufgenommen oder Prozessformulierungen realitätsnäher gestaltet. Die 25 Parameter des Stoffhaushaltsmodells im BWQM wurden einer linearen Sensitivitätsanalyse unterzogen. Hieraus wird deutlich, dass die Sauerstoffkonzentrationen am sensitivsten auf jene Parameter reagieren, die eng mit der Dynamik des Phytoplanktons verknüpft sind. Auf Grundlage der Sensitivitätsanalyse wurde die Identifizierbarkeit der Parameterwerte quantifiziert. Demnach sind lediglich vier der fünf sensitivsten Parameter durch eine inverse Kalibrierung anhand von Messdaten kalibrierbar. Die vier gleichzeitig identifizierbaren Parameter wurden anhand von Sauerstoff und Chlorophyll-a Messwerten eines dreimonatigen Zeitraums kalibriert. Mit dem so kalibrierten Modell können der Sauerstoff und Chlorophyll Gehalt sowie der BSB und die Nährstoffkonzentrationen sowohl im Kalibrierungs- als auch im achtzehnmonatigen Validierungszeitraum gut nachgebildet werden. Mäßige systematische Fehleinschätzungen ergeben sich nur dahingehend, dass die Chlorophyllkonzentrationen nach dem Zusammenbruch von Algenblüten in der Natur rascher zurückgehen als in der Simulation und an unterstromigen Messstationen die Chlorophyll und Sauerstoffgehalte im Spätsommer tendenziell überschätzt werden. Diesen systematischen Fehleinschätzungen des BWQM wird im erweiterten Modellansatz Rechnung getragen, indem hier zusätzlich die Primärkonsumenten in Form von herbivorem Zooplankton und benthischen Filtrierern (Dreikantmuscheln) explizit mit simuliert werden. Eine strikte Kalibrierung des EWQM schloss sich dadurch aus, dass für die zusätzlichen Zielgrößen keine Messdaten für Rand- und Anfangsbedingungen vorliegen. Daher wurden die Parameterwerte soweit als möglich aus experimentellen Befunden in der Literatur abgeleitet und lediglich eine händische Anpassung weniger sehr sensibler Parameter vorgenommen. Das so angepasste EWQM beschreibt die Messdaten ähnlich gut wie das BWQM. Die systematische Überschätzung der Chlorophyllgehalte im Spätsommer konnte unterbunden werden. Der Zusammenbruch von Algenblüten erfolgt jedoch auch hier in der Simulation nicht so rasch wie in der Natur. Bei der Anwendung des ATV-FGSM wird auf Grundlage der Erfahrungen mit den selbst entwickelten Modellen die Bausteinkombination „Algen-Gesamt + Konsumenten I“ gewählt. Somit werden neben der Primärbelastung zwei Algenklassen, Kieselalgen und Grünalgen sowie pelagische und benthische Primärkonsumenten simuliert. Im Zuge der schrittweisen Implementierung und Anpassung des Modells konnten Unzulänglichkeiten in manchen Funktionalitäten aufgedeckt werden. Die Modellentwickler wurden hierauf aufmerksam gemacht, so dass diese Unzulänglichkeiten in zukünftigen Modellversionen beseitigt werden können. Bei der Modellanpassung wurden einige der vorgegebenen Parameterwerte für Kieselalgen und herbivores Zooplankton auf Grundlage von Systemkenntnis und Messwerten angepasst. Für die Simulation der Bodenfauna wurden zum Teil erhebliche Änderungen der Parameterwerte vorgenommen, um das Modell an die in der Literatur verfügbaren Daten für die Dreikantmuschel als Leitorganismus anzupassen. Die Simulationsergebnisse des ATV-FGSM stimmen ähnlich gut mit den Messdaten überein wie die mit BWQM und EWQM erzielten Ergebnisse. Insgesamt scheint keines der drei verwendeten Modelle den anderen grundsätzlich überlegen zu sein. Für die modellgestützte Systemanalyse und prognostische Szenarien erscheint es prinzipiell sinnvoll parallele Simulationen mit mehreren Modellen durchzuführen, um die Vertrauenswürdigkeit der Ergebnisse zu erhöhen. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die Anwendbarkeit der Modelle von der konkreten Problemstellung abhängt. Insbesondere Prognosen zu den Auswirkungen möglicher Nährstofflimitierungen sind bei allen Modellen mit großen Unsicherheiten behaftet, da die Halbsättigungskonzentrationen nur mit unzureichender Genauigkeit bekannt sind.

Die in Kapitel 8 entwickelten und überprüften Modelle werden im neunten Kapitel zur modellgestützten Systemanalyse eingesetzt. Es kann gezeigt werden, dass in dem untersuchten Abschnitt oberhalb der

Enzmündung in den Jahren 1996 bis 1998 Wärmeeinleitungen nur marginale Auswirkungen auf den Sauerstoffhaushalt hatten. Als maßgebliche Steuergröße für die Sauerstoffdynamik wird im Einklang mit den empirischen Analysen die Dynamik des Phytoplanktons identifiziert. Zu Instabilitäten des Sauerstoffhaushalts kommt es offenkundig vor allem im Zuge von Algenblüten, wenn die Umsatzraten des Sauerstoffs nahezu ausschließlich durch Photosynthese und Algenverluste bestimmt werden. Während Zeiten mit geringen Algenkonzentrationen haben hingegen mehrere Prozesse etwa gleichen Anteil am gesamten Sauerstoffumsatz, weshalb der Sauerstoffhaushalt zu diesen Zeiten wesentlich stabiler ist. Die Systemanalyse verdeutlicht zudem, dass die Primärproduktion und die resultierende Sekundärbelastung im Wesentlichen den Zeitpunkt und die Amplitude extremer Schwankungen der Sauerstoffkonzentration bestimmen, während die Primärbelastung mit dafür verantwortlich ist, auf welchem Niveau diese Schwankungen stattfinden. Dabei spielen die direkten Kläranlageneinleitungen auf der untersuchten Modellstrecke – inklusive des Hauptklärwerks Stuttgart-Mühlhausen – offenkundig nur eine geringe Rolle für die Absenkung der Sauerstoffkonzentration. Im Mittel bedingen diese Einleitungen, dass die Sauerstoffgehalte auf der Modellstrecke um etwa 0,3 mg/L abgesenkt werden. Hinsichtlich der Steuerung der für die Sauerstoffgehalte maßgeblichen Algendynamik wird deutlich, dass das herbivore Zooplankton allenfalls in der Folge extremer Algenblüten größere Bedeutung erlangt. Für die beobachteten und mit den Modellen erfolgreich simulierten Zusammenbrüche von Algenblüten waren neben dem Zooplankton vor allem abiotische Faktoren wie die Wassertemperatur und das Lichtangebot verantwortlich. Die Simulationsergebnisse weisen darauf hin, dass benthische Filtrierer (vor allem Dreikantmuscheln) erheblichen Anteil an den Algenverlusten im Spätsommer erlangen können. Der durch sie ausgeübte Fraßdruck ist offenbar so groß, dass die Entwicklung ausgeprägter Algenblüten in der zweiten Hälfte des Sommers weitgehend unterbunden wird. Damit trägt die benthische Fauna zumindest im Spätsommer merklich zur Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts bei. Die modellgestützte Systemanalyse verdeutlicht zudem, dass die von Oberstrom in das Modellgebiet eingetragene Algenmasse erheblichen Anteil an der Sekundärbelastung erlangen kann. Um die negativen Auswirkungen der Eutrophierung erfolgreich zu bekämpfen, müssen die Maßnahmen folglich auf jeden Fall bereits oberhalb der Bundeswasserstraße ansetzen. Mit Hilfe des BWQM wird zudem die flussinterne Retention von Stickstoff und Phosphor während der simulierten Sommermonate quantifiziert. Zu den eingetragenen Gesamtmassen von Stickstoff trägt der Neckar knapp 70% bei, während das Hauptklärwerk Stuttgart-Mühlhausen und die Nebenflüsse Rems und Murr jeweils etwa 10% beitragen. Bei Phosphor entfallen nur etwa 60% auf den Neckar, ca. 10% auf das Hauptklärwerk Stuttgart, 13% auf die Murr und 16% auf die Rems. Hinsichtlich der Quantifizierung der Retentionsleistung ist zu beachten, dass die erosive Freisetzung der Nährstoffe, die vor allem in den hochwasserreichen Wintermonaten auftritt, nicht berücksichtigt wurde. Während der Sommermonate werden auf der Fließstrecke sowohl Stickstoff als auch Phosphor zurückgehalten. Bei Stickstoff liegt der zurückgehaltene Anteil zwischen 6% und 11% der eingetragenen Gesamtmasse, wobei die Denitrifikation am Gewässerbett der wichtigste Verlustpfad ist. Bei Phosphor liegt der mit dem BWQM ermittelte Retentionsanteil zwischen 8% und 13% an der eingetragenen Gesamtmasse. Die Verluste teilen sich zu etwa gleichen Teilen in die Sedimentation toter organischer Substanz, die Sedimentation von Algenbiomasse und die Adsorption von Phosphat am Gewässerbett auf.

Im zehnten Kapitel werden vor allem mit Hilfe von Simulationsszenarien die Potenziale für eine nachhaltige Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts und die Stützung der Sauerstoffkonzentrationen durch Belüftungsmaßnahmen analysiert. Als Zielwert für die Sauerstoffkonzentration, der zum Schutz der aquatischen Lebensgemeinschaft auch kurzzeitig nicht unterschritten werden sollte, werden 3,5 mg/L veranschlagt. Auf Grundlage der in den vorangegangenen Kapiteln gewonnenen Erkenntnisse beschränkt sich die modellgestützte prognostische Analyse auf kurzfristige Sauerstoffdepressionen. Alle Analysen beruhen auf zahlreichen Varianten zweier grundlegender Szenarien, die mit Hilfe des BWQM simuliert werden. Beide Szenarien bilden den Zusammenbruch von „Algenblüten“ ab. Eines der Szenarien spiegelt dabei realitätsnahe Verhältnisse wider, wie sie im Neckar in ähnlicher Weise in den Sommern 1997 und 1998 vorzufinden waren. Das zweite Szenario basiert hingegen auf extremeren Annahmen und kann als „worst case“ Szenario verstanden werden. Als mögliche nachhaltige Verbesserungsoption wird zunächst die Wirkung einer Nährstofflimitierung über das pflanzenverfügbare Phosphor untersucht. Aus den Ergebnissen ist zu folgern, dass die Nährstofflimitierung prinzipiell eine effiziente Möglichkeit zur Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts darstellt, sofern sie über den gesamten Flusslauf wirkt. Allerdings ist eine exakte Prognose eines Phosphorzielwertes mit dessen Erreichen sich positive Effekte einstellen nicht möglich, da die Festlegung von Phosphorhalbsättigungskonstanten äußerst problematisch ist. Im Zuge der Szenarien-

rechnungen zur möglichen Nährstofflimitierung konnte der maximal zulässige Chlorophyll Gehalt in der Modellstrecke auf etwa 50 µg/L festgesetzt werden. Bei höheren Algengehalten besteht prinzipiell die Gefahr, dass es bei ungünstigen Rahmenbedingungen beim Zusammenbruch der Algenblüte zu kritischen Sauerstoffdepressionen kommt. Mit einer weiteren Reduktion der Zehrstoffemissionen im Bereich der Modellstrecke können nur mäßige Verbesserungen im Falle von Sauerstoffdepressionen erzielt werden. Auf der anderen Seite wäre bei einer Verschlechterung der Reinigungsleistungen damit zu rechnen, dass im Zuge des Zusammenbruchs von Algenblüten unterhalb von Stuttgart wesentlich tiefere Sauerstoffminima auftreten. Dies unterstreicht die enorme Bedeutung des aktuell sehr hohen Zehrstoffrückhalts in den Klärwerken. Für eine langfristig nachhaltige Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts empfiehlt sich eine weitere Reduktion sowohl der Zehr- als vor allem auch der Nährstoffemissionen. In weiteren Szenarien konnte gezeigt werden, dass Änderungen der Stauziele im Bereich der Modellstrecke durchaus nachweisbare Folgen für die zu erwartenden Sauerstoffminima hätten. Die in Hinblick auf den Sauerstoffhaushalt positiv zu bewertende Absenkung der Stauziele widerspricht den Zielen der Schiffbarkeit. Allerdings stellt der Verzicht auf weitere Stauerhöhungen eine Möglichkeit dar, den Sauerstoffhaushalt nicht zusätzlich zu belasten.

Mit Blick auf die kurzzeitige Stützung des Sauerstoffgehalts während Depressionsphasen werden die Turbinen- und die Wehrbelüftung näher untersucht. Jedes Verfahren für sich oder beide in Kombination bergen ausreichend Sauerstoffeintragspotenziale, um Konzentrationsminima auf ökologisch verträgliche Sauerstoffgehalte aufzustocken. Stehen, wie an den Wehren Cannstatt, Hofen und Poppenweiler, beide Verfahren zur Verfügung, so stellt die Turbinenbelüftung die ökonomischere Variante dar. Legt man das realitätsnahe erste Szenario zugrunde, so können mit der im neuen Sauerstoffreglement Neckar vorgesehenen stützenden Turbinenbelüftung in Hofen und Poppenweiler ökologisch unverträgliche Sauerstoffgehalte im Bereich der Modellstrecke weitgehend vermieden werden. Bei dem „worst case“ Szenario wären hingegen zusätzliche Belüftungsmaßnahmen unabdingbar, um den Sauerstoffgehalt im gesamten Modellbereich über 3,5 mg/L zu halten. Infolge der bei Niedrigwasser relativ langen Fließzeiten zwischen den potenziellen Belüftungspunkten, stellt das Timing des Beginns der Belüftungsmaßnahmen ein bislang nicht zufriedenstellend gelöstes Problem dar. Dieses Problem könnte zukünftig mit Hilfe eines Echtzeit Vorhersagemodells für den Sauerstoffhaushalt gelöst werden.

SUMMARY

Model based investigations for an economic water-quality management of the River Neckar

The present study focuses on the oxygen budget of the lock-regulated River Neckar. The 202 km long reach can be viewed as a typical example of relatively deep, lock-regulated and navigable rivers in Germany and worldwide. In particular the “mittlere Neckar” upstream of the confluence with River Enz, is a good example for other navigable rivers with low discharge, which are known to be very susceptible to oxygen problems. Since the oxygen budget is directly or indirectly influenced by various processes, any study of the oxygen budget has to include other substances, such as degradable organic matter, ammonium, other plant nutrients, algae, and to some extent organisms of higher trophic levels.

The major objectives of the present study can be summarised as follows:

- (1) Using the available monitoring data, the oxygen budget of River Neckar is to be analysed with respect to its changes over the last 25 years and its present status.
- (2) Since there is only little quantitative knowledge about the solute and gas transport over the water-sediment and water-atmosphere interfaces, these processes are to be elucidated by field and laboratory experiments.
- (3) On the basis of the results gained from (1) and (2) one or several models have to be chosen, which are adequate to simulate the oxygen budget in River Neckar. They can either be publicly available or they are especially developed for the purpose. These models shall be used for a quantitative system analysis and for prognostic scenarios to improve the river's oxygen budget.

To achieve these goals, first a general introduction is given. Chapter 2 serves to introduce the basic principles of the processes, which govern the oxygen budget in lock-regulated rivers. Special emphasis is put on in-stream biological processes, because it cannot be assumed that water engineers are familiar with the details of these processes. The theoretical background of the matter transport over the interfaces with sediment and atmosphere is presented later, in connection with the experiments conducted on these topics. The major features of the study site, which might be influential for the oxygen budget of River Neckar, are presented in chapter 3.

Time series of oxygen, biochemical oxygen demand, nutrients, and chlorophyll are analysed in chapter 4. Robust, non-parametric statistical approaches are shown to be superior to the commonly used regression analyses for the purpose of detecting concentration trends in the present case. The statistical analyses reveal a significant increase of the mean oxygen content between 1975 and 1998. Between 1975 and 1986 the mean concentration increase was much more pronounced than in the time span from 1987 through 1998. The minimum concentrations of oxygen detected within one year did also steadily increase until the end of the 1980s. However, since then the yearly minimum showed strong fluctuations but did no longer increase significantly. The increase of the mean oxygen content was accompanied by a concentration decrease of BOD, ammonium, nitrate and ortho-phosphate. However, on the basis of measurements dating back to 1984, for chlorophyll no significant trend could be detected. The increase of the mean oxygen content, which was most pronounced until the end of the 1980s, can clearly be attributed to dramatically reduced BOD and ammonium emissions. This outcome highlights the success of past efforts to improve wastewater treatment within the Neckar watershed. However, algae concentrations could not yet be significantly reduced, despite an immense decline of nutrient emissions.

Chapter 5 concentrates on an empirical analysis of the present status of the oxygen budget of River Neckar. Most of the time the oxygen content is within a tolerable range. However, in summer, during phases of low discharge extreme oxygen oversaturation and short term oxygen depressions going down to 3 mg/L may occur. It could be shown by means of explorative statistics, that these extreme oxygen concentrations are associated with phytoplankton dynamics: Algal blooms, with chlorophyll concentrations exceeding 100 µg/L, result in significant oversaturations and pronounced diurnal changes of the oxygen content. The break down of these algal blooms may induce dramatic declines of the oxygen content. The

yearly minima of oxygen are due to the depressions associated with the breakdown of algal blooms. Hence, this process is also responsible for the fact that yearly oxygen minima have not significantly increased since the late 1980s. Consequently, the eutrophic status of River Neckar can be viewed as the major obstacle for a further improvement of the oxygen budget.

The gas exchange between water and atmosphere in general and in particular of oxygen is analysed in chapter 6. Most important for this analysis are the results of a gas tracer experiment, which was conducted in the river reach between Deizisau and Poppenweiler during low flow conditions. A total of 15 formulae were tested with respect to their ability to predict aeration over the water surface. The formulae introduced by Wolf (1974) and by O'Connor and Dobbins (1958) performed best. Similarly good results could be achieved by using a constant transfer coefficient of 0.9 m/d for oxygen at 20°C. This implies that the factors controlling gas exchange in the River Neckar do not change significantly in space during low flow conditions. The performance of formulae to predict aeration at weir overfalls was tested on the basis of measured data from the literature. The formula suggested by Avery and Novak (1978) proved to perform best. However, neither this formula nor any of the other formulae suggested in the literature, accounts for the effect of the hydrostatic pressure, which acts on the submerged air bubbles in the stilling basin. Therefore, a mechanistic model was developed, which explicitly simulates the gas transfer between water and submerged bubbles. Simulation results show that the hydrostatic pressure significantly increases the transfer of atmospheric gases, such as oxygen, from the air bubbles into the water. The mechanistic model was also applied to the results of the gas tracer experiment at the weir Esslingen. It seems to be a promising approach to develop a universally valid formula to predict gas transfer at overfalls, which accounts for the influence of the hydrostatic pressure acting on submerged bubbles.

Chapter 7 deals with the transfer of oxygen and dissolved nutrients over the water-sediment interface. Theoretical considerations account for early diagenesis, transport within pore water, and the resistance of the diffusive boundary layer. These considerations and preliminary numerical simulations lead to the conclusion, that the oxygen demand of typical River Neckar sediment is mainly governed by the content of degradable organic matter and the magnitude of bioturbation, enhancing pore water transport. Experiments with a laboratory flume also indicate that the influence of the diffusive boundary layer is of minor importance. An in situ-batch device is used to quantify the transfer of oxygen and nutrients in the field. To facilitate the interpretation of the field experiments, a numerical model was developed, which considers the main processes of early diagenesis, and the effective diffusion through pore water as influenced by bioturbation. Simulation results show, that fluxes across the interface can be determined on the basis of concentration changes in the water phase of the in situ-device. Moreover, in connection with experimental results it is shown, that artefacts such as the forced settling of easily degradable organic matter, may heavily bias the experimental results. Representative oxygen demand of River Neckar sediment at 20°C, was found to vary between 0.7 g/m²/d for sandy material and up to 1.6 g/m²/d for silty material. In agreement with the predictions of the numerical model, the experimentally determined sediment oxygen demand increases with the square root of the BOD of the sediments. All investigated sediments were found to be significant nitrate sinks, because of denitrification taking place within the sediment body. Ammonium (and obviously also CO₂) were released from the sediments, due to the degradation of organic matter. Somewhat surprisingly the sediments acted as a phosphate sink. This can be explained by postulating a region of high oxide/hydroxide content near the interface, with a large density of adsorption sites for phosphate. All observed fluxes can be explained in the context of a unifying conceptual model.

Primary goal of chapter 8 is the choice, implementation, calibration, and validation of numerical models for the simulation of the oxygen budget of River Neckar. First an overview over presently available models is given. On the basis of this overview and empirical as well as experimental results, three models are chosen, which in principal seem to be adequate: (1) A basic model (BWQM), which on one hand accounts for all the processes that are considered relevant to the oxygen budget, but on the other hand only relies on measured input data. (2) An extension of the basic model (EWQM), which aims to eliminate obvious shortcomings of BWQM. The extended model no longer has to be based on measured data only. (3) The water quality model of the ATV-DVWK (ATV-FGSM), a state of the art model, which encompasses most of the expert knowledge presently available in the field of water quality modelling.

The simulations are generally restricted to the 63 km reach between the start of the navigable river section and the confluence with River Enz. Only the months April through October of the years 1996, 1997, and 1998 are considered. The basic model was realised using AQUASIM as a programming environment. The

fundamental structure of BWQM follows that of QUAL2E, although some additional processes were considered and some process formulations were altered on the basis of the empirical and experimental results. The 25 parameters of the basic water quality model were subjected to a linear sensitivity analysis, revealing that simulated oxygen concentrations are most sensitive to changes of the parameters governing algae dynamics. The identifiability of parameters from inverse calibration was quantitatively assessed on the basis of available measurements and the sensitivity analysis. The identifiability analysis showed that only four out of the five most sensitive parameters can be identified simultaneously by inverse calibration. These four parameters were calibrated on the basis of oxygen and chlorophyll measurements from a three months period. The calibrated model was able to predict oxygen, chlorophyll, BOD, and nutrient species quite well. Only two more or less systematic discrepancies became obvious: With BWQM chlorophyll concentrations generally declined more slowly after algal blooms than in nature, and BWQM showed a tendency to overestimate chlorophyll and oxygen contents at downstream measuring stations in late summer. To overcome these systematic discrepancies EWQM additionally considered pelagic and benthic primary consumers, i.e. herbivorous zooplankton and filter feeding mussels. Since the initial and boundary conditions of these additional state variables had to be estimated, EWQM could not be calibrated in such a strict way as BWQM. Therefore, special emphasis was placed on the correct choice of parameter values, which are based on own measurements and literature data, as far as possible. Only two particularly sensitive parameters were adjusted, to improve the fit of the model results. Results of EWQM are in similar good agreement with the measurements as are BWQM results. The systematic overprediction of chlorophyll and oxygen in later summer does not occur with the extended model. However, the modelled decline of chlorophyll after algal blooms still is slower than observed in nature. Based on the experience gathered with the models developed in this study, the module combination "Algen-Gesamt + Konsumenten I" was chosen for the application of the ATV-FGSM. This means that diatoms, green algae, and primary consumers were modelled, beside the biochemical oxygen demand. The model was implemented and its functionality was extended step by step. This procedure revealed some shortcomings of the model. The errors were reported to the model developers, to make sure they will be eliminated in future versions of the model. Some of the default parameter values concerning diatoms and zooplankton were changed slightly, on the basis of the knowledge about the water quality system of River Neckar. Major modifications had to be undertaken for the parameter values of benthic fauna, in order to adjust them to the zebra mussel, which is considered to be the most important benthic macro invertebrate of the river. After these changes the simulation results of ATV-FGSM were similar good as those of the other two models. In summary, none of the three models is generally better suited to simulate the oxygen budget of River Neckar than the other models. For a model-based system analysis and prognostic scenarios, it is preferable to use more than one model at a time. Using at least two models will increase the credibility of the results. However, one has to be aware, that the applicability of any of the models is determined by the problem to be solved. In particular, prognostic simulations concerning the effect of nutrient limitations will be associated with large uncertainties, no matter which model is used, because half saturation concentrations are not known well enough.

The models which were developed, implemented and tested in chapter 8 are used for model-based system analyses in chapter 9. Since only little heat is emitted, cooling water discharged within the modelled reach, barely has any influence on the oxygen content of the river. In agreement with the empirical results, the system analysis highlights the importance of the processes associated with algae dynamics for the oxygen content of the river. Instabilities of the oxygen budget occur in connection with algal blooms, when the oxygen budget is almost completely determined by photosynthesis and algal loss processes. In contrast, during times of low algae concentrations the oxygen budget is governed by several processes, whose relative importance is almost equal. Primary production and the resulting secondary oxygen demand govern the timing and the amplitude of major oxygen variations, whereas BOD and ammonium from external sources determine the level on which these fluctuations occur. The wastewater directly emitted into the model reach seems to be of minor importance for the oxygen content. On average, oxygen concentrations are reduced by approximately 0.3 mg/L by these emissions. Herbivorous zooplankton only plays a considerable role in controlling chlorophyll concentrations during major algal blooms. The break down of these blooms and the associated oxygen declines, are in general mainly caused by physical factors such as water temperature and light availability. Simulation results indicate that benthic filter feeders (i.e. zebra mussels) may reduce algae concentrations considerably, during late summer. Hence, the mussels help to avoid extreme algal blooms and instabilities of the oxygen budget, at least in late

summer and autumn. The model-based system analysis also clearly shows that algae transported into the modelled reach from upstream, can have a significant influence on extreme oxygen depressions. To prevent the negative effects of eutrophication in the future, one surely has to start upstream of the navigable section of River Neckar. BWQM was also used to quantify the retention of nitrogen and phosphorous during the summer months within the modelled river reach. About 70% of the total mass of inflowing nitrogen can be ascribed to the upstream part of River Neckar, whereas the main wastewater treatment plant of the city of Stuttgart as well as the two tributaries Rivers Rems and Murr contribute approximately 10%, each. For phosphorous the contribution of River Neckar is only about 60%, whereas the major wastewater treatment plant, River Rems and River Murr contribute about 10%, 16%, and 13%, respectively. When quantifying the retention, one has to be aware of the fact, that the nutrient release due to erosion, which mainly occurs during winter floods, is not considered in the present analysis. During the modelled summer months 6% to 11% of the inflowing nitrogen are held back in the river reach. The most important process of nitrogen retention is denitrification at the river bed. For phosphorous retention factors of 8% to 13% were determined with BWQM. The settling of dead organic matter, settling of algae and the adsorption of phosphate to the river bed contributed equally to the observed retention.

Chapter 10 serves to investigate the effectiveness of potential measures to improve the oxygen budget, by prognostic scenarios. Both, sustainable improvements and short term measures during oxygen declines are investigated. First a target value of 3.5 mg/L is derived for dissolved oxygen. The oxygen content of the river water should not even shortly decline below this value to sustain the aquatic biocenosis. Taking the results of previous chapters into account, the prognostic analyses concentrate on short term oxygen depressions. In principle, all analyses are based on two underlying scenarios, which simulate the break down of an algal bloom. The first scenario can be viewed as relatively realistic and is closely matched by real situations found in summer 1997 and 1998. The second scenario can rather be viewed as a worst case scenario. As one option for a sustainable improvement of the oxygen budget the potentials of the limitation of algal growth by the nutrient phosphorous are investigated. The results show that nutrient limitation can be an effective measure to stabilize the oxygen budget, if limitation is effective throughout the whole river system. However, it is not possible to exactly predict the phosphorous concentration, which has to be reached in order to ensure the necessary effect on algal growth. Such a prediction is very uncertain because of the problems, which are associated with defining the algal half saturation constant for phosphorous. The simulations also showed that a chlorophyll-a concentration of approximately 50 $\mu\text{g/L}$ should not be exceeded. If the break down of higher algae contents is accompanied by additional unfavourable conditions, the oxygen content may decline to critical values. Further reductions of BOD and Ammonium emissions within the modelled reach only have a moderate potential to raise the oxygen content during extreme depressions. On the other hand it can be shown, that the presently very good elimination of oxygen consuming substances in the wastewater treatment plants is indispensable, to avoid even more extreme dissolved oxygen depressions. In the long run, a sustainable stabilization of the oxygen budget can only be reached by a combined further reduction of nutrient and BOD emissions. The prognostic simulations also show that a rise of water level does have a negative impact on the oxygen budget. Therefore, in order to avoid even worse oxygen declines, the mean depth of the river should not be further increased.

Looking at short term measures to supplement the oxygen content during extreme depressions, the effects of aeration at hydroturbines and overfalls are investigated. These measures comprise high potentials for an oxygen enrichment, which are sufficient to keep the oxygen level above critical values, even under extreme conditions. If turbine venting is available, it is generally the economically sounder method of aeration. Turbine venting at Hofen and Poppenweiler are sufficient to avoid ecologically harmful undersaturations, in case of the realistic first scenario. However, the extreme scenario would necessitate further aeration measures at the other weirs to keep the oxygen level above 3.5 mg/L throughout the whole reach. Since the travel times from one to the next weir are rather long during low flow, the problem of timing the aeration measures is not yet solved satisfactorily. The timing might in the future be optimised by applying a real-time oxygen forecasting model.

1 EINFÜHRUNG

1.1 Problemstellung

Der Sauerstoffgehalt ist ein maßgebender Einflussfaktor für zahlreiche biogeochemische Prozesse im Gewässer. Der Sauerstoffhaushalt ist unter anderem von entscheidender Bedeutung für die Zusammensetzung der aquatischen Biozönose. So ist eine ausreichende Sauerstoffversorgung unabdingbare Grundvoraussetzung für die Besiedlung des Gewässers mit höheren Organismen. Die Diversifizierung und damit die Stabilität der Biozönose nimmt mit verbesserten Sauerstoffbedingungen allgemein zu. Auch unter ästhetischen Gesichtspunkten und hinsichtlich der Nutzung von Gewässern für Freizeit Zwecke oder als Trinkwasser muss ein ausreichender Sauerstoffgehalt sichergestellt werden. Sauerstoff ist somit einer der wichtigsten Gewässergüteparameter.

In früheren Jahrzehnten wurde der Sauerstoffhaushalt von Flüssen vor allem durch die Einleitung von sauerstoffzehrenden Substanzen auf direktem Wege negativ beeinflusst. Minimale Sauerstoffgehalte waren vor allem bei hohen Anteilen abwasserbürtigen Abflusses, geringen Gesamtabflüssen mit reduziertem Gasaustausch und hohen Wassertemperaturen zu erwarten. Vordringliche Aufgabe der Gewässergüteschutz war die Reduktion des abwasserbürtigen biochemischen Sauerstoffbedarfs durch den Ausbau und die Verbesserung der Abwasserreinigung. Infolge dieser Anstrengungen auf dem Gebiet des technischen Gewässerschutzes konnten die Zehrstoffemissionen in den meisten deutschen Flussgebieten im Laufe der letzten Jahrzehnte drastisch reduziert werden, was allgemein zur Erhöhung der mittleren Sauerstoffgehalte führte. Gewässer mit chronischem Sauerstoffmangel sind daher heute kaum mehr zu finden.

In manchen Flussabschnitten, insbesondere auch staugeregelter Flüsse, existieren aber nach wie vor Probleme mit dem Sauerstoffhaushalt, die im Gegensatz zu früher zumeist nur episodisch und kurzzeitig auftreten. Dabei sind sowohl Sauerstoffmangelsituationen als auch extreme Übersättigungen und Tageschwankungen im Sauerstoffgehalt anzuführen. Diese episodisch auftretenden kritischen Situationen können nicht mehr ausschließlich im Rahmen des isolierten Themenkomplexes abwasserbürtiger Zehrstoffemissionen betrachtet werden. Vielmehr muss die Problematik im Zusammenspiel mit anderen Prozessen des zumeist biologisch dominierten Stoffhaushalts sowie dessen physikalisch-hydrodynamischen und chemischen Rahmenbedingungen gesehen werden. Für eine adäquate Betrachtungsweise aktueller Probleme mit dem Sauerstoffhaushalt müssen daher neben dem biochemischen Sauerstoffbedarf zahlreiche weitere Aspekte des Stoffhaushalts berücksichtigt werden.

Entsprechend seiner Bedeutung für die Gewässergüte liegen zahlreiche Untersuchungen zum Sauerstoffhaushalt von Fließgewässern im Allgemeinen und von staugeregelten Flüssen im Besonderen vor. Bislang liegen jedoch kaum Arbeiten vor, in denen empirische Datenanalysen, experimentelle Befunde und numerische Simulationen miteinander verknüpft werden. Die empirischen Analysen zum Sauerstoffhaushalt beschränken sich im Allgemeinen auf Zeitreihenbetrachtungen. Prozessidentifikationen mit Hilfe explorativer statistischer Methoden sind hingegen selten. Experimentelle Arbeiten beschränken sich zumeist auf Teilaspekte des Sauerstoffhaushalts, wie technische Belüftungsmaßnahmen oder im biologisch relevanten Bereich auf Räuber-Beute-Beziehungen. Eine Einbindung dieser experimentellen Befunde in numerische Simulationsmodelle ist selten zu finden. Das Gros der numerischen Simulationen konzentriert sich auf die Zehrstoffproblematik, weshalb stationäre Betrachtungsweisen überwiegen. Dynamische Simulationen, die den veränderten Belastungssituationen Rechnung tragen, werden erst in den letzten Jahren vermehrt durchgeführt. Hierbei ist jedoch insbesondere die Frage nach der richtigen Balance zwischen sehr komplexen, deterministisch gut fundierten aber sehr stark überparametrisierten ökologischen Modellen einerseits und relativ einfachen Modellen, die sich auch an der Datenverfügbarkeit orientieren, andererseits, nicht geklärt.

1.2 Zielsetzung und Vorgehensweise

Übergreifendes Ziel der vorliegenden Arbeit ist die detaillierte Untersuchung und Darstellung des Sauerstoffhaushalts in der Bundeswasserstraße Neckar, die als Beispiel für anderer staureguliert Flüsse gelten kann. Die Untersuchung soll dabei im methodischen Sinne umfassend sein: Empirische und statistische Analysen der vorliegenden Messdaten sollen Hand in Hand mit experimentellen Prozessstudien und quantitativen numerischen Simulationen erfolgen.

Das übergeordnete Ziel lässt sich in folgende Teilaspekte gliedern:

- Quantifizierung der Entwicklung der Sauerstoffverhältnisse in der Bundeswasserstraße Neckar seit Beginn der kontinuierlichen Überwachung und Bewertung der historischen Gewässerschutzmaßnahmen.
- Identifikation der für den Sauerstoffhaushalt im aktuellen Zustand maßgeblichen Prozesse und hieraus abgeleitete Mindestanforderungen an ein adäquates Simulationsmodell für den Neckar und vergleichbare staugeregelte Flüsse.
- Prozessstudien zu Teilaspekten des Sauerstoffhaushalts, die auf Grundlage von Datenanalysen und in der Literatur verfügbaren Erkenntnissen nicht mit der notwendigen Genauigkeit quantifiziert werden können.
- Auswahl, Bereitstellung und Überprüfung von Simulationsmodellen für einen als sensitiv erachteten Teilabschnitt der Bundeswasserstraße Neckar.
- Bewertung der einzelnen Modelle hinsichtlich ihrer Eignung zur Systemanalyse und für prognostische Szenarien sowie bewertender Vergleich zwischen Modellansätzen unterschiedlicher Komplexität.
- Modellgestützte Analyse des Sauerstoffhaushalts, in der die quantitative Bedeutung einzelner Prozesse und Einflussfaktoren verdeutlicht wird.
- Prognostische Modellszenarien, die Potenziale zur Verbesserung des Sauerstoffhaushalts aufzeigen und in Verbindung mit Wirtschaftlichkeitsbetrachtungen zu praxisnahen Handlungsstrategien führen.

Aus den aufgeführten Zielen leitet sich die gewählte Vorgehensweise und somit auch der Aufbau der vorliegenden Arbeit ab:

In einem ersten Schritt werden die Grundzüge des Sauerstoffhaushalts erläutert und das Untersuchungsgebiet vorgestellt, um die Grundlage für das Verständnis der weiteren Arbeit zu legen. Hierzu dienen die Kapitel 2 und 3.

Hiernach erfolgt eine eingehende empirische und statistische Analyse der vorliegenden Monitoringdaten. In Kapitel 4 wird zunächst die historische Entwicklung der Sauerstoffkonzentrationen und anderer im Zusammenhang mit dem Sauerstoffhaushalt relevanter Inhaltsstoffe quantifiziert und in Verbindung mit der Entwicklung der Abwasserreinigung dargestellt. An die beschreibende Charakterisierung des aktuellen Zustands des Sauerstoffhaushalts im ersten Teil von Kapitel 5 schließt sich die Identifikation und Bewertung maßgeblicher Prozesse mit Hilfe explorativer statistischer Methoden an. Aus den so gewonnenen Erkenntnissen ergibt sich ein grundlegendes Systemverständnis, das auch dazu dient die Mindestanforderungen an ein adäquates Simulationsmodell festzusetzen.

Aus den empirischen Erkenntnissen wird in Verbindung mit Literaturdaten deutlich, dass vor allem hinsichtlich des Stoffaustauschs an den Grenzflächen Wasser-Sediment und Wasser-Atmosphäre zusätzliche experimentelle Untersuchungen notwendig sind, um zu fundierten Modellparameterwerten zu gelangen. In den beiden nachfolgenden Kapiteln werden die dementsprechenden Prozessstudien erläutert. Zum besseren Verständnis werden jeweils die theoretischen Grundlagen dieser Teilaspekte in detaillierter Form vorangestellt. Neben repräsentativen Modellparametern leitet sich aus den Prozessstudien vor allem auch ein verbessertes Verständnis der untersuchten Teilaspekte ab.

Die drei folgenden Kapitel haben die numerischen Simulationen des Sauerstoffhaushalts zum Inhalt. In Kapitel 8 werden auf Grundlage der bisherigen Erkenntnisse brauchbare Modelle abgeleitet, implementiert, kalibriert und für sich sowie im Vergleich bewertet. Von besonderem Interesse ist hierbei der Vergleich zwischen Modellansätzen unterschiedlicher Komplexität. Die bereitgestellten und überprüften Modelle werden in Kapitel 9 verwendet, um das Sauerstoffhaushaltssystem quantitativ zu analysieren. In Kapitel 10 dienen sie als Werkzeug für die prognostischen Szenarien und die Ableitung von Handlungsstrategien.

In einem abschließenden elften Kapitel werden die wesentlichen Schlussfolgerungen zusammengeführt sowie Hinweise auf offene Fragen und zukünftig zu lösende Aufgaben gegeben.

2 GRUNDLAGEN DES STOFFHAUSHALTS IN STAUGEREGELTEN FLÜSSEN

2.1 Einführung

Der Sauerstoffhaushalt eines Fließgewässers ist in dessen gesamten Stoffhaushalt eingebettet, weshalb die aktuelle Sauerstoffkonzentration von dem Zusammenspiel zahlreicher physikalischer, biochemischer und biologischer Prozesse gesteuert wird. Für das Verständnis des Sauerstoffhaushalts ist es daher unabdingbar, das Stoffhaushaltssystem mit seinen komplexen internen Interaktionen sowie in seiner Beziehung zu den Nachbarkompartimenten zu betrachten. Im Folgenden werden die potenziell maßgeblichen Prozesse und Einflussfaktoren des Stoffhaushalts in dem Maße erklärt, wie es für das Verständnis des Sauerstoffhaushalts und seine modellhafte Beschreibung notwendig erscheint. Die zu betrachtenden Prozesse sind in schematischer Form in Abbildung 2.1 wiedergegeben. Um den Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht zu sprengen, müssen ausführliche Ableitungen unterbleiben und zum Teil Vereinfachungen vorgenommen werden. Für umfassendere Beschreibungen wird auf die entsprechende Fachliteratur verwiesen.

Als maßgebliche Grundlage für die Konzentrationsverteilung aller Wasserinhaltsstoffe werden zunächst die Strömungs- und Transportprozesse sowie die Beziehungen zu den Nachbarkompartimenten Sediment und Luft besprochen, bevor auf den Stoffhaushalt im engeren Sinne eingegangen wird. Zum Abschluss werden anthropogene Einflüsse diskutiert und die Besonderheiten staugeregelter Flüsse herausgestellt.

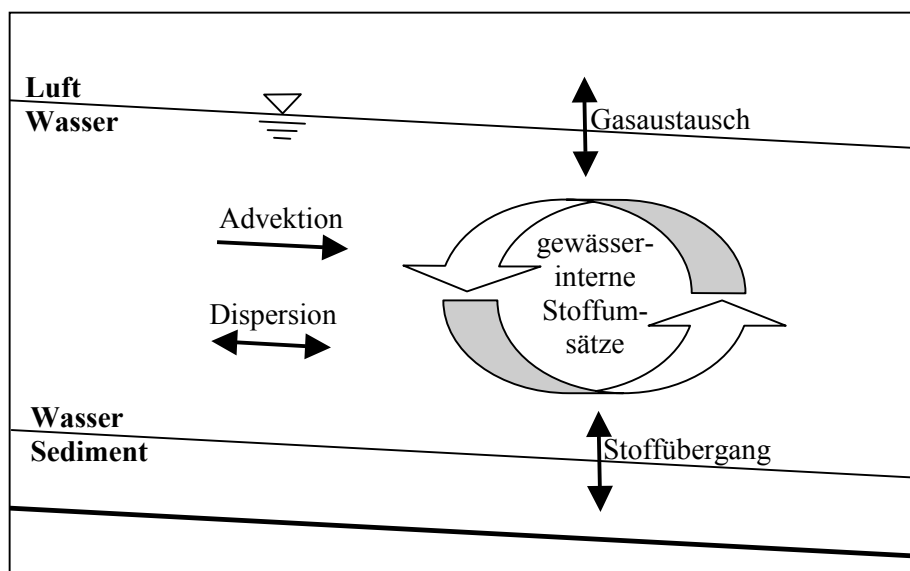


Abb. 2.1: Schematische Darstellung der für den Stoffhaushalt staugeregelter Flüsse maßgeblichen Prozesse.

2.2 Strömung und Transport

2.2.1 Strömung

Die Strömung bzw. der Wassertransport im Fluss bestimmt die Richtung und Geschwindigkeit des advektiven Stofftransports und ist somit eine elementare Grundlage des Stoffhaushalts. Die Wasserbewegung lässt sich bei Kenntnis der geometrischen Gegebenheiten auf Grundlage der Erhaltungssätze bzw. Bilanzgleichungen für Masse und Impuls beschreiben (Markofsky 1980). Beim Fließvorgang handelt es sich im Allgemeinen Fall um ein dreidimensionales Phänomen. Für großräumige Gewässergütebetrachtungen in Flüssen, in denen die Hauptfließrichtung durch das Gerinnebett und das Gefälle vorgegeben ist, ist für gewöhnlich eine eindimensionale (querschnittsgemittelte) Prozessdarstellung ausreichend (Rauch et al. 1998; Shanahan et al. 2001). Das hierfür gültige hydrodynamische Gleichungssystem besteht aus der

eindimensionalen Bewegungsgleichung (Impulsbilanz) und der eindimensionalen Kontinuitätsgleichung (Massenbilanz). Dieses gekoppelte System aus zwei partiellen Differentialgleichungen wird als *Saint-Venant-Gleichungen* bezeichnet. Ausführliche Ableitungen der *Saint-Venant-Gleichungen* und Angaben bezüglich ihres Anwendungsspektrums bzw. ihrer Grenzen finden sich z.B. bei Chow (1959), Dracos (1990) und Henderson (1966).

Werden keine lateralen Quellen oder Senken berücksichtigt so lassen sich die *Saint-Venant-Gleichungen* wie folgt ausdrücken:

Bewegungsgleichung	Kontinuitätsgleichung	
$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + g \cdot \frac{\partial y}{\partial x} + g \cdot (I_E - I_0) = 0$	$\frac{\partial(A \cdot u)}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial t} = 0$	(2.1)
<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> kinematische Welle diffusive Welle </div>		
hydrodynamische Welle (Lösung des vollständigen Gleichungssystems)		

Hierin sind g die Gravitation, u die querschnittsgemittelte Fließgeschwindigkeit, x die Längskoordinate, y die Wassertiefe, I_E das Energielinien- bzw. Reibungsgefälle, I_0 das Sohlgefälle und A der durchflossene Querschnitt. Die beiden ersten Terme der Bewegungsgleichung beschreiben die lokale und advective Beschleunigung. Der dritte Term beschreibt den Druckgradienten im Längsverlauf.

Wird das vollständige Gleichungssystem gelöst, so spricht man vom *hydrodynamischen Wellenansatz*. Da die vollständige Lösung im Allgemeinen numerisch sehr aufwendig ist, wird das Gleichungssystem jedoch häufig zum *diffusiven* oder *kinematischen Wellenansatz* vereinfacht (Cunge et al. 1980; siehe Gleichung 2.1). Bei der *diffusiven Wellenapproximation* werden die Geschwindigkeitsgradienten vernachlässigt, was bedeutet, dass das Reibungsgefälle dem Wasserspiegelgefälle gleichgesetzt wird. Bei der *kinematischen Welle* bleibt darüber hinaus auch der Druckgradient unberücksichtigt. Somit wird bei der *kinematischen Wellenapproximation* davon ausgegangen, dass das Reibungsgefälle dem Sohlgefälle entspricht (Normalabfluss), weshalb unter anderem Rückstauereffekte nicht erfasst werden können. Die *kinematische Wellenapproximation* stellt somit eine zu grobe Vereinfachung dar, mit der die Strömung in staugeregelten Flüssen nicht adäquat simuliert werden kann.

Im Gegensatz hierzu sind die Beschleunigungsterme lediglich bei extremen Wellen (z.B. Dammbbruch) von größerer Bedeutung und können daher zumeist ohne signifikante Fehler vernachlässigt werden (Chaudry 1993; Cunge et al. 1980). Für großräumige Gewässergütesimulationen wird die Strömung auch in staugeregelten Flüssen daher im Allgemeinen mit der *diffusiven Wellenapproximation* ausreichend genau beschrieben (Rauch et al. 1998).

Um das Gleichungssystem lösen zu können muss neben der Vorgabe geeigneter Rand- und Anfangsbedingungen auch das Reibungsgefälle parametrisiert werden (Reichert 1994). Dies geschieht zumeist über die *Strickler-Gleichung*:

$$I_E = \frac{u^2}{k_{st}^2 \cdot r_{hy}^{4/3}} \quad (2.2)$$

Hierin sind r_{hy} der hydraulische Radius und k_{st} der Rauigkeitsbeiwert. Der hydraulische Radius ergibt sich aus dem Quotienten des durchflossenen Querschnitts und des benetzten Umfangs ($r_{hy}=A/P$). Die Rauigkeitsbeiwerte sind umgekehrt proportional zur Gerinnerauigkeit und liegen für ein Flussbett mit fester Sohle und ohne Unregelmäßigkeiten bei etwa $40 \text{ m}^{1/3}/\text{s}$ (Chow 1959).

2.2.2 Ausbreitung und Transport

Der prinzipiell dominierende Transportprozess in Fließgewässern ist die Advektion, also der Transport eines Stoffes mit der Strömung. Die advective Transportgeschwindigkeit eines gelösten oder suspendierten Stoffes entspricht dabei der mittleren Fließgeschwindigkeit.

Die Advektion wird von der Vermischung der Konzentrationswolke mit angrenzenden Wasserpaketen überlagert. Diese infolge der turbulenten Diffusion auftretende Vermischung läuft grundsätzlich in vertikaler, transversaler und longitudinaler Richtung ab, ist also auch in einer eindimensionalen Strömung ein dreidimensionales Phänomen (Fischer et al. 1979; Rutherford 1994). Da die Tiefe und Breite von Flüssen wesentlich kleiner ist als deren Längserstreckung, kann bei ausreichender Turbulenz für großräumige Gütebetrachtungen von homogener Durchmischung im Fließquerschnitt ausgegangen werden. Bei solchen sogenannten Fernfeldproblemen wird folglich eine eindimensionale Betrachtungsweise möglich, bei der lediglich die als Längsdispersion bezeichnete Vermischung der Konzentrationswolke in Fließrichtung berücksichtigt wird (Fischer et al. 1979; Markofsky 1980). Die Zulässigkeit dieser eindimensionalen Betrachtungsweise kann experimentell mit Hilfe von Tracerversuchen oder mit geeigneten numerischen Ansätzen überprüft werden (Reichert und Wanner 1991; Rutherford 1994).

Im Fernfeld kann der turbulente Stofftransport in einem Fluss folglich im Allgemeinen mit der eindimensionalen *Advektions-Dispersions-Gleichung* beschrieben werden (z.B. Markofsky 1980):

$$\frac{\partial c_w}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial c_w}{\partial x} = E_x \cdot \frac{\partial^2 c_w}{\partial x^2} \pm S \quad (2.3)$$

Hierbei sind c_w , die querschnittsgemittelte Konzentration des Stoffes, u die mittlere Strömungsgeschwindigkeit in Fließrichtung und E_x der Längsdispersionskoeffizient. In dem mit S bezeichneten Quellen- und Senkenterm sind Konzentrationsänderungen durch lokale Quellen (Zuflüsse, Einleitungen), den Austausch mit Atmosphäre oder Sediment und Stoffumsetzungen im Fluss (Stoffhaushalt im engeren Sinne) zusammengefasst.

Die Längsdispersion ist im Wesentlichen auf Gradienten der Strömungsgeschwindigkeit sowie turbulent diffusive transversale und vertikale Austauschprozesse zurückzuführen (Grimm-Strele 1983). E_x ist somit ein zusammengesetzter oder effektiver Parameter, der mit Hilfe von Tracerdurchbruchkurven experimentell bestimmt oder auf Grundlage empirischer Gleichungen abgeschätzt werden kann (Fischer et al. 1979; Markofsky 1980; Rutherford 1994). Als gut geeignet für die Abschätzung hat sich eine Formel von (Fischer 1967) erwiesen, bei der die Längsdispersion in Abhängigkeit des Geschwindigkeitsgradienten und der Quervermischungsintensität ausgedrückt wird (Ableitung siehe Fischer 1967):

$$E_x = c_f \cdot \frac{w^2 \cdot u^2}{u_0^* \cdot y} \quad (2.4)$$

Hierin sind w die Wasserspiegelbreite, u_0^* die Sohlschubspannungsgeschwindigkeit und c_f ein dimensionsloser Beiwert, der im Gegensatz zu E_x relativ wenig von Gewässer zu Gewässer variiert. Fischer et al. (1979) empfehlen auf der Grundlage mehrerer Versuchsergebnisse einen allgemeingültigen Wert von 0,011 für c_f .

2.3 Stoffaustausch über die Grenzflächen

2.3.1 Gasaustausch mit der Atmosphäre

Prinzipiell streben alle im Wasser gelösten Gase jener druck- und vor allem temperaturabhängigen Konzentration entgegen, bei der sie im Gleichgewicht mit der Atmosphäre stehen. Eventuell vorhandene Ungleichgewichte werden über den Prozess des Gasaustauschs ausgeglichen (Thibodeaux 1996). Die Mechanismen und Einflussfaktoren des Gasaustausches werden in Kapitel 6 im Zuge experimenteller Arbeiten zum Stoffübergang an der Grenzfläche Wasser-Atmosphäre ausführlich erläutert.

In Hinblick auf den Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit ist in erster Linie der Austausch des im Wasser gelösten Sauerstoffs mit dem atmosphärischen Sauerstoff von herausragender Bedeutung: Durch den Gasaustausch werden sowohl Sauerstoffüber- als auch -untersättigungen abgebaut. Der Gasaustausch findet dabei zum einen über die freie Wasseroberfläche statt, wobei die Turbulenz im Gewässer maßgeblich für die Austauschintensität ist. Zum anderen wird er durch den Eintrag von Luftblasen und den anschließenden Austausch über die Oberfläche der Blasen deutlich intensiviert. Hierdurch sind im Falle von Sauerstoffuntersättigungen auch Möglichkeiten zur Sauerstoffanreicherung gegeben (Markofsky 1980). So können durch Wehrüberfall oder Turbinenbelüftung Luftblasen eingetragen und somit der lokale Sauerstoffeintrag stark erhöht werden.

Für den Stoffhaushalt ist darüber hinaus die Verfügbarkeit von CO_2 in der Atmosphäre von entscheidender Bedeutung. Durch die über den Gasaustausch mögliche Nachlieferung von CO_2 aus der Atmosphäre wird gewährleistet, dass Kohlenstoff nicht zum begrenzenden Faktor für die Primärproduktion wird (Schindler 1977; Schindler 1990).

2.3.2 Der Austausch mit dem Sediment

Gelöste Stoffe

Auch an der Grenzfläche Sediment-Wasser findet ein Austausch gelöster Stoffe statt, dessen Grundlagen in Kapitel 7 in Verbindung mit den zu diesem Aspekt durchgeführten Feld- und Laborexperimenten ausführlich erläutert werden.

Treibende Kraft für den Stoffaustausch zwischen Freiwasser und Porenwasser sind Konzentrationsgradienten, die in erster Linie durch die intensiven Stoffumsetzungen in den abgelagerten Sedimenten hervorgerufen werden. Zum einen bedingt dies einen Verlust von gelöstem Sauerstoff, der aus dem Freiwasser in das Sediment diffundiert, wo er durch aerobe Abbauprozesse verbraucht wird. Zum anderen sind auch die für den Stoffhaushalt relevanten Nährstoffe (Stickstoff, Phosphor und Silizium) am Austausch zwischen Poren- und Freiwasser beteiligt, da sie entweder beim Abbau der Biomasse frei werden oder wie im Falle von Nitrat nach dem Verbrauch von Sauerstoff im Sediment als alternatives Oxidationsmittel dienen (Clasen et al. 1997).

Sedimentation und Erosion

Da die für den Stoffhaushalt maßgebliche lebende und tote organische Substanz zum Teil in partikulärer Form vorliegt, muss hinsichtlich des Austausches zwischen Freiwasser und Sediment neben den gelösten Stoffen auch der partikelgebundene Stoffübergang in Form von Sedimentation und Erosion berücksichtigt werden. Ausführliche und sehr anschauliche Erläuterungen zum Feststofftransport sowie zur Erosion und Sedimentation geben beispielsweise (Westrich 1988) und (Kern 1997), so dass hier eine Beschränkung auf die mit Blick auf den Sauerstoffhaushalt wesentlichen Aspekte erfolgen kann.

Sedimentation: Hinsichtlich des Stoffhaushalts ist das suspendierte organische Material von vordringlichem Interesse. Dieses stellt in Form toter, abbaubarer Biomasse einen Anteil des Zehrstoffpotenzials und in Form suspendierter Algen den Großteil des biogenen Sauerstoffproduktionspotenzials im Gewässer. Zudem ist es für die in der fließenden Welle stattfindenden Mineralisierungs- und Nitrifikationsprozesse von entscheidender Bedeutung (Kerner und Edelkraut 1995). Durch Sedimentationsprozesse können somit Verluste beim (partikelgebundenen) biochemischen Sauerstoffbedarf, bei der aktiven Bakterienbio-

masse und bei den planktischen Algen entstehen. Bei lebendem Zooplankton oder höheren tierischen Organismen spielt die Sedimentation aufgrund der Eigenbeweglichkeit der Tiere hingegen keine Rolle.

Die für Sedimentationsverluste maßgebliche Eigenschaft ist die Sinkgeschwindigkeit der Partikel, die sich im ruhenden Medium aus dem Kräftegleichgewicht zwischen dem Strömungswiderstand und der um den Auftrieb verminderten Gewichtskraft ergibt (Zanke 1982). Bei schleichender Umströmung der absinkenden Partikel wird der Strömungswiderstand durch die Reibungskräfte dominiert. Für diesen Bereich mit $Re < 1$ kann die Sinkgeschwindigkeit sphärischer Partikel mit dem Stoke'schen Gesetz beschrieben werden (Schlichting 1951):

$$v_s = \frac{g}{18} \cdot \frac{\Delta\rho}{\eta} \cdot d^2 \quad (2.5)$$

Wobei v_s die Sinkgeschwindigkeit, $\Delta\rho$ die Dichtedifferenz zwischen Partikel und Fluid, η die dynamische Viskosität des Fluids und d der Durchmesser des Partikels sind.

Das suspendierte organische Material zeichnet sich gegenüber mineralischen Bestandteilen durch eine sehr geringe Dichte aus, die in hydratisierter Form etwa zwischen 1020 und 1100 kg/m^3 liegt (Chapra 1997). Bei einer maximalen Dichtedifferenz von 100 kg/m^3 zwischen Wasser und organischen Partikeln besitzt Gleichung 2.5 bis zu Partikeldurchmessern von $270 \text{ }\mu\text{m}$ Gültigkeit. Somit kann für organisches Material der für Binnengewässer relevante Größenbereich der Partikel mit dem Stoke'schen Gesetz weitgehend abgedeckt werden. Unter natürlichen Bedingungen wird das Absinkverhalten jedoch zusätzlich durch die tatsächliche Form der Schwebstoffe, durch die Aggregation mehrerer Partikel zu Schwebstoffflocken und durch die Turbulenz im Gewässer entscheidend beeinflusst.

Die Form natürlicher Suspensa weicht zum Teil erheblich von der einer Kugel ab, wodurch die Sinkgeschwindigkeit zumeist abgemindert wird. Deshalb empfiehlt Graf (1971) die theoretisch ermittelte Sinkgeschwindigkeit mit einem Formfaktor von $0,7$ zu multiplizieren.

In Tabelle 2.1 werden die von Burns und Rosa (1980) ermittelten Sinkgeschwindigkeiten einiger Algen und von toter partikulärer organischer Substanz, mit den theoretischen Werten gemäß Gleichung 2.5 verglichen. Wie die Tabelle verdeutlicht, weichen die tatsächlichen Sinkgeschwindigkeiten zum Teil erheblich von den theoretisch zu erwartenden Werten ab. Diese Diskrepanzen sind auch durch einen einheitlichen Formfaktor nicht zu erfassen. Bei kleinen Kieselalgen wie *Cyclotella*, können die Abweichung darin begründet liegen, dass deren Dichte durch die silikatische Zellwand über 1100 kg/m^3 liegt. Insbesondere bei den großen Algen wird die Sinkgeschwindigkeit mit dem Stoke'schen Gesetz jedoch umgekehrt zumeist deutlich überschätzt. Dies ist auf deutliche Abweichungen der häufig komplex gebauten Algen von der Kugelform und auf die von einigen Arten entwickelten speziellen Strategien gegen das Absinken (z.B. Schwebfortsätze) zurückzuführen (Smayda 1970; Vogellehner 1981). Darüber hinaus treten auch zwischen gleichen Arten deutliche Unterschiede im Sinkverhalten je nach Entwicklungsstadium und von Ort zu Ort auf (vgl. Burns und Rosa 1980; Sommer 1984).

Bei dem toten partikulären organischen Material kleiner $64 \text{ }\mu\text{m}$ liegen die gemessenen Sinkgeschwindigkeiten in etwa in dem zu erwartenden Bereich, während die Sinkgeschwindigkeit größerer Partikel offensichtlich durch das Stoke'sche Gesetz deutlich überschätzt wird. Diese Diskrepanz ist wohl in erster Linie darauf zurückzuführen, dass es sich bei den größeren organischen Partikeln um Aggregate bzw. Flocken handelt.

Der allergrößte Teil der partikulären organischen Substanz, inklusive Algen und Bakterien wird in größeren Flüssen in Form solcher Schwebstoffflocken transportiert (Droppo 2001). Hierbei handelt es sich um Aggregate aus organischem und anorganischem Material mit einer hochgradig irregulären und porösen Struktur, die vor allem durch extrazelluläre Polymere Substanzen (EPS) verkittet werden (Droppo 2000a; Greiser et al. 1996; Liss et al. 1996). Da die Flockungstendenz sowohl von der Konzentrations- und turbulenzbeeinflussten Kollisionsfrequenz als auch von der Kohäsionswirkung abhängt (Stumm und Morgan 1995; Westrich 1988), variiert die Flockengröße in Flusssystemen in weiten Bereichen, liegt aber häufig zwischen $10 \text{ }\mu\text{m}$ und wenigen $100 \text{ }\mu\text{m}$ (Droppo 2000a). Trotz der Beteiligung anorganischer Bestandteile, liegt die Dichte insbesondere größerer Flocken aufgrund ihres hohen Wassergehalts zumeist unter 1100 kg/m^3 (Droppo 2000b). Die Sinkgeschwindigkeiten der größeren Flocken liegen meist weit unter den theoretisch zu erwartenden Werten (vgl. Tab. 2.1), was in erster Linie Ausdruck ihrer komplexen, „strömungsungünstigen“ Form sein dürfte.

Tab. 2.1: Vergleich zwischen den von Burns und Rosa (1980) gemessenen und theoretisch mit Gleichung 2.5 ermittelten Sinkgeschwindigkeiten.

Partikel	d (in μm)	v_s gemessen (in m/d)	v_s berechnet (in m/d)	
			$\rho=1020 \text{ kg/m}^3$	$\rho=1100 \text{ kg/m}^3$
Phytoplankton:				
<i>Cyclotella meneghiniana</i>	2	0,08	0,004	0,02
<i>Thalassiosira nana</i>	4,3...5,2	0,1...0,28	0,02...0,03	0,09...0,13
<i>Scenedesmus quadricauda</i>	8,4	0,27	0,07	0,33
<i>Asterionella formosa</i>	25	0,2	0,59	2,9
<i>Thalassiosira rotula</i>	19...34	0,39...2,1	0,34...1,09	1,7...5,4
<i>Coscinodiscus lineatus</i>	50	1,9	2,4	11,8
<i>Melosira agassizii</i>	54,8	0,67	2,8	14,1
<i>Rhizosolenia robusta</i>	84	1,1	6,7	33,2
Totes partikuläres	1...10	0,2	0,0...0,09	0,005...0,47
organisches Material	10...64	1,5	0,09...3,9	0,47...19,3
	>64	2,3	>3,9	>19,3

Über die Eigenschaften der suspendierten Stoffe hinaus, hat auch die Turbulenz im Gewässer maßgeblichen Einfluss auf die tatsächliche Sinkgeschwindigkeit und Sedimentation der relevanten organischen Partikel. Allgemein gilt, dass die Sinkgeschwindigkeit im turbulenten Medium geringer ist als im ruhenden Fluid. Dies ist durch die zusätzliche scheinbare Viskosität im turbulenten Strömungsfeld bedingt und kann entsprechend parametrisiert werden (Kern 1997).

Offensichtlich wird das Sinkverhalten der für den Stoffhaushalt relevanten organischen Suspensa und hier vor allem der Algen von zahlreichen zum Teil nicht quantifizierbaren Einflussfaktoren gesteuert. Eine möglichst exakte modellhafte Beschreibung der Sedimentationsvorgänge, wie sie z.B. von Kern (1997) und Westrich (1988) für überwiegend mineralische Partikel aufgezeigt wird, erscheint daher im Rahmen von Stoffhaushaltssimulationen für die organischen Bestandteile nicht angebracht. Vielmehr sollten hier zunächst möglichst einfache Ansätze gewählt werden (Chapra 1997).

Erosion: Die Erosion oder Resuspension tritt dann auf, wenn die sohnahen Strömungskräfte die kritische Erosionsschubspannung der abgelagerten Sedimente überschreiten (Westrich 1988). Dies ist in erster Linie während Hochwasserereignissen der Fall, wenn erhöhte Abflüsse hohe Sohlschubspannungen induzieren (Haag et al. 2001a; Kern et al. 1999). Mit der Erosion biomassehaltiger Sedimente ist der Transfer von feststoffgebundenem biochemischem Sauerstoffbedarf und Bakterienbiomasse in das Freiwasser verbunden. Zudem kommt es zur Freisetzung von Porenwasser mit den darin enthaltenen reduzierten und daher sauerstoffzehrenden Substanzen (Clasen et al. 1997; Haag et al. 2000a; Müller et al. 1998). Hinsichtlich des Stoffhaushalts hat die Erosion also vor allem zwei Auswirkungen: Sie erhöht die Konzentration (partikelgebundener und gelöster) sauerstoffzehrender Substanzen und sie erhöht die Trübung, was zu einer lichtbedingten Verschlechterung der biogenen Sauerstoffproduktionsbedingungen führt.

Andererseits ist während erosionskritischer Hochwasserereignisse der Gasaustausch mit der Atmosphäre infolge der hohen Turbulenz sehr intensiv, weshalb die Sauerstoffgehalte allenfalls wenig unter den Sättigungswert absinken. Aus diesem Grund liegt der Schwerpunkt von Sauerstoffhaushaltssimulationen im Niedrigwasserbereich, wenn extreme Sauerstoffgehalte auftreten können, die durch die physikalische Belüftung nur unzureichend ausgeglichen werden. Folglich wird die erosive Stofffreisetzung bei der Simulation des Sauerstoffhaushalts zumeist nicht berücksichtigt (Chapra 1997; Rauch et al. 1998; van der Perk 1996).

2.4 Gewässerinterne Stoffumsetzungen

2.4.1 Grundlagen des gewässerinternen Stoffhaushalts

Der gewässerinterne Stoffumsatz stellt den Stoffhaushalt im engeren Sinne dar, der von Wechselwirkungen mit den angrenzenden Systemen und dem Stofftransport im Fluss beeinflusst wird. Dieser interne Stoffhaushalt ist äußerst komplex und gliedert sich in eine Vielzahl vernetzter Einzelprozesse. Um dieses System verständlich zu machen, sollen zunächst dessen grundlegenden Prinzipien erläutert werden (Abb. 2.2).

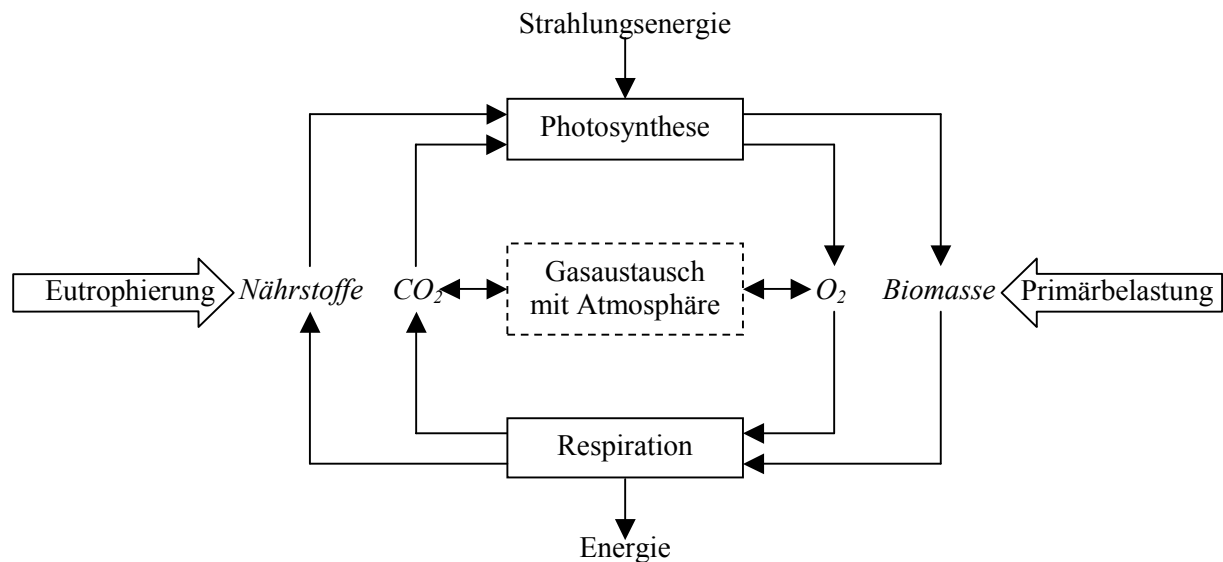


Abb. 2.2: Grundlegendes Prinzip des internen Stoffhaushalts und der anthropogenen Beeinflussung durch Einleitungen von Nähr- und Zehrstoffen.

Das geschlossene System

Um die Darstellung möglichst einfach zu halten, wird das Fließgewässer zunächst als geschlossenes System betrachtet, über dessen Grenzen zwar Energieflüsse jedoch keine Stoffflüsse statt finden.

Grundlegende Prozesse: Vom Grundprinzip her beruhen die internen Stoffumsätze auf einem Wechselspiel zwischen Biomasse aufbauenden und abbauenden Prozessen: der Photosynthese und der Respiration (Kummert und Stumm 1989; Uhlmann und Horn 2001). Die Synthese von organischer Substanz aus mineralischen Nährstoffen und Kohlenstoff unter Nutzung der Lichtenergie wird auch als Primärproduktion bezeichnet. Hierbei wird Biomasse aufgebaut und Sauerstoff erzeugt. Bei der Respiration oder Atmung wird die Biomasse hingegen unter Rückgewinnung der darin gespeicherten Energie abgebaut. Hierbei wird Sauerstoff verbraucht und die in der organischen Substanz enthaltenen Bestandteile werden freigesetzt (Abb. 2.2). Zur Photosynthese sind nur die photoautotrophen grünen Pflanzen befähigt. Respiration wird hingegen sowohl von den grünen Pflanzen als auch von allen anderen, heterotrophen Organismen betrieben. Zur Respiration zählt also auch die Atmung der Destruenten – jener Bakterien die organische Substanz zersetzen. Folglich fällt im Schema von Abbildung 2.2 auch der in der Wassergütwirtschaft als biochemischer Sauerstoffverbrauch infolge der Einleitung organisch belasteter Abwässer bezeichnete Sauerstoffverbrauch unter den Begriff der Respiration.

Stoffkreislauf: Abbildung 2.2 veranschaulicht, dass die am Wechselspiel zwischen Photosynthese und Respiration beteiligten Stoffe einem Kreislauf unterliegen. Die durch die Veratmung der Biomasse freigesetzten Nährstoffe und Kohlenstoff werden durch die Photosynthese wieder in Biomasse eingebaut. Diese Biomasse sowie der photosynthetisch erzeugte Sauerstoff werden bei der Respiration wieder verbraucht. Der Stoffkreislauf ist geschlossen. Da dieser Kreislauf von dem entsprechend der Strömung gerichteten Transport überlagert wird, erscheint es korrekter von einer „Stoffspirale“ zu sprechen.

Energiefluss: Die Sonnenstrahlung ist im geschlossenen System der einzige Energielieferant für den internen Stoffhaushalt. Durch die Photosynthese wird ein kleiner Teil der verfügbaren Strahlungsenergie – etwa 1 % – in „chemisch gebundene“ Energie in Form von Algenbiomasse überführt. Die durch die photosynthetische Aktivität synthetisierte Biomasse stellt die Energiegrundlage für alle weiteren aquatischen Organismen und das Phytoplankton selbst dar. Bei der weiteren Verwertung der Biomasse durch heterotrophe Organismen (Destruenten oder Konsumenten) wird der als Biomasse gespeicherte Anteil der ursprünglich verfügbaren Energie immer kleiner (Odum 1991). Der größte Teil wird in nicht mehr verfügbare Wärme umgewandelt. Somit wird die in das System eingespeiste Energie im Zuge der darin stattfindenden Umwandlungsprozesse gemäß den Gesetzen der Thermodynamik zum Großteil in nicht mehr nutzbare Energieformen umgewandelt (Energieerhaltung bei Entropiezunahme). Zur Aufrechterhaltung des Systems und der darin ablaufenden Prozesse ist die ständige Zufuhr von Energie erforderlich (Stumm und Morgan 1995). Im Gegensatz zu den Stoffen wird die Energie im System also nicht komplett recycelt sondern sukzessive in Entropie umgewandelt (Odum 1991; Stumm und Morgan 1995).

Das offene System

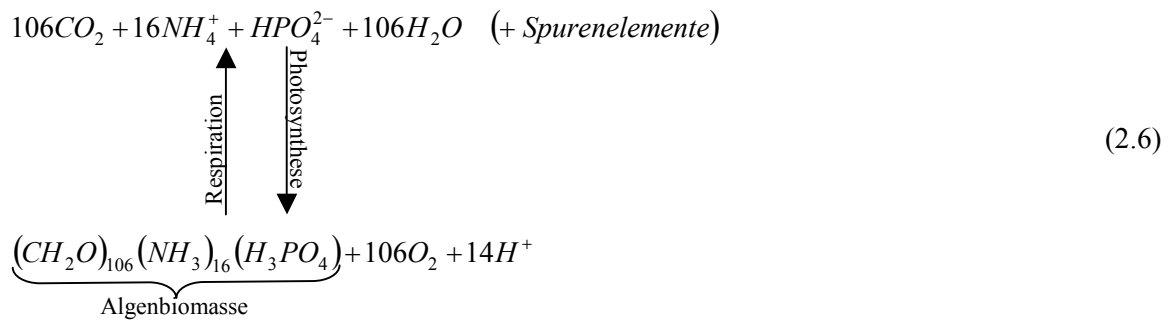
Tatsächlich handelt es sich bei keinem aquatischen Ökosystem um ein geschlossenes System, vielmehr ist das Stoffhaushaltssystem insbesondere bei Fließgewässern eng mit den Nachbarkompartimenten verbunden. Hierzu zählen die Interaktionen mit dem Gewässersediment ebenso wie der Gasaustausch mit der Atmosphäre. Über den Gasaustausch mit der Atmosphäre können je nachdem ob Über- oder Untersättigungen vorliegen O₂ und CO₂ dem Stoffkreislauf entzogen oder zugeführt werden.

Darüber hinaus werden in das Gewässer allochtone Substanzen aus dem Einzugsgebiet eingetragen, die den Stoffkreislauf und Energiefluss beeinflussen. Hierbei kann es sich einerseits um natürlicher Weise eingetragene Stoffe handeln, was die enge Vernetzung des Fließgewässers mit seinem Einzugsgebiet verdeutlicht (Hynes 1975). Andererseits können die allochtonen Stoffe jedoch auch auf anthropogene Ursachen zurückgehen und möglicherweise unerwünschte Auswirkungen auf den Stoffhaushalt haben. Die Einleitung abbaubarer organischer Substanz ist gleichbedeutend mit der Einleitung von als Biomasse „chemisch gebundener“ Energie. Eine solche Einleitung kann zur Dominanz der Respiration und damit zu übermäßigem Sauerstoffverbrauch führen (Primärbelastung). Andererseits kann die Zufuhr von Nährstoffen die Förderung der Primärproduktion bedingen (Eutrophierung). In jedem Fall werden die Energie- und Stoffflüsse im Gewässer durch allochtone Substanzen beeinflusst. Auf die beiden genannten und weitere anthropogene Einflüsse wird in Abschnitt 2.5 näher eingegangen.

Beteiligte Stoffe und stöchiometrische Rahmenbedingungen

BSB: Die Konzentration der abbaubaren Biomasse wird in der wassergütewirtschaftlichen Praxis zumeist als biochemischer Sauerstoffbedarf (BSB) gemessen. Der BSB entspricht der Verminderung der Sauerstoffkonzentration infolge des Abbaus der organischen Substanz durch Bakterien (Destruenten) und der Atmungsaktivität aller anderen Organismen. Im Allgemeinen ist dabei der Sauerstoffbedarf infolge des Stoffwechsels der Destruenten der wichtigste Faktor, weshalb der BSB häufig als ein Maß für die Belastung mit abbaubaren organischen Stoffen verstanden wird. Der als Sauerstoffverbrauch in fünf Tagen gemessene BSB₅ ist die am weitesten verbreitete Maßzahl für die potenzielle Sauerstoffzehrung im Gewässer (DVWK 1990). Für die autochton produzierte Biomasse erhält man mit Hilfe der Stöchiometrie der Algensubstanz näheren Einblick in den Stoffhaushalt.

Algenstöchiometrie: Die chemische Zusammensetzung der Algenbiomasse kann zumeist als relativ konstant angesehen werden (Lampert und Sommer 1993). Allgemein wird davon ausgegangen, dass sie nahe bei der von Redfield (1956) vorgeschlagenen Stöchiometrie liegt (Chapra 1997; Stumm und Morgan 1995). Legt man diese Redfield-Stöchiometrie zugrunde, so kann man Photosynthese und Respiration vereinfacht mit der folgenden chemischen Reaktionsgleichung beschreiben:



In der Summenformel kann die Algenbiomasse demnach als $\text{C}_{106}\text{H}_{263}\text{O}_{110}\text{N}_{16}\text{P}_1$ ausgedrückt werden. Vollenweider (1968) sowie Uhlmann und Horn (2001) gehen alternativ hierzu von anderen Summenformeln aus: $\text{C}_{106}\text{H}_{180}\text{O}_{58}\text{N}_{16}\text{P}_1$ (Vollenweider 1968), bzw. $\text{C}_{106}\text{H}_{180}\text{O}_{45}\text{N}_{16}\text{P}_1$ (Uhlmann und Horn 2001).

Makronährstoffe: Hieraus wird deutlich, dass alle drei Autoren von einem molaren C:N:P Verhältnis von 106:16:1 in der Algenbiomasse ausgehen. Auf die Masse bezogen entspricht dies C:N:P = 41:7,2:1. Allerdings gehen Vollenweider (1968) und Uhlmann und Horn (2001; S. 33) von geringeren Wasserstoff- und Sauerstoffgehalten in der Biomasse aus, so dass sich für die relativen Anteile von C, N und P an der Biomasse Unterschiede ergeben. Die prozentualen Stoffanteile liegen je nach Autor bei 36...52% für Kohlenstoff, 6,3...9,2% für Stickstoff und 0,9...1,2% für Phosphor. Bei der Untersuchung von drei häufig auftretenden Kieselalgenarten und zwei weit verbreiteten Grünalgenarten gelangte Kirchesch bezogen auf die silikatfreie Biomasse zu folgenden Stoffanteilen: 48% C, 8,5...9% N und 1,0...1,2% P (Müller 2001a). Demnach scheint die Vollenweider-Stöchiometrie weitgehend repräsentativ zu sein, während die von Redfield (1956) und Uhlmann und Horn (2001) die Spannweite gut eingrenzen.

Mikronährstoffe Silizium und Chlorophyll-a: Neben den Makronährstoffen Stickstoff und Phosphor benötigen die Algen vor allem zum Aufbau bestimmter Enzyme weitere Spurenelemente, wie z.B. Eisen, Mangan oder Molybdän (Schwörbel 1993). Deren Anteil an der Biomasse ist jedoch gering. Die in vielen Flüssen das Phytoplankton dominierenden Kieselalgen benötigen darüber hinaus für den Aufbau ihrer silikatischen Zellwände Silizium (van den Hoek et al. 1993). Der Silikatgehalt variiert von Art zu Art und liegt in Bezug auf die nichtsilikatische Biomasse bei Massenanteilen zwischen etwa 10% und 20% (Messungen von Kirchesch zit. in Müller 2001a). Im Rahmen der meisten Monitoringprogramme wird nicht die Algenbiomasse bestimmt, sondern der Chlorophyll-a Gehalt (Chl-a). Entsprechend ist die modellhafte Beschreibung des Stoffhaushalts häufig an diesen Parameter gebunden. Bezogen auf die nicht silikatische Algenbiomasse liegen die Chl-a Gehalte bei etwa 1%, können jedoch in Abhängigkeit von Art und Lichtangebot zwischen 0,5% und maximal 3% schwanken (DVWK 1993).

Sauerstoff: Gleichung 2.6 liegen neben der Stöchiometrie die Annahmen zugrunde, dass Stickstoff ausschließlich als Ammonium und Phosphor als HPO_4^{2-} (der bei $\text{pH} > 7,2$ dominanten Form des Orthophosphats) aufgenommen bzw. freigesetzt werden. Auf dieser Grundlage ergibt sich für die Redfieldstöchiometrie, dass bei der Photosynthese je Gramm Biomasse 0,96 Gramm Sauerstoff produziert und entsprechend bei der Respiration verbraucht werden. Bei der Respiration wird in jedem Fall zunächst Ammonium freigesetzt. Bei der Photosynthese kann Stickstoff hingegen je nach Verfügbarkeit auch als Nitrat aufgenommen werden. Drückt man Gleichung 2.6 mit Nitrat aus (siehe Stumm und Morgan 1995; S. 887), so ergibt sich bei der Photosynthese eine Sauerstoffproduktion von 1,2 Gramm Sauerstoff je Gramm aufgebauter Biomasse. Bei der von Uhlmann und Horn (2001) zugrunde gelegten Algenstöchiometrie ergeben sich hingegen Werte von 2,0 g Sauerstoff je Gramm Biomasse für Ammonium und respektive 2,6 g/g für Nitrat als Stickstoffquelle. Die von Kirchesch für 5 Algenarten ermittelten Sauerstoffproduktionsraten liegen bei 1,3...1,8 Gramm Sauerstoff je Gramm silikatfreier Algenbiomasse. Damit scheinen die auf Grundlage der Redfield- bzw. Uhlmann und Horn-Stöchiometrien ermittelten Werte wiederum die maximale Spannweite einzugrenzen und die Vollenweider-Stöchiometrie weitgehend repräsentativ zu sein. Da Ammonium von den Algen bevorzugt aufgenommen wird, dürften plausible Werte für die Sauerstoffproduktion bei der Algenphotosynthese bzw. die Sauerstoffzehrung bei der Respiration von Algenbiomasse im Bereich von 1...2 g/g liegen.

Allochtone organische Substanz: Die von außen eingetragene Biomasse kann erheblich von der oben beschriebenen Stöchiometrie abweichen. So weist Biomasse aus terrestrischen Quellen und insbesondere häusliches Abwasser beispielsweise wesentlich höhere Stickstoffgehalte auf.

Nahrungskette/Nahrungsnetz

Lediglich die photoautotrophen Organismen, also die grünen Pflanzen, können Lichtenergie in „chemisch gespeicherte“ Energie in Form von Biomasse überführen. Die so im System erzeugte autochtone Biomasse und die von extern in das Gewässer eingetragene allochtone Biomasse sind für alle weiteren heterotrophen Organismen die einzigen Energiequellen und somit Ausgangspunkt des Nahrungsnetzes. Das in der Natur häufig sehr komplexe Nahrungsnetz kann vereinfachend und schematisch als Nahrungskette abgebildet werden, die als Pyramide mehrerer trophischer Stufen begriffen werden kann. An der Basis dieser trophischen Pyramide stehen die (Primär-)Produzenten (die Photoautotrophen), an die sich Konsumenten verschiedener Ordnung anschließen. Parallel hierzu spielen die Destruenten eine wichtige Rolle beim Stoffrecycling, indem sie sowohl allochtone als auch abgestorbene bzw. von den Konsumenten nicht verwertbare autochtone Biomasse mineralisieren.

Produzenten: Die Primärproduktion im Gewässer wird durch photoautotrophe grüne Pflanzen bewerkstelligt, diese werden daher als *Produzenten* bezeichnet. In den zumeist recht tiefen staugeregelten Flüssen sind planktische Algen (Phytoplankton) die Hauptträger der Primärproduktion (Uhlmann und Horn 2001).

Konsumenten: Ein Teil der durch die Produzenten aufgebauten Biomasse dient den Pflanzenfressern, den sogenannten *Primärkonsumenten*, als Nahrung respektive Energiequelle. In größeren Fließgewässern sind die wichtigsten *Primärkonsumenten* das herbivore Zooplankton, vor allem Rotatorien und Cladoceeren, sowie am Gewässerbett die benthischen Filtrierer, vor allem Muscheln (Lampert und Sommer 1993). Die *Primärkonsumenten* dienen wiederum anderen Tieren, den sogenannten *Sekundärkonsumenten* erster Ordnung, als Nahrungsgrundlage. Hierzu zählen z.B. räuberische Zooplankter (carnivores bzw. omnivores Zooplankton, z.B. Copepoden) oder Friedfische (im Neckar z.B. Rotaugen und Brachse). Diese sind wiederum Nahrung und Energiequelle der *Sekundärkonsumenten* zweiter Ordnung. Hierzu zählen Raubfische wie Hechte oder größere Barsche. Sind diese das letzte Glied in der Kette werden sie auch als *Endkonsumenten* bezeichnet (Ministerium für Ländlichen Raum 1989; Schwörbel 1993; Uhlmann und Horn 2001).

Destruenten: Ein Teil der in den einzelnen trophischen Stufen erzeugten Biomasse wird nicht in die nächste Stufe der Nahrungskette weitergereicht, da sie nicht von den Konsumenten höherer Ordnung verwertet werden kann oder durch andere Ursachen (Altersmortalität, Nahrungsmangel etc.) abstirbt. Diese tote organische Substanz sowie die allochtone Biomasse wird von den *Destruenten* abgebaut.

Weiterführende Beschreibungen der in der Natur tatsächlich vorgefundenen komplexen Nahrungsnetze finden sich in Lehrbüchern der Limnologie wie z.B. Schwörbel (1993), Lampert und Sommer (1993) oder Uhlmann und Horn (2001).

Energie- und Stoffflüsse in der Nahrungskette

In Abbildung 2.3 ist der Fluss von Biomasse, Energie und Nährstoffen beim Übergang von einer trophischen Stufe auf die nächste schematisch dargestellt. Die Breite der Blockpfeile ist dabei repräsentativ für die relativen Anteile der Biomassenflüsse, also auch für die Flüsse der darin gespeicherten Nährstoffe und Energie (Zahlenwerte grob gerundet nach Odum 1991). Die absoluten Zahlen variieren selbstverständlich örtlich wie räumlich stark und können somit nur als grobe Richtwerte verstanden werden (Likens 1985). Der Stoff- und Energiefluss soll exemplarisch anhand der ersten beiden trophischen Stufen, also anhand des Übergangs vom Phytoplankton zu den Primärkonsumenten erläutert werden.

Aus Abbildung 2.3 wird deutlich, dass in aquatischen Systemen nur ein kleiner Teil der Biomasse (inklusive Energie und Nährstoffe) tatsächlich von einer trophischen Stufe zur nächsten überführt wird. Dieser Anteil liegt bei etwa 5% bis 20% (Odum 1991; Kummert und Stumm 1989; Schwörbel 1993). Das bedeutet, dass durchschnittlich nur maximal 20% der Algenbiomasse dem herbivoren Zooplankton und den benthischen Filtrierern zugute kommen.

Der weitaus größte Teil – etwa die Hälfte – der autotroph erzeugten Biomasse wird vom Phytoplankton selbst zur Aufrechterhaltung seiner Lebensfunktionen veratmet (Betriebsstoffwechsel). Die in der veratmeten Biomasse gespeicherte Energie wird letztlich in Wärme umgewandelt, während die Nährstoffe und CO₂ freigesetzt werden und somit wieder für die photoautotrophe Produktion zur Verfügung stehen. In

Bezug auf Sauerstoff bedeutet dies, dass durchschnittlich etwa 50 % des durch die Photosynthese erzeugten O_2 durch Respiration von den Algen selbst wieder verbraucht wird.

Ein Teil der Biomasse stirbt beispielsweise durch die natürliche Mortalität, durch Licht- oder Nährstoffmangel ab. Ein weiterer Teil wird von den Primärkonsumenten zwar aufgenommen, kann von diesen aber nicht verwertet werden und wird daher wieder ausgeschieden. Diese beiden Anteile, die durchschnittlich etwa ein Drittel der produzierten Biomasse ausmachen, werden von den Destruenten abgebaut. Hinzu kommt noch die allochtone organische Substanz, also auch die mit Abwasser eingeleitete Biomasse (in Abb. 2.3 nicht dargestellt). Genauer betrachtet dient auch bei den Destruenten die Biomasse zunächst zum Wachstum der Bakterien und wird dann von diesen wiederum veratmet. Da der Lebenszyklus der Bakterien sehr kurz ist, kann man vereinfachend davon ausgehen, dass sie die Biomasse direkt veratmen. Auch durch die Destruenten wird die Energie in nicht mehr verfügbare Wärme umgewandelt und die Nährstoffe werden recycelt. Zudem wird bei dem (respirativen) Stoffabbau Sauerstoff verbraucht und CO_2 erzeugt.

Bei den Übergängen auf die nachfolgenden trophischen Stufen sind die relativen Anteile der Stoff- und Energieflüsse im Mittel etwa gleich (Odum 1991). Daraus folgt, dass mit jeder zunehmenden Stufe in der Nahrungskette die gespeicherte Biomasse sowie das Sauerstoffzehrungspotenzial durch Respiration und Abbau drastisch abnimmt.

Für Sauerstoff- und Nährstoffhaushalt sind also zum einen die ersten Glieder der Nahrungskette von herausragender Wichtigkeit, in staugeregelten Flüssen also vor allem das Phytoplankton. Dieses trägt sowohl durch die Primärproduktion als auch durch seine Atmung und das Absterben von Biomasse wesentlich mehr zum Sauerstoff- und Nährstoffhaushalt bei, als höhere trophische Stufen. Zum anderen kann die allochtone Biomasse von sehr großer Bedeutung für den Stoffhaushalt sein. Je nach Grad der Abwasserbelastung kann die anthropogen bedingte Zufuhr von organischer Substanz wesentlich mehr zum Abbau durch Destruenten beitragen als die intern produzierte Biomasse. Entsprechend können die Abwassereinleitungen entscheidend für den Sauerstoffhaushalt sein. Nachfolgend werden daher schwerpunktmäßig die Rollen der allochtonen Biomasse und des Phytoplanktons näher beleuchtet.

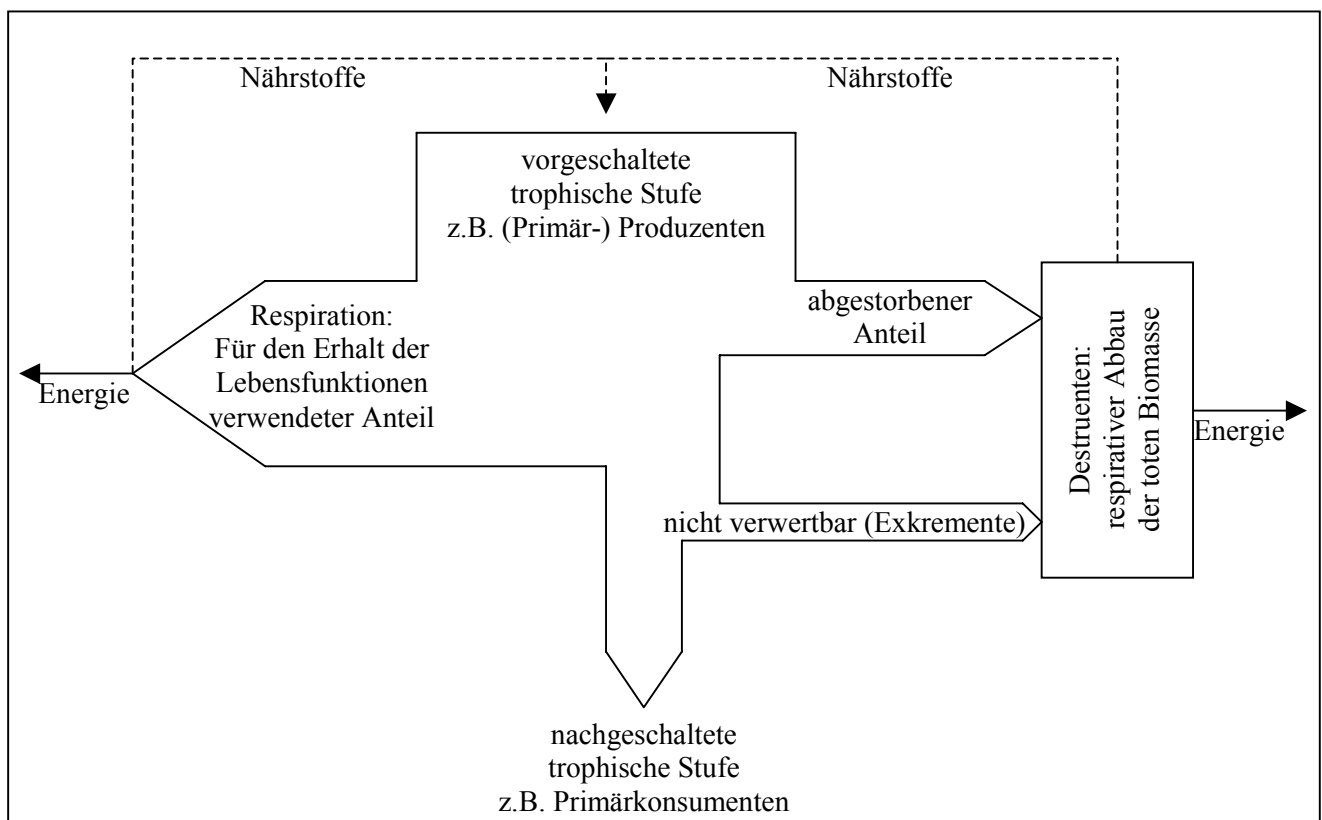


Abb. 2.3: Schematische Darstellung der Flüsse von mineralischen Nährstoffen (gestrichelte Linie), Energie (durchgezogene Linie) und Biomasse inklusive gespeicherter Energie und Nährstoffe (Blockpfeile) beim Übergang zwischen zwei trophischen Stufen.

2.4.2 Abbau toter organischer Substanz und Stickstoffkreislauf

Ausgangspunkt der nachfolgenden Betrachtung ist das tote organische Material im Freiwasser, sowie die darin gespeicherten Nährstoffe und das inhärente Sauerstoffzehrungspotenzial. Bei dem abbaubaren organischen Material handelt es sich zum einen um autochton gebildete Biomasse und zum anderen um anthropogen mit dem Abwasser eingeleitete Stoffe. In den zumeist größeren staugeregelten Flüssen spielt die allochtone organische Substanz aus natürlichen Quellen hingegen zumeist eine untergeordnete Rolle, weshalb diese hier nicht weiter betrachtet wird. Abbildung 2.4 gibt einen schematischen Überblick über die Prozesse, die im Zusammenhang mit dem biologisch katalysierten Abbau der organischen Substanz von Interesse für den Sauerstoffhaushalt sind und hier näher erläutert werden.

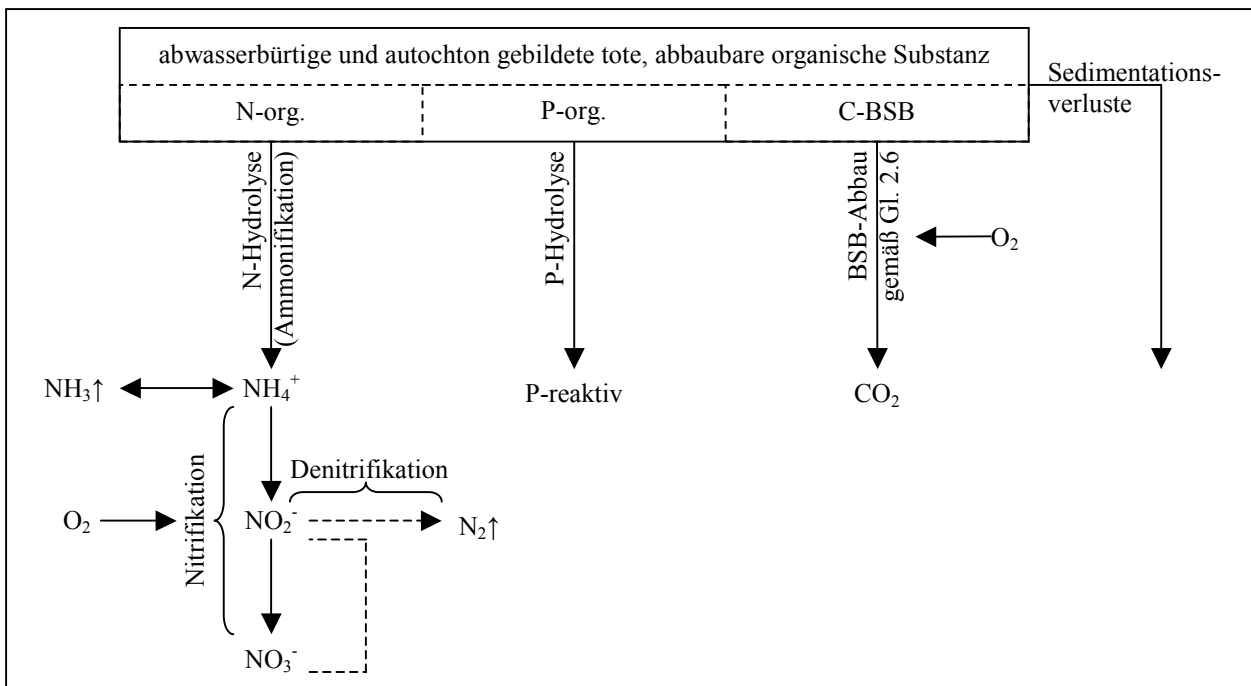


Abb. 2.4: Schematische Darstellung der für den Sauerstoffhaushalt relevanten Prozesse beim biochemischen Abbau toter organischer Substanz und der nachfolgenden Stickstoffumsetzung.

Biochemischer Sauerstoffbedarf – C-BSB

Das der toten Biomasse inhärente Sauerstoffzehrungspotenzial beruht auf dem O_2 Verbrauch, der beim Abbau der organischen Substanz durch die Atmung der Destruenten entsteht. Dieses Sauerstoffzehrungspotenzial wird in der Wassergütwirtschaft als Ersatzmaß für die Belastung mit biologisch abbaubarer organischer Substanz herangezogen und als biochemischer Sauerstoffbedarf (BSB) bezeichnet. Die organische Belastung wird also in Sauerstoffäquivalenten ausgedrückt. Hier soll darunter lediglich die Sauerstoffzehrung infolge der biochemischen Oxidation von Kohlenstoffverbindungen verstanden werden (C-BSB), wohingegen auf den durch Nitrifikation bedingten Sauerstoffverbrauch später eingegangen wird.

Werden Messungen des BSB herangezogen, die in Oberflächengewässern zumeist nach DIN 38 409 Teil 52 („Bestimmung der Sauerstoffzehrung in n Tagen“) durchgeführt werden, sind vor allem zwei Punkte zu beachten: Zum einen kann der BSB_n mit oder ohne Nitrifikationshemmer ermittelt worden sein. Gegebenenfalls ist das Ergebnis daher um die Sauerstoffzehrung infolge der Nitrifikation zu korrigieren. Zum anderen geht bei der Flaschenmessung unter Lichtausschluss auch die Atmung der enthaltenen Organismen (z.B. Phytoplankton) und bei langanhaltenden Messungen auch die Zehrung infolge des Abbaus der dann abgetöteten Organismen mit in den BSB ein. Werden diese Faktoren getrennt betrachtet, so gilt es die Messwerte auch diesbezüglich zu korrigieren (DVWK 1990).

Das Zehrungspotenzial der autochtonen Biomasse liegt bei 1...2 Gramm Sauerstoff je Gramm Biomasse (siehe 2.4.1, Stöchiometrie), während sich das abwasserbürtige Zehrungspotenzial aus dem BSB_{30} abschätzen lässt. Für den Sauerstoffhaushalt ist jedoch nicht nur das gesamte Sauerstoffzehrungspotenzial

sondern auch die Geschwindigkeit des Abbaus maßgeblich. Diese Abbaugeschwindigkeit ist streng genommen nicht nur von den Eigenschaften der abzubauenen Biomasse sondern auch von der Konzentration der abbauenden Bakterien abhängig. In manchen Modellansätzen wird daher die Biomasse der Destruenten explizit simuliert (Reichert et al. 2001). Aufgrund der hohen Wachstumsgeschwindigkeiten der für den Abbau der organischen Substanz verantwortlichen Bakterien, kann aber zumeist davon ausgegangen werden, dass deren Population im Gewässer an die Verfügbarkeit von C-BSB angepasst ist (Thomann und Mueller 1987). Daher erscheint es gerechtfertigt, von einem Abbau erster Ordnung auszugehen, der lediglich von der Wassertemperatur beeinflusst wird. Da ein Teil der abbaubaren organischen Substanz in partikulärer Form vorliegt, muss für die Bilanzgleichung zudem die Sedimentation berücksichtigt werden (Abb. 2.4). Hieraus ergibt sich:

$$\frac{dBSB}{dt} = -(K_1 \cdot \Theta^{T_w-20} + Sed_{BSB}) \cdot BSB \quad (2.7)$$

Hierin sind BSB das gesamte Sauerstoffzehrungspotenzial (häufig auch als BSB_∞ oder L_0 bezeichnet), Θ ein Temperaturkorrekturterm nach Arrhenius, T_w die Wassertemperatur, K_1 die Abbaurate und Sed_{BSB} die Sedimentationsrate des BSB. Für die Auswirkung des C-BSB auf den Sauerstoffgehalt ergibt sich entsprechend:

$$\frac{dO_2}{dt} = -K_1 \cdot \Theta^{T_w-20} \cdot BSB \quad (2.8)$$

Hierbei ist zu beachten, dass kein stöchiometrischer Umrechnungsfaktor erforderlich ist, da der BSB bereits in Sauerstoffäquivalenten ausgedrückt ist.

In der wasserwirtschaftlichen Praxis wird zumeist der biochemische Sauerstoffbedarf in 5 Tagen BSB_5 ermittelt. In Ausnahmefällen wird die Zehrung auch für andere Zeiträume von n Tagen (BSB_n mit $n=1;2;7;21$) ermittelt. Der in 2.7 und 2.8 verwendete BSB lässt sich mit Hilfe der Abbaurate K_1 leicht aus dem BSB_n errechnen:

$$BSB = \frac{BSB_n}{1 - \exp(-n \cdot K_1)} \quad (2.9)$$

Wobei K_1 selbstverständlich in der Dimension 1/d ausgedrückt werden muss.

In der Natur setzt sich die organische Materie bzw. der BSB aus einer Vielzahl unterschiedlicher Substanzen zusammen, die verschieden schnell abgebaut werden können. Beispielsweise zeichnen sich Algenexsudate und Teile der abgestorbenen Algenbiomasse durch sehr hohe Abbauraten aus, während das organische Material, das aus Kläranlagen mit vollbiologischer Reinigung eingeleitet wird, zumeist sehr kleine Abbauraten aufweist (vgl. Tab. 2.2). Aus diesem Grund werden bei der modellhaften Beschreibung des Sauerstoffhaushalts häufig mehrere BSB Klassen simuliert, die sich durch ihre Abbauraten unterscheiden (ATV 1998; Schroeder 1997). Eine andere Möglichkeit der Differenzierung besteht darin, dass der allochtone BSB explizit simuliert wird, während der Sauerstoffverbrauch der autochton gebildeten Biomasse in Form eines „Kurzschlusses“ abgebildet wird: Beim Absterben aquatischer Organismen führt dies unmittelbar zur Sauerstoffzehrung, ohne den Zwischenschritt über den BSB.

Tab. 2.2: Charakteristische Werte für die BSB Abbauraten organischer Substanz unterschiedlicher Herkunft (Zusammengestellt nach Chapra 1997 und ATV 1998).

Quelle der organischen Substanz	typischer Wert für K_1 bei 20°C (in 1/d)	Spannweite für K_1 bei 20°C (in 1/d)
autochtone Algenbiomasse	0,50	0,20...1,50
kommunales Abwasser		
ungereinigt	0,35	0,20...0,50
mechanisch gereinigt	0,20	0,10...0,30
vollbiologisch gereinigt	0,08	0,05...0,10

Als grobe Anhaltspunkte sind in Tabelle 2.2 Literaturangaben zu typischen C-BSB Abbauraten für kommunale Abwässer und autochtone Biomasse zusammengestellt.

Nährstofffreisetzung

Im Zuge des Abbaus der Biomasse werden auch die darin gespeicherten Nährstoffe vom organisch gebundenen Zustand wieder in anorganische Spezies überführt. Hierbei handelt es sich um einen vielschichtigen Prozess, der über zahlreiche Zwischenstufen letztlich aber zur Freisetzung der Nährstoffe in anorganischer und somit bioverfügbarer Form führt (Abb. 2.2 und 2.4). Bei dieser Mineralisierung wird häufig nicht ganz korrekt von der Stickstoff- bzw. Phosphorhydrolyse gesprochen. Sofern es sich bei der toten Biomasse um abgestorbene Kieselalgen handelt wird selbstverständlich auch das Silizium freigesetzt (in Abb. 2.4 nicht dargestellt).

Die organisch gebundenen Nährstoffe können für modellhafte Beschreibungen über ein stöchiometrisches Verhältnis direkt an den BSB gekoppelt werden (z.B. Gleichung 2.6). In diesem Fall ist die Nährstofffreisetzung direkt an die BSB Abbaurate gekoppelt: Die Nährstofffreisetzung erfolgt mit der selben Rate wie die Sauerstoffzehrung und wird lediglich um den stöchiometrischen Faktor korrigiert. Häufig werden die organisch gebundenen Nährstoffe aber auch getrennt vom BSB betrachtet, was insofern gerechtfertigt ist, als die Zusammensetzung der allochthonen Biomasse stark variiert. Zudem sind Stickstoff oder Phosphor zum Großteil in spezifischen organischen Verbindungen gebunden, die mit anderen Raten abgebaut werden als die Gesamtbiomasse im Mittel. Die vom BSB getrennte Betrachtung erlaubt es die Umsetzung der organisch gebundenen Nährstoffe mit eigenen Raten analog zu Gleichung 2.7 zu beschreiben.

Der Stickstoffkreislauf

Ammonium und Ammoniak: Bei der Mineralisierung toter Biomasse wird Stickstoff in reduzierter Form als Ammonium (NH_4^+) freigesetzt. Als schwache Säure steht das Ammonium im dynamischen Gleichgewicht mit seiner deprotonierten Form dem Ammoniak (NH_3) (Abb. 2.4). Ammoniak steht als Gas über den Gasaustausch in Verbindung mit der Atmosphäre. Bei hohen Ammoniakkonzentrationen kann es also zu Stickstoffverlusten über den Gasaustausch kommen. Zudem wirkt Ammoniak bereits in minimalen Konzentrationen im Bereich von 0,01 mg/L fischtoxisch (Schreckenbach und Spangenberg 1978). Die Dissoziation von NH_4^+ verläuft wesentlich schneller als die anderen beteiligten Reaktionen, weshalb sie als Gleichgewicht betrachtet werden kann (Abb. 2.5).

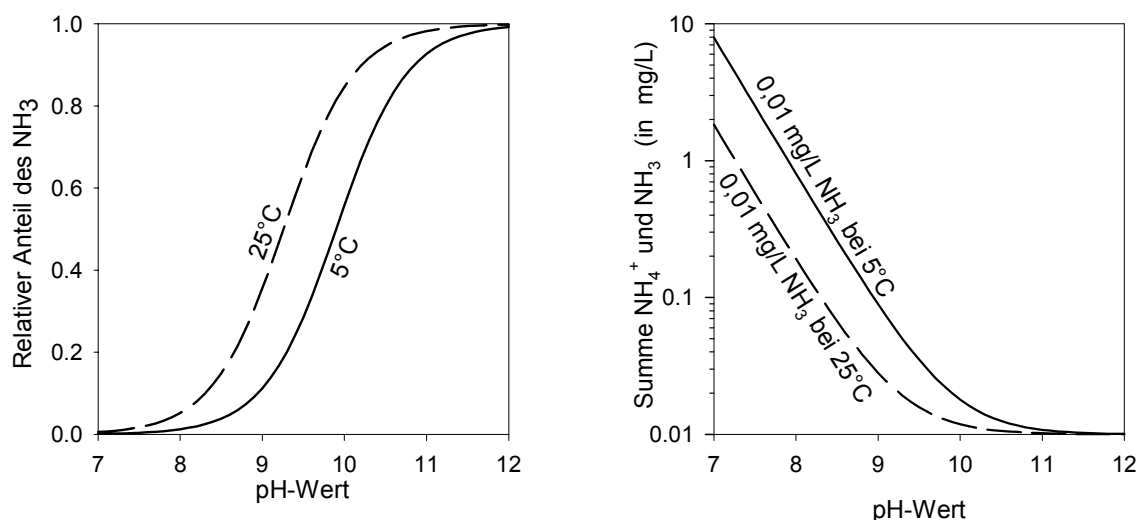
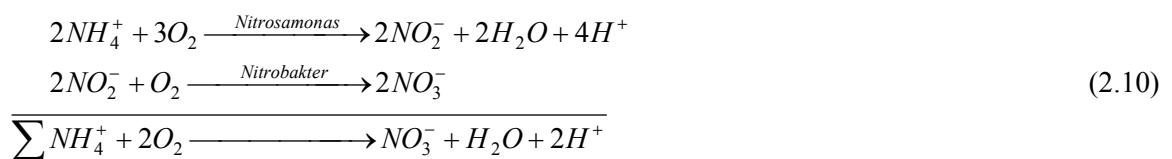


Abb. 2.5: Relative Anteile des Ammoniaks an der Gesamtkonzentration von $\text{NH}_3 + \text{NH}_4^+$ in Abhängigkeit vom pH-Wert und der Wassertemperatur (links), sowie Gesamtkonzentrationen bei denen 0,01 mg/L NH_3 in Abhängigkeit vom pH-Wert überschritten werden (rechts).

In der chemischen Analytik wird immer die Summe aus NH_4^+ und NH_3 ermittelt. Um hieraus den Ammoniakgehalt zu erhalten, muss die Dissoziation berechnet werden. Um die Einflussfaktoren auf die Dissoziation zu verdeutlichen, wurde die Speziierung von NH_4^+ in Abhängigkeit des pH-Wertes und der Wassertemperatur simuliert. Hierzu wurden die von Stumm und Morgan (1995, S. 122) angegebenen Dissoziationskonstanten in einem selbst entwickelten thermodynamischen Gleichgewichtsprogramm verwendet, das auf den von (Westall 1986) vorgegebenen Algorithmen beruht (Haag et al. 2001b). Die Ergebnisse sind in Abbildung 2.5 dargestellt.

Hieraus wird deutlich, dass bei Wassertemperaturen von 25°C bereits bei pH-Werten von 8 ein signifikanter Anteil als Ammoniak vorliegt. Dies hat zur Folge, dass bei hohen Wassertemperaturen und pH-Werten über 8 die Verflüchtigung von Ammoniak als mögliche Stickstoffsinke berücksichtigt werden sollte. Darüber hinaus wird deutlich, dass für das als fischtoxisch einzuschätzende NH_3 Konzentrationen von $0,01 \text{ mg/L}$ bei 25°C und pH 8 bereits bei Ammonium/Ammoniak Gesamtkonzentrationen von $0,2 \text{ mg/L}$ zu erwarten sind. Bei 5°C und pH 8 sind hierfür hingegen Gesamtkonzentrationen von 1 mg/L erforderlich. Zusammenfassend veranschaulicht Abbildung 2.5, dass sowohl für die mögliche toxische Wirkung als auch für den potenziellen Verlust von Stickstoff als Ammoniak nicht nur die Gesamtkonzentration und der pH-Wert sondern auch die Wassertemperatur von entscheidender Bedeutung sind.

Nitrifikation (N-BSB): Das aus der Ammonifikation des organisch gebundenen Stickstoffs freigesetzte und anthropogen eingeleitetes Ammonium wird unter aeroben Bedingungen zu Nitrat oxidiert. Wie Abbildung 2.4 verdeutlicht ist die Nitrifikation ein zweistufiger Prozess, bei dem Ammonium zunächst durch Nitrosomonas zu Nitrit und dieses dann durch Nitrobakter zu Nitrat oxidiert wird. Diese zweistufige, biologisch katalysierte Redoxreaktion lässt sich mit folgenden Reaktionsgleichungen ausdrücken:



Hieraus wird deutlich, dass bei der Nitrifikation eines Mols NH_4 2 Mol O_2 verbraucht werden. Dies entspricht $4,6 \text{ Gramm Sauerstoff je Gramm nitrifizierten Stickstoffs}$. Ein Teil des Ammoniums wird bei der chemoautotrophen Umwandlung jedoch in reduzierter Form in die Biomasse der Nitrosomonas und Nitrobakter Bakterien eingebaut, so dass die meisten Autoren von einer etwas geringeren Sauerstoffzehrung von $4,2$ oder $4,3 \text{ Gramm O}_2 \text{ je Gramm Stickstoff}$ ausgehen (Gaudy und Gaudy 1980; Müller und Kirchesch 1980).

Die Wachstumsrate der nitrifizierenden Bakterien ist etwa um den Faktor 5 bis 10 kleiner als die der Destruenten (Gujer 1999). Dies bedingt, dass die Biomasse der Nitrifizierer im Freiwasser direkt unterhalb von Punktquellen mit unzureichend geklärtem Abwasser teilweise noch nicht an die verfügbare Ammoniumkonzentration angepasst ist. In diesem Fall erscheint es hinsichtlich der Simulation der Nitrifikation angebracht, die Bakterienbiomasse explizit mit zu simulieren (Müller und Kirchesch 1980). Bei modernen heute gebräuchlichen Kläranlagen, die Nitrifikation im Belebtschlammverfahren betreiben, werden allerdings mit dem gereinigten Abwasser auch Nitrifizierer in das Gewässer eingeleitet, so dass hier eher von angepassten Nitrifiziererbiomassen unterhalb der Punktquellen ausgegangen werden kann (Chapra 1997; DVWK 1990). In diesem Fall ist die Simulation der Nitrifikation als Reaktion erster Ordnung – wie in Gleichung 2.7 aber ohne Sedimentation – ausreichend. Die Auswirkung auf Sauerstoff wird entsprechend mit einem stöchiometrischen Faktor von $4,2$ bis $4,6$ berücksichtigt (siehe oben).

Nitrobakter weisen eine höhere Wachstumsrate auf als Nitrosomonas, weshalb im Allgemeinen der erste Reaktionsschritt für die Gesamtnitrifikation maßgeblich ist und Nitrit zumeist nur in sehr kleinen Konzentrationen auftritt. Soll Nitrit nicht explizit mit simuliert werden, kann die Nitrifikation daher auch in einem Schritt betrachtet werden (Gleichung 2.10). Bei der mathematischen Beschreibung der Nitrifikation ist allerdings zu beachten, dass es sich bei den Nitrifikanten um obligat aerobe Bakterien handelt, die Nitrifikation durch Sauerstoffmangel also gehemmt werden kann (Gaudy und Gaudy 1980). Eine deutliche Hemmung tritt im Allgemeinen erst bei Sauerstoffkonzentrationen unter 2 mg/L auf (Blackburn et al. 1994). Die potenzielle Hemmung der Nitrifikation kann über einen von der Sauerstoffkonzentration abhängigen Korrekturterm berücksichtigt werden (Brown und Barnwell 1987).

Wohl vor allem aufgrund der relativ geringen Wachstumsraten der Nitrifikanten ist ein Großteil der im Gewässer stattfindenden Nitrifikation an das Gewässerbett gebunden, wo die Substratverfügbarkeit sehr hoch ist und die sessilen Bakterien über einen längeren Zeitraum wachsen können, ohne von der Strömung abtransportiert zu werden (Pauer und Auer 2000). Da in den Sedimenten aber zugleich Biomasse mineralisiert wird, können die Sedimente trotz der effektiven Nitrifikation zur Ammoniumquelle werden. Dies muss über den Austausch mit dem Sediment berücksichtigt werden und wird in Kapitel 7 näher betrachtet.

Denitrifikation und N₂-Fixierung: Denitrifikation, d.h. die Reduktion von Nitrat über Nitrit zu N₂ (sowie in geringem Maße N₂O), findet nur unter annähernd sauerstofffreien Verhältnissen (geringen Redoxpotenzialen) statt. Das gebildete Gas kann in die Atmosphäre entweichen, weshalb die Denitrifikation eine potenzielle Stickstoffsenke darstellt. Bei Sauerstoffmangel wird Nitrat als alternativer Elektronenakzeptor bei der mikrobiellen Oxidation organischer Substanz und anderer reduzierter Verbindungen verwendet (Stumm und Morgan 1995). Im Allgemeinen tritt die Denitrifikation erst bei Sauerstoffgehalten unter etwa 2 mg/L auf. In Flüssen bei denen keine so geringen Sauerstoffgehalte auftreten, ist die Denitrifikation daher überwiegend an die anaeroben Bereiche des Sediments gebunden (siehe Kapitel 7). Unter Umständen kann jedoch auch im Inneren sehr großer Schwebstoffflocken das Redoxpotenzial weit genug absinken, um Denitrifikation zu ermöglichen (Kerner und Gramm 1995).

Einige Arten der Cyanobakterien (Blaualgen) sind dazu in der Lage Luftstickstoff zu fixieren, diesen also für ihren Stoffwechsel verfügbar zu machen. Blaualgen treten vermehrt zumeist erst bei hypertrophen Verhältnissen auf und werden aufgrund ihrer Fähigkeit Stickstoff zu fixieren insbesondere bei Stickstoffmangel gefördert (Lampert und Sommer 1993; Schindler 1977). Blaualgen reagieren zudem äußerst empfindlich auf Turbulenzeinflüsse, weshalb sie selbst in langsam fließenden, stauregulierten Flüssen zumeist keine bedeutende Rolle spielen (Lenhart 1989; Steinberg et al. 1987). Die Stickstofffixierung ist daher in Fließgewässern allgemein von geringer Bedeutung.

2.4.3 Phytoplankton

In den größeren staugeregelten Flüssen liefert nur das Phytoplankton relevante Beiträge zur photosynthetischen Primärproduktion, wohingegen der Beitrag von Makrophyten und sessilen Algen zumeist vernachlässigt werden kann (Kopf 1986; Thomann und Mueller 1987). Das Phytoplankton der Fließgewässer wird allgemein von Kieselalgen und Grünalgen dominiert (Lenhart 1989). Neben dem aufbauenden Prozess der Photosynthese tragen die Respiration der Algen, die Eigenmortalität, der Fraß und die Sedimentation zum aktuellen Phytoplanktongehalt und somit zum Sauerstoffhaushalt bei.

Photosynthese

Die Photosynthese der pelagischen Algen ist der einzige relevante biogene Sauerstoffeintragungspfad für tiefe staugeregelte Gewässer. Je Gramm gebildeter Algenbiomasse werden hierbei etwa 1...2 Gramm Sauerstoff produziert und entsprechend der Stöchiometrie Nährstoffe und CO₂ gebunden. Prinzipiell kann davon ausgegangen werden, dass für jede Algenart ein Ensemble optimaler Umweltbedingung existiert, bei dem die Algen eine maximale Wachstumsrate (M_{max}) aufweisen. Diese maximale Wachstumsrate unter optimalen Bedingungen liegt für das Phytoplankton etwa bei 1,5...2,5 1/d (Coveney und Wetzel 1995; Gelda et al. 2001; Müller 2001a; Pöhlmann et al. 1989). Das tatsächliche Wachstum wird durch physikalische und chemische Außenfaktoren beeinflusst (Reynolds 1984). Die wichtigsten Einflussfaktoren sind die verfügbare Strahlungsenergie, die Wassertemperatur und die Nährstoffe.

Lichtabhängigkeit: Für die Photosynthese sind nur knapp 50% der eingehenden Globalstrahlung nutzbar. Diesen überwiegend im sichtbaren Bereich (400...700 nm) liegenden Strahlungsanteil bezeichnet man als photosynthetisch aktive Strahlung PAR (engl. Photosynthetically Active Radiation) (Auer und Effler 1990; Kopf 1983). Grundsätzlich gibt es hinsichtlich der PAR Versorgung des Photosyntheseapparates der Algen drei unterschiedliche Bereiche: 1) den Bereich der Lichtbegrenzung, in dem den Algen nicht genügend Strahlung für ein optimales Wachstum zur Verfügung steht, 2) den Bereich der Lichtsättigung, in dem das Lichtangebot annähernd optimal ist und 3) den Bereich der Lichthemmung, in dem das Wachstum infolge zu hoher Strahlung gehemmt wird (Harris 1978). Diese Abhängigkeit der Algenpro-

duktion vom Strahlungsangebot kann mit einer von (Steele 1962) vorgeschlagenen und in der Gewässersimulation üblichen Gleichung abgebildet werden:

$$F_{PAR} = \frac{PAR}{PAR_{opt}} \cdot \exp\left(-\frac{PAR}{PAR_{opt}} + 1\right) \quad (2.11)$$

Hierin sind F_{PAR} (0...1) der resultierende Hemmfaktor infolge nicht optimaler Lichtbedingungen, PAR die aktuell verfügbare Strahlung und PAR_{opt} die für die Primärproduktion optimale Strahlung. Der mit Gleichung 2.11 ermittelte Zusammenhang zwischen PAR Angebot und Wachstumsrate ist in Abbildung 2.6 dargestellt. Das Strahlungsoptimum liegt je nach Algenart etwa im Bereich zwischen 30 W/m^2 und 100 W/m^2 (entspricht etwa $50...200 \mu\text{E/m}^2/\text{s}$) (Auer und Effler 1990; Müller 2001a).

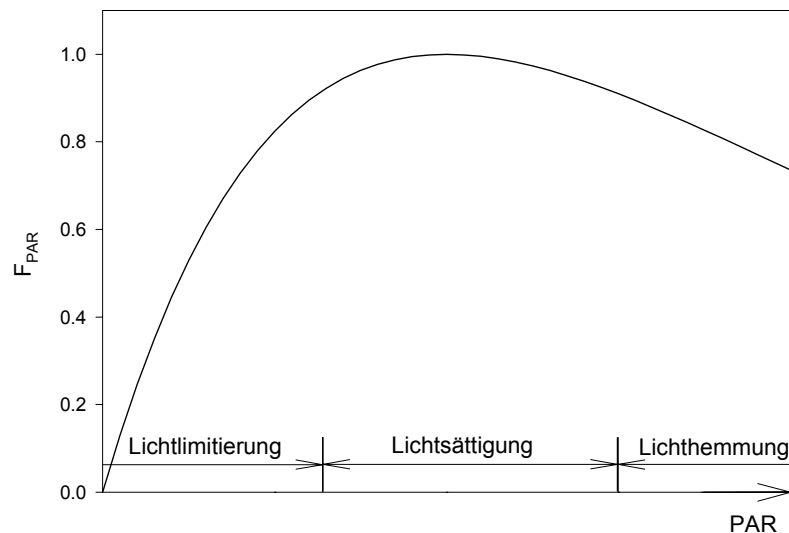


Abb. 2.6: Beziehung zwischen verfügbarer Strahlung und dem Hemmfaktor des Algenwachstums infolge nicht optimaler Lichtbedingungen F_{PAR} .

Um Aufschluss über das verfügbare Lichtangebot zu erhalten, muss die Strahlung über die gesamte Gewässertiefe ermittelt werden. Hierbei müssen die Reflexion der Strahlung an der Wasseroberfläche und die Extinktion beim Durchgang durch das Wasser berücksichtigt werden. Die Reflexion an der Wasseroberfläche hängt vom Einfallswinkel der Strahlung ab und ist somit eine Funktion von Jahres- und Tageszeit, sowie von der Aufteilung der PAR in diffuse und direkte Einstrahlung (Arya 1988). In erster Näherung kann davon ausgegangen werden, dass etwa 5% bis 10% der eingehenden Strahlung an der Wasseroberfläche reflektiert werden (Bannister 1974; Hoffmann 1977; Kopf 1983). Die Abschwächung der Strahlung infolge der Extinktion beim Durchgang durch die Wassersäule kann mit dem Lambert-Beer'schen Gesetz wie folgt berechnet werden:

$$PAR(z) = PAR|_{z=0} \cdot \exp(-TR \cdot z) \quad (2.12)$$

Wobei z der vertikale Abstand von der Wasseroberfläche ist. Der Extinktionsfaktor (bzw. Trübungsfaktor) TR ist in erster Linie eine Funktion des Schwebstoff- und Algengehalts im Wasser, wird aber auch von gelösten oder kolloidalen Huminstoffen beeinflusst. TR kann entweder über Messungen bestimmt oder mit Hilfe von empirischen Formeln abgeschätzt werden (Chapra 1997; Kopf 1983; Schreiner 1977; Schroeder 1997).

Durch die Abnahme der Strahlungsintensität mit der Wassertiefe ergibt sich ein oberflächennaher Bereich in dem die Lichtversorgung so groß ist, dass die Photosynthese größer ist als die Respiration der Algen. Diesen produktiven Bereich bezeichnet man als *euphotische Zone* (auch trophogene Zone). In dem tiefer liegenden nahezu dunklen Bereich führt die mangelnde Lichtversorgung hingegen dazu, dass die Respiration der Algen gegenüber ihrer Produktion überwiegt. Die Tiefe der *euphotischen Zone* entspricht näherungsweise jener Tiefe, bei der noch 1% der direkt unter der Wasseroberfläche verfügbaren Strahlung eingeht (Schwörbel 1993).

In Fließgewässern verändern die suspendierten Algen infolge der vertikalen Diffusion ihre Tiefenlage, wodurch sich auch das Lichtangebot beständig verändert. Geht man von einer homogenen Konzentrationsverteilung der Algen über die gesamte Tiefe aus und nimmt weiter an, dass der Photosyntheseapparat ohne Zeitverzögerungen auf das veränderliche Lichtangebot reagiert, so ergibt sich die für die Primärproduktion relevante mittlere PAR aus der Integration von $PAR(z)$ über die Gewässertiefe. In den meisten Gewässergütemodellen wird von dieser Annahme ausgegangen, wonach die über die Tiefe gemittelte Strahlung maßgebend für den Einfluss des Lichts auf die Photosynthesaktivität des Phytoplanktons ist (Brown und Barnwell 1987; Chapra 1997; Schroeder 1997).

Allerdings wird bei dem oben beschriebenen statischen Ansatz der Einfluss dynamischer Effekte, die in Verbindung mit der vertikalen Diffusion auftreten, nicht erfasst (Pahl-Wostl 1992). Experimentelle Untersuchungen belegen, dass die Lichthemmung erst mit einer zeitlichen Verzögerung von etwa 10 Minuten zum Tragen kommt. Bei eigentlich hemmenden Lichtdosen kommt es anfänglich sogar noch zu einer Steigerung der Photosyntheseaktivität, die erst innerhalb einiger Minuten in eine Hemmung übergeht. Gelangt eine Alge nach dem Lichtüberangebot wieder in dunklere Zonen, so ist sie nach einer kurzen etwa fünfminütigen „Erholungszeit“ wieder in der Lage die volle Photosyntheseleistung zu erbringen (Harris 1978; Harris und Piccinin 1977; Pahl-Wostl und Imboden 1990). Aus diesem Grund wirkt der Hell-Dunkel Wechsel, wie er infolge des vertikal turbulenten Austausches auftritt, zumeist produktionssteigernd auf das Phytoplankton (Harris 1978). Dies kann hochsignifikante Auswirkungen auf die Photosyntheseleistung in einem staugeregelten Fluss haben und die Anwendbarkeit des oben skizzierten statischen Ansatzes begrenzen (Löhr 1984). Vielmehr zeigten Jewson und Wood (1975), dass die Sauerstoffproduktion von Algen, die in Lichtgradienten bewegt wurden, der Sauerstoffproduktion der Algen im Lichtsättigungsbereich entsprach, solange die Durchmischungstiefe auf die *euphotische Zone* begrenzt blieb. Der produktionssteigernde Einfluss der Vertikaldurchmischung konnte für die in staugeregelten Flüssen typischen Algengesellschaften und charakteristischen Vertikaldurchmischungen von Pöhlmann (1989) mit Hilfe von Feldversuchen am Main bestätigt werden. Demnach ist die Photosyntheseleistung unabhängig von der Wassertiefe, solange die Wassertiefe kleiner gleich der *euphotischen Tiefe* ist. Erst wenn die *euphotische Tiefe* überschritten wird nimmt die photosynthetische Sauerstoffproduktion ab. Eine einfache modellhafte Beschreibung dieses Sachverhalts wird in Kapitel 8.4.2 dargestellt.

Temperatureinfluss: Um den Einfluss der Wassertemperaturen zu verdeutlichen, wurden Versuchsergebnisse von Pöhlmann et al. (1989) auf einen Hemmfaktor für nicht optimale Wassertemperaturen F_{TW} normiert. Die Ergebnisse für 4 typische Algengesellschaften sind in Abbildung 2.7 dargestellt.

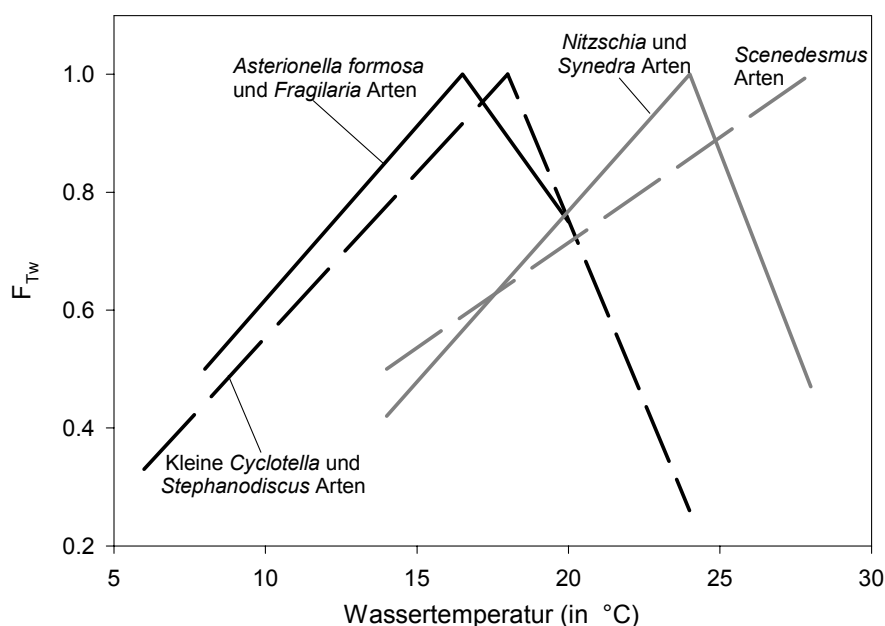


Abb. 2.7: Hemmfaktor für nicht optimale Temperaturbedingungen als Funktion der Wassertemperatur für vier typische Algengesellschaften (nach Messungen von Pöhlmann et al. 1989).

Abbildung 2.7 verdeutlicht, dass die Photosyntheseleistung prinzipiell mit steigender Wassertemperatur langsam zunimmt und nach Überschreiten der Optimumtemperatur relativ rasch abfällt. Canale und Vogel (1974) sowie Reimann (1978) extrahierten ähnliche Zusammenhänge für andere Algengesellschaften. Die Optimumtemperatur hängt offenkundig von der Algenart bzw. Algengesellschaft ab. Das höchste Temperaturoptimum der dargestellten Algengesellschaften weisen die Grünalgen der Gattung *Scenedesmus* mit etwa 28°C auf. Alle drei Kieselalgenengesellschaften haben dagegen geringere Temperaturoptima. Für die sehr weit verbreitete *Asterionella formosa* sowie für die kleinen zentrischen Kieselalgen der Gattungen *Cyclotella* und *Stephanodiscus* liegen die optimalen Temperaturen im Bereich von 16°C bis 18°C (vgl. auch ATV 1998).

Nährstoffe: Die Primärproduktion kann auch durch den Mangel an essentiellen Nährstoffen limitiert werden. Der Einfluss der Verfügbarkeit eines Nährstoffs wird zumeist mit der als *Michaelis-Menten* oder *Monod* Modell bezeichneten Beziehung beschrieben. Der Hemmfaktor F_{N_x} infolge des Mangels eines spezifischen Nährstoffs ergibt sich demnach aus:

$$F_{N_x} = \frac{c_{N_x}}{K_{N_x} + c_{N_x}} \quad (2.13)$$

Hierin sind c_{N_x} die aktuelle Konzentration des Nährstoffs und K_{N_x} die sogenannte Halbsättigungskonzentration, die jener Nährstoffkonzentration entspricht, bei der der Hemmfaktor F_{N_x} 0,5 beträgt.

Zur Hemmung des Algenwachstums können grundsätzlich alle essentiellen Nährstoffe inklusive des Kohlenstoffs beitragen. Zur Kohlenstofflimitierung kommt es jedoch so gut wie nie: In Gewässern in deren Einzugsgebieten sich Carbonatgesteine finden, ist die Kohlenstoffversorgung aus mineralischen Quellen gewährleistet. In silikatischen Gewässern, die sehr arm an mineralischem Kohlenstoff sind, kann über den Gasaustausch CO_2 aus der Atmosphäre nachgeliefert werden (Schindler 1977; Schindler 1990). Auch die essentiellen Spurenelemente (K, Mg, Fe, Mn, Mo, etc.) werden mit wenigen extremen Ausnahmen in ausreichendem Maße durch die Verwitterung zur Verfügung gestellt (Schwörbel 1993). Das Hauptaugenmerk hinsichtlich einer potenziellen Wachstumslimitierung liegt daher auf den Makronährstoffen Stickstoff und Phosphor sowie im Falle von Kieselalgen auch auf Silizium.

Tabelle 2.3 enthält eine Übersicht über in der Literatur angegebene Halbsättigungskonstanten. Weitere Angaben zu einzelnen Algenarten finden sich in Jørgensen (1979). Die Tabelle verdeutlicht, dass zum Teil große Unsicherheit bezüglich der Halbsättigungskonstanten besteht. Dies ist nicht nur Ausdruck dessen, dass die Halbsättigungswerte zwischen den Arten variieren, sondern beruht zum Teil sicherlich auch auf unterschiedlichen Messmethoden. Darüber hinaus können je nach Aufwuchsbedingungen sogar unterschiedliche Stämme der selben Art verschiedene Halbsättigungskonstanten aufweisen (Soeder et al. 1971).

Tab. 2.3: Halbsättigungskonzentrationen von Stickstoff, Phosphor und Silizium (nur Kieselalgen) nach Angaben unterschiedlicher Autoren.

Algenart bzw. -gesellschaft	K_N (in $\mu\text{g/L}$)	K_P (in $\mu\text{g/L}$)	K_{Si} (in $\mu\text{g/L}$)	Quelle
Phytoplankton allgemein	5...20	1...5	20...80	Chapra (1997)
Kieselalgen allgemein	170	36	90	Pöhlmann et al. (1989)
Kieselalgen allgemein	200	20	80	ATV (1998)
Kieselalgen allgemein	30	2	70	Schöl et al. (2002)
<i>Asterionella formosa</i>		2		Holm und Armstrong (1981)
<i>Cyclotella nana</i>		18		Jørgensen (1979)
<i>Nitzschia actinastroides</i>		30		Jørgensen (1979)
Grünalgen allgemein	200	20		ATV (1998)
Grünalgen allgemein	30	2		Schöl et al. (2002)
<i>Scenedesmus spec.</i>		19		Jørgensen (1979)
<i>Scenedesmus spec.</i>		50		Uhlmann und Horn (2001)

In Binnengewässern ist Phosphor der Nährstoff, der für das Algenwachstum am häufigsten limitierend wirkt. Von den meisten Algen wird Phosphor nur als Orthophosphat (PO_4) aufgenommen, manche Algenarten können aber auch gelösten organisch gebundenen oder sogar partikulären Phosphor aufnehmen (Chrost 1988; Steinberg 1989). Manche Kieselalgen (z.B. *Asterionella* und *Nitzschia*) sowie viele Grünalgen nehmen während Zeiten ausreichender Versorgung mehr Phosphor auf als sie verwerten und speichern diesen in Form von osmotisch unwirksamen Polyphosphaten. Bei Phosphormangel können diese Algen auf den internen Phosphorspeicher zurückgreifen. Folglich sind die Halbsättigungskonstanten streng genommen nicht nur von der Algenart sondern auch von der Vorgeschichte der Phosphorversorgung abhängig. Diese komplexen Zusammenhänge erschweren eine modellhafte Beschreibung der Phosphorlimitierung der Primärproduktion (Kohl und Niklisch 1988).

Stickstoff wird von den meisten Algen bevorzugt als Ammonium aufgenommen, allgemein kann aber auch Nitrat verwertet werden. Stickstoff wirkt in Binnengewässern nur selten wachstumslimitierend (Schwörbel 1993), was auch darin zum Ausdruck kommt, dass einer exakten Bestimmung von Halbsättigungskonstanten weniger Beachtung geschenkt wird.

Silizium, das in Form gelöster Kieselsäure in allen Gewässern vorkommt, ist nur für Diatomeen potenziell limitierend. Im Gegensatz zu Phosphor kann Si offensichtlich nicht im Überschuss aufgenommen werden (Schwörbel 1993). *Cyclotella* Arten haben nur etwa halb so große Siliziumgehalte wie *Asterionella formosa* (ATV 1998), was als Hinweis auf unterschiedliche Halbsättigungskonzentrationen für diese beiden häufigen Kieselalgengruppen verstanden werden kann. Dies steht im Einklang mit den Versuchsergebnissen von Tilman (1976), wonach *Cyclotella* bei Si Mangel Wachstumsvorteile gegenüber *Asterionella* hat.

Gemäß dem Liebig'schen Minimumgesetz (Uhlmann und Horn 2001) ist jener Nährstoff wachstumsbegrenzend, der am stärksten im Minimum steht. Für die Gesamthemmung durch alle Nährstoffe muss demnach nur der Nährstoff berücksichtigt werden, dessen Hemmfaktor am geringsten ist. Andere Ansätze gehen von einer synergistischen Wirkung der Nährstoffe aus, so dass die Gesamthemmung durch die Multiplikation der einzelnen Hemmfaktoren ermittelt wird (Chapra 1997).

Respiration

Durch die Respiration wird die bei den Photosynthesereaktionen in Form von Sachariden gespeicherte Energie wieder für die Algen verfügbar gemacht. Hierbei wird Sauerstoff verbraucht und CO_2 sowie Nährstoffe in mineralischer Form freigesetzt. Die zurückgewonnene Energie dient dem Erhalt der Lebensfunktionen der Algen. Der Sauerstoffverbrauch und die Nährstofffreisetzung richtet sich dabei nach der zugrunde gelegten Stöchiometrie (Abschnitt 2.4.1).

Ein Teil der Respiration – die sogenannte Photorespiration – ist mit dem Lichtangebot bzw. der aktuellen Photosyntheserate gekoppelt (Baumert 1996). Die Grund- oder Basisrespiration ist hingegen unabhängig vom Lichtangebot, steigt aber mit der Wassertemperatur an.

Bei der modellhaften Beschreibung wird zumeist vereinfachend von einer konstanten lediglich temperaturabhängigen Respirationsrate ausgegangen (Chapra 1997). In neueren Ansätzen wird die Photorespiration jedoch zum Teil explizit berücksichtigt, indem sie entweder als konstanter Anteil der aktuellen Photosyntheserate (Gelda et al. 2001) oder in Relation zum Lichthemmungsfaktor der Photosynthese (ATV, 1998) angesetzt wird. Die Photorespirationsrate beträgt dabei bis zu 10% der Photosyntheserate, während die Basisrespirationsrate bei 20°C etwa zwischen 0,075 1/d und 0,15 1/d liegt (ATV 1998; Chapra 1997; Gelda et al. 2001).

Mortalität

Beim Phytoplankton ist die Grundmortalitätsrate mit 0,01...0,02 1/d allgemein sehr gering (Jorgensen 1979). Die Mortalität kann aber infolge von Nährstoff- oder Lichtmangel ansteigen und Maximalwerte bis zu 0,38 1/d erreichen (Schöl et al. 2002). Beim Absterben der Algen fällt zunächst abbaubare Biomasse mit dem zugehörigen Sauerstoffzehrungspotenzial und den gespeicherten Nährstoffen an. Ein Teil der Nährstoffe wird durch Autolyse rasch freigesetzt und die verbleibende Biomasse wird von den Destruenten veratmet.

In Simulationsmodellen wird die Mortalität mit wenigen Ausnahmen (z.B. ATV 1998; Schöl et al. 2002) zumeist nicht explizit simuliert, sondern in der Respiration implizit mit erfasst (Chapra 1997).

Fraß

Das Phytoplankton dient den Primärkonsumenten als Nahrung. In staugeregelten Flüssen sind das herbivore Zooplankton (vor allem Rädertierchen) und Muscheln (vor allem *Dreissena polymorpha*) die wichtigsten Phytoplanktonkonsumenten. Hierbei handelt es sich um Filtrierer, die – wie der Name sagt – ihre Nahrung passiv aufnehmen indem sie das Wasser filtern (Lampert und Sommer 1993). Vereinfachend wird deshalb von einer Filtrationsrate ausgegangen, die angibt welches Wasservolumen je Zeiteinheit von den Primärkonsumenten (ausgedrückt in Biomasse) filtriert wird. Das im filtrierten Wasservolumen enthaltene Phytoplankton wird ingestiert. Allerdings wird von der aufgenommenen Phytoplanktonbiomasse ein gewisser Anteil nicht verwertet sondern als sogenannte Faeces wieder ausgeschieden. Die Faeces werden von den Destruenten unter Sauerstoffzehrung und Nährstofffreisetzung abgebaut (Abschnitt 2.4.2). Der nutzbare Anteil der Algenbiomasse wird assimiliert, also verdaut. Ein Teil hiervon wird zum Aufbau körpereigener Substanz verwendet, während der Rest direkt respiriert wird (Straskraba und Gnauck 1983). Letztlich werden auch die in den Primärkonsumenten zwischengespeicherten Nährstoffe direkt (Respiration, Mortalität) oder indirekt (Nahrungskette) wieder im System verfügbar, wobei dies mit Sauerstoffzehrung verbunden ist. Der gesamte Vorgang ist in Abbildung 2.8 schematisch dargestellt.

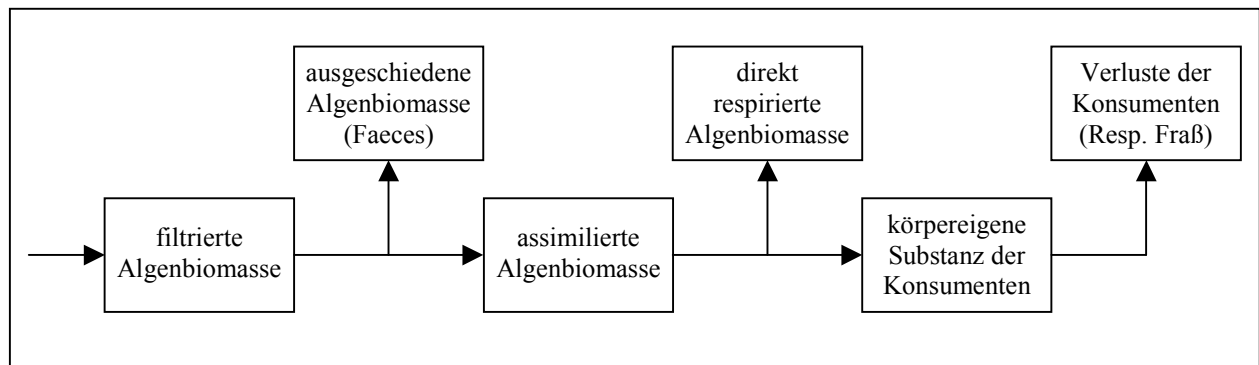


Abb. 2.8: Schematische Darstellung der Vorgänge beim Fraß von Phytoplankton durch Filtrierer.

Die Filtrationsrate der Rädertierchen (Rotatorien) liegt im Bereich von 0,2 bis 0,4 L/mg/d (Gosselain et al. 1998; Straskraba und Gnauck 1983). Bei *Dreissena polymorpha* (Dreikantmuschel) hängt die Filtrationsrate stark vom Entwicklungszustand der Individuen ab und liegt etwa eine Größenordnung unter jener der Rotatorien (Schöl et al. 1999). Kryger und Riisgard (1988) geben einen Überblick über experimentell ermittelte Filtrationsraten für die Dreikantmuschel. Der Anteil der verwerteten Algenbiomasse hängt von der Art und Konzentration der Algen sowie von der Art des Filtrierers ab. Für Rädertierchen liegt er etwa zwischen 50% und 80%, für *Dreissena polymorpha* kann er bei sehr hohem Nahrungsangebot bis auf 15% absinken (Chapra 1997; Schneider 1992; Schöl et al. 1999; Schöl et al. 2002).

Sedimentation

Als weitere Verlustgröße für die Algen ist die Sedimentation zu berücksichtigen. Diese führt zu einem Biomassetransfer zum Sediment hin und ist in Abschnitt 2.3.2 näher erläutert.

2.5 Anthropogene Beeinflussung des Stoffhaushalts

2.5.1 Stoff- und Wärmeeintrag

Punktförmige und diffuse Stoffeinträge sowie die Einleitung von Abwärme wirken sich in vielfältiger Weise auf den Stoffhaushalt staugeregelter Flüsse aus. Zu den wichtigsten stofflichen Belastungen zählen abbaubare organische Substanzen, und Nährstoffe. Zudem haben toxisch oder endokrin wirksame Stoffe Auswirkungen auf den Stoffhaushalt, indem sie das gesamte System oder einzelne Wirkungsebenen beeinträchtigen. Hier soll aber davon ausgegangen werden, dass diese Auswirkungen von untergeordneter Bedeutung für die gewässerinternen Stoffumsätze sind, weshalb mit Ausnahme von Ammoniak nicht weiter auf toxische oder endokrin wirksame Stoffe eingegangen wird.

Abbaubare Substanzen – Primärbelastung

Einleitungen von abbaubaren organischen Stoffen und von Ammonium wirken sich unmittelbar auf den Sauerstoffgehalt im Gewässer aus, weshalb sie auch als *Primärbelastung* bezeichnet werden.

Durch die Zufuhr abbaubarer organischer Stoffe werden die Nahrungsverhältnisse der Destruenten verbessert und das Gleichgewicht zwischen Respiration und Photosynthese zur Respiration hin verschoben (Abb. 2.2). Hierdurch wird der regulative Mechanismus der sogenannten *Selbstreinigung* induziert: Die Destruenten bewirken zunächst den Abbau der organischen Belastung, wodurch es zur verstärkten Sauerstoffzehrung und zur Freisetzung von Nährstoffen kommt. Die Nitrifikation des aus der organischen Substanz stammenden und des direkt eingeleiteten Ammoniums trägt zusätzlich zur Sauerstoffzehrung bei.

Die Primärbelastung und die hieraus resultierenden Sauerstoffdepressionen standen über viele Jahrzehnte im Mittelpunkt der ökologischen und ingenieurwissenschaftlichen Betrachtungen (Chapra 1997; Schwörbel 1993; Streeter und Phelps 1925). Neben der zumeist im Mittelpunkt des Interesses stehenden Sauerstoffzehrung sollte aber auch beachtet werden, dass die Einleitung abbaubarer organischer Substanz im Zuge der *Selbstreinigung* zur Erhöhung der Nährstoffkonzentrationen führt. Dies verdeutlicht, dass das Fließgewässerökosystem auch unterhalb einer „Selbstreinigungsstrecke“ nicht zu seinem Ausgangszustand zurückkehrt. Der Begriff *Selbstreinigung* ist daher nur bedingt korrekt.

Nährstoffe – Eutrophierung und Sekundärbelastung

Die Makronährstoffe Phosphor und Stickstoff werden über Kläranlagenausläufe und aus diffusen Quellen, vor allem aus landwirtschaftlich genutzten Flächen, über das natürliche Maß hinaus in unsere Gewässer eingetragen. Sie können dabei sowohl in anorganischer als auch in organisch gebundener Form vorliegen. Im Gegensatz hierzu stammt Silizium nahezu ausschließlich aus natürlichen Quellen.

Die zusätzliche anthropogene Einleitung von Phosphor- und Stickstoffverbindungen hat zur Folge, dass diese beiden Nährstoffe in den meisten größeren Flüssen das Algenwachstum nicht maßgeblich limitieren. Hieraus kann sich ein im Vergleich zur anthropogen unbeeinflussten Situation übermäßiges Algenwachstum ergeben. Sofern das Algenwachstum durch die Einleitung von Nährstoffen stimuliert wird, ergibt sich hieraus also zunächst eine Verschiebung des Gleichgewichts zwischen Respiration und Photosynthese hin zur Photosynthese (Abb. 2.2). Die Nährstoffeinleitung erhöht also die Primärproduktion, weshalb man von der *Eutrophierung* (Erhöhung der Trophie) spricht (Schwörbel 1993).

Infolge der erhöhten Primärproduktion wird mehr Biomasse aus anorganischen Bestandteilen erzeugt. Unter günstigen Wachstumsbedingungen kann der biogene Sauerstoffeintrag durch große Algenpopulationen so hoch sein, dass es vor allem am Tage zu ausgeprägten Sauerstoffübersättigungen und Kohlendioxiduntersättigungen kommt. Hohe Sauerstoffübersättigungen können bei höheren aquatischen Organismen infolge des Ausperlens von Sauerstoff die sogenannte Gasblasenkrankheit bewirken (Fickeisen und Schneider 1976; Reimann 1986). In schlecht gepufferten Systemen, kann der CO₂ Verbrauch zudem zu pH Werten deutlicher über 9 führen, wodurch sich bereits bei niedrigen Ammoniumkonzentrationen die toxische Wirkung des Ammoniaks entfalten kann (vgl. Abb. 2.5). Infolge der nachts dominierenden Respiration der Algen treten ausgeprägte Tag-Nacht-Schwankungen der Sauerstoff- und Kohlendioxidkonzentration auf. Solche extremen Konzentrationsschwankungen im Tagesgang wirken als Stressfaktoren

auf die aquatische Biozönose (Kopf 1995). Diese Ausführungen verdeutlichen, dass bereits das übermäßig stimulierte Algenwachstum als solches negativ beurteilt werden muss, sofern es extreme Sauerstoffübersättigungen, CO₂ Untersättigungen oder Konzentrationsschwankungen bedingt.

Ein rascher Abbau großer Algenpopulationen infolge der Limitierung durch andere Faktoren (Temperatur, Licht, Fraß) führt dazu, dass die Respiration zum dominierend Prozess wird. Die Respiration der Algen selbst und/oder der Abbau ihrer Biomasse kann zu erheblicher Sauerstoffzehrung führen (Kopf 1986). Da ein Teil des während der „Algenblüte“ produzierten Sauerstoffs über den Gasaustausch in die Atmosphäre entwichen ist (Abb. 2.2), kann diese Zehrung je nach Dichte der Algenpopulation ausgeprägte Sauerstoffuntersättigungen bedingen. In diesem Fall wurden die sauerstoffzehrenden Stoffe nicht von extern eingeleitet, sondern im Gewässer selbst aufgebaut, daher spricht man von der *Sekundärbelastung* (DVWK 1993).

Der gemäß DIN 38 409 Teil 52 ermittelte C-BSB₅ wird durch natürliche Phytoplanktonpopulationen um etwa 2...3 mg/L je 100 µg Chl-a erhöht (Lenhart und Steinberg 1983; Nusch, 1989; DVWK 1993; Guhr et al. 1998; Haag et al. 2000b; Müller 2001a). Diese BSB Erhöhung ist Größtenteils lediglich auf die Atmung der lebenden Algen zurückzuführen (Lenhart und Steinberg 1983). Legt man die Spannweite der in 2.4.1 eingeführten Algenstöchiometrie zugrunde, so wird deutlich, dass das inhärente Sauerstoffzehrungspotenzial mit 1...2 mg Sauerstoff je mg Algenbiomasse wesentlich höher liegt. Dieses der Algenbiomasse inne wohnende Sauerstoffzehrungspotenzial kommt allerdings erst mit dem Absterben voll zum Tragen und wurde von Kirchesch für häufige Algenarten zu ca. 1,3 mg Sauerstoff je mg Algenbiomasse (entspricht ca. 13 mg O₂ je 100 µg Chl-a) bestimmt (Daten nach Kirchesch in Müller 2001a). Berücksichtigt man, dass die Chlorophyllkonzentrationen in vielen großen Flüssen deutlich über 100 µg/L ansteigen können, so wird verständlich, dass heute häufig die *Sekundärbelastung* nach Algenblüten von größerer Bedeutung für extreme Sauerstoffdepressionen ist als die *Primärbelastung* (Guhr et al. 1998; Haag et al. 2000b; Kopf 1986; Kopf 1995; Nusch 1989). Neben dem Phytoplankton tragen auch die in der Nahrungskette nachfolgenden Organismen zur *Sekundärbelastung* bei, wobei jedoch allenfalls das Zooplankton von quantitativer Bedeutung ist (DVWK 1993).

Die *Eutrophierung* kann außer durch Nährstoffe auch durch physikalische Randbedingungen, vor allem das Lichtangebot, die Temperatur und die Aufenthaltszeit limitiert sein (Lenhart 1989). Das gleichzeitige auftreten eines ausreichenden Lichtangebots (hohe Strahlung und geringe Trübung), hoher Temperaturen und größerer Aufenthaltszeiten ist vor allem dann wahrscheinlich, wenn die Vegetationszeit mit Niedrigwasserphasen zusammenfällt. Hieraus resultiert eine besondere Bedeutung des Abflussregimes für die Eutrophierungsanfälligkeit eines Flusses: Sommerliche Niedrigwasserperioden treten insbesondere in den aus dem Mittelgebirgsraum gespeisten Flüssen mit nivalen bis nivopluvialen Abflussregimen auf (Keller 1979), entsprechend sind diese Flüsse besonders eutrophierungsgefährdet (Kopf 1995; Müller 1993).

Wärmeeinleitungen

Die Wassertemperaturen zahlreicher größerer Flüsse werden durch die Einleitung von Abwärme aus dem Kühlprozess von Kraftwerken erhöht. Da die Lösung eines Gases eine exotherme Reaktion ist, werden die Sättigungskonzentrationen der Gase infolge von Temperaturerhöhungen herabgesetzt. Hinsichtlich des Stoffhaushalts ist vor allem die Erniedrigung der Gleichgewichtskonzentration von Sauerstoff von Bedeutung. Die Sauerstoffsättigungskonzentrationen in Abhängigkeit von der Wassertemperatur können entweder aus Tabellenwerken entnommen (z.B. DIN 38408, Teil 22) oder mit Formeln (z.B. Hua 1990) berechnet werden.

Darüber hinaus bewirkt eine Temperaturerhöhung im Allgemeinen auch eine Beschleunigung der biochemischen Prozesse. So nehmen im Temperaturbereich zwischen 5°C und 30°C die biologisch katalysierten Prozesse des Abbaus organischer Substanz und der Nitrifikation mit der Temperatur zu. Dementsprechend kommt es auch zu höheren Sauerstoffzehrungsraten (Müller 1975; Wunderlich 1982). In Bezug auf die Primärbelastung bedingen Temperaturerhöhungen also einerseits ausgeprägtere Sauerstoffdepressionen. Andererseits ist die *Selbstreinigung* schneller, also auf einer kürzeren Strecke abgeschlossen.

In Hinblick auf das Phytoplankton sind die Auswirkungen erhöhter Temperaturen uneinheitlicher: Die Atmung der Algen steigt mit zunehmender Temperatur stetig an (Reimann 1978). Die Photosyntheserate hat hingegen ein von der Algenart abhängiges Temperaturoptimum, nach dessen Überschreiten die Rate

wieder abnimmt (Abb. 2.7). Insofern stellt die Temperatur einen maßgeblichen Faktor für die Konkurrenz zwischen verschiedenen Phytoplanktonspezies dar. Kommt es in der Folge von Algenblüten zur Dominanz der respirativen Prozesse, so sind durch den beschleunigten Abbau auch bei der *Sekundärbelastung* ausgeprägtere Sauerstoffdepressionen zu erwarten.

Über die genannten Auswirkungen hinaus haben erhöhte Wassertemperaturen negative Auswirkungen auf Organismen höherer trophischer Stufen, insbesondere auf empfindliche Fischarten (LAWA 1991). Zudem wird häufig die Wirksamkeit toxischer Stoffe erhöht (Uhlmann und Horn 2001), wie das Beispiel des Ammoniaks zeigt (Abb. 2.5).

Mit Blick auf die Stabilität des Sauerstoffhaushalts sind Temperaturerhöhungen infolge von Wärmeeinleitungen als überwiegend negativ zu bewerten (LAWA 1991; DVWK 1993), wobei das Ausmaß der negativen Auswirkungen stark vom jeweiligen Gewässerökosystem abhängt.

2.5.2 Auswirkungen der Stauregulierung auf den Stoffhaushalt

Die Stauregulierung von Flüssen hat primär physikalische Auswirkungen, in deren Folge jedoch zahlreiche für den Stoffhaushalt relevante biogeochemische Prozesse verändert werden können (Friedl und Wüest 2002). Grundsätzlich bewirkt ein Aufstau die nachfolgend aufgelisteten Veränderungen der physikalischen Randbedingungen (DVWK 1981):

- Die mittlere Wassertiefe, das Verhältnis zwischen durchflossenem Querschnitt und benetztem Umfang und zumeist auch die Gewässerbreite werden vergrößert
- Mittlere Fließgeschwindigkeit, Turbulenz und Sohlschubspannung werden herabgesetzt
- Die mittlere Aufenthaltszeit wird erhöht

Die wichtigsten Auswirkungen dieser veränderten Rahmenbedingungen auf den Stoffhaushalt können wie folgt kurz zusammengefasst werden:

- Verminderter Gasaustausch über die Wasseroberfläche (Wolf et al. 1986)
- Verminderung der relativen Durchlichtung (Wolf et al. 1986)
- Förderung der planktischen Primärproduktion (Lenhart 1989)
- Vermehrte Sedimentation auch feinkörniger Bestandteile und organischer Flocken mit geringen Sinkgeschwindigkeiten (Westrich 1981; Westrich 1988)
- Retention partikelgebundener Nähr- und Zehrstoffe (Humborg et al. 1997; Koppe et al. 1985)
- Verminderung der relativen Sedimentoberfläche für die Aktivität sessiler Bakterien (Koppe et al. 1985)

Gasaustausch: Der infolge der geringeren Turbulenz verminderte Gasaustausch über die Wasseroberfläche hat unmittelbare Auswirkungen auf den Sauerstoffhaushalt: Sauerstoffunter- oder -übersättigungen können nicht so rasch ausgeglichen werden. Sofern die Stauanlage wie in den meisten Fällen auch zur Wasserkraftnutzung verwendet wird, findet auch an den Stauwehren im Normalfall kein wesentlicher Gasaustausch statt. Allerdings besteht die Möglichkeit in kritischen Situationen durch Wehrüberfall oder Turbinenbelüftung den Gasaustausch gezielt zu intensivieren.

Primärproduktion und Sekundärbelastung: Während die verringerte relative Durchlichtung die Primärproduktion insgesamt hemmt, wird die Entwicklung planktischer Algen durch die vergrößerten Aufenthaltszeiten gefördert. Sofern die Stauregulierung zu den für Wasserstraßen üblichen Tiefen von mindestens 3 m führt, bedingt sie auch, dass die Primärproduktion durch Phytoplankter dominiert wird, während benthische Algen und Makrophyten unbedeutend sind. Dementsprechend kommt den erhöhten Aufenthaltszeiten eine besondere Bedeutung zu, die durch sie bedingte Steigerung der Phytoplanktonproduktion überwiegt häufig den Effekt der verminderten relativen Durchlichtung (Koppe et al. 1985; Lenhart 1989; Müller und Kirchesch 1980).

Nachdem ein Fließgewässer durch verdriftete Benthonalgen oder durch Algen aus Stillwasserbereichen mit Phytoplankton „angeimpft“ wurde, können je nach Wachstumsbedingungen nach Fließzeiten von etwa 1 bis 3 Wochen deutlich erhöhte Algengehalte auftreten. Liegen bereits im Zulauf einer Stauhaltung erhöhte Phytoplanktongehalte vor, so können diese bei Fließzeiten von wenigen Tagen zu Algenblüten mit Chlorophyll a Gehalten über 100 µg/L anwachsen (Koppe et al. 1985; Lenhart 1989). Dies verdeutlicht, dass insbesondere Stauhaltungsketten mit Aufenthaltszeiten von mehreren Tagen bis Wochen förderlich für die *Eutrophierung* und die oben beschriebenen negativen Folgeerscheinungen sind.

Sedimentation und Stoffretention: Aufgrund der verringerten Schleppkraft kann die Stauregulierung vor allem bei geringen Abflüssen zur Ablagerung feiner Partikel mit teilweise hohen Gehalten an organischem Kohlenstoff (Schwebstoffflocken) und Algenbiomasse führen (Westrich 1988). Damit ist die Sedimentation partikelgebundener Nähr- und Zehrstoffe verbunden. Die Sedimentation an sich bedingt folglich, dass ein Teil des Sauerstoffzehrungspotenzials der Wassersäule entzogen wird. Zusätzlich führt die verlängerte Aufenthaltszeit dazu, dass die gelöste Primärbelastung auf einer kürzeren Fließstrecke abgebaut wird. Daher ist davon auszugehen, dass die „Selbstreinigungstrecke“ eines Fließgewässers durch Aufstau reduziert wird (Koppe et al. 1985).

Die Ablagerung organischer Schlämme bedingt die Verlagerung von mikrobiellen Zersetzungsprozessen zur Gewässersohle hin, wodurch sich der Sauerstoffbedarf und die Ammoniumfreisetzung der Sedimente erhöht. Zudem kann es in den unter Aufstaubedingungen gebildeten organischen Feinsedimenten zu anoxischen Bedingungen und damit zur Denitrifikation und unter Umständen zur Freisetzung von Phosphat und Methan kommen (siehe Kapitel 7; Clasen et al. 1997). Das freigesetzte Methan kann zur Sauerstoffzehrung im Freiwasser beitragen.

Durch die Feinsedimentablagerung werden auch die benthischen Habitate stark modifiziert. So werden Schlammablagerungen überwiegend von Zuckmückenlarven und Schlammröhrenwürmern (Tubificiden) besiedelt, während die meisten Insektenlarven und Muscheln eher grobe Substrate bevorzugen (Uhlmann und Horn 2001). Sofern die Habitate effektiver benthischer Filtrierer – also vor allem der Dreikantmuschel – signifikant reduziert werden, kann dies über die Nahrungskette die Produktion planktischer Algen befördern.

Die durch die Sedimentation bedingte Verminderung der Nährstofffracht und die damit zum Teil verbundene Änderung der Konzentrationsverhältnisse der Nährstoffe kann erhebliche Auswirkungen auf die Küstengewässer haben (Humborg et al. 2000). So führte der Aufstau der unteren Donau in Rumänien zum bevorzugten Rückhalt von Silizium infolge der Sedimentation von Kieselalgen, die sich in dem Staubeereich vermehrt bilden konnten. Dies bedingte einen Siliziummangel im Schwarzen Meer, durch den sich die Zusammensetzung der Algenarten und in deren Folge das gesamte Nahrungsnetz nachteilig entwickelte (Friedl und Wüest 2002; Humborg et al. 1997).

Nitrifikation: Da die Nitrifikation in erster Linie durch sessile Bakterien in den Biofilmen des Gewässerbetts betrieben wird, ist bei einer Verringerung des Verhältnisses zwischen benetztem Umfang und durchflossener Fläche mit einer verminderten Nitrifikationsleistung im Gewässer zu rechnen (DVWK 1981). Während Koppe et al. (1985) eine im Vergleich zur frei fließenden Ruhr verminderte Nitrifikation im Baldeneysee ermittelten, konnten Müller und Kirchesch (1980) keine signifikanten Unterschiede in der Nitrifikationsrate des frei fließenden Rheins und der gestauten Mosel feststellen. In der stauregulierten Mosel ist offenkundig ein größerer Anteil des Nitrifikationspotenzials an das Freiwasser gebunden (Müller und Kirchesch 1980). Die Nitrifikanten dürften hier wie in anderen staugeregelten Flüssen vor allem an größere Schwebstoffflocken mit minimalen Sinkgeschwindigkeiten gebunden sein (Kern und Westrich 1999; Kerner und Gramm 1995). Zusammenfassend scheint eine Verminderung der Nitrifikationsleistung durch Aufstau zwar möglich, dürfte aber in längeren Stauhaltungsketten weitgehend durch schwebstoffgebundene Nitrifikanten kompensiert werden.

Gesamtbewertung

Insbesondere bei Flüssen in denen der Sauerstoffhaushalt durch *Eutrophierung* bzw. *Sekundärbelastung* gefährdet ist, scheint sich die Stauregulierung negativ auszuwirken. Hinsichtlich der Eutrophierungswirkung ist vor allem die Erhöhung der Aufenthaltszeit und damit das Verhältnis zwischen Abfluss und

Stauvolumen entscheidend. In Bezug auf die Bundeswasserstraßen liegen folglich vor allem dann signifikante negative Auswirkungen vor, wenn Flüsse mit geringen Abflüssen durch Stauregulierung schiffbar gemacht werden und gemäß dem Abflussregime sommerliche Niedrigwasserphasen auftreten. Mit Blick auf die Bundeswasserstraßen hat demzufolge vor allem die Stauregulierung von Altmühl, Saar, Fulda und mittlerem Neckar negative Auswirkungen auf den Sauerstoffhaushalt (Müller 1993).

3 UNTERSUCHUNGSGEBIET

3.1 Grundlegendes

Der Neckar entwässert ein Einzugsgebiet von nahezu 14000 km², in dem mit 5,2 Millionen Einwohnern etwa die Hälfte der Bevölkerung Baden-Württembergs wohnt. Zwischen 1921 und 1968 wurden die unteren 202 km des Flusses zur Großschiffahrtstraße ausgebaut (Beiche 1968). Auf dieser Strecke zwischen Plochingen und der Mündung bei Mannheim wird der Höhenunterschied von 151 m mit insgesamt 27 Staustufen überwunden (Abb. 3.1). Mit Ausnahme der Staustufe Esslingen befinden sich an allen Wehren Wasserkraftanlagen, so dass unter Niedrigwasserbedingungen der gesamte Abfluss durch die Turbinen abgeführt wird (Neckar-AG und WSD Südwest 1985).

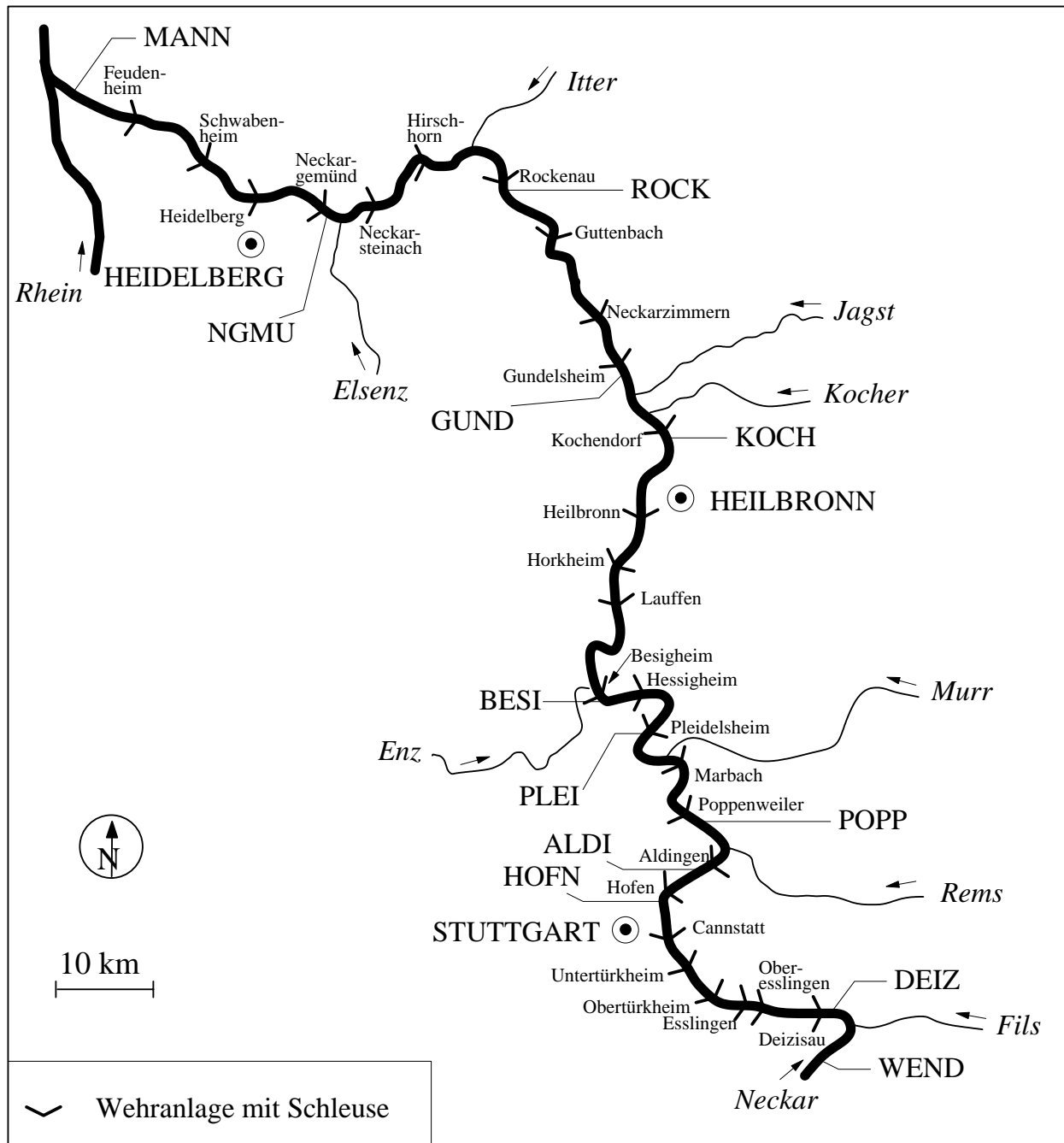


Abb. 3.1: Bundeswasserstraße Neckar mit Bezeichnung der Stauhaltungen und Lage der Messstellen.

Aus den in Tabelle 3.1 zusammengestellten Kennwerten wird deutlich, dass es sich beim Neckargebiet um eine dicht besiedelte und landwirtschaftlich wie industriell intensiv genutzte Region handelt. Insbesondere im mittleren Neckarraum ist die Einwohnerdichte mit etwa 700 Einwohnern je km² sehr hoch.

Die Wohnbevölkerung im Einzugsgebiet ist nahezu vollständig an öffentliche Kläranlagen angeschlossen, in denen die mechanisch-biologische und zum Großteil auch eine weiterführende Reinigung (Denitrifikation, Phosphatfällung) der Abwässer gewährleistet wird. Zudem werden etwa 80% des auf den versiegelten Flächen anfallenden Regenwassers gereinigt. Trotz der sehr weit entwickelten Abwasserreinigung ergeben sich im Neckar aktuelle Probleme hinsichtlich der Gewässergüte: Neben dem teilweise instabilen Sauerstoffhaushalt im Bereich der Bundeswasserstraße, sind vor allem die Konzentrationen der Nährstoffe Stickstoff und Phosphor sowie von Pflanzenschutzmitteln zu hoch. Ein Großteil der Belastung mit Nährstoffen und vor allem mit Pflanzenschutzmitteln ist auf diffuse Einträge aus der Landwirtschaft zurückzuführen (Pinter 2000).

Tab. 3.1: Wesentliche Kenngrößen des Neckars und seines Einzugsgebiets. Daten nach LfU (2000) und Borchardt und Geffers (1999).

Einzugsgebietsfläche		
insgesamt	km ²	13960
am Beginn der Bundeswasserstraße bei Plochingen	km ²	3995
Lauflänge		
insgesamt	km	355
Bundeswasserstraße	km	202
Landnutzung im Gesamteinzugsgebiet		
Wald	%	38
Grünland	%	26
Ackerland	%	26
Siedlung, Industrie und Verkehr (versiegelt)	%	9
Einwohnerdichte	E/km ²	373
Abwasserreinigung		
Anschlussgrad der Wohnbevölkerung	%	99
Anteil des Mischwassersystems	%	96

3.2 Hydrologie

In Tabelle 3.2 sind die wesentlichen hydrologischen Kenngrößen des Neckars für die Pegel Plochingen und Rockenau zusammengestellt. Der Pegel Plochingen repräsentiert dabei die Verhältnisse am Beginn der Bundeswasserstraße, während der Pegel Rockenau mit einer Einzugsgebietsfläche von 12710 km² weitgehend charakteristisch für den gesamten Neckar ist.

Im Mittel verlassen etwa 40% der mit 900 mm für Deutschland durchschnittlichen Niederschläge das Einzugsgebiet als oberirdischer Abfluss. Hieraus ergeben sich relativ geringe mittlere Abflussspenden von etwa 11 L/km²/s. Auffällig sind insbesondere die für ein Einzugsgebiet in der Größenordnung des Neckars recht geringen mittleren Niedrigwasserabflussspenden und die große Spannweite zwischen mittleren Niedrig- und Hochwasserabflüssen. Im Mittel gehen etwa 16 m³/s des Abflusses an der Mündung auf Abwasser zurück (Pinter 2000). Folglich besteht aufgrund des geringen MN_q und der hohen Einwohnerdichte bei Niedrigwasser ein erheblicher Anteil des Abflusses aus Abwasser.

Tab. 3.2: Gewässerkundliche Hauptwerte an den Neckarpegeln Plochingen und Rockenau. (Daten nach LfU (2000)).

Kenngröße	Einheit	Plochingen	Rockenau
Mittlere jährliche Niederschlagshöhe Mh_N	mm/a	921	906
Mittlere jährliche Abflusshöhe Mh_A	mm/a	377	340
Mittel der Tagesabflüsse MQ	m^3/s	46,1	134
Mittlerer Niedrigwasserabfluss MNQ	m^3/s	10,6	35,3
Mittlerer Hochwasserabfluss MHQ	m^3/s	435	1170
Mittlere Abflussspende Mq	$L/km^2/s$	11,5	10,5
Mittlere Niedrigwasserabflussspende MNq	$L/km^2/s$	2,65	2,78
Mittlere Hochwasserabflussspende MHq	$L/km^2/s$	109	92,4

Abflussregime

Da in der staugeregelten Bundeswasserstraße Neckar, der physikalische Sauerstoffeintrag aus der Atmosphäre bei Niedrigwasser besonders gering ist, sind Aussagen über die jahreszeitliche Verteilung des Abflusses auch im Hinblick auf den Sauerstoffhaushalt von Bedeutung.

Die Niederschläge im Einzugsgebiet fallen im Mittel nahezu gleichmäßig über das Jahr verteilt. Daher wird das Abflussregime im Wesentlichen durch den Gang der Evapotranspiration und die zeitweise Speicherung des Niederschlags als Schnee gesteuert. Wie Abbildung 3.2 verdeutlicht ergibt sich hieraus im Mittel ein nivopluviales Abflussregime, mit den durchschnittlich höchsten Abflüssen im hydrologischen Winterhalbjahr und einem ausgeprägten Minimum während der Monate August bis Oktober. Aus dem Vergleich zwischen dem Median und dem Mittelwert der Abflüsse innerhalb einzelner Monate wird deutlich, dass die Abflüsse linksschief verteilt sind, d.h. der Mittelwert durch wenige extreme Abflussspitzen beeinflusst ist. Die Mediane für die einzelnen Monate verdeutlichen, dass während aller Monate zwischen Mai und Dezember an mehr als 50% der Tage Abflüsse unterhalb von MQ auftreten. Die 5-Perzentillinie veranschaulicht, dass bei Plochingen in jedem Monat Abflüsse unter $22 m^3/s$ möglich sind.

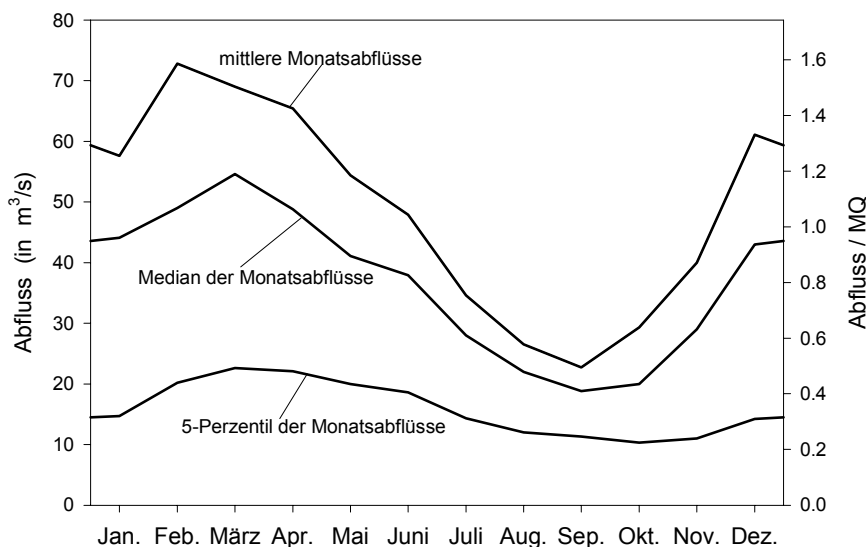


Abb. 3.2: Abflussregime des Neckars bei Plochingen. Datengrundlage: Tagesabflüsse während der Jahre 1970 bis einschließlich 1998.

In Bezug auf die durch den Abfluss gesteuerte physikalische Belüftung können somit prinzipiell während des ganzen Jahres als kritisch zu bewertende Situationen auftreten. Allerdings ist die Wahrscheinlichkeit extremer Niedrigwasserperioden im Spätsommer am größten.

3.3 Gewässergütedaten

Von zentraler Bedeutung für verschiedene Aspekte der vorliegenden Arbeit sind die Gewässergütedaten, die von der LfU Baden-Württemberg im Rahmen ständiger Beobachtungsprogramme erhoben werden (Möhle 1991). Hierbei lagen sowohl kontinuierlich erhobene Daten als auch die Analysenergebnisse von Einzelproben vor. Die Messstellen am Neckar, deren Daten Eingang in die vorliegende Arbeit fanden sind in Tabelle 3.3 zusammengestellt. Mit Ausnahme der Stationen Wendlingen und Mannheim liegen die Neckarmessstellen direkt oberhalb der Stauwehre. Wendlingen liegt hingegen oberstrom der Bundeswasserstraße und Mannheim unterhalb der letzten Staustufe, kurz vor der Mündung in den Rhein (Abb. 3.1). Detaillierte Angaben zu den zugrunde liegenden Messprogrammen und Analysemethoden sind der Literatur zu entnehmen (Haag und Westrich 2002; LfU 1997; Matthias 1993; Möhle 1991).

Tab. 3.3: Messstellen am Neckar und dort verfügbare Daten, die in dieser Arbeit verwendet wurden.

Neckar- km	Stauhaltung bzw. Ort	Kurz- bezeichnung	Daten
208	Wendlingen	WEND	Registrierdaten
200	Deizisau	DEIZ	Chemie, Biologie
176	Hofen	HOFN	Registrierdaten, Chemie
172	Aldingen	ALDI	Registrierdaten, Chemie
165	Poppenweiler	POPP	Registrierdaten, Chemie, Biologie
150	Pleidelsheim	PLEI	Registrierdaten
137	Besigheim	BESI	Registrierdaten, Chemie, Biologie
104	Kochendorf	KOCH	Registrierdaten, Chemie
94	Gundelsheim	GUND	Registrierdaten
61	Rockenau	ROCK	Registrierdaten, Chemie, Biologie
31	Neckargmünd	NGMU	Registrierdaten
3	Mannheim	MANN	Registrierdaten, Chemie, Biologie

An den Registrierstationen werden die Wassertemperatur (T_w), die elektrische Leitfähigkeit (L_f), der pH-Wert und die Sauerstoffkonzentration (O_2) aufgezeichnet. Von diesen in Tabelle 3.3 als Registrierdaten bezeichneten Aufzeichnungen wurden die jeweiligen Tagesmittelwerte gebildet.

Die Einzelproben werden zumeist in vierzehntäglichen Intervallen entnommen. An ihnen wurden sowohl chemische als auch biologische Analysen durchgeführt. Das Programm der chemischen Analysen umfasst eine umfangreiche Parameterliste (Hertel und Lehmann 2000), von denen in der vorliegenden Arbeit neben den oben genannten Parametern lediglich die BSB-Werte und die Nährstoffspezies Verwendung fanden. Diese Werte werden in Tabelle 3.3 als Daten zur Chemie bezeichnet. Die sogenannten Daten zur Biologie umfassen in erster Linie Chlorophyll-a Konzentrationen, teilweise aber auch Individuenzahlen von Phyto- und Zooplanktonarten.

4 HISTORISCHE ENTWICKLUNG DES SAUERSTOFFHAUSHALTS IM NECKAR

4.1 Motivation

Anfang der 1970er Jahre manifestierte sich der damals sehr schlechte ökologische Zustand des zur Bundeswasserstraße ausgebauten Neckars in zahlreichen Beobachtungen: Neben den hohen Konzentrationen an toxischen Stoffen im Wasser und Sediment (Förstner und Müller 1974; Müller und Förstner 1973) trugen vor allem abwasserbürtige Zehrstoffe und deren negativen Auswirkungen auf den Sauerstoffhaushalt zu dieser unzulänglichen Situation bei (LfU 1997). Eine maßgebliche Folge hiervon war die Verarmung der aquatischen Biozönose, die sowohl für das Makrozoobenthon (Alf 1991) als auch für die Fische belegt ist (Ulrich 1991; Wnuck 2000). Vor diesem Hintergrund wurden in den letzten Jahrzehnten vor allem auf dem Gebiet des emissionsseitigen Gewässerschutzes enorme Anstrengungen unternommen, wodurch unter anderem die Belastung mit Zehrstoffen drastisch reduziert werden konnte (Beyl 1991). Die Auswirkungen dieser Maßnahmen auf den Stoffhaushalt im Neckar sind qualitativ bekannt. So führten sie zu einer weitgehenden Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts (LfU 1997) und in dessen Folge zu einer teilweisen Erholung und Diversifizierung der Lebensgemeinschaften im Freiwasser und an der Gewässer- sohle (Alf 1991; Wnuck 2000). Eine quantitative Analyse der Auswirkungen von Umweltauflagen und verbesserter Abwasserreinigung auf den Sauerstoffhaushalt im Neckar liegt bislang jedoch nicht vor. Ziel des vorliegenden Kapitels ist es daher zu quantifizieren, welche Wirkung die in den vergangenen 25 Jahren vorgenommenen Gewässerschutzmaßnahmen auf den Sauerstoffhaushalt hatten.

Im Folgenden werden zunächst die Datengrundlage und die verwendeten statistischen Methoden vorgestellt. Im Ergebnisteil wird im ersten Schritt aufgezeigt wie sich die Abwassersituation im Neckareinzugsgebiet im Laufe der Jahre verändert hat. Mit Hilfe von Zeitreihenanalysen der Konzentrationen von Sauerstoff und anderen relevanten Wasserinhaltsstoffen wird die historische Entwicklung der Stoffkonzentrationen im Neckar quantifiziert. Diese Analysen erlauben es darüber hinaus, die Entwicklungen in verschiedenen Gewässerabschnitten und Zeiträumen bewertend zu vergleichen. Schließlich werden die für das Gewässer quantifizierten Veränderungen vor dem Hintergrund der externen Maßnahmen und möglicherweise veränderter interner Umsetzungen diskutiert.

4.2 Datengrundlage

Abwasserreinigung: Daten zum aktuellen Stand und der zeitlichen Entwicklung der Abwasserreinigung im Einzugsgebiet des Neckars werden vom Statistischen Landesamt Baden-Württemberg regelmäßig erhoben, zusammengestellt und veröffentlicht. Für die hier durchgeführte Analyse lagen diese sogenannten „Daten zur Umwelt“ bis einschließlich 1998 vor (Baden-Württemberg 1998).

Stoffkonzentrationen im Gewässer: Die Analyse der zeitlichen Entwicklung der Gewässergüte im Neckar basiert auf Daten, die von der Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg zur Verfügung gestellt wurden (siehe Kapitel 3.3). Für die statistische Analyse wurden ausgewählte Gewässergütedaten von insgesamt neun Probenahmestellen entlang der Bundeswasserstraße Neckar verwendet (Tab. 4.1). Aus Tabelle 4.1 geht hervor welche Messstellen und welche Daten in die Zeitreihenanalyse einbezogen wurden. Die Lage der Messstellen ist Abbildung 3.1 zu entnehmen. Bei Sauerstoff wurden aus den Tagesmittelwerten der kontinuierlichen Messungen vor der statistischen Analyse zweiwöchentliche Medianwerte gebildet. Bei allen anderen Parametern wurden die Daten der zumeist zweiwöchentlichen Stichproben verwendet.

Die Zeitreihen für die einzelnen Parameter reichen unterschiedlich lang zurück, worauf bei der Auswertung in Kapitel 4.4 detailliert eingegangen wird. Für die statistischen Analysen wurden als externe Einflussgrößen zudem Abflusswerte und Wassertemperaturen berücksichtigt, die ebenfalls von der LfU und der Bundesanstalt für Gewässerkunde erhoben und für die vorliegende Arbeit zur Verfügung gestellt wurden.

Tab. 4.1: Für die Zeitreihenanalyse verwendete Messstellen und die an ihnen verfügbaren Daten.

Neckar- km	Messstelle	Kurz- bezeichnung	Verwendete Güteparameter
208,0	Wendlingen	WEND	O ₂
199,8	Deizisau	DEIZ	BSB ₅ , N-NH ₄ , N-NO ₃ , P-PO ₄
176,1	Hofen	HOFN	O ₂
172,2	Aldingen	ALDI	O ₂
165,0	Poppenweiler	POPP	O ₂ , BSB ₅ , N-NH ₄ , N-NO ₃ , P-PO ₄ , Chl-a
150,2	Pleidelsheim	PLEI	O ₂
137,0	Besigheim	BESI	O ₂ , BSB ₅ , N-NH ₄ , N-NO ₃ , P-PO ₄
61,4	Rockenau	ROCK	O ₂ , BSB ₅ , N-NH ₄ , N-NO ₃ , P-PO ₄
3,0	Mannheim	MANN	O ₂ , BSB ₅ , N-NH ₄ , N-NO ₃ , P-PO ₄ , Chl-a

4.3 Statistische Methoden

Zur Analyse der historischen Entwicklung der Stoffkonzentrationen wurden unterschiedliche parametrische (Regressionsanalysen) und robuste, nicht parametrische Verfahren hinsichtlich ihrer Eignung getestet. Um die vermuteten zeitlichen Trends mit möglichst hoher Signifikanz nachweisen zu können, mussten Verfahren gewählt werden, mit denen die starken Einflüsse der externen Größen Abfluss und Wassertemperatur bzw. Saisonalität eliminiert werden konnten (Helsel und Hirsch 1992). Für ein solches Vorgehen muss angenommen werden, dass die verwendeten externen Größen selbst keinem Trend unterliegen. Bei Abfluss und Wassertemperatur kann dies nicht a priori vorausgesetzt werden.

In Tabelle 4.2 sind die vier Verfahren dargestellt, die nach intensiver Prüfung für die Zeitreihenanalyse der untersuchten Parameter als grundsätzlich geeignet erschienen und daher verwendet wurden. Für die zeitliche Entwicklung wurde bei allen statistischen Modellen ein linearer Trend vorausgesetzt, um so anhand der ermittelten Steigungen unterschiedliche Messstellen und Untersuchungszeiträume direkt miteinander vergleichen zu können.

Tab. 4.2: Zur Zeitreihenanalyse der Stoffkonzentrationen verwendete statistische Modelle.

Nr.	Typ	Modell
(1)	Multiple Regression Saisonalität, Trend (Parametrisch)	$c = c_0 + \frac{1}{2} \cdot A \cdot \sin\left((t - t_0) \cdot \frac{2\pi}{T}\right) + b_{t1} \cdot t$
(2)	Multiple Regression Wassertemp., Abfluss, Trend (Parametrisch)	$c = c_0 + b_{T_w1} \cdot T_w + b_{Q1} \cdot Q^{b_{Q2}} + b_{t1} \cdot t$
(3)	Nicht parametrischer schrittweiser Ansatz Saisonalität, Trend	a) LOWESS $\frac{t}{365,25}$ gegen $c = \text{Res}_1$ b) Kendall-Theil-Gerade t gegen Res_1
(4)	Nicht parametrischer schrittweiser Ansatz Wassertemp., Abfluss, Trend	a) LOWESS Q gegen $c = \text{Res}_1$ b) LOWESS T_w gegen $\text{Res}_1 = \text{Res}_2$ c) Kendall-Theil-Gerade t gegen Res_2

Regressionsmodelle: Die beiden Regressionsmodelle (Modell 1 und 2) werden mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate in einem Schritt an den zu analysierenden Datensatz angepasst. Mit den so erlangten Regressionsgleichungen können auch Lücken in den vorliegenden Datenreihen geschlossen werden. Die Richtung und die Stärke des zeitlichen Trends des untersuchten Güteparameters (c) wird durch die Steigung b_{t1} angegeben. Die Signifikanz bzw. Irrtumswahrscheinlichkeit p des Trends wird bei beiden Verfahren mit dem zweiseitigen t -Test anhand von b_{t1} ermittelt.

Modell 1 berücksichtigt den Jahresgang der Konzentrationen als externe Einflussgröße mit Hilfe einer Sinusschwingung, wobei die Periodenlänge (T) mit einem Jahr (365,25 Tage) vorgegeben ist. Hierdurch werden neben einer verbesserten Trenddetektion auch Aussagen zur mittleren Jahresamplitude (A) des untersuchten Parameters, sowie zur Phasenverschiebung (t_0) und damit zum jahreszeitlichen Auftreten der minimalen und maximalen Konzentrationen möglich (Güttinger 1980; Weilguni und Humpesch 1999). Modell 2 berücksichtigt den externen Einfluss der Wassertemperatur (T_w) in linearer Form und den des Abflusses (Q) gemäß seiner nicht linearen Beziehung zu den untersuchten Güteparametern (Foster et al. 1989) durch eine Potenzfunktion.

Formal liegen den in den ersten beiden Modellen verwendeten Regressionsverfahren die folgenden Annahmen zugrunde: a) die Varianz der Residuen ist konstant (Homoskedasität), b) die Residuen sind nicht autokorreliert und c) die Residuen sind normalverteilt. In diesen Annahmen ist die implizite Grundvoraussetzung enthalten, dass das gewählte Modell die Daten korrekt beschreibt, d.h. alle wesentlichen Einflussgrößen in der Regressionsgleichung berücksichtigt sind (Chatterje und Price 1995). Ist eine oder mehrere der Voraussetzungen nicht erfüllt, dann haben die berechneten Regressionskoeffizienten (z.B. b_{t1}), Vertrauens- und Vorhersageintervalle sowie Signifikanztests nur eine begrenzte Aussagekraft (Chatterje und Price 1995; Hirsch et al. 1991). Die Annahmen a) bis c) wurden sowohl mit Residuenplots als auch mit statistischen Testverfahren überprüft. Als Autokorrelationstest wurde das von Durbin und Watson vorgeschlagene Verfahren angewandt (Durbin und Watson 1951a; Durbin und Watson 1951b). Die Durbin-Watson Statistik (DW) kann Werte zwischen 0 und 4 annehmen. Je näher der Wert bei 2 liegt desto größer ist die Wahrscheinlichkeit, dass keine Autokorrelation vorliegt. Für $1,5 > DW > 2,5$ muss davon ausgegangen werden, dass die Daten autokorreliert sind. Zur Überprüfung der konstanten Varianz wurde der Levene-Test, zur Überprüfung der Normalverteilung der Kolmogorov-Smirnov-Test verwendet (Sachs 1992). Die Nullhypothesen (Normalverteilung bzw. konstante Varianz) wurden hierbei jeweils auf dem 5%-igen Signifikanzniveau getestet.

Robuste, nicht parametrische Modelle: In den Modellen 3 und 4 wurden komplett nicht parametrische Ansätze gewählt. Der Hauptnachteil dieser Methoden liegt darin, dass sie nur schrittweise durchgeführt werden können, d.h. zunächst werden die Einflüsse der externen Größen eliminiert und erst anschließend wird der zeitliche Trend ermittelt. Dadurch ist es auch nicht möglich, Datenlücken in den Zeitreihen mit Hilfe der Ergebnisse dieser Verfahren zu schließen. Der Hauptvorteil dieser robusten Methoden ist, dass ihnen keine strengen Annahmen bezüglich der Datenstruktur zugrunde liegen. Daher können mit ihnen zeitliche Trends und deren Signifikanz auch bei vorliegender Autokorrelation, Heteroskedasität, und nicht normalverteilten Residuen zuverlässig geschätzt werden (Esterby 1996; Hirsch et al. 1991).

Bei Modell 3 wurde zunächst der Einfluss der Jahreszeit – ausgedrückt als Quotient zwischen dem Tag im Jahr und 365,25 – auf die Konzentration des zu untersuchenden Parameters eliminiert. Hierzu wurde eine robuste iterative Methode der gewichteten kleinsten Fehlerquadrate (LOWESS = locally weighted scatterplot smoothing) verwendet (Cleveland 1979). Anhand der verbleibenden Residuen (Res_1) wurde die Steigung der Trendgeraden (bt_1) ermittelt. Hierzu wurde die robuste Methode nach Theil angewendet (Kendall-Theil-Trendgerade), bei der sich bt_1 aus dem Median der Steigungen aller Datenpaare ergibt (Helsel und Hirsch 1992). Die Signifikanz bzw. Irrtumswahrscheinlichkeit p des Trends wurde anhand des robusten Rang-Korrelationskoeffizienten nach Kendall (τ) mit Hilfe der ebenfalls von Kendall vorgeschlagenen S -Statistik ermittelt (Kendall 1970). Bei Modell 4 wurden die Einflüsse der externen Größen Abfluss (Q) und Wassertemperatur (T_w) in zwei Schritten jeweils über LOWESS eliminiert. Die Ermittlung des Trends erfolgte analog zu Modell 3 anhand der verbleibenden Residuen (Res_2).

Um die robusten statistischen Modelle umzusetzen, wurden mit der in SigmaPlot 5.0 intern verfügbaren Programmiersprache entsprechende Programme entwickelt und auf die Daten angewandt.

Jahresminima der Sauerstoffkonzentrationen: Aufgrund ihrer besonderen ökologischen Relevanz, wurden die minimalen Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen der einzelnen Jahre ermittelt und auch diese auf zeitliche Trends hin untersucht. Zur Trendanalyse wurden hierbei lineare Regressionen durchgeführt und die Kendall-Theil-Trendgeraden berechnet.

Güte der statistischen Modelle: Als Maß für die Übereinstimmung zwischen den Modellergebnissen und den vorliegenden Datensätzen wurde für alle statistischen Modellansätze der Standardfehler (SF) berechnet:

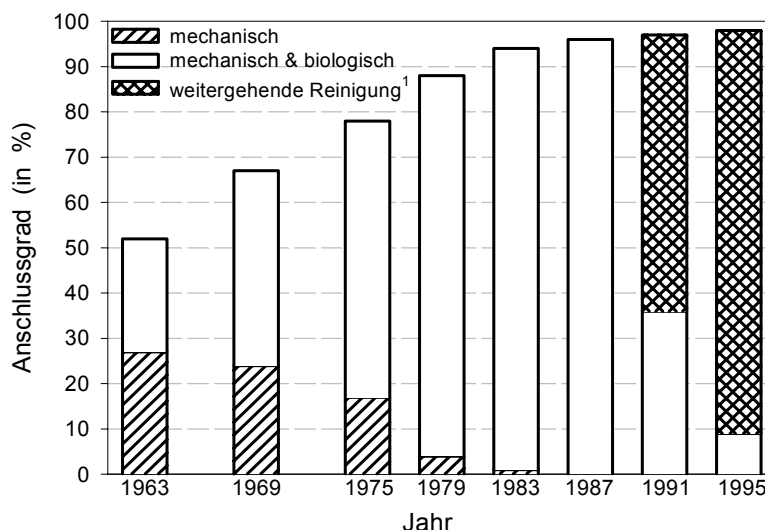
$$SF = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (c_{ber,i} - c_{gem,i})^2}{n}} \quad (4.1)$$

Hierbei sind c_{ber} und c_{gem} die berechneten und gemessenen Konzentrationen des untersuchten Gewässergüteparameters; n ist die Anzahl der Wertepaare. Auf der Grundlage von SF kann die Effizienz der verwendeten Modelle bewertend verglichen werden (Hirsch et al. 1991).

4.4 Ergebnisse und Diskussion

4.4.1 Entwicklung der Abwasserreinigung

Abbildung 4.1 dokumentiert den massiven Ausbau von Kanalisation und Kläranlagen in Baden-Württemberg während der letzten 40 Jahre. Die Abbildung verdeutlicht, dass insbesondere in den 1960er und 1970er Jahren der Anschlussgrad der Wohnbevölkerung an die Abwasserreinigung drastisch erhöht wurde, so dass Anfang der 1980er Jahre in Baden-Württemberg bereits über 90% an öffentliche Kläranlagen angeschlossen waren. In den relativ dicht besiedelten Gebieten des Neckareinzugsgebiets lag der Anschlussgrad sogar noch darüber (Baden-Württemberg 1998; Beyl 1991). Im Rahmen des Neckar-Sanierungsprogramms wurden in den 1970er Jahren zudem nahezu alle Kläranlagen mit einer biologischen Reinigungsstufe versehen. Abbildung 4.2 verdeutlicht für das gesamte Land eindrucksvoll, dass hierdurch die jährlichen Emissionen leicht abbaubarer organischer Substanzen trotz zunehmender Abwassermengen merklich reduziert werden konnten: Während sich die behandelte Abwassermenge etwa verdoppelte konnte die Jahresfracht des ATH-BSB₅ (BSB₅ mit Nitrifikationshemmer) nahezu auf ein Zehntel des Ausgangswertes reduziert werden.



¹Erst seit 1991 erhoben, im wesentlichen Nitrifikation, Denitrifikation, Phosphatelimination und Sandfiltration.

Abb. 4.1: Entwicklung des Anschlussgrads der Wohnbevölkerung an die öffentliche Kanalisation und der Art der Abwasserreinigung in Baden-Württemberg. Daten nach Baden-Württemberg (1998).

Im Zuge des Ausbaus der biologischen Reinigungsstufen wurde die Nitrifikation in den Kläranlagen verbessert, wodurch auch die Ammoniumemissionen drastisch reduziert werden konnten (LfU 1997). Seit Mitte der 80er Jahre stagnieren die Jahresemissionen des ATH-BSB₅ (und des CSB) auf niedrigem Niveau; hier sind die Grenzen des mit vertretbarem finanziellem Aufwand machbaren offenbar erreicht (Pinter 1991). Seit dieser Zeit werden in den Kläranlagen in zunehmendem Maße die Nährstoffe Stickstoff und Phosphor zurückgehalten, indem Denitrifikation und Phosphorelimination implementiert und die Nitrifikation noch weiter verbessert wurde (Abb. 4.1; Beyl 1991). Die Phosphorbelastung häuslicher Abwässer wurde zudem durch die Substitution von Phosphat in Waschmitteln stark reduziert. Deshalb sind die Phosphor-, Gesamtstickstoff- und Ammoniumemissionen am Neckar aktuell weiter rückläufig (ATV Landesgruppe Baden-Württemberg 1996; Baden-Württemberg 1998; LfU 1997).

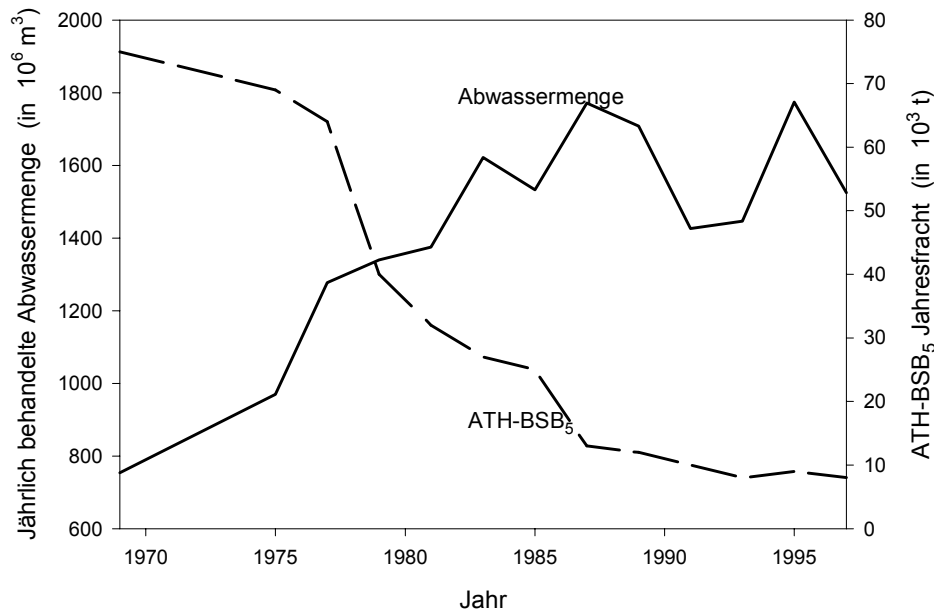


Abb. 4.2: Entwicklung der in Baden-Württemberg jährlich behandelten Abwassermenge und der emittierten ATH-BSB₅ Fracht. Daten nach Baden-Württemberg (1998).

4.4.2 Sauerstoff

Um externe Einflüsse korrigierte Konzentrationen

Die wesentlichen Ergebnisse der Trendanalysen der Sauerstoffkonzentrationen sind in Tabelle 4.3 zusammengefasst. Zusätzliche Informationen zu den Ergebnissen der beiden parametrischen Verfahren sind Tabelle 4.4 zu entnehmen. Bei der Interpretation der Daten ist zu beachten, dass Zeitreihen unterschiedlicher Länge zugrunde liegen. Zur Vereinfachung sind in den Tabellen 4.3 und 4.4 die Stationen entsprechend der Länge der an ihnen vorliegenden Sauerstoffmessreihen geordnet.

Parametrische Regressionen: In Abbildung 4.3 sind die Ergebnisse der parametrischen Modelle 1 und 2 für den Neckar bei Poppenweiler exemplarisch dargestellt. An der Messstation Poppenweiler liegen zum einen die längsten Sauerstoffmessreihen vor. Zum anderen spiegelt diese Station den Einfluss des Klärwerks Stuttgart-Mühlhausen (Neckar-km 174,5) wider, das eine der größten Punktquellen am Neckar ist (Haag et al. 2000b). Abbildung 4.3 verdeutlicht sowohl den positiven Langzeittrend als auch die ausgeprägte saisonale Dynamik der Sauerstoffkonzentrationen. Mit beiden parametrischen Ansätzen wird der mittlere Anstieg der Sauerstoffkonzentrationen bei Poppenweiler zwischen 1975 und 1998 auf 0,17 mg/L je Jahr geschätzt (bt_1 in Tab. 4.3). Dies entspricht einem Anstieg der mittleren Sauerstoffkonzentrationen von 4,1 mg/L über den Gesamtzeitraum von 24 Jahren. Mit Ausnahme der 3 Stationen mit den kürzesten Zeitreihen (Wendlingen, Pleidelsheim und Aldingen) wurden mit Modell 1 und 2 für alle übrigen Stationen hochsignifikant positive Trends der Sauerstoffkonzentrationen detektiert (Irrtumswahrscheinlichkeiten $< 0,001$).

Tab. 4.3: Ergebnisse der Trendanalysen für 14-tägliche Mediane der Sauerstoffkonzentrationen.

Messstation		POPP	MANN	BESI	ROCK	HOFN	WEND	PLEI	ALDI
Zeitraum		1.75– 12.98	8.76– 12.98	11.76– 12.98	1.77– 12.98	3.82– 12.98	9.86– 12.98	1.92– 12.98	1.92– 12.98
n		548	447	528	502	382	288	180	158
Modell 1	b _{tl} mg/L/a	0,17	0,13	0,17	0,071	0,10	0,012	0,042	-0,052
	p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	0,20	0,35	0,24
	SF	1,6	1,5	1,7	1,6	1,1	0,57	1,2	0,96
Modell 2	b _{tl} mg/L/a	0,17	0,10	0,19	0,084	0,10	0,028	0,010	-0,022
	p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	0,003	0,84	0,61
	SF	1,4	1,3	1,7	1,4	1,2	0,57	1,2	0,88
Modell 3	b _{tl} mg/L/a	0,15	0,10	0,16	0,056	0,10	0,012	0,032	-0,023
	p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	0,15	0,46	0,54
	SF	1,5	1,3	1,5	1,4	1,0	0,50	1,2	0,92
Modell 4	b _{tl} mg/L/a	0,15	0,09	0,19	0,077	0,09	0,023	0,063	0,037
	p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	0,009	0,08	0,30
	SF	1,4	1,4	1,6	1,5	1,1	0,55	1,4	0,95

Aus den Parameterschätzungen für Modell 1 ergibt sich, dass die Sauerstoffkonzentrationen mittlere Jahresamplituden zwischen 3,1 (Wendlingen) und 5,4 mg/L (Besigheim) aufweisen (Tab. 4.4). Gemäß den berechneten Phasenverschiebungen treten an allen Stationen durchschnittlich die minimalen Konzentrationen im August, die maximalen im Februar auf (Tab. 4.4).

Tab. 4.4: Mit dem statistischen Modell 1 berechnete mittlere Jahresamplituden sowie die Tage der minimalen bzw. maximalen Sauerstoffkonzentrationen; Ergebnisse der Tests bezüglich der Gültigkeit der Grundannahmen für die parametrischen Modelle 1 und 2.

		POPP	MANN	BESI	ROCK	HOFN	WEND	PLEI	ALDI
Jahresamplituden sowie berechnete Zeitpunkte minimaler und maximaler Sauerstoffkonzentrationen									
Jahresamplitude mg/L		5,2	3,3	5,4	4,9	3,9	3,1	4,6	3,9
Modell 1	Tag minimaler Konz.	22.8.	17.8.	25.8.	23.8.	23.8.	2.8.	13.8.	6.8.
	Tag maximaler Konz.	21.2.	16.2.	24.2.	22.2.	22.2.	3.8.	12.2.	5.2.
Überprüfung der Modellannahmen *									
Modell 1	Durbin-Watson-Statistik	0,8	0,9	0,9	0,8	1,2	1,4	1,0	1,0
	H ₀ : Normalverteilt	-	-	+	+	-	+	+	+
	H ₀ : Konstante Varianz	-	-	-	+	-	+	-	-
Modell 2	Durbin-Watson-Statistik	1,1	1,1	1,0	0,9	1,2	1,2	1,1	1,2
	H ₀ : Normalverteilt	-	-	-	-	-	+	-	-
	H ₀ : Konstante Varianz	-	-	-	-	-	-	-	-

* „+“ Annahme der Nullhypothese (Normalverteilung bzw. konstante Varianz) auf dem 5%-Signifikanzniveau
 „-“ Zurückweisung der Nullhypothese.

Abbildung 4.3 verdeutlicht, dass durch die starre Vorgabe einer Sinusschwingung viele der Extremwerte schlechter reproduziert werden können als über die Berücksichtigung von Wassertemperatur und Abfluss. Dies spiegelt sich auch darin wider, dass an den meisten Messstellen der Standardfehler von Modell 1 größer ist als der von Modell 2 (Tab. 4.3). Allerdings treten auch bei Modell 2 Situationen auf, in denen die Modellergebnisse deutlich von den Messergebnissen abweichen (für Poppenweiler siehe Abb. 4.3).

Dies kann als Hinweis darauf gewertet werden, dass beide Modelle die Daten nicht korrekt beschreiben, also nicht alle relevanten Prädiktorvariablen in den Regressionsmodellen berücksichtigt sind. So kann beispielsweise der Einfluss der biologischen Dynamik auf den Jahresgang des Sauerstoffs nicht mit den externen Größen Abfluss und Wassertemperatur bzw. Saisonalität erfasst werden. Die Dynamik der Primärproduktion kann in den Regressionsmodellen auch nicht durch zusätzliche Parameter berücksichtigt werden, da die einzige hierfür geeignete Größe, Chlorophyll-a, nur in unzureichender räumlicher und zeitlicher Auflösung vorliegt. Folgerichtig geht aus Tabelle 4.4 hervor, dass die beiden parametrischen Modelle an keiner der Messstellen alle drei Voraussetzungen für die Anwendbarkeit von Regressionsanalysen streng erfüllen. Dies wurde auch durch die Residuenplots deutlich (Daten nicht dargestellt). Die Autokorrelationen, die bei beiden Modellen an allen Messstationen auftraten, konnten auch dadurch nicht wesentlich verringert werden, dass längere Zeiträume zur Bildung der medianen Sauerstoffkonzentrationen verwendet wurden. Die formalen Voraussetzungen für eine parametrische Regressionsanalyse konnten also nicht eingehalten werden. Die beiden Regressionsmodelle besitzen damit nur eine beschränkte Aussagekraft. Insbesondere bei Trends mit geringer Signifikanz sowie beim Vergleich unterschiedlicher Stationen sollten daher die Ergebnisse der nicht parametrischen Modelle 3 und 4 herangezogen werden.

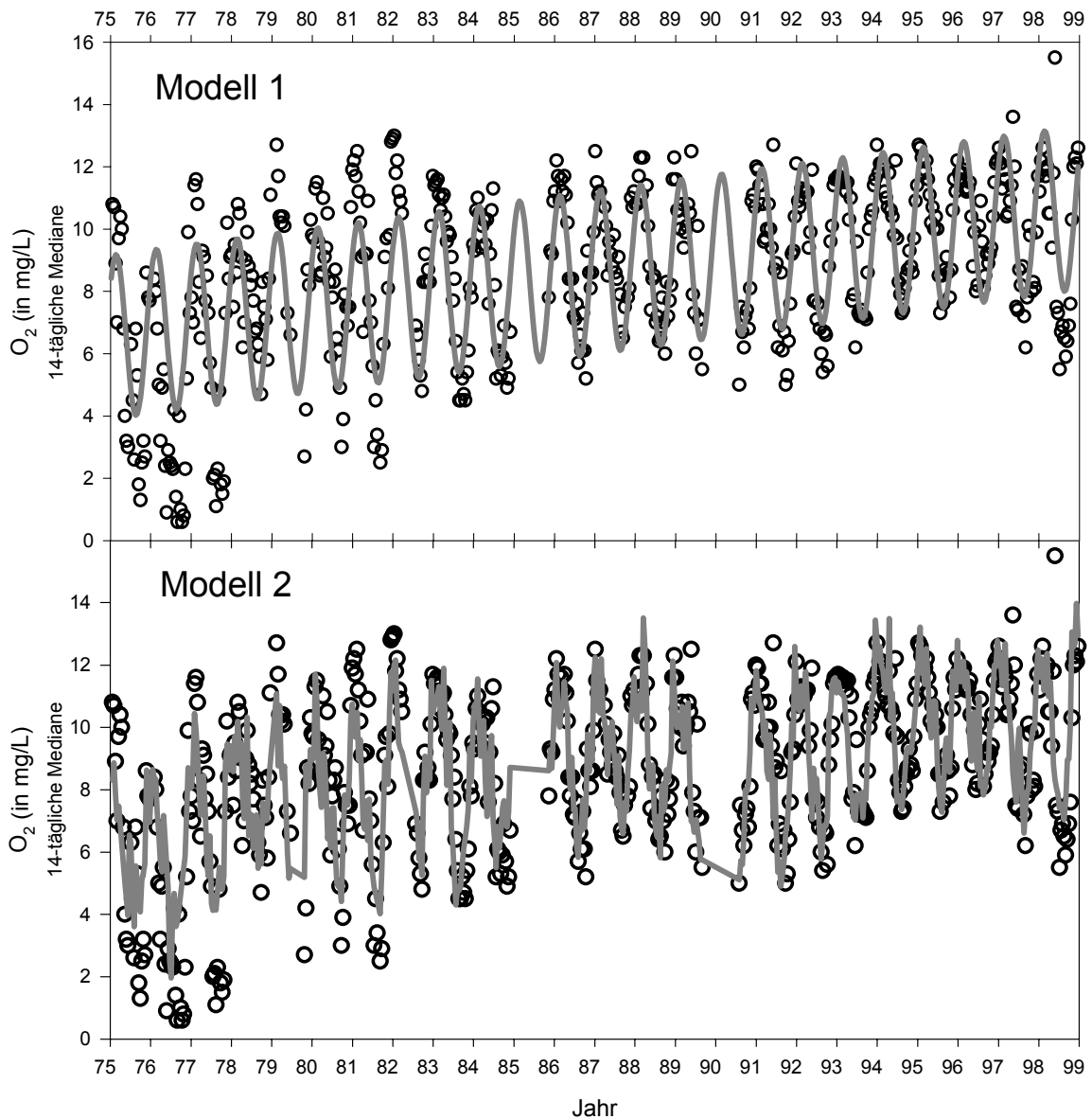


Abb. 4.3: Ergebnisse der parametrischen statistischen Modelle 1 (oben) und 2 (unten) für Sauerstoff an der Station Poppenweiler.

Robuste Verfahren: Auf Grundlage der in Tabelle 4.3 dargestellten Standardfehler ist die Effizienz der beiden nicht parametrischen Verfahren im Vergleich zu den korrespondierenden parametrischen Verfahren zumeist als äquivalent oder sogar besser zu bewerten. Da die parametrischen Modelle bei normalverteilten Daten eine höhere Effizienz (kleinere SF) aufweisen müssten als die nicht parametrischen, ist dies wiederum ein Hinweis darauf, dass die Voraussetzungen für Regressionsanalysen nicht streng erfüllt sind (Hirsch et al. 1991). Zudem verdeutlicht dieser Befund, dass die verwendeten robusten Ansätze im vorliegenden Fall einen sehr guten Ersatz für die gängigeren Regressionsmodelle darstellen.

In den Abbildungen 4.4 und 4.5 sind die Ergebnisse der robusten Modelle 3 und 4 exemplarisch für die Station Poppenweiler dargestellt. Hieraus wird ähnlich wie bei den Regressionen der Zusammenhang der Sauerstoffgehalte mit der Jahreszeit bzw. mit den saisonalen Größen Abfluss und Wassertemperatur deutlich. Die positiven zeitlichen Trends der Sauerstoffgehalte werden bei beiden Modellen klar ersichtlich.

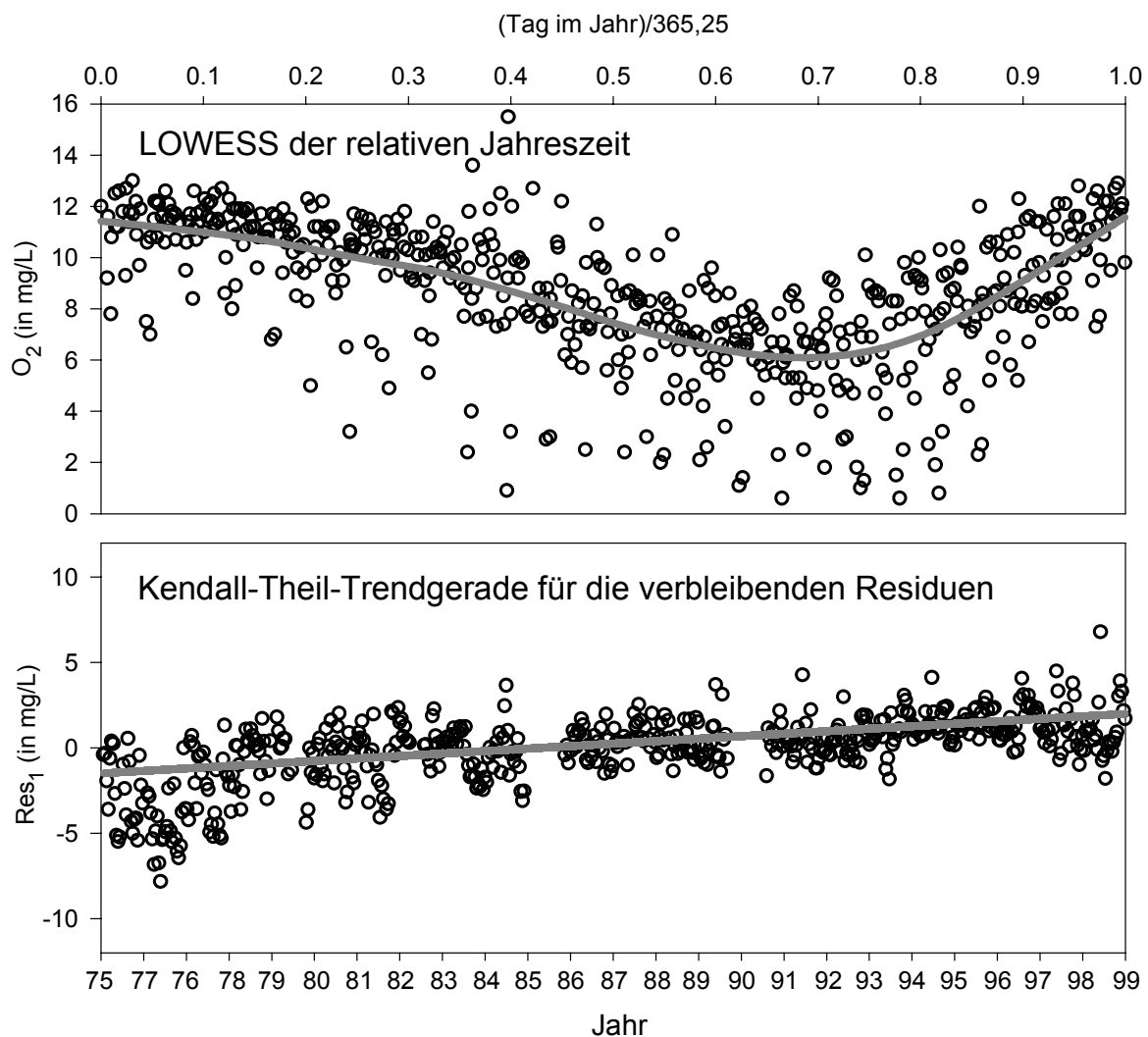


Abb. 4.4: Ergebnisse des robusten statistischen Modells 3 für Sauerstoff an der Station Poppenweiler.

Wie bei den Regressionsanalysen zeigen neben Poppenweiler auch die Stationen Mannheim, Besigheim, Rockenau und Hofen signifikant positive Trends für die Sauerstoffkonzentrationen. Die Stärke der Trends, d.h. die Steigungen bt_1 sind bei den robusten Methoden allerdings zumeist etwas geringer als bei den Regresionsverfahren (Tab. 4.3). An den Stationen Wendlingen und Pleidelsheim, an denen 13- bzw. 7-jährige Messreihen vorlagen, erreichten die berechneten positiven Trends das 0,1%-ige Signifikanzniveau nicht. Für die 7-jährige Messreihe der Station Aldingen konnte kein eindeutiger Trend festgestellt werden.

Auf Basis eines Vergleichs der 4 Stationen mit den längsten Messreihen scheinen in Rockenau die geringsten Veränderungen stattgefunden zu haben, wohingegen in Besigheim und Poppenweiler die mittleren Sauerstoffkonzentrationen am stärksten angestiegen sind. In Besigheim ist der mittlere Trend etwa 2,5 mal so hoch wie in Rockenau.

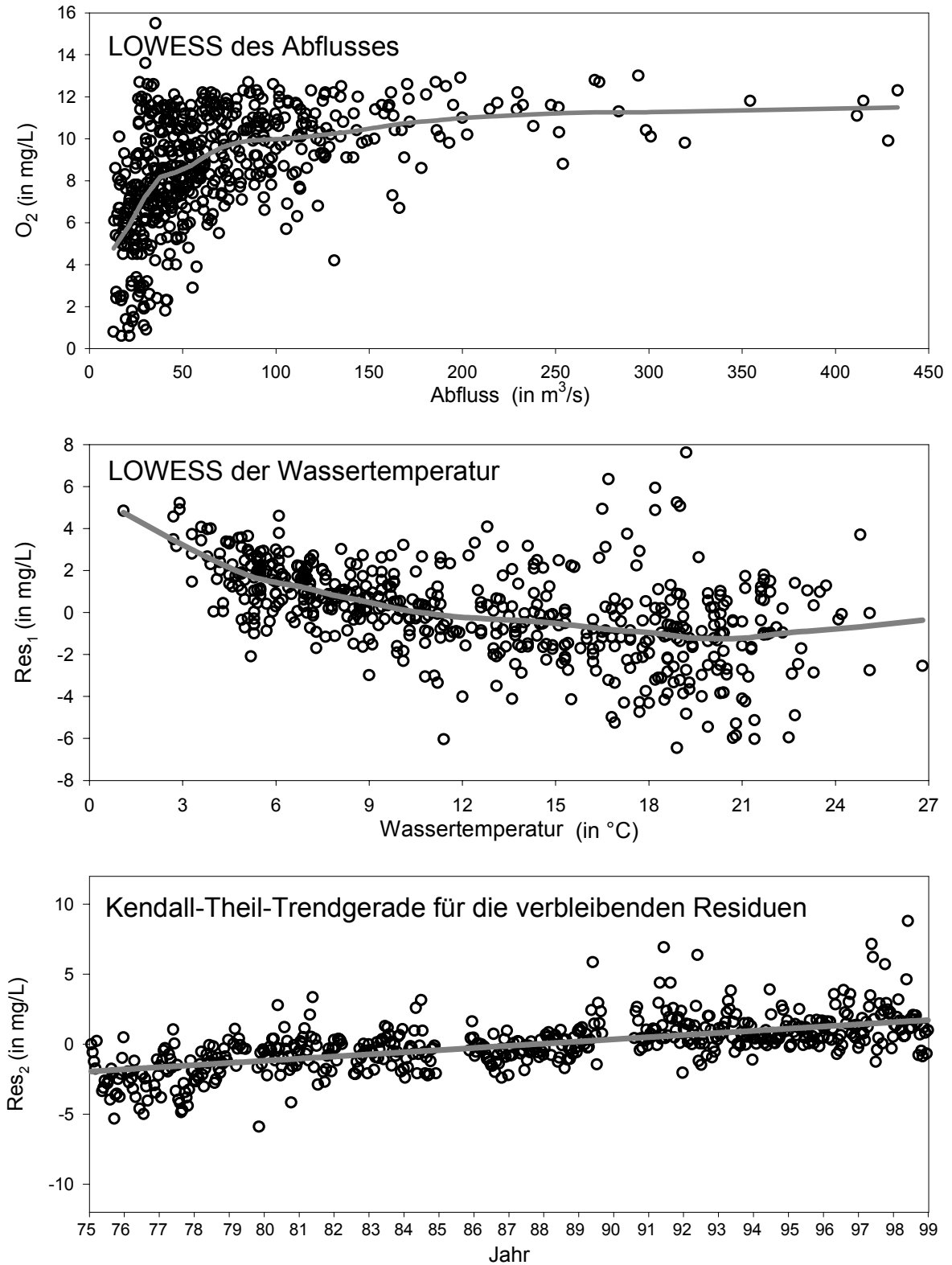


Abb. 4.5: Ergebnisse des robusten statistischen Modells 4 für Sauerstoff an der Station Poppenweiler.

Trends vor und nach 1987: Um Unterschiede bei den Konzentrationsentwicklungen in unterschiedlichen Zeiträumen zu untersuchen, wurden die Datenreihen in zwei Pools unterteilt: Die Daten die vor dem 1.1.1987 erhoben wurden und jene, aus dem Zeitraum danach. Das Jahr 1987 wurde aus zweierlei Gründen gewählt. Zum einen waren zu diesem Zeitpunkt nahezu alle Haushalte an die öffentliche Abwasserentsorgung angeschlossen und die Kläranlagen mit biologischen Reinigungsstufen versehen (Abb. 4.1). Zum anderen konnten so für die Station Poppenweiler zwei gleich lange Zeitspannen von 12 Jahren untersucht werden.

Wenngleich für die beiden externen Größen Abfluss und Wassertemperatur keine zeitlichen Trends festgestellt wurden, werden beide durch Überleitungen (Fernwasserversorgungen) bzw. Wärmeeinleitungen (Kraftwerke) anthropogen beeinflusst. Um Fehlinterpretationen durch zeitliche Veränderungen der externen Größen sicher auszuschließen, wurde ein Vergleich der Entwicklungen in unterschiedlichen Zeiträumen mit Hilfe von Modell 3 vorgenommen. Diese Wahl wird auch dadurch gestützt, dass Modell 3 bei der Betrachtung der vollständigen Messreihen in 7 von 8 Fällen eine höhere Effizienz aufweist als Modell 4 (Tab. 4.3).

In Tabelle 4.5 sind die Ergebnisse der mit Modell 3 durchgeführten Trendanalysen an 5 Stationen für die Zeiträume vor und nach dem Januar 1987 zusammengefasst. Hierdurch können einerseits die zwei Zeiträume an den einzelnen Stationen miteinander verglichen werden. Andererseits werden die Entwicklungen an den unterschiedlichen Stationen für den Zeitraum 1987 bis 1998 direkt vergleichbar.

Tab. 4.5: Ergebnisse der Trendanalysen für 14-tägliche Mediane der Sauerstoffkonzentrationen mit dem robusten Modell 3, für Zeiträume vor und nach dem 1.1.1987.

	POPP	MANN	BESI	ROCK	HOFN
Vor 1987					
Zeitraum	1.75-12.86	8.76-12.86	11.76-12.86	1.77-12.86	-
n	263	144	224	194	-
b _{tl} mg/L/a	0,28	0,22	0,31	0,13	-
p	<0,001	<0,001	<0,001	0,007	-
SF	1,7	1,4	1,5	1,5	-
Ab 1987					
Zeitraum	1.87-12.98	1.87-12.98	1.87-12.98	1.87-12.98	1.87-12.98
n	285	303	304	308	303
b _{tl} mg/L/a	0,10	0,02	0,15	-0,01	0,10
p	<0,001	0,33	<0,001	0,48	<0,001
SF	1,1	1,1	1,3	1,3	1,1

Für den Zeitraum vor 1987 wurden für alle Stationen eindeutig positive Trends der mittleren Sauerstoffgehalte nachgewiesen, wenngleich der Trend bei Rockenau das 0,1%-ige Signifikanzniveau nicht ganz erreichte. Für den Zeitraum 1987 bis 1998 konnten für Rockenau und Mannheim keine signifikanten Trends ermittelt werden, während in Hofen, Poppenweiler und Besigheim auch in diesem Zeitraum hochsignifikante Anstiege der mittleren Sauerstoffkonzentrationen vorlagen.

Bei Poppenweiler, wo vor und nach dem Januar 1987 gleich lange Zeitreihen vorlagen, ist die Steigung der Trendgerade für die ersten 12 Jahre 2,8 mal höher als für die zweiten 12 Jahre: Zwischen 1975 und 1987 stiegen die mittleren Sauerstoffkonzentrationen um 3,4 mg/L, während sie zwischen 1987 und 1998 nur noch um 1,2 mg/L anstiegen. Dieser deutliche Unterschied wird in Abbildung 4.6 veranschaulicht. Hier sind wiederum exemplarisch für die Station Poppenweiler die für die beiden Zeiträume anhand der Residuen 1 ermittelten Trendgeraden dargestellt. Ein ähnlich ausgeprägter Unterschied zwischen den beiden Zeitintervallen ergibt sich für Besigheim (Tab. 4.5). Aus dem Vergleich zwischen den Stationen erhärtet sich das Ergebnis von Tabelle 4.3, wonach in Besigheim sowohl vor dem Januar 1987 als auch danach der deutlichste Anstieg der mittleren Sauerstoffkonzentrationen zu verzeichnen war.

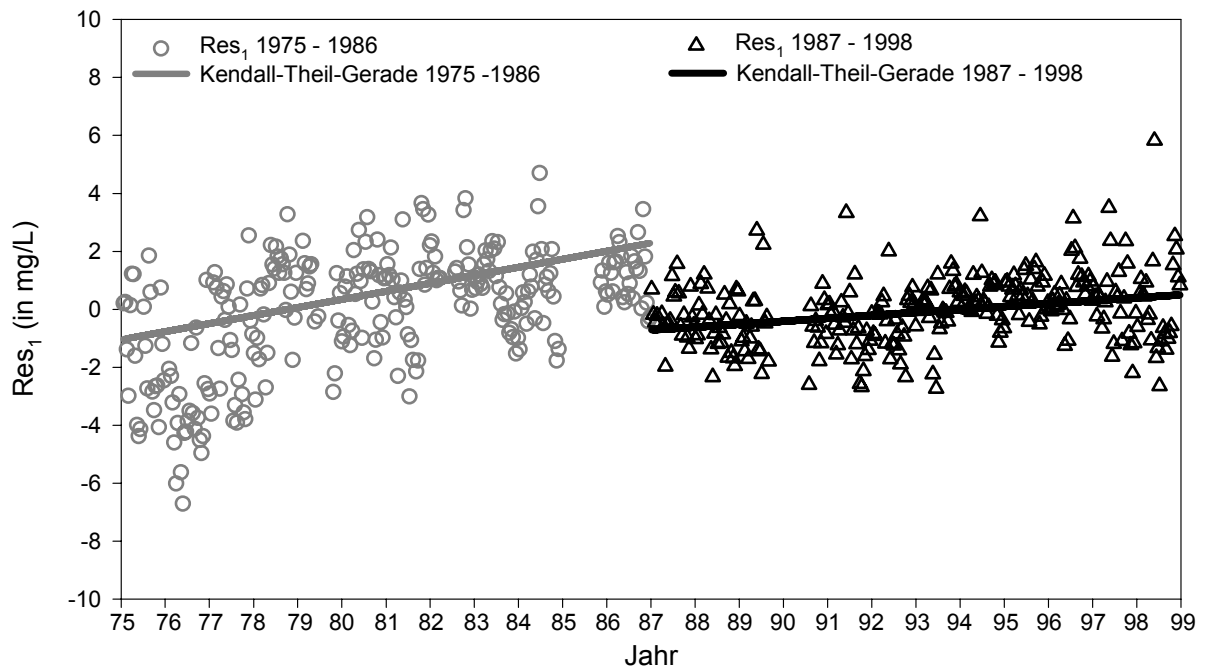


Abb. 4.6: Ergebnisse des robusten statistischen Modells 3 für Sauerstoff an der Station Poppenweiler während der Zeitabschnitte vor und nach dem 1.1.1987. (Dargestellt sind nur die Kendall-Theil-Trendgeraden für die verbleibenden Residuen).

Jahresminima

Die zeitliche Entwicklung der Jahresminima der Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen wurde zum einen über die gesamte verfügbare Zeitspanne untersucht. Zum anderen wurden auch hier die Entwicklungen vor und ab 1987 getrennt analysiert. Im Fall der Jahresminima wurden die Grundvoraussetzungen der Regressionsanalyse an allen untersuchten Stationen eingehalten (Daten nicht dargestellt). Weshalb die Ergebnisse dieses parametrischen Ansatzes hier zur Interpretation verwendet werden können. Die Ergebnisse der Regressionsanalysen sind in Tabelle 4.6 zusammengestellt. Die exemplarischen Ergebnisse für die Station Poppenweiler sind zusammen mit den Jahresmedianen und den Jahresmaxima in Abbildung 4.7 dargestellt.

Bei der Betrachtung der Jahresminima ist die Signifikanz der detektierten Trends infolge der wesentlich kleineren Stichprobenumfänge geringer als bei der Untersuchung der um externe Einflüsse korrigierten Konzentrationen. Dennoch konnte bei der Auswertung der gesamten Zeitreihen für die vier Stationen, an denen die Daten bis in die 1970er Jahre zurück reichen, signifikant positive Trends ermittelt werden (in Rockenau noch mit einer Irrtumswahrscheinlichkeit von 3 %). Die stärksten zeitlichen Veränderungen manifestieren sich hierbei wiederum in Besigheim und Poppenweiler. Es erscheint erwähnenswert, dass die Steigungen der Trendgeraden etwas größer sind als bei der Betrachtung der Jahresgänge (vgl. Tab. 4.3).

Trotz sehr kleiner Stichprobenumfänge konnte für den Zeitraum vor 1987 an den Stationen Poppenweiler, Mannheim und Besigheim positive Trends mit Irrtumswahrscheinlichkeiten von maximal 1% nachgewiesen werden. Die Trends sind ausgeprägter als bei Betrachtung der gesamten Zeitreihe. Die stärkste Veränderung weist in diesem Fall der Neckar bei Mannheim mit 0,43 mg/L/a auf. Hierbei ist jedoch zu beachten, dass die Jahre 1982 bis 1984 in Mannheim aufgrund fehlender Daten nicht berücksichtigt wurden ($n=8$!). Für Rockenau konnte bei nur 8 Datenpunkten kein signifikanter Trend detektiert werden.

Tab. 4.6: Ergebnisse der Trendanalysen für Jahresminima der Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen mit der Regressionsanalyse.

	POPP	MANN	BESI	ROCK	HOFN
Gesamte Zeitreihe					
Zeitraum	1975-1998	1976-1998	1976-1998	1977-1998	1982-1998
n	22	20	23	20	17
b_{tl} mg/L/a	0,20	0,17	0,22	0,10	0,10
p	<0,001	<0,001	<0,001	0,034	0,168
SF	1,1	1,2	1,2	1,3	1,4
Vor 1987					
Zeitraum	1975-1986	1976-1986	1976-1986	1977-1998	-
n	11	8	11	8	-
b_{tl} mg/L/a	0,33	0,43	0,37	0,10	-
p	0,003	0,010	<0,001	0,543	-
SF	0,9	1,1	0,7	1,3	-
Ab 1987					
Zeitraum	1987-1998	1987-1998	1987-1998	1987-1998	1987-1998
n	11	12	12	12	12
b_{tl} mg/L/a	0,12	-0,01	0,10	-0,09	0,10
p	0,306	0,861	0,419	0,349	0,390
SF	1,3	0,9	1,5	1,1	1,4

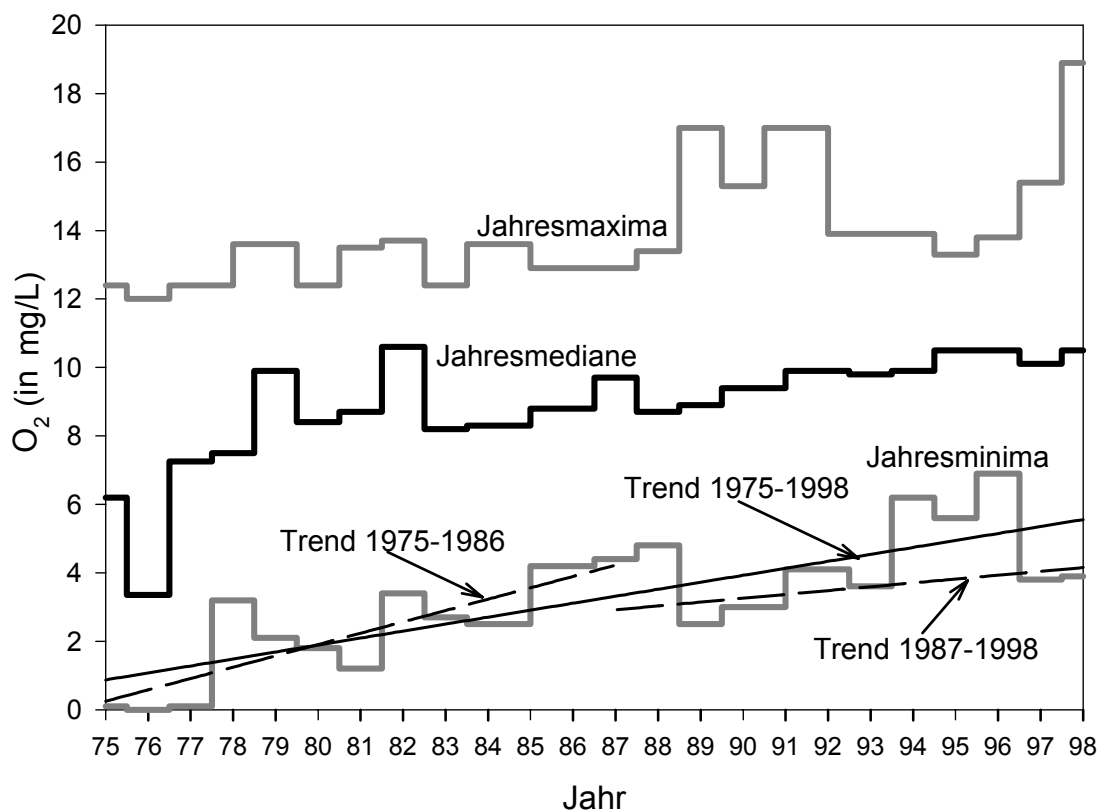


Abb.4.7: Jährliche Maxima, Medianwerte und Minima der Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen an der Station Poppenweiler sowie berechnete Trendgeraden für die Jahresminima.

Für den Zeitraum zwischen 1987 und 1998 konnte an keiner der untersuchten Messstationen ein signifikanter Trend bei den Jahresminima der Sauerstoffkonzentrationen festgestellt werden. Die Irrtumswahrscheinlichkeit für das Vorliegen eines Trends liegt in allen Fällen über 30%. Für den Neckar bei Mannheim und Rockenau deuten sich sogar negative Entwicklungen an, die aber selbstverständlich nicht signifikant sind.

Aus Abbildung 4.7 geht hervor, dass die jährlichen Minima der Sauerstoffkonzentrationen in Poppenweiler (wie an anderen Stationen) starken Schwankungen unterliegen. Die ermittelten Trends können von einzelnen Extremwerten sehr stark beeinflusst werden, was die teilweise geringen Signifikanzen erklärt. Die Jahresmediane variieren zumindest seit den 1980er Jahren erwartungsgemäß nicht so stark. Die Maximalwerte der Sauerstoffkonzentrationen einzelner Jahre lagen bis 1988 im Bereich zwischen 12 mg/L und 14 mg/L. Dies entspricht in etwa der Sättigungskonzentration bei Wassertemperaturen von 1°C bis 5°C, wie sie im Winter bei Poppenweiler erreicht werden. Seit 1989 treten in einzelnen Jahren auch wesentlich höhere Konzentrationen auf. Solche starken Übersättigungen treten offenkundig zumeist in den selben Jahren auf, in denen auch die Jahresminima auf sehr geringe Werte absinken.

4.4.3 Zehrstoffe, Nährstoffe und Chlorophyll

Die unter 4.4.2 durchgeführten Trendanalysen für Sauerstoff ermöglichen noch keine Aussagen über die Ursachen für die veränderten Sauerstoffgehalte. Um näheren Aufschluss hierüber zu erlangen, wurden an 5 Messstellen Zeitreihenanalysen für BSB₅, Ammonium-Stickstoff, Nitrat-Stickstoff und Gesamtorthosphat-Phosphor sowie an 2 Messstellen für Chlorophyll-a durchgeführt (Tab. 4.1). Dabei steht der BSB₅ für die direkte Belastung mit Zehrstoffen, die sogenannte Primärbelastung. Chl-a sowie die Nährstoffe NO₃ und PO₄ charakterisieren die Sekundärbelastung durch Eutrophierungsprozesse und übermäßiges Biomassenwachstum. Ammonium ist als Zehr- und Nährstoff für beide Belastungspfade von Interesse.

Da auch für diese Wassergüteparameter die Voraussetzungen für parametrische Regressionsanalysen nicht eingehalten werden konnten, werden hier nur die Ergebnisse der robusten Modelle 3 und 4 vorgestellt. Diese sind in Tabelle 4.7 zusammengefasst. Hierbei ist wiederum zu beachten, dass Zeitreihen in unterschiedlicher Länge zugrunde liegen. Mit Ausnahme von Chl-a lagen die Daten nur bis Ende 1997 vor. Die Messstationen sind in Tabelle 4.7 nach der Länge der BSB₅-Zeitreihen geordnet, wobei dieses Ordnungsprinzip jedoch nicht für die übrigen Parameter gilt. In Abbildung 4.8 sind die mit Modell 3 anhand der Residuen 1 ermittelten Trendgeraden der fünf Güteparameter wiederum exemplarisch für den Neckar bei Poppenweiler dargestellt.

BSB₅: Trotz unterschiedlicher Zeitreihenlängen konnte für alle Stationen eine hochsignifikante Reduktion der Belastung mit leicht abbaubarer organischer Substanz (ausgedrückt als BSB₅) verzeichnet werden. Aus Abbildung 4.8 wird zudem ersichtlich, dass die durch die Trendanalyse nicht erfassten Schwankungen um die Trendgerade im Laufe der Jahre kleiner wurden. Im Neckar bei Poppenweiler lag der mittlere jährliche Rückgang des BSB₅ zwischen 1975 und 1997 bei 0,27 bzw. 0,28 mg/L/a. Damit wurde die mittlere BSB₅ Konzentration in 23 Jahren um mehr als 6 mg/L reduziert. Für nahezu den selben Zeitraum war der negative Trend bei Deizisau wesentlich weniger ausgeprägt. Auffällig ist auch der ausgeprägte Trend bei Besigheim, der die selbe Steigung wie bei Poppenweiler erreicht, wenngleich hier nur Messdaten seit 1982 vorlagen.

Stickstoff: Wenngleich die Messreihen nur bis 1990 zurück reichen, wurden für die Stationen Poppenweiler, Besigheim und Mannheim auch für Ammonium und Nitrat hochsignifikante Konzentrationsabnahmen ermittelt. Für Ammonium wurden die stärksten Reduktionen dabei wiederum bei Poppenweiler und Besigheim detektiert. Auch für Deizisau und Rockenau deuten sich negative Trends an, die aufgrund der nur 5-jährigen Messreihen, das 0,1%ige Vertrauensniveau nicht erreichen. Erwähnenswert ist dennoch der ausgeprägte Trend von N-NH₄ in Rockenau mit einer ermittelten mittleren jährlichen Konzentrationsabnahme von ca. 0,05 mg/L.

Phosphor: Für P-PO₄ konnte an allen Messstellen mit Ausnahme von Rockenau, wo nur eine 5-jährige Messreihe vorlag, hochsignifikant negative Konzentrationstrends ermittelt werden. Die mittleren jährlichen Konzentrationsabnahmen liegen dabei, mit Ausnahme von Rockenau, zwischen 0,25 und 0,55 mg/L.

Tab. 4.7: Ergebnisse der Zeitreihenanalysen mit den robusten Modellen 3 und 4 für die Konzentrationen von Zehr- und Nährstoffen, sowie von Chl-a im Neckar. Die Einheiten für bt_1 sind für Chl-a in $\mu\text{g/L/a}$, für alle anderen Stoffe in mg/L/a .

Messstelle		BSB ₅	N-NH ₄	N-NO ₃	P-PO ₄	Chl-a	
POPP	Zeitraum	1.75-12.97	1.90-12.97	1.90-12.97	6.86-12.97	4.84-12.98	
	n	624	212	211	272	304	
	Modell 3	b_{t1}	-0,28	-0,025	-0,14	-0,055	0,018
		p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	0,83
		SF	2,6	0,43	0,9	0,21	18,3
	Modell 4	b_{t1}	-0,27	-0,032	-0,15	-0,051	-0,12
		p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	0,38
		SF	2,5	0,18	0,7	0,20	18,0
	DEIZ	Zeitraum	12.75-12.97	4.93-12.97	1.93-12.97	6.86-12.97	
		n	499	125	125	206	
Modell 3		b_{t1}	-0,12	-0,027	-0,043	-0,042	-
		p	<0,001	0,004	0,39	<0,001	-
		SF	2,0	0,21	0,77	0,18	-
Modell 4		b_{t1}	-0,13	-0,011	-0,098	-0,042	-
		p	<0,001	0,38	0,005	<0,001	-
		SF	2,0	0,18	0,56	0,16	-
MANN		Zeitraum	1.81-12.97	1.90-12.97	1.90-12.97	6.86-12.97	7.84-12.98
		n	424	244	268	206	318
	Modell 3	b_{t1}	-0,16	-0,005	-0,18	-0,031	-0,21
		p	<0,001	0,01	<0,001	<0,001	0,02
		SF	1,4	0,09	0,7	0,12	17,1
	Modell 4	b_{t1}	-0,15	-0,008	-0,15	-0,025	-0,21
		p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	0,12
		SF	1,3	0,09	0,7	0,13	18,5
	ROCK	Zeitraum	1.82-12.97	1.93-12.97	1.93-12.97	1.93-12.97	
		n	428	124	124	124	
Modell 3		b_{t1}	-0,16	-0,048	-0,11	-0,004	-
		p	<0,001	0,35	0,006	0,18	-
		SF	1,5	0,09	0,6	0,08	-
Modell 4		b_{t1}	-0,15	-0,050	-0,10	-0,009	-
		p	<0,001	0,09	0,005	0,014	-
		SF	1,4	0,31	0,5	0,08	-
BESI		Zeitraum	9.82-12.97	1.90-12.97	1.90-12.97	1.89-12.97	
		n	373	146	148	174	
	Modell 3	b_{t1}	-0,28	-0,028	-0,16	-0,036	-
		p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	-
		SF	2,3	0,30	0,8	0,11	-
	Modell 4	b_{t1}	-0,27	-0,032	-0,16	-0,036	-
		p	<0,001	<0,001	<0,001	<0,001	-
		SF	2,1	0,31	0,6	0,09	-

Chlorophyll: Für Chl-a, für das bei Poppenweiler und Mannheim je 15-jährige Messreihen vorlagen, ergibt sich ein generell anderes Bild als für die Nähr- und Zehrstoffe. Bei Mannheim ist ein Rückgang von Chl-a und damit der Phytoplanktonkonzentrationen noch als relativ wahrscheinlich anzusehen. Bei Poppenweiler kann jedoch kein Trend festgestellt werden.

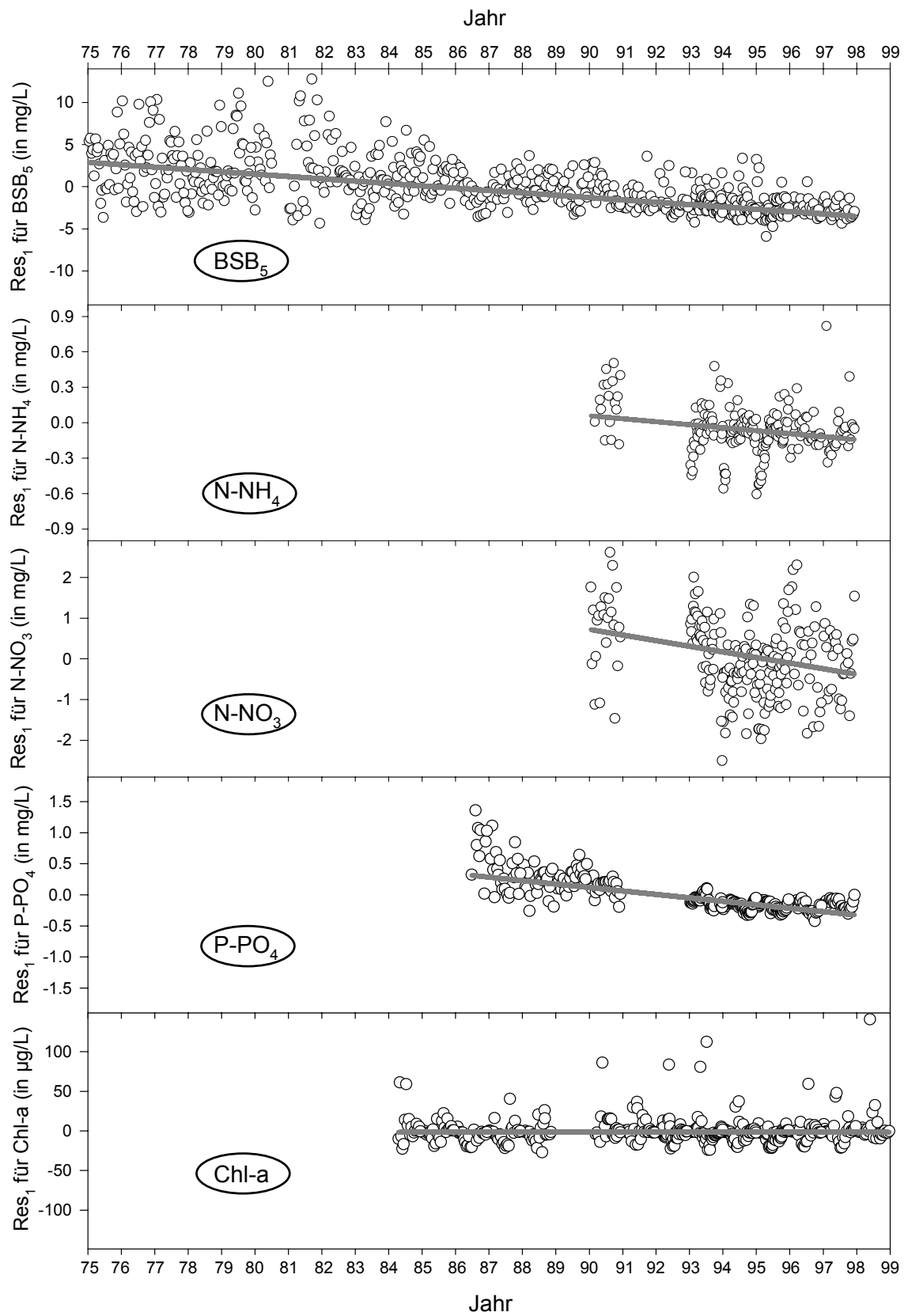


Abb. 4.8: Ergebnisse des robusten statistischen Modells 3 für BSB₅, N-NH₄, N-NO₃, P-PO₄ und Chl-a an der Station Poppenweiler. (Dargestellt sind nur die Kendall-Theil-Trendgeraden für die verbleibenden Residuen).

4.4.4 Zusammenfassende Diskussion der Ergebnisse

Die Ergebnisse der statistischen Analysen verdeutlichen eindrucksvoll, dass sich die mittleren Sauerstoffverhältnisse in der Bundeswasserstraße Neckar seit Mitte der 1970er Jahre nachhaltig verbessert haben (Tab. 4.3). Diese positive Entwicklung war im Zeitraum 1975 bis 1986 wesentlich stärker ausgeprägt als in den Jahren 1987 bis 1998. Die drastische Verbesserung zwischen Mitte der 1970er und Mitte 1980er Jahre kann in erster Linie auf den in dieser Zeit vollzogenen massiven Ausbau von Kanalisation und Kläranlagen sowie auf die deutlich verbesserten Reinigungsleistungen der Klärwerke zurückgeführt werden (Abb. 4.1 und 4.2). Die Reduktion der Zehrstoffemissionen wird auch durch den drastischen Rückgang der BSB_5 Konzentrationen im Neckar untermauert (Tab. 4.7). Die damit verbundene Verringerung der Primärbelastung kann als direkte Ursache für die nachhaltige Verbesserung der Sauerstoffverhältnisse bis Mitte der 1980er Jahre angesehen werden. Dabei waren die positiven Auswirkungen, sowohl hinsichtlich der mittleren Konzentrationen als auch für die Jahresminima, in der mit Abwasser sehr stark belasteten Fließstrecke zwischen dem Ballungsraum Stuttgart und der Enzmündung am stärksten ausgeprägt.

Die darüber hinaus insbesondere in den 1990er Jahren in den Kläranlagen implementierten bzw. verbesserten Verfahren zur Nitrifikation, Denitrifikation und Phosphatelimination spiegeln sich in den nach wie vor abnehmenden Ammonium-, Nitrat- und Orthophosphatkonzentrationen im Neckar direkt wider (Tab. 4.7). Eine positive Auswirkung auf die Sekundärbelastung, ausgedrückt als Abnahme der Chlorophyll-a Konzentration, lässt sich bislang aber nicht signifikant nachweisen. Dies verdeutlicht, dass trotz stark rückläufiger Konzentrationen die Nährstoffe Phosphor und Stickstoff offenbar nach wie vor im Überschuss vorhanden sind und daher nicht limitierend auf das Algenwachstum wirken. Als maßgeblicher limitierender Faktor wirkt viel mehr das Lichtangebot, das sich infolge des verringerten Trübstoffeintrags in den Neckar in den letzten Jahrzehnten vermutlich sogar verbessert hat.

Da in der Zeit nach 1987 nur noch ein geringfügiger Rückgang der Zehrstoffemissionen (BSB_5 und NH_4) zu verzeichnen war, sind vermutlich zusätzliche Wirkungsmechanismen für die anhaltende Erhöhung der mittleren Sauerstoffgehalte mit verantwortlich. Zum einen ist die sehr langsame qualitative Veränderung des Sediments zu nennen, zum anderen die komplexe Dynamik der Primärproduktion. Im Zuge der verbesserten Abwasserreinigung kam es zu qualitativen Veränderungen der im Neckar transportierten Feststoffe: Der Anteil abwasserbürtiger stark zehrender Partikel reduzierte sich zugunsten mineralischer Bestandteile. In der Folge kam es offenbar zu einer stetigen Reduktion des Sauerstoffzehrungspotenzials des abgelagerten Sediments. Infolge interner Umlagerungen bei Hochwasser und Baggerungen sowie des nur langsam von statten gehenden Aufbrauchs des Zehrungspotenzials hält die Verminderung der Sauerstoffzehrung des Sediments noch lange über den Rückgang der Emissionen hinaus an.

Mit dem Rückgang der direkten Zehrstoffbelastung erlangt – ähnlich wie an anderen Flüssen (z.B. Bergemann et al. 1996; Guhr et al. 1998) – die biologische Dynamik des Phytoplanktons mit ihren komplexen Wirkungspfaden eine immer bedeutendere Rolle für den Sauerstoffhaushalt im Neckar. So konnten Haag und Westrich (2002) mit Hilfe von Hauptkomponentenanalysen zeigen, dass sich die maßgeblichen Steuerfaktoren des Sauerstoffhaushalts im Neckar zwischen den 1970er und 1990er Jahren grundlegend veränderten: Während die Sauerstoffgehalte in den 1970er Jahren unmittelbar durch die Primärbelastung und die atmosphärische Wiederbelüftung gesteuert wurden, war in den 1990er Jahren die Entwicklung des Phytoplanktons von maßgeblicher Bedeutung (Haag und Westrich 2002). Dieser Aspekt wird im folgenden Kapitel ausführlicher untersucht. Hier wird nur insoweit darauf eingegangen, wie es für die Interpretation der Ergebnisse erforderlich ist.

In den letzten Jahren konnte bei länger anhaltenden günstigen Strahlungsbedingungen während des Sommerhalbjahres der Aufbau dichter Algenpopulationen mit Chl-a Konzentrationen von über 100 $\mu\text{g/L}$ verzeichnet werden. Hierbei können deutliche Sauerstoffübersättigungen auftreten, die teilweise über mehrere Wochen anhalten. Beim Zusammenbrechen der Algenpopulationen kommt es zu ausgeprägten Sauerstoffdepressionen, die allerdings zumeist innerhalb weniger Tage wieder ausgeglichen werden. Dies bedingt, dass eine erhöhte Primärproduktion bei der Analyse des Langzeittrends undifferenziert als Zunahme des mittleren Sauerstoffgehalts bewertet wird. Diese Zusammenhänge werden auch in Abbildung 4.7 veranschaulicht. Das auffällig häufige Zusammentreffen extrem hoher Jahresmaxima und extrem niedriger Minima ist auf die Steuerung des Sauerstoffhaushalts durch die Phytoplanktodynamik zurückzuführen. Zudem wird deutlich, dass die Jahresmediane der Sauerstoffkonzentrationen in den 1990er Jahren (wie die um saisonale Effekte bereinigten Konzentrationen) nahezu stetig ansteigen, während die Jahresminima und Maxima starken Schwankungen von Jahr zu Jahr unterliegen.

Hieraus ist zu folgern, dass in durch Sekundärbelastung dominierten Flüssen die mittlere bzw. die um externe Einflüsse bereinigte Sauerstoffkonzentration nur bedingt als geeignetes Maß für die Entwicklung der Belastung anzusehen ist. In solchen Systemen ist die minimale jährliche Sauerstoffkonzentration besser geeignet, um zu bewerten wie sich der Einfluss des Sauerstoffhaushalts auf die aquatische Biozönose entwickelt. Mit diesen minimalen Jahreskonzentrationen können auch die kurzzeitigen Sauerstoffdepressionen, die durch das Zusammenbrechen von Algenblüten zustande kommen, erfasst werden.

Hinsichtlich der Jahresminima der O_2 Konzentrationen konnten für den Zeitraum von 1987 bis 1998 keine signifikanten Trends ermittelt werden. Vielmehr scheinen die jährlichen Minima seit Ende der 1980er Jahre bei starken Schwankungen nahezu zu stagnieren. Die unter ökologischen Gesichtspunkten maßgebenden Sauerstoffminima hängen stark vom Witterungs- und Abflussgeschehen ab und sind daher von Jahr zu Jahr sehr unterschiedlich. Um den Sauerstoffhaushalt zu stabilisieren, also auch die Jahresminima der Konzentrationen signifikant zu erhöhen, müsste die Sekundärbelastung in Form des übermäßigen Algenwachstums bekämpft oder die Sauerstoffdepressionen mit Belüftungsmaßnahmen abgeschwächt werden. Mit welchen Mitteln der Sekundärbelastung bzw. ihrer negativen Auswirkungen auf den Sauerstoffhaushalt im Neckar zukünftig am wirksamsten begegnet werden kann, ist Gegenstand nachfolgender Kapitel.

5 AKTUELLER ZUSTAND DES STOFFHAUSHALTS IM NECKAR

5.1 Einleitung

Nachdem aufgezeigt wurde wie sich die Konzentrationen relevanter Wasserinhaltsstoffe während der vergangenen 25 Jahre entwickelt haben, soll hier der aktuelle Zustand des Stoffhaushalts mit besonderem Blick auf die Sauerstoffkonzentrationen näher untersucht werden. Hierzu werden die von der LfU Baden-Württemberg erhobenen und zur Verfügung gestellten Monitoringdaten aus den 1990er Jahren herangezogen. In einem ersten Schritt wird der Zustand des Sauerstoffhaushalts anhand der verfügbaren Daten deskriptiv charakterisiert. Hierdurch können mittlere und extreme Konzentrationen von Sauerstoff und anderen relevanten Wasserinhaltsstoffen in Hinblick auf die Gewässergüte beurteilt und Belastungsschwerpunkte identifiziert werden.

In einem zweiten Schritt sollen die für den Sauerstoffhaushalt maßgeblichen Prozesse identifiziert und näher analysiert werden. Die aus dem Monitoringprogramm resultierenden multivariaten Datensätze sind jedoch so komplex, dass sie sich einer einfachen Interpretation entziehen. Um die vorliegenden Datensätze umfassend auszuwerten, bieten sich vielmehr Verfahren aus der multivariaten Statistik, wie die Hauptkomponenten- oder Faktorenanalyse an (Reyment und Jöreskog, 1993; Petersen et al., 2001). Nach der allgemeinen Charakterisierung des Sauerstoffhaushalts wird daher die Hauptkomponentenanalyse in Verbindung mit anderen statistischen Verfahren verwendet, um die vorliegenden Gewässergütedaten zu analysieren. Hierdurch können die für den Stoffhaushalt maßgeblichen Prozesse identifiziert und hinsichtlich ihres Einflusses auf den Sauerstoffhaushalt bewertet werden. Auf Grundlage dieser Befunde werden einzelne Prozesse mit Hilfe der Originaldaten näher beleuchtet. Aus dieser kombinierten Vorgehensweise ergeben sich erste Hinweise auf erfolgversprechende Maßnahmen zur weiteren Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts. Zudem wird aus den Ergebnissen deutlich, welche Hauptprozesse in einem numerischen Modell unbedingt berücksichtigt werden müssen, um den Sauerstoffhaushalt des Neckars zuverlässig zu simulieren.

5.2 Allgemeine Charakterisierung des Stoffhaushalts

Hydrochemische Charakterisierung

Zur grundlegenden geochemischen Charakterisierung wurden die Ergebnisse der vierzehntäglichen Einzelproben aus den Jahren 1993 bis 1998 herangezogen. Die Analysenwerte der Hauptkationen und -anionen wurden von mg/L in mmol/L überführt und Dreiecksdiagramme erstellt, die die prozentualen Anteile der Hauptkationen an der positiven bzw. der Hauptanionen an der negativen Ladung ersichtlich machen. Das Ergebnis für die Messstelle Poppenweiler ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Die Ergebnisse der anderen Messstellen unterscheiden sich nur graduell hiervon, so dass Abbildung 5.1 als repräsentativ für die gesamte Bundeswasserstraße Neckar angesehen werden kann.

Für eine weitergehende Charakterisierung hinsichtlich der für den Sauerstoffhaushalt relevanten Kenngrößen, wurden aus den vierzehntäglichen Einzelproben der Jahre 1993 bis 1998 Box-und-Whisker-Plots der elektrischen Leitfähigkeit, des pH-Wertes, der Wassertemperatur, der Sauerstoffgehalte, des biochemischen Sauerstoffbedarfs, der mineralischen Nährstoffe und des Chlorophyll-a erstellt. Diese sind für die Stationen Deizisau, Poppenweiler, Rockenau und Mannheim in den Abbildungen 5.2 und 5.3 dargestellt. Bei der Interpretation der Daten ist zu beachten, dass in den Box-und-Whisker-Plots die Spannweite der Konzentrationen lediglich vom 5- bis 95-Perzentil reicht, absolute Extremwerte also nicht dargestellt sind.

Aus Abbildung 5.1 wird deutlich, dass entsprechend den petrographischen Gegebenheiten im Einzugsgebiet des Neckars bei den positiven Ladungsträgern die Erdalkaliumionen dominieren, wohingegen der Ladungsanteil der Alkaliionen unter 30% liegt. Die Anionen werden, mit einem Ladungsanteil der zumeist über 50% liegt, von Hydrogencarbonat dominiert. Bei dem untersuchten Neckarwasser handelt es sich folglich im Wesentlichen um ein Kalziumhydrogencarbonatwasser, worin der prägende Einfluss der carbonatischen Gesteine im Einzugsgebiet zum Ausdruck kommt. Allerdings wird auch die Abwasserbeeinflussung durch die leicht erhöhten Chlorid- und Sulfatanteile deutlich.

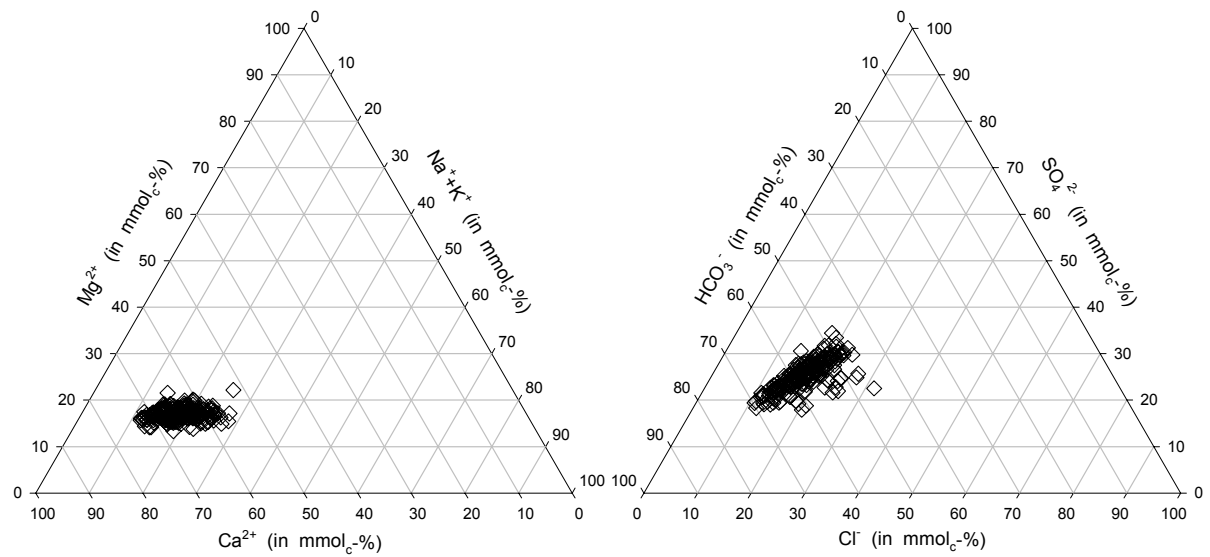


Abb. 5.1: Relative Anteile der Hauptkationen bzw. Hauptanionen an der positiven respektive negativen Ladung im Neckarwasser bei Poppenweiler.

Die Gesamtlösungsinhalte TDS (total dissolved solids) variieren je nach Abflusszustand etwa zwischen 10 und 20 mmol/L. Dies drückt sich in Leitfähigkeitswerten von etwa 600 bis 1000 $\mu\text{S}/\text{cm}$ aus (Abb. 5.2; Appelo und Postma 1993). Die leicht alkalischen pH-Werte, die zumeist nur knapp unter dem beim Kalk-Kohlensäure Gleichgewicht zu erwartenden Wert von 8,2 liegen, sind auf den Einfluss der carbonatischen Gesteine zurückzuführen. Insgesamt kann der Neckar als ein recht hoch mineralisiertes und gut gepuffer-tes Gewässer beschrieben werden. Die hohe Pufferkapazität des Gewässers wird auch dadurch untermauert, dass die erosive Remobilisierung reduzierter Stoffe im Hochwasserfall allenfalls zu geringen pH-Absenkungen führt (Kern 1997; Kern und Westrich 1995).

Die Wassertemperatur variiert über einen weiten Bereich, wobei die extrem hohen Sommertemperaturen vor allem im unterstromigen Bereich zu einem Gutteil auf die anthropogene Beeinflussung durch Stauregulierung und Abwärmeeinleitung zurückzuführen sind (Abb. 5.2).

Auch die Sauerstoffkonzentrationen bzw. -sättigungen sind äußerst variabel, wobei zu beachten ist, dass Extremwerte durch die Art der Darstellung nicht ersichtlich werden. Der überwiegende Anteil der Proben weist Sauerstoffsättigungen nahe 100% auf. Allerdings wird auch ersichtlich, dass an allen Messstellen sowohl deutliche Über- als auch Untersättigungen auftreten können. Auffällig ist die deutliche Tendenz zur Untersättigung mit Sauerstoff bei Rockenau: Hier weisen etwa 25% aller Einzelproben Sättigungswerte kleiner 75% auf (Abb. 5.2).

Sowohl der biochemische Sauerstoffbedarf als auch Ammonium zeigen in Fließrichtung abnehmende Konzentrationen (Abb. 5.3). Dies kann als Hinweis darauf gewertet werden, dass die Hauptquellen dieser beiden Belastungsstoffe im oberstromigen Bereich der Bundeswasserstraße Neckar liegen und sauerstoffzehrende Abbau- bzw. Nitrifikationsprozesse im Fluss zur Reduktion der Konzentrationen beitragen.

Die Ammoniumgehalte sind in Verbindung mit den pH-Werten und sommerlichen Wassertemperaturen hinsichtlich möglicher toxischer Effekte von Ammoniak als kritisch einzustufen (vgl. Abb. 2.5).

Hinsichtlich der Sekundärbelastung durch Eutrophierung sind die Chl-a Gehalte von zentraler Bedeutung (Abb. 5.3). Hier fällt insbesondere auf, dass die Werte stark rechtsschief verteilt sind: Die Allermeisten Werte liegen unter 10 $\mu\text{g}/\text{L}$. Bei den recht seltenen, auf das Sommerhalbjahr beschränkten „Algenblüten“, können jedoch an allen Messstellen wesentlich höhere Konzentrationen auftreten. Wobei auch hier darauf zu verweisen ist, dass auch Extremwerte jenseits des 95-Perzentils auftreten (siehe unten).

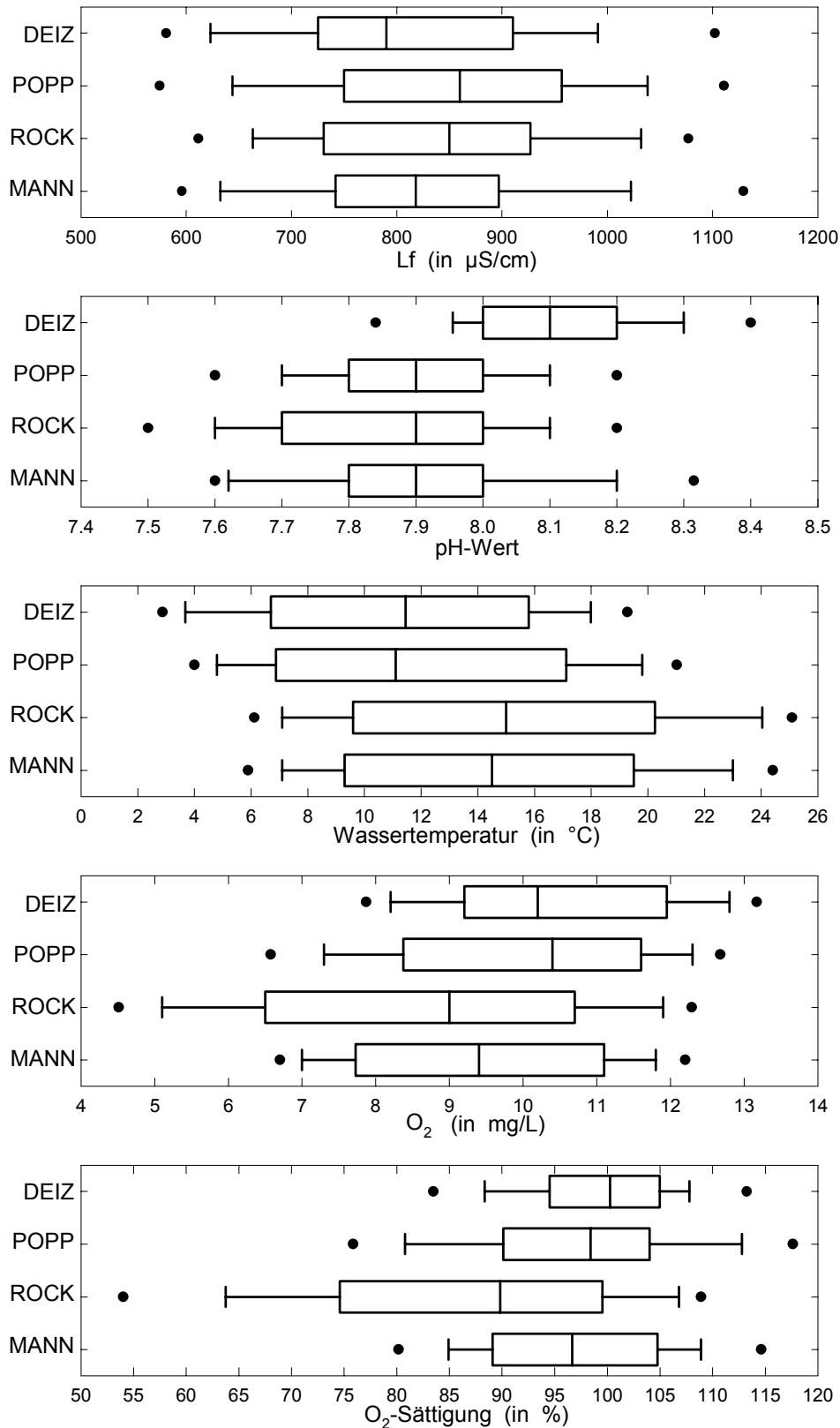


Abb. 5.2: Box-und-Whisker-Plots der elektrischen Leitfähigkeit, des pH-Wertes, der Wassertemperatur, der Sauerstoffkonzentration und der Sauerstoffsättigung an verschiedenen Messstellen im Neckar. Dargestellt sind 5-, 10-, 25-, 50-, 75-, 90- und 95-Perzentile.

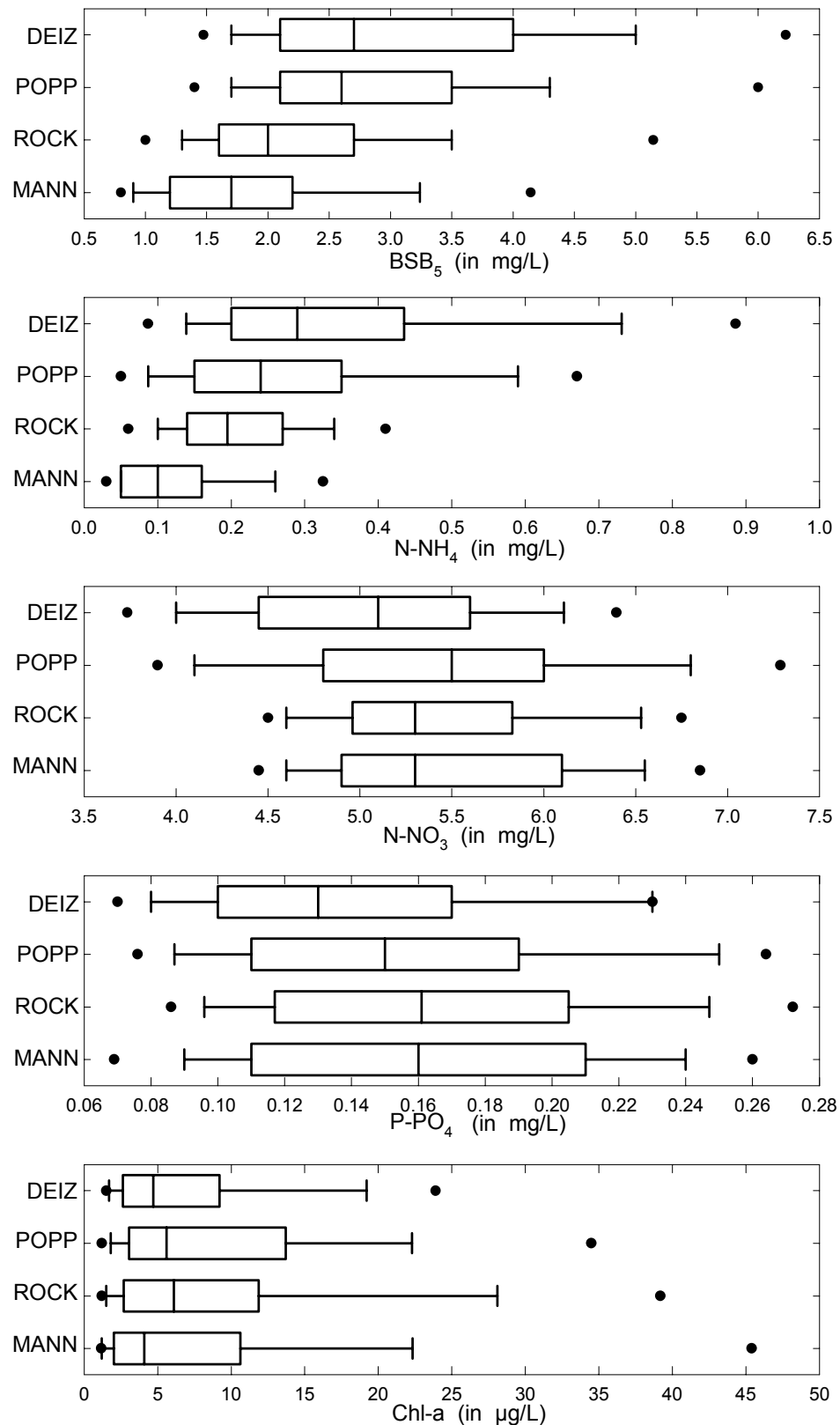


Abb. 5.3: Box-und-Whisker-Plots des BSB₅, der Ammonium-Stickstoff, der Nitrat-Stickstoff, der Gesamtorthosphat-Phosphor und der Chl-a Konzentrationen an verschiedenen Messstellen im Neckar. Dargestellt sind 5-, 10-, 25-, 50-, 75-, 90- und 95-Perzentile.

Inwiefern übermäßiges Algenwachstum durch Mangel an den Nährstoffen Stickstoff oder Phosphor unterbunden wird, kann aus den Konzentrationen des Gesamtorthosphosphat-Phosphors und des mineralischen Stickstoffs ($\approx \text{N-NO}_3 + \text{N-NH}_4$) abgeleitet werden. In der Literatur werden Halbsättigungskonzentrationen für das Algenwachstum genannt, die für Phosphor zumeist im Bereich von 2 $\mu\text{g/L}$ und für Stickstoff bei etwa 30 $\mu\text{g/L}$ liegen (vgl. Tab. 2.3). Eine merkliche Limitierung ist daher erst bei Phosphorkonzentrationen unter etwa 6 $\mu\text{g/L}$ bzw. Stickstoffkonzentrationen von weniger als ca. 90 $\mu\text{g/L}$ zu erwarten (Haag et al. 2000b). Aus Abbildung 5.3 wird deutlich, dass selbst die 5-Perzentile um mehr als den Faktor 10 über diesen Werten liegen. Mit einer merklichen Limitierung des Algenwachstums durch die Nährstoffe Phosphor oder Stickstoff ist momentan also nicht zu rechnen. Gemäß der Redfieldstöchiometrie liegt das molare Verhältnis von Stickstoff und Phosphor in der Biomasse von Algen bei N:P = 16:1 (Redfield 1956; Stumm und Morgan 1995). Bezogen auf die Masse entspricht dies einem Verhältnis von 7,2:1. Im Neckarwasser liegt das Verhältnis zwischen gelöstem anorganischem Stickstoff und Gesamtorthosphosphat-Phosphor im Mittel etwa bei 40:1 (molar 90:1), das minimale N:P Verhältnis liegt bei etwa 20:1 (molar 40:1). Hieraus wird ersichtlich, dass Stickstoff offenbar noch wesentlich weiter davon entfernt ist zum limitierenden Faktor für das Algenwachstum zu werden als Phosphor.

Da das Phytoplankton im Neckar durch Diatomeen (Kieselalgen) dominiert wird, ist Silizium (Si) als weiterer möglicherweise limitierend wirkender Nährstoff zu berücksichtigen, der im Gegensatz zu N und P allerdings kaum anthropogen beeinflusst wird. Silizium wurde nicht in die Box- und Whisker-Plots aufgenommen, da für diesen Stoff nur Messungen aus den Jahren 1997 und 1998 vorlagen. In diesen beiden Jahren lagen die Si Konzentrationen zumeist im Bereich von 2,5 bis 3 mg/L, wobei allerdings minimale Konzentrationen von 0,1 mg/L gemessen wurden. Da die Halbsättigungskonzentrationen von Si für Kieselalgen bei etwa 70 $\mu\text{g/L}$ liegen (Chapra 1997; Pöhlmann et al. 1989; Schöl et al. 2002; Thomann und Mueller 1987), ist in diesen Extremfällen mit einer deutlichen Reduktion des Kieselalgenwachstums durch Siliziummangel zu rechnen.

Auftreten und Häufigkeit extremer Sauerstoffkonzentrationen

Für eine weitergehende Charakterisierung der Sauerstoffkonzentrationen wurden diese zunächst in einen akzeptablen Bereich sowie inakzeptable Bereiche extremer Unter- und Übersättigung klassifiziert. Sauerstoffmangel kann die aquatische Lebensgemeinschaft in allen trophischen Stufen und Entwicklungsstadien nachhaltig beeinträchtigen (Schwörbel 1993). Vor diesem Hintergrund und unter Abwägung zahlreicher empirischer Erkenntnisse geben die LAWA-Richtlinien vor, dass das 5-Perzentil der Sauerstoffkonzentrationen über 6 mg/L liegen muss, um den Anforderungen der Gewässergüteklasse II zu genügen. In Anlehnung an diese Zielvorgabe wurden Sauerstoffkonzentrationen kleiner 6 mg/L als inakzeptable Untersättigungen klassifiziert. Hohe Sauerstoffübersättigungen sind vor allem deshalb ökologisch bedenklich weil sie zum Ausperlen von Gasblasen in Körpergewebe und -kanälen der Organismen mit letalen Folgen führen können (Gasblasenkrankheit) (Fickeisen und Schneider 1976). Hinsichtlich der Übersättigung gibt es keine klaren Richtlinien von der LAWA. Statzner (1986) kommt auf der Grundlage zahlreicher Literaturdaten zu dem Schluss, dass Sauerstoffsättigungen von 120% nicht überschritten werden sollten, um die aquatische Biozönose nicht nachhaltig zu schädigen. In Anlehnung an diese Befunde wurden Sauerstoffsättigungen über 120% als inakzeptable Übersättigungen klassifiziert.

Mit Hilfe dieser ad hoc „Grenzwerte“ wurden die Anzahl der Tage und der getrennten Ereignisse mit inakzeptablen Sauerstoffüber- und -untersättigungen für die Registrierstationen im Neckar ermittelt. Ausgangspunkt waren hierbei die an den Registrierstationen erhobenen Tagesmittelwerte der Sauerstoffgehalte. Als Kriterium für ein getrenntes Ereignis galt, dass es sich um Extrema handeln musste, die deutlich von vorhergehenden oder nachfolgenden Perioden mit Extremwerten getrennt waren. Wenn innerhalb einer zusammenhängenden Periode mit extremen Sauerstoffwerten der Grenzwert nur an einzelnen Tagen unter- bzw. überschritten wurde, so wurde dies nicht als getrenntes Ereignis betrachtet. Die Ergebnisse für die Jahre 1991 bis 1998 sind in Abbildung 5.4 dargestellt. Darüber hinaus wurden auf Grundlage der Tagesmittelwerte Dauerlinien der Sauerstoffkonzentrationen erstellt. In Abbildung 5.5 sind sowohl die mittleren Dauerlinien der Jahre 1993 bis 1998 als auch die Dauerlinien der einzelnen Jahre für die Registrierstationen Poppenweiler, Rockenau und Mannheim dargestellt

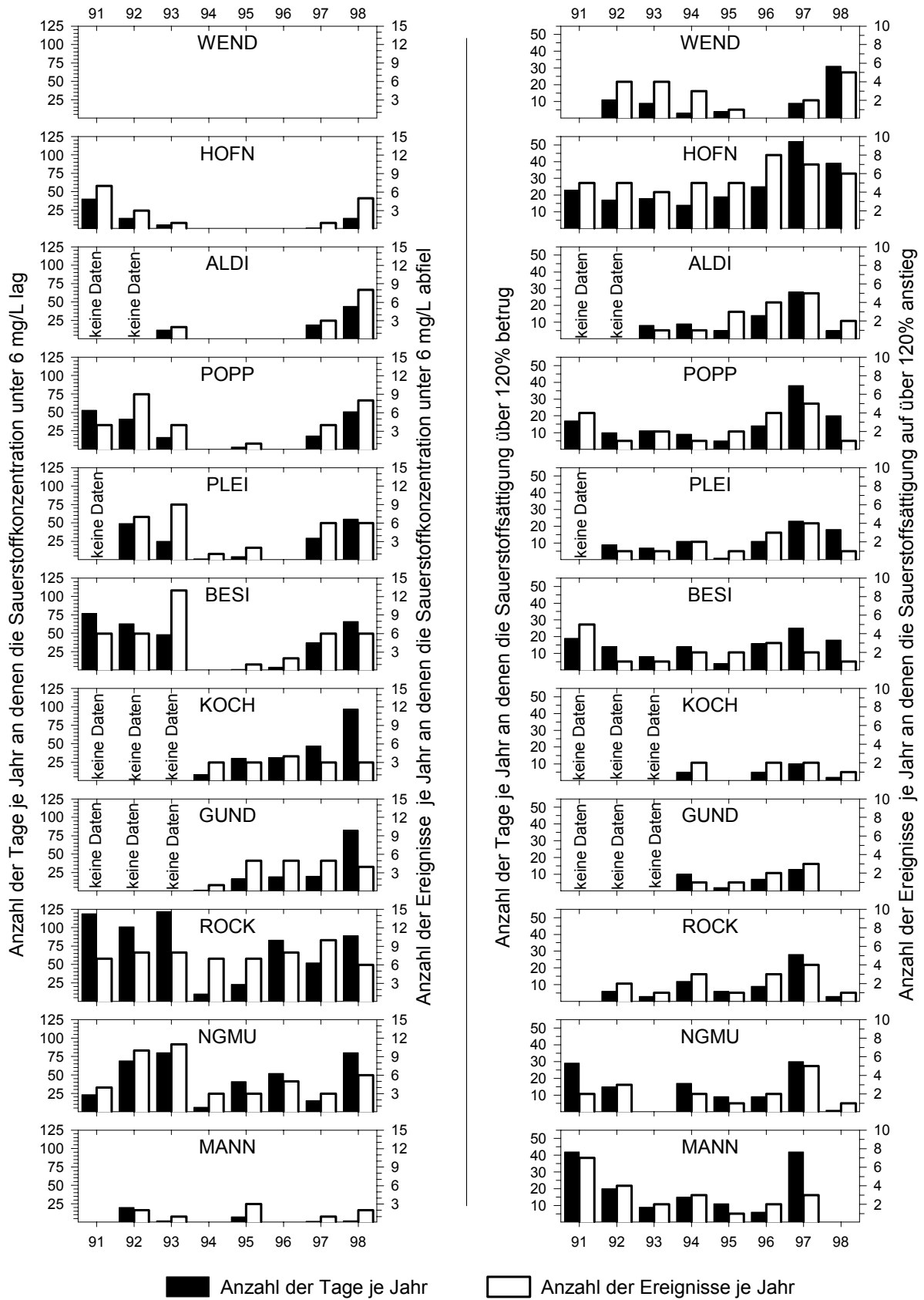


Abb. 5.4: Anzahl der Tage und Ereignisse je Jahr an denen die Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen unter 6 mg/L lagen (links) bzw. die Sauerstoffsättigung 120% überschritt (rechts).

Aus Abbildung 5.4 wird deutlich, dass an allen Registrierstationen im Bereich der Bundeswasserstraße Neckar Situationen mit O_2 Gehalten unter 6 mg/L und über 120% Sättigung auftreten. Lediglich bei Wendlingen, das oberstrom des stauregulierten Bereichs liegt, wurden zwischen 1991 und 1998 keine Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentration unter 6 mg/L detektiert.

Die Station Rockenau fällt durch häufiges Unterschreiten der 6 mg/L Grenze auf, womit sich die Probleme die sich bereits in Abbildung 5.2 andeuteten bestätigen. Da an dieser Station weder die Primärbelastung mit BSB_5 und NH_4 noch die Sekundärbelastung mit Chl-a auffällig hoch ist (Abb. 5.3), können die häufigen extrem niedrigen Sauerstoffgehalte nicht hierauf zurückgeführt werden. In Rockenau sind lediglich die Temperaturwerte im Vergleich zu den anderen Stationen etwas erhöht, was auf die Lage direkt unterhalb des Kernkraftwerkes Obrigheim zurückzuführen ist. Die häufigen Untersättigungen sind vermutlich zum Teil auf die infolge der hohen Wassertemperaturen beschleunigten sauerstoffzehrenden Abbauprozesse zurückzuführen. Die kritischen Sauerstoffuntersättigungen im Bereich zwischen dem KKW Obrigheim und Neckargmünd werden aber zukünftig durch neue wasserrechtliche Auflagen entschärft werden. Gemäß diesen Auflagen muss das Kühlwasser (des mit keinem Kühlturm ausgestatteten) Kernkraftwerkes Obrigheim zumindest ab Sauerstoffgehalten von 5 mg/L belüftet werden, so dass in diesen Fällen mit einer deutlichen Aufstockung der Sauerstoffgehalte zu rechnen ist (Pinter 2000).

Ausgeprägte Übersättigungen treten hingegen besonders häufig im Neckar bei Hofen auf. Nahe der Mündung bei Mannheim sind hohe Übersättigungen auch recht häufig, wohingegen kritische Situationen mit Sauerstoffgehalten unter 6 mg/L nur sehr selten auftreten.

Insbesondere hinsichtlich der Häufigkeit von starken Untersättigungen (aber auch bei den Übersättigungen) ist im Abschnitt zwischen Hofen und Besigheim ein ähnliches Muster über die Jahre hinweg zu beobachten: Zwischen 1994 und 1996 traten nur wenige bzw. keine Situationen mit O_2 Konzentrationen unter 6 mg/L auf. In den Jahren davor sowie 1997 und insbesondere 1998 waren kritische Untersättigungen hingegen recht häufig. Das Jahr 1998 stellte mit Ausnahme von Mannheim an allen Stationen ein Jahr mit extrem häufigen Grenzwertunterschreitungen dar. Ansonsten wird an den Stationen unterstrom von Besigheim das zwischen Hofen und Besigheim detektierte Muster jedoch nicht deutlich. Dies ist ein Hinweis darauf, dass im Abschnitt zwischen Stuttgart und der Enzmündung (Hofen bis Besigheim) der Sauerstoffhaushalt durch andere Faktoren gesteuert wird als im Bereich unterstrom der Enzmündung. Dies ist sicherlich zumindest teilweise durch den Einfluss der bedeutenden Nebenflüsse Enz, Kocher und Jagst bedingt.

Aus Abbildung 5.5 wird deutlich, dass die Dauerlinien der Einzeljahre in Mannheim insbesondere im Bereich geringer Sauerstoffkonzentrationen nahe bei der mittleren Dauerlinie liegen. Auch bei höheren Sauerstoffkonzentrationen sind in Mannheim die Unterschiede zwischen den Jahren relativ gering. Lediglich das Jahr 1997 weicht bei sehr hohen Sauerstoffgehalten deutlich von der mittleren Dauerlinie ab.

Im Gegensatz hierzu treten in Rockenau die deutlichsten Unterschiede zwischen den Jahren bei Sauerstoffkonzentrationen kleiner 8 mg/L auf. Auffällige Abweichungen nach unten treten insbesondere im Jahr 1993 zu Tage, an dem auch das absolute Sauerstoffminimum mit 2,8 mg/L auftrat. Im Bereich hoher Sauerstoffgehalte zeigte wie in Mannheim das 1997 die deutlichsten Abweichungen nach oben.

Auch in Poppenweiler werden insbesondere bei Sauerstoffgehalten unter 8 mg/L deutliche Unterschiede zwischen den einzelnen Jahren ersichtlich: Die Jahre 1993, 1997 und 1998 kommen unter der mittleren Dauerlinie zu liegen, während 1994, 1995 und 1996 über der mittleren Dauerlinie liegen und 6 mg/L kaum unterschreiten. Das Jahr 1998 fällt sowohl durch extrem hohe Sauerstoffgehalte als auch durch eine sehr lange Dauer mit geringen Sauerstoffgehalten auf. Die absoluten Sauerstoffminima treten in Poppenweiler allerdings 1993 mit 3,6 mg/L und 1997 mit 3,8 mg/L auf.

Mit den Jahren 1993 bis 1998 werden daher offenkundig drei Jahre mit relativ wenigen Problemen bezüglich des Sauerstoffhaushalts und drei Jahre mit zum Teil häufigen und langanhaltenden Unter- und Überschreitungen der Grenzwerte erfasst. Dieser Zeitraum wurde daher als repräsentativ für den aktuellen Zustand erachtet und für die weiterführende Analyse ausgewählt.

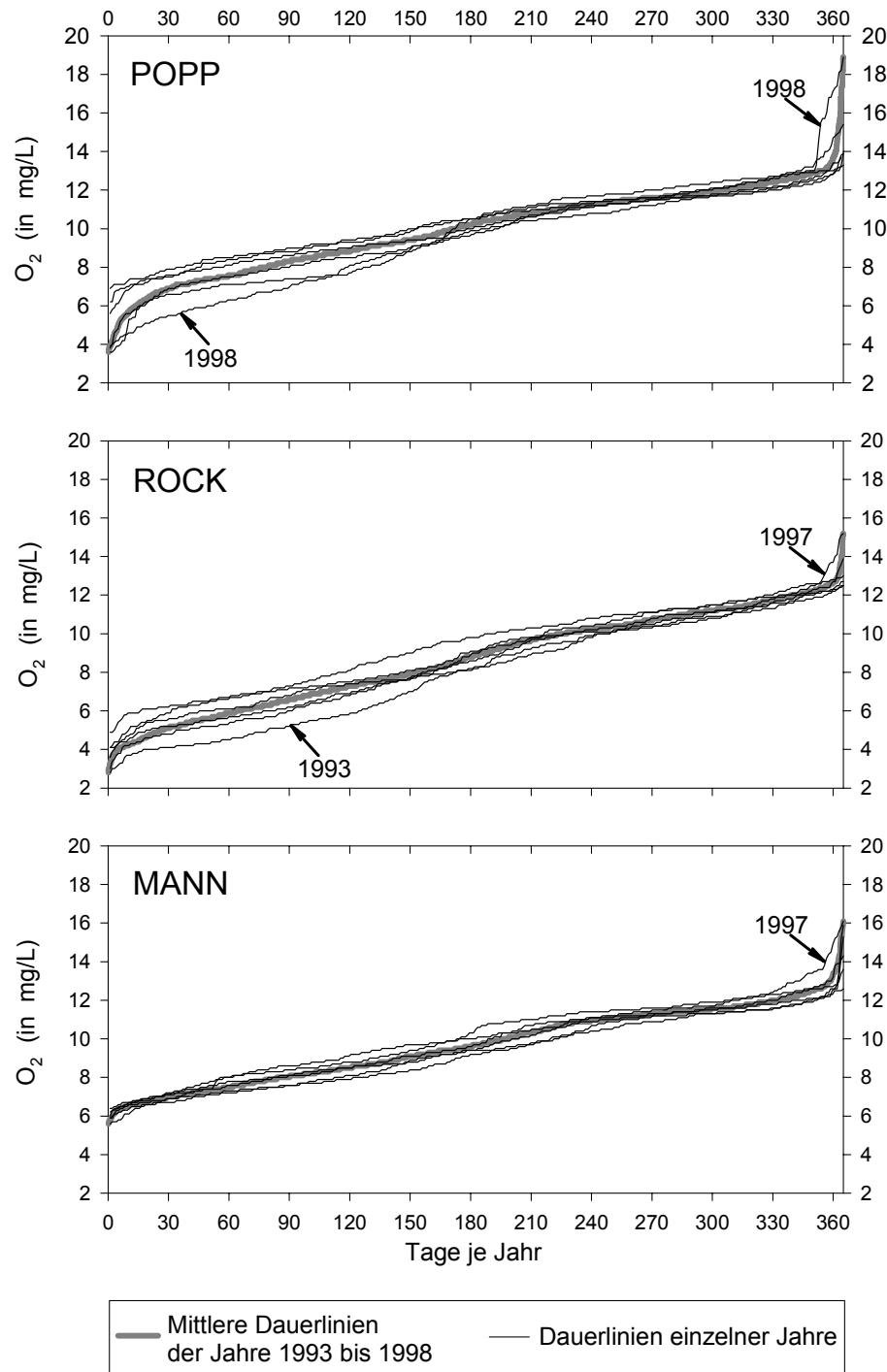


Abb. 5.5: Mittlere Dauerlinien der Sauerstoffkonzentrationen der Jahre 1993 bis 1998 sowie Dauerlinien der Einzeljahre an den Registrierstationen Poppenweiler, Rockenau und Mannheim.

Die deutlichen Unterschiede zwischen den einzelnen Jahren, die sowohl aus der klassifizierenden Darstellung in Abbildung 5.4 als auch aus den Dauerlinien deutlich werden, werden wohl in erster Linie durch die sommerlichen Witterungs- und Abflussverhältnisse in den einzelnen Jahren geprägt: Die Sommerhalbjahre 1994 bis 1996 waren recht feucht und der Abfluss stieg immer wieder deutlich über MQ an. Die Jahre 1993, 1997 und 1998 waren hingegen durch langanhaltende Schönwetterperioden geprägt. Der Abfluss im Neckar lag während der Sommerhalbjahre 1993 und 1998 kontinuierlich im Bereich oder unterhalb von MQ, während 1997 im Juli ein kleines Hochwasser auftrat (Abb. 5.6). Diese langanhaltenden sommerlichen Niedrigwasserperioden verringern den physikalischen Sauerstoffeintrag, begünstigen die

Sekundärbelastung durch übermäßiges Algenwachstum und bedingen hohe Wassertemperaturen und somit hohe Abbauraten. Hieraus wird deutlich, dass die Witterungs- und Abflussverhältnisse das Ausmaß und die Dauer extremer Sauerstoffdepressionen aber auch von Übersättigungen maßgeblich mit beeinflussen.

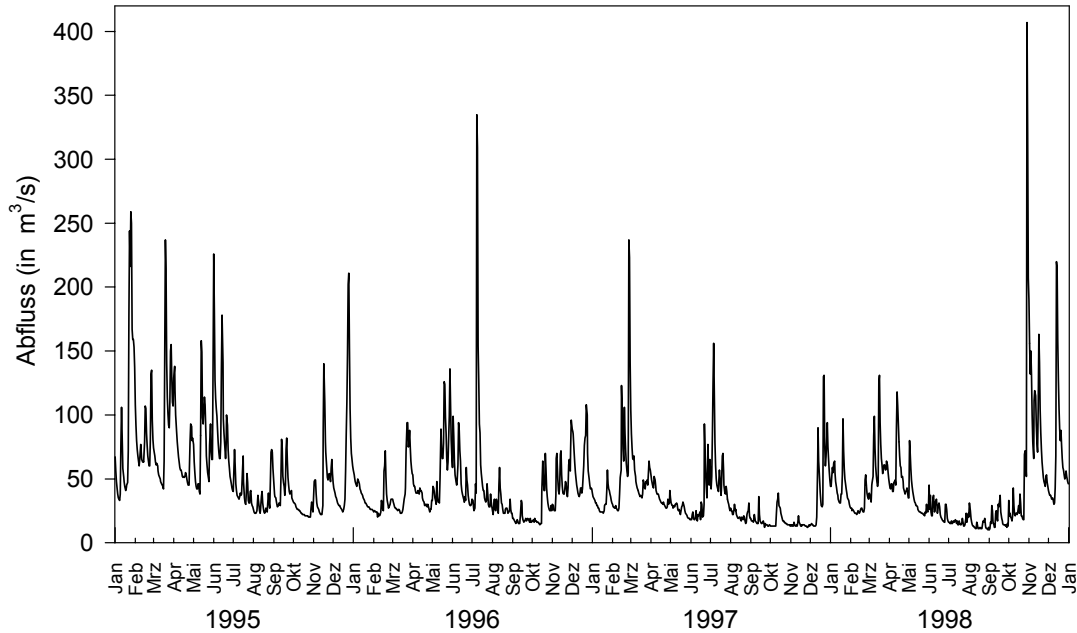


Abb. 5.6: Tagesabflüsse am Pegel Plochingen während der Jahre 1995 bis 1998.

Zeitlich-räumliche Muster der Sauerstoffkonzentrationen

Um einen Überblick über die raum-zeitliche Dynamik des Sauerstoffgehalts zu erlangen, wurden die Tageswerte der Registrierstationen zeitlich und räumlich linear interpoliert und Isolinien darstellungen der Sauerstoffkonzentrationen erzeugt. Diese sind für die Jahre 1995 bis 1998 in den Abbildungen 5.7 und 5.8 dargestellt. Infolge der bilinearen Interpolation stellen diese Darstellungen kein naturgetreues Abbild der wirklichen Situation dar, hierfür wäre vielmehr ein Gütesimulationsmodell notwendig, das lokale Einflussfaktoren wie Punktquellen mit berücksichtigt. Zudem erfordert die Isolinien darstellung eine Glättung der Daten, so dass kurzandauernde und zugleich kleinräumige Extremwerte nicht abgebildet werden können. Trotz dieser Einschränkungen erlauben die Abbildungen 5.7 und 5.8 einen qualitativen Überblick über das raum-zeitliche Muster der Sauerstoffkonzentrationen im Neckar.

Allgemein spiegeln die Grundzüge der Sauerstoffkonzentrationsmuster den Jahresgang der Wassertemperatur und das Abflussregime wider. Im Winterhalbjahr von November bis März herrschen im Allgemeinen Sauerstoffkonzentrationen von 10 mg/L bis 12 mg/L vor, die nahe der Sättigung liegen. Im Winterhalbjahr kann die Sekundärbelastung nicht zum Tragen kommen, da niedrige Temperaturen und mangelndes Strahlungsangebot kein übermäßiges Algenwachstum erlauben. Die Wirkung der Primärbelastung wird durch die infolge der geringen Temperaturen stark reduzierten Abbauraten ebenfalls minimiert. Zudem wird der Sauerstoffaustausch mit der Atmosphäre durch die höheren Abflüsse intensiviert. Zum einen ist der Gasaustausch auf der Fließstrecke bei erhöhter Turbulenz besser. Zum anderen kommt es zum Wehrüberfall, wenn der Abfluss die Durchflusskapazität der Wasserkraftwerke übersteigt.

Geringe Sauerstoffkonzentrationen unter 6 mg/L treten prinzipiell nur in den Sommerhalbjahren zwischen April und Oktober auf. In den allgemein eher als unkritisch zu bewertenden Jahren 1995 und 1996 wird das Auftreten solcher Sauerstoffminima offensichtlich stark durch das sommerliche Abflussgeschehen geprägt. So herrschten 1995 bis Juli beständig deutlich erhöhte Abflüsse vor, zu einem längeranhaltenden Absinken unter MQ kam es erst Mitte Juli (Abb. 5.6). Dies spiegelt sich in den Sauerstoffkonzentrationen

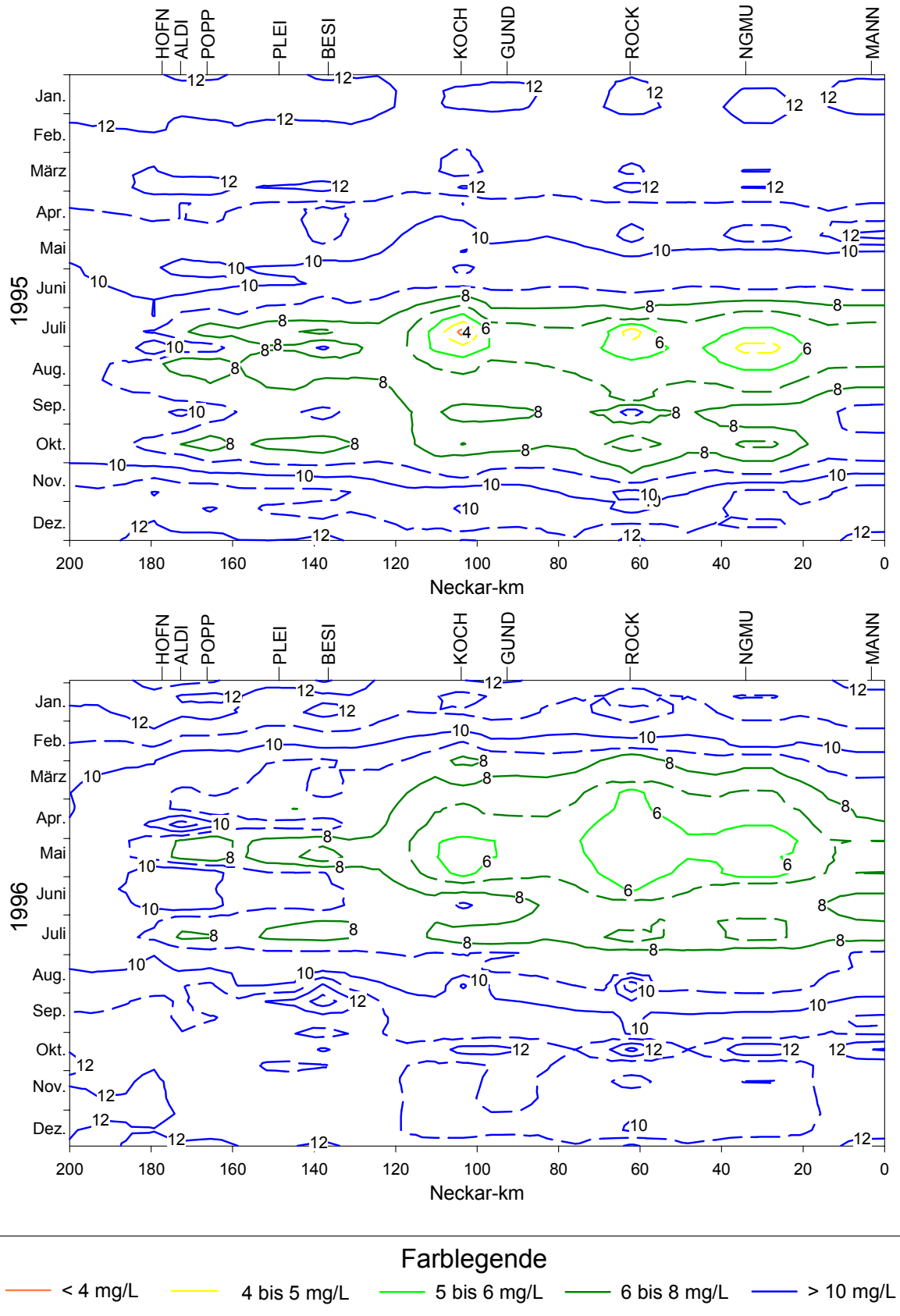


Abb. 5.7: Zeitlich-räumliche Strukturen der Sauerstoffgehalte im Neckar in den Jahren 1995 (oben) und 1996 (unten).

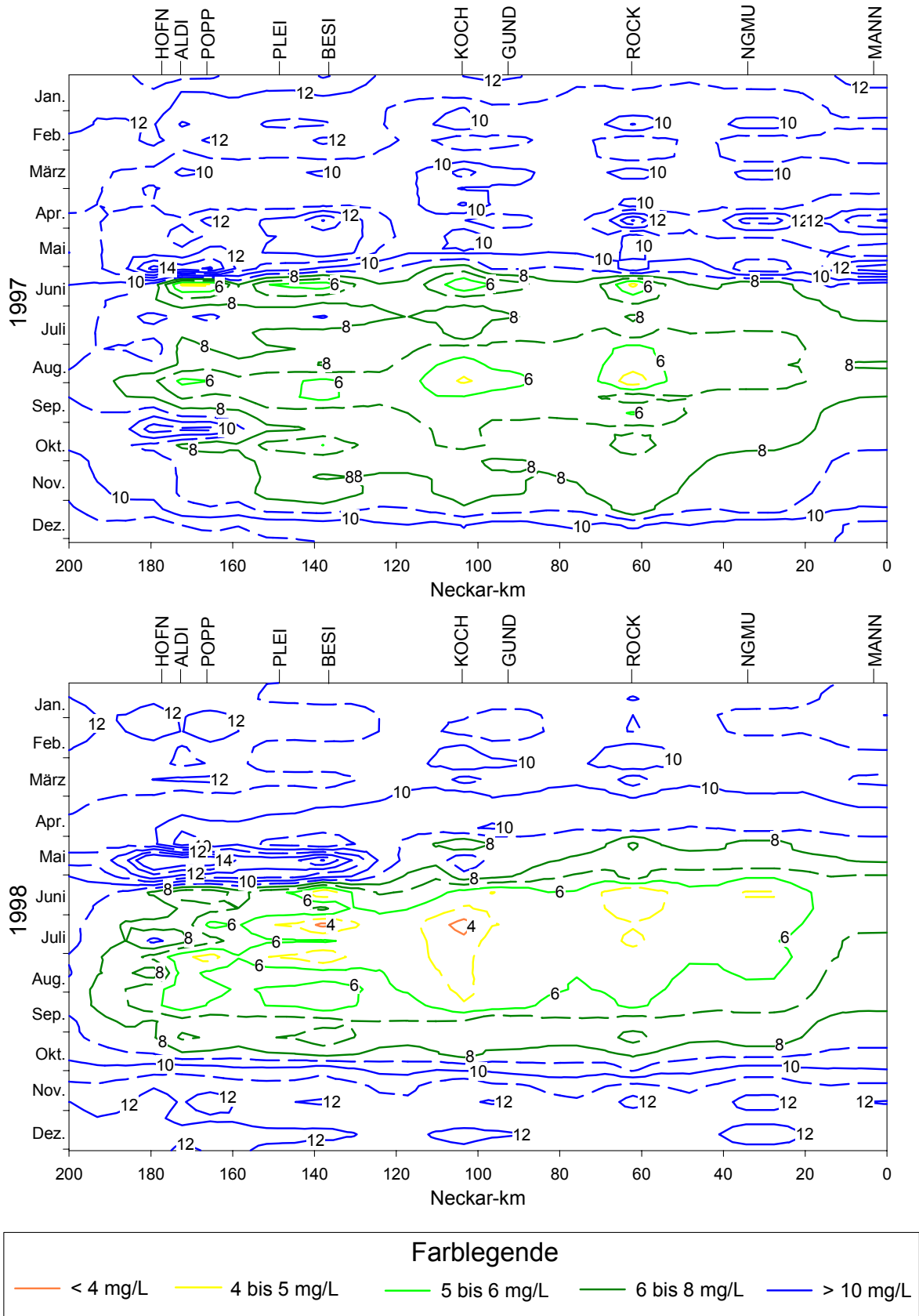


Abb. 5.8: Zeitlich-räumliche Strukturen der Sauerstoffgehalte im Neckar in den Jahren 1997 (oben) und 1998 (unten).

deutlich wider. Konzentrationen unter 6 mg/L traten erst ab Mitte Juli und nur unterstrom der Enzmündung auf. 1996 lagen hingegen im Frühsommer relativ geringe Abflüsse vor, während es Ende Mai und im Juli zu deutlichen Abflusserhöhungen kam (Abb. 5.6). Entsprechend traten in diesem Jahr die minimalen Sauerstoffkonzentrationen im April und Mai auf, wobei 6 mg/L wiederum nur unterstrom von Besigheim unterschritten wurden.

In den Jahren 1997 und 1998 ergeben sich deutlich komplexere Muster der Sauerstoffkonzentrationen (Abb. 5.8). Im Mai und Juni 1997 traten insbesondere im Flussabschnitt zwischen Stuttgart und Besigheim deutlich erhöhte Sauerstoffkonzentrationen bis über 14 mg/L auf. Hieran schließt sich ein sehr rascher, ausgeprägter Rückgang der Sauerstoffgehalte bis unter 5 mg/L an. Infolge der dann erhöhten Abflüsse liegen die Sauerstoffkonzentrationen im Juli wieder bei 8 mg/L, was bei den zu jener Zeit vorherrschenden Wassertemperaturen von ca. 20°C in etwa dem Sättigungswert entspricht. Nach dem Abflussergebnis tritt ein zweites Sauerstoffminimum Ende August, Anfang September auf, bei dem wiederum Sauerstoffkonzentrationen unter 5 mg/L beobachtet wurden.

Das raum-zeitliche Muster des Jahres 1998 ähnelt zunächst dem von 1997: Deutliche Übersättigungen oberhalb der Enzmündung im Mai, an die sich ein rascher Abfall der Sauerstoffgehalte im Juni anschließt. In diesem Jahr erholen sich die Sauerstoffgehalte anschließend jedoch nicht nachhaltig, da anhaltend Niedrigwasser vorherrscht. Daher herrschen bei kurzfristigen Schwankungen bis in den September hinein Sauerstoffkonzentrationen unter 6 mg/L im gesamten Bereich zwischen Hofen und Neckargmünd vor. Zu einer nachhaltigen Verbesserung der Situation kommt es erst mit dem Hochwasser Ende Oktober (Abb. 5.6 und 5.8).

Sowohl Sauerstoffminima als auch extreme Übersättigungen sind im gesamten Neckar offenkundig an sommerliche Niedrigwasserperioden gebunden. Damit spielt auch das längerfristige hydrologische Geschehen als Steuergröße für den sommerlichen Basisabfluss eine mitentscheidende Rolle für die Wahrscheinlichkeit und Häufigkeit extremer Sauerstoffgehalte im Neckar. In feuchteren Perioden, in denen der grundwasserbürtige Basisabfluss ausreicht, um im Neckar mittlere Abflüsse zu gewährleisten, sind extreme Sauerstoffgehalte relativ unwahrscheinlich. Treffen hingegen eine über mehrere Jahre hinweg unterdurchschnittliche Grundwasserneubildung und langanhaltende sommerliche Trockenperioden zusammen, dann können Situationen wie im Sommer 1998 auftreten.

Die schnelle Abfolge extremer Sauerstoffübersättigungen und anschließender Sauerstoffdepressionen deutet auf die maßgebliche Rolle des Phytoplanktons für die Extremwerte des Sauerstoffs hin. Insbesondere im Flussabschnitt zwischen Stuttgart und der Enzmündung (Hofen bis Besigheim) scheinen ausgeprägte Sauerstoffdepressionen an die Sekundärbelastung gebunden zu sein (siehe unten). Im unterstromigen Abschnitt, vor allem zwischen Rockenau und Neckargmünd sind Sauerstoffminima unter 6 mg/L offenbar auch ohne extreme Sekundärbelastungen möglich (Abb. 5.4 und 5.7).

Jahresgänge der Sauerstoff- und Chlorophyllkonzentrationen

Um den Zusammenhang zwischen der Phytoplanktondynamik und dem Sauerstoffhaushalt näher zu beleuchten, werden in den Abbildungen 5.9 und 5.10 die Jahresgänge des Chl-a und der Sauerstoffkonzentration im Neckar bei Poppenweiler für die Jahre 1997 und 1998 gegenübergestellt. Als Indikator für den möglichen Einfluss von Mischwasserentlastungen sind zudem die täglichen Niederschlagshöhen an der Klimastation Stuttgart-Neckartal dargestellt. Bei der Interpretation ist zu beachten, dass sich die Achsenkalierungen der Ordinaten in den beiden Abbildungen unterscheiden.

Aus Abbildung 5.9 wird deutlich, dass sich von April bis Mitte Juni eine große Phytoplanktonpopulation aufgebaut hat. Im selben Zeitraum konnte auch ein deutlicher Rückgang der Phosphat- und Silikatkonzentrationen ermittelt werden (Daten nicht dargestellt), wobei jedoch keiner der Nährstoffe auf Konzentrationen absank, die das Phytoplanktonwachstum merklich limitieren (Haag et al. 2000b). Wenngleich für 1997 keine Bestimmung der Algenspezies vorliegt, weist der Konzentrationsgang von Silikat darauf hin, dass wie in früheren Jahren (vgl. Backhaus und Matthias 1997) das Phytoplankton durch Kieselalgen dominiert wurde. Infolge der intensiven Primärproduktion kam es im Mai und Juni zu sehr hohen Sauerstoffkonzentrationen mit deutlichen Übersättigungen. Durch das Wechselspiel der bei Tageslicht dominierenden Photosynthese und der nachts vorherrschenden Respiration, ergaben sich in dieser Zeit ausgeprägte Tag-Nacht-Schwankungen der Sauerstoffgehalte. Mitte Juni stieg die Wassertemperatur inner-

halb weniger Tage von ca. 18°C auf über 22°C an, wodurch sich die Wachstumsbedingungen für die Kieselalgen merklich verschlechterten (vgl. Abb. 2.7). Zudem kam es anschließend zu einem Witterungseinbruch, in dessen Folge sich die Lichtverhältnisse für das Algenwachstum deutlich verschlechterten. Als weiterer maßgeblicher Faktor hat zu dieser Zeit möglicherweise der Fraßdruck durch das nachwachsende herbivore Zooplankton stark zugenommen. Hierdurch kam es zum Zusammenbruch der Algenpopulation, in dessen Folge die Respiration und der mikrobielle Abbau der algenbürtigen organischen Substanz zu einem drastischen Absinken der Sauerstoffkonzentration führte. Möglicherweise trug ein durch das intensive Niederschlagsereignis Mitte Juni bedingter Zehrstoffeintrag infolge von Mischwasserentlastungen mit zu der beobachteten Sauerstoffdepression bei. Die Bedeutung der Sekundärbelastung wird jedoch dadurch unterstrichen, dass die Chl-a-Gehalte und die an den selben Proben ermittelten BSB₁-Werte im Neckar signifikant positiv korreliert sind. Aus einer Regression ergibt sich, dass 100 µg/L Chl-a im Mittel zu einer Erhöhung des BSB₁ um 2,4 mg/L führen (Haag et al. 2000b). Zusammenhänge zwischen Chl-a und BSB₅ mit ähnlichen Steigungen wurden für weitere mitteleuropäische Flüsse unterschiedlichster Größe berichtet (siehe Kapitel 2.4.3). Auf der Grundlage des Zusammenhangs zwischen BSB und Chl-a kann der Anteil der Sekundärbelastung an der gesamten Belastung mit sauerstoffzehrenden Stoffen abgeschätzt werden. Demnach war die algenbürtige Sekundärbelastung Mitte Juni 1997 für gut zwei Drittel der gesamten BSB-Belastung im Neckar verantwortlich. Demnach ist die beobachtete Sauerstoffdepression in erster Linie auf die Belastung durch Algenrespiration bzw. die tote Algenbiomasse zurückzuführen. Ein möglicher zusätzlicher Beitrag von Mischwasserentlastungen ist aber nicht auszuschließen. Auch bei dem lokalen Sauerstoffminimum im Oktober scheint ein Zusammenhang mit der Entwicklung des Phytoplanktons gegeben.

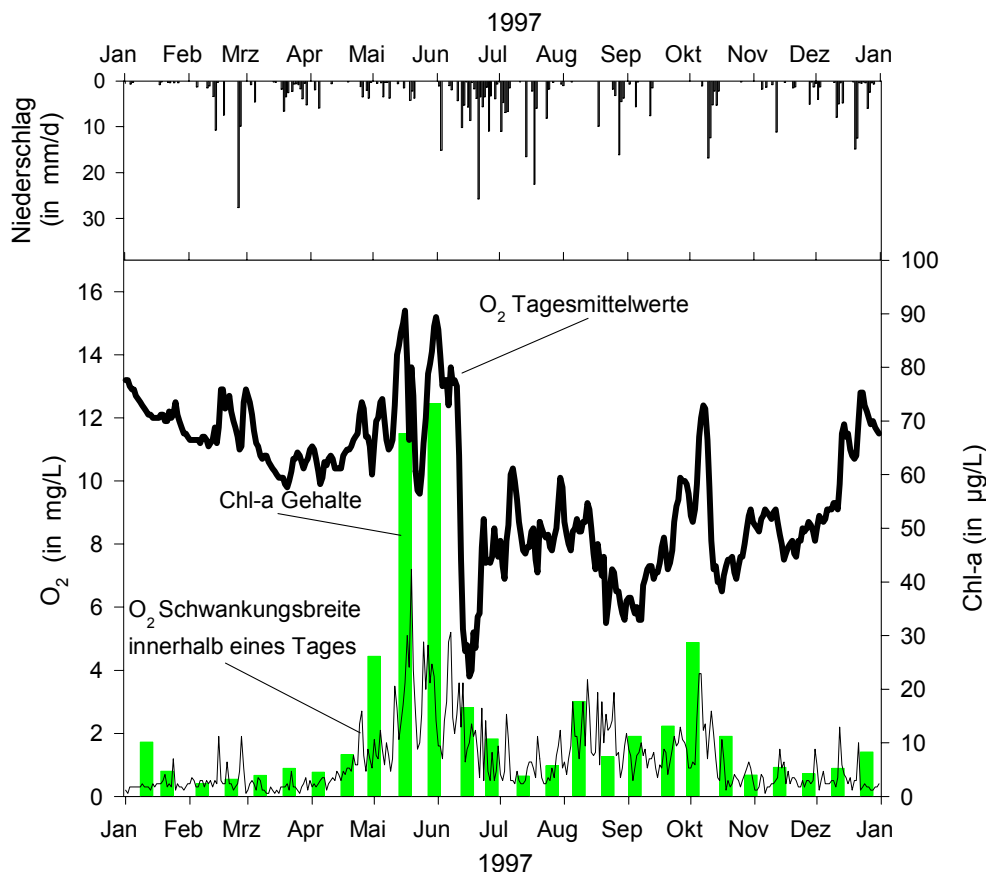


Abb. 5.9: Tagesmittelwerte und Schwankungsbreiten der Sauerstoffkonzentrationen sowie Chl-a Gehalte im Neckar bei Poppenweiler und tägliche Niederschlagshöhen an der Klimastation Stuttgart-Neckartal im Jahr 1997.

Im Mai und Juni 1998 stellte sich die Situation ähnlich wie 1997 dar (Abb. 5.10): Bei noch höheren Chl-a Gehalten wurden noch höhere Sauerstoffübersättigungen und Tagesschwankungen verzeichnet. Infolge

des Zusammenbruchs der Algenpopulation kam es Anfang Juni zu einem ersten Einbruch der Sauerstoffwerte. Im Gegensatz zum Jahr 1997 erholte sich der Sauerstoffgehalt 1998 bei anhaltendem Niedrigwasser den gesamten Sommer über nicht nachhaltig. Aktueller Auslöser des absoluten Minimums Ende Juli, waren vermutlich nicht nur der erneute Zusammenbruch einer kleineren Algenpopulation, sondern auch Mischwasserentlastungen infolge des hier verzeichneten kurzen sehr intensiven Niederschlagsereignisses.

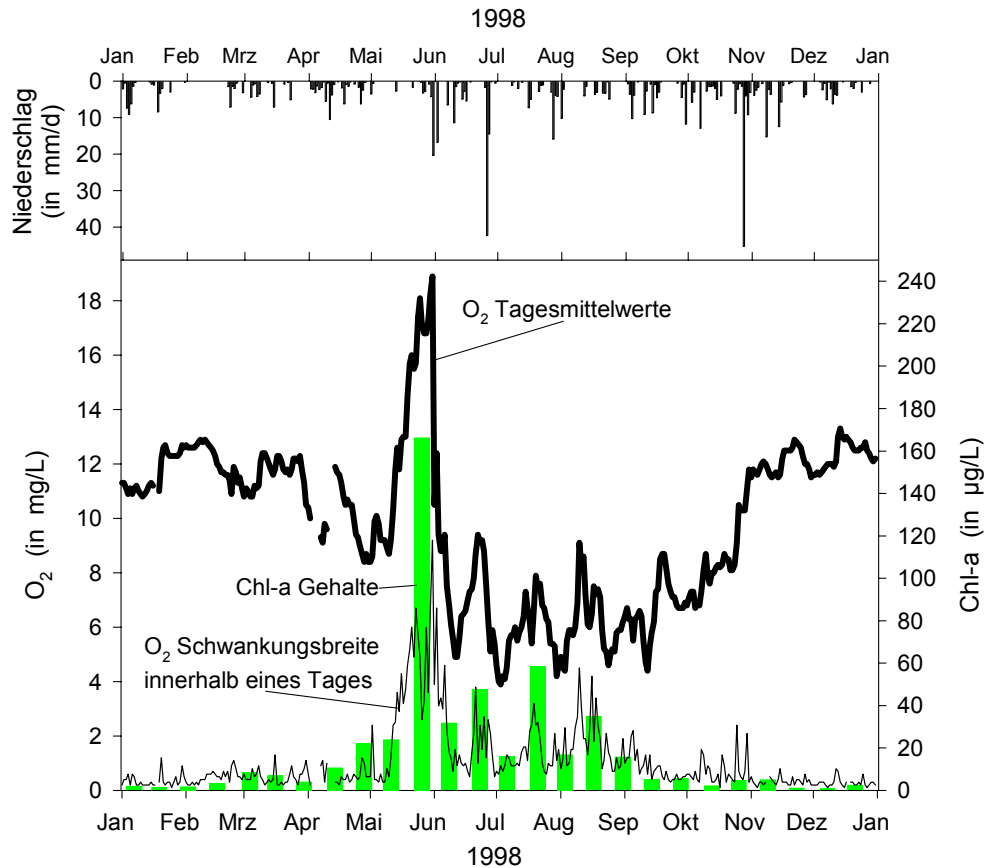


Abb. 5.10: Tagesmittelwerte und Schwankungsbreiten der Sauerstoffkonzentrationen sowie Chl-a Gehalte im Neckar bei Poppenweiler und tägliche Niederschlagshöhen an der Klimastation Stuttgart-Neckartal im Jahr 1998.

Offensichtlich kann der über lange Zeiträume stabile Sauerstoffhaushalt infolge seiner engen Kopplung an die Phytoplanktodynamik rasch instabil werden. Da der Großteil der Algenbiomasse sehr leicht abbaubar ist (Backhaus und Matthias, 1997), kann es nach dem Zusammenbruch einer „Algenblüte“ zu einem raschen und intensiven Einbruch der Sauerstoffkonzentrationen kommen. Bei anhaltendem Niedrigwasser, können die Sauerstoffgehalte wie im Jahr 1998 nachfolgend offenbar langfristig instabil bleiben. Als ökologisch bedenklich ist nicht nur der Abfall auf Sauerstoffgehalte deutlich unter den LAWA Zielwert von 6 mg/L einzustufen, sondern auch die starke Übersättigung während der „Algenblüten“. Allerdings ist zu beachten, dass die O_2 Konzentrationen nahe der Wasseroberfläche ermittelt wurden. Da bei geringen Abflüssen durchaus vertikale Sauerstoffgradienten mit den höchsten Werten nahe der Oberfläche auftreten können, sind in größeren Tiefen keine so hohen Übersättigungen zu erwarten. Bislang wurde auch über keine Schädigung der Fischfauna berichtet, die auf die Gasblasenkrankheit zurückzuführen ist. Als vordringliches Problem sind daher die starken Sauerstoffdepressionen anzusehen.

5.3 Identifikation und Bewertung der maßgeblichen Prozesse

5.3.1 Methodik

Daten

Zur quantitativen empirischen Prozessidentifikation wurde als multivariates Verfahren der explorativen Statistik die Hauptkomponentenanalyse (HKA) ausgewählt. Auf Grundlage der oben beschriebenen Charakterisierung des Stoffhaushalts im Neckar, wurde der Zeitraum von 1993 bis 1998 als repräsentativ für den aktuellen Zustand des Sauerstoffhaushalts erachtet. Entsprechend wurden Gewässergütedaten aus diesem Zeitraum in die statistische Analyse einbezogen. Um die maßgeblichen Prozesse auf möglichst breiter Basis untersuchen zu können, wurden alle jene verfügbaren Gewässergüteparameter verwendet, die den Sauerstoffhaushalt direkt oder indirekt beeinflussen bzw. von diesem beeinflusst werden. Im einzelnen sind das die folgenden 11 Kenngrößen: Abfluss (Q), Wassertemperatur (T_w), Elektrische Leitfähigkeit (Lf), pH-Wert (pH), biochemischer Sauerstoffbedarf in 5 Tagen (BSB_5), Ammonium-Stickstoff (NH_4), Nitrit-Stickstoff (NO_2), Nitrat-Stickstoff (NO_3), Gesamtorthophosphat-Phosphor (PO_4), Chlorophyll a (Chl-a) und die Sauerstoffsättigung (O_2 -sat). Für Sauerstoff wurde der Sättigungswert verwendet, da die absolute Konzentration eine inhärente Korrelation mit der Wassertemperatur aufweist, was bei der HKA unerwünscht ist. Für die Jahre 1993 bis 1998 lagen zu diesen 11 Parametern nur an den folgenden Messstellen alle Daten vor: Deizisau (DEIZ), Poppenweiler (POPP), Besigheim (BESI), Kochendorf (KOCH), Rockenau (ROCK), Mannheim (MANN). Daher wurden diese sechs Probenahmestellen in die Analyse aufgenommen, wodurch gewährleistet ist, dass die Bundeswasserstraße in ihrer gesamten Länge von über 200 km einbezogen wurde.

Hauptkomponentenanalyse

Grundlegendes Ziel der HKA ist es, auf Grundlage der Interkorrelation der Parameterwerte, unkorrelierte lineare Kombinationen zu finden, mit denen der Großteil der Varianz aller Parameter erklärt werden kann. Diese als Hauptkomponenten bezeichneten linearen Kombinationen können als Hintergrundvariablen verstanden und gegebenenfalls den zugrundeliegenden steuernden Prozessen zugeordnet werden (Jolliffe 1986; Reyment und Jöreskog 1993).

Die HKA wurde sowohl auf die aus allen sechs Messstationen gepoolten Daten, als auch getrennt auf die Daten der einzelnen Stationen angewandt. Um eine einheitliche Gewichtung der unterschiedlichen Parameter zu gewährleisten, wurden zunächst alle Messreihen so skaliert, dass sie einen Mittelwert von Null und eine Standardabweichung von Eins aufwiesen. Mit Hilfe von SPSS 8.0 wurden anschließend m Hauptkomponenten (HK) extrahiert. Für die Anzahl der zu extrahierenden HKs wurde dabei das Kaiser-Guttman Kriterium gewählt, wonach der Eigenwert der letzten zu extrahierenden HK größer Eins sein muss, also mehr als die Varianz eines einzelnen Parameters erklärt. Anschließend wurden die linearen Kombinationen so rotiert, dass die einzelnen Parameter eine möglichst maximale Korrelation mit einer HK aufwiesen (Varimax Kriterium). Letztlich wurden somit die Ladungsmatrix \mathbf{A} (auch als Muster bezeichnet) und die (Faktor-)Wertematrix \mathbf{F} extrahiert.

Die Ladungsmatrix besteht aus m Spaltenvektoren $\mathbf{a}_1 \dots \mathbf{a}_m$, die die Ladungen der ursprünglichen Parameter auf die einzelnen HKs enthalten. Die Wertematrix besteht aus m Reihenvektoren $\mathbf{f}_1 \dots \mathbf{f}_m$, die die (Faktor-) Werte der einzelnen HKs enthalten. Die lineare Kombination $\mathbf{A} \times \mathbf{F}$ ergibt die Werte, die den einzelnen Parametern auf Grundlage aller extrahierten HKs zugewiesen werden. Parameterwerte, die mit einer einzelnen HK vorhergesagt werden, ergeben sich entsprechend aus $\mathbf{a}_i \times \mathbf{f}_i$. Die genannten Matrixoperationen wurden mit Hilfe von Matlab durchgeführt.

Die Ladung eines Parameters auf HK_i entspricht dem Pearson'schen Korrelationskoeffizienten (r) zwischen den gemessenen Parameterwerten und den durch HK_i (also $\mathbf{a}_i \times \mathbf{f}_i$) vorhergesagten Parameterwerten. Daher ist das Quadrat der Ladung eines Parameters auf HK_i gleich dem Anteil der beobachteten Varianz dieses Parameters, der durch HK_i erklärt wird (r^2). Die Höhe des Absolutwerts der Ladung ist also ein Maß dafür, wie stark ein Parameter durch die entsprechende HK beeinflusst wird. Das Vorzeichen gibt dabei lediglich die Richtung des Zusammenhangs im Verhältnis zu den anderen Parametern an. Durch die Multiplikation eines Ladungsvektors \mathbf{a}_i mit -1 verliert man daher keine Informationen.

Der Eigenwert einer HK entspricht der Summe der quadrierten Ladungen dieser HK. Entsprechend gibt der Quotient aus dem Eigenwert und der Anzahl der untersuchten Parameter an, wie groß der Varianzanteil aller Parameter ist, der durch diese HK erklärt wird.

Eliminierung externer Einflüsse: In Kapitel 4 wurde gezeigt, dass ein Großteil der für die Gewässergüteparameter beobachteten Varianz auf jahreszeitliche Temperatur- und Abflussschwankungen zurückzuführen ist. Da der Abfluss und die Wassertemperatur von den externen meteorologischen Bedingungen aufgeprägt werden, spiegelt ihr Einfluss auf die Gewässergüte nicht die gewässerinternen Stoffumsetzungen wider. In Analogie zu Petersen et al. (2001) werden der Abfluss und die Wassertemperatur daher als externe Einflüsse bezeichnet. Durch ähnliche Zusammenhänge zwischen einzelnen Parametern einerseits und dem Abfluss oder der Wassertemperatur andererseits, können lose Korrelationen zwischen Parametern erzeugt werden, die nicht durch gewässerinterne Umsetzungen bedingt sind. Um hieraus resultierende mögliche Fehlinterpretationen auszuschließen, wurden auch HKAs durchgeführt, bei denen der Einfluss der Wassertemperatur und des Abflusses zuvor eliminiert worden sind. Hierzu wurde zunächst der Einfluss des Abflusses auf die Parameterwerte mit LOWESS (siehe Kapitel 4.3) eliminiert. Anschließend wurde der Einfluss der Wassertemperatur auf die verbleibenden Residuen ebenfalls über LOWESS eliminiert. Die Hauptkomponentenanalyse wurde dann auf die resultierenden Residuen der verbleibenden 9 Parameter angewandt.

5.3.2 Ergebnisse und Diskussion

Hauptkomponentenanalyse der gepoolten Originaldaten

Die Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse der von allen 6 Stationen gepoolten Originaldaten sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst. Das Muster der Ladungsmatrix wird zudem aus Abbildung 5.11 ersichtlich.

Tab. 5.1: Ladungsmatrix und weiterführende Ergebnisse der Hauptkomponentenanalyse der gepoolten Originaldaten. Ladungen <0,3 sind nicht dargestellt, Ladungen >0,6 sind fett gedruckt.

Parameter	HK1	HK2	HK3	HK4	Durch die 4 HKs erklärter Varianzanteil des Parameters (in %)
Chl-a	0,60		0,65		84,4
BSB ₅				0,83	83,9
Lf		0,83			74,5
NH ₄			-0,53	0,66	75,1
NO ₂				0,63	54,6
NO ₃		0,80	-0,39		79,1
PO ₄	-0,65	0,38			63,0
pH	0,69				48,7
Tw	-0,35		0,85		85,3
O ₂ -sat	0,89				80,6
Q		-0,75			64,9
Eigenwerte der HKs	2,36	2,23	1,70	1,65	Durch die 4 HKs erklärter Varianzanteil aller Parameter (in %)
Durch die HKs erklärte Varianzanteile aller Parameter (in %)	21,5	20,3	15,5	15,0	72,3

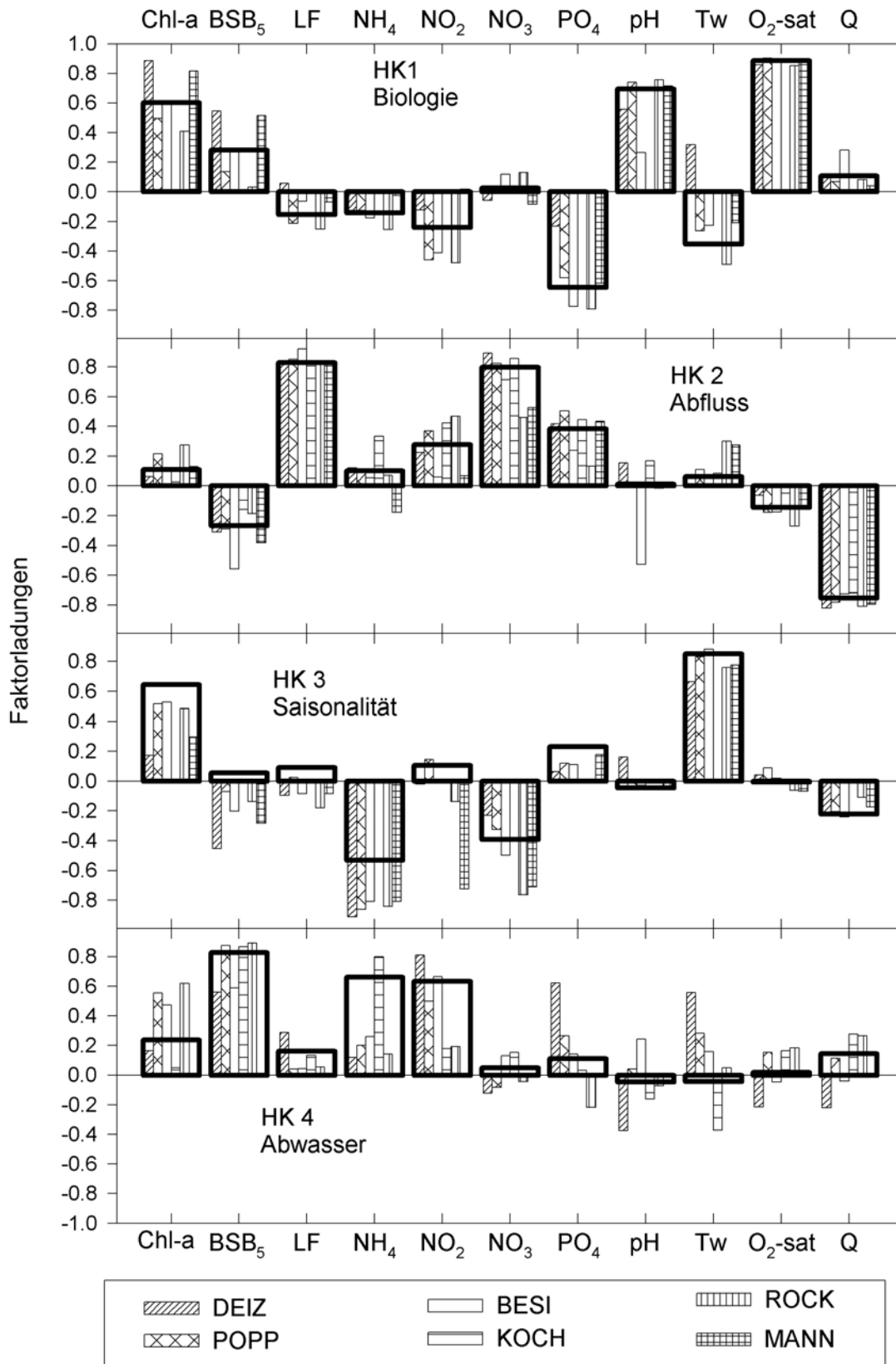


Abb. 5.11: Ladungsmuster der vier extrahierten Hauptkomponenten bei der HKA der gepoolten Daten von allen sechs Stationen (breite fett umrandete Balken) und bei der HKA an den einzelnen Probenahmestellen (schmale gemusterte Balken).

Die vier extrahierten Hauptkomponenten (HK) erklären zusammen 72,3 % der beobachteten zeitlichen Varianz aller 11 verwendeten Parameter. Für jeden Parameter, mit Ausnahme von NO_2 und pH werden über 60 % der beobachteten Varianz durch die 4 HKs erklärt. Der relativ geringe Erklärungsgrad dieser beiden Parameter ist darauf zurückzuführen, dass beide nur sehr geringen zeitlichen Schwankungen unterliegen und die NO_2 Konzentrationen zudem nahe an der Nachweisgrenze liegen. Folglich ist ein Großteil der für pH und NO_2 dokumentierten Varianz vermutlich auf analytische Ungenauigkeiten zurückzuführen, die nicht mit zugrundeliegenden physikalischen Prozessen erklärt werden können.

Die vier extrahierten Hauptkomponenten können relativ eindeutig Prozessen bzw. Prozesskombinationen zugeordnet werden:

HK1: Mit 21,5 % erklärt HK1 den größten Varianzanteil. Diese HK wird von O_2 -sat, pH und Chl-a signifikant positiv geladen, während sie PO_4 signifikant negativ lädt. Die Sauerstoffsättigung wird offensichtlich direkt durch die gegenläufigen Prozesse der Photosynthese und Respiration gesteuert. Im gut gepufferten Neckar sind auch pH-Schwankungen in erster Linie an diese beiden Prozesse gebunden: Bei starker Primärproduktion führt der CO_2 -Verbrauch zur Erhöhung des pH-Wertes, wohingegen bei dominierender Respiration die Freisetzung von CO_2 eine Absenkung des pH-Wertes bedingt.

Offensichtlich wird auch die Konzentration des Nährstoffes PO_4 maßgeblich durch diese beiden gegenläufigen Prozesse beeinflusst, wobei hier eine hohe Primärproduktion mit der Bindung von Phosphor in Biomasse und folglich einer Reduktion der gelösten Konzentration verbunden ist. Dies bedeutet jedoch nicht, dass die Primärproduktion durch die Phosphorverfügbarkeit limitiert sein muss, vielmehr weisen die während „Algenblüten“ gemessenen PO_4 -Konzentrationen auf eine ausreichende P-Versorgung hin (vgl. Kapitel 5.2).

Im recht tiefen und stark verbauten Neckar ist die Primärproduktion zum allergrößten Teil an das Freiwasser gebunden. Folglich ist die Produktion auf ausreichend hohe Phytoplanktongehalte angewiesen, was die positive Ladung von Chl-a für HK1 erklärt.

HK1 steht somit für zwei gegenläufige Prozesse: Einerseits für die überwiegend durch Phytoplankton bewerkstelligte Primärproduktion (hohe Faktorwerte) und andererseits die Algenrespiration bzw. den mikrobiellen Abbau planktonbürtiger aber auch allochtoner organischer Substanz (kleine Faktorwerte). Zusammenfassend und stark vereinfachend kann HK1 daher als *biologische Komponente* bezeichnet werden.

HK2: Die zweite Hauptkomponente erklärt 20,3 % der Varianz aller 11 Parameter. Diese HK wird vom Abfluss signifikant negativ, von Lf und NO_3 signifikant positiv geladen. Hohe Abflüsse sind also mit kleinen Faktorwerten verbunden. Leitfähigkeit, Nitrat- und in geringerem Maße Phosphatkonzentrationen sind negativ mit dem Abfluss korreliert. HK2 beschreibt somit das Abflussgeschehen und die Verdünnung der Summe gelöster Substanzen sowie von NO_3 und PO_4 durch erhöhte Abflüsse. Zusammenfassend kann daher von einer *Abflusskomponente* gesprochen werden.

HK3: Diese HK erklärt 15,5 % der beobachteten Varianz und wird von der Wassertemperatur und Chl-a positiv geladen. Die Faktorwerte zeigen einen eindeutig zyklisch saisonalen Verlauf (Abb. 5.12). Damit steht HK2 für die saisonale Dynamik. Erhöhte Chl-a Konzentrationen treten lediglich im Sommerhalbjahr auf, wenn die Wassertemperaturen und die photosynthetisch aktive Strahlung das Phytoplanktonwachstum ermöglichen. Ammonium verhält sich gegenläufig zu T_w , da die Nitrifikation (im Gewässer und in Kläranlagen) bei erhöhten Temperaturen wesentlich rascher abläuft. Das der Temperatur gegenläufige Verhalten von Nitrat kann dadurch erklärt werden, dass Stickstoff während der Vegetationszeit in terrestrischen Ökosystemen zurückgehalten wird, während es im Winterhalbjahr verstärkt ausgewaschen werden kann (Haag et al. 1999c). HK3 kann somit als *saisonale Komponente* beschrieben werden.

HK4: Die vierte HK erklärt 15 % der Varianz. Sie wird von BSB_5 , NH_4 und NO_2 signifikant positiv geladen. Diese drei Parameter weisen auf den direkten Einfluss von ungeklärtem bzw. unzureichend geklärtem Abwassers hin. Somit repräsentiert die HK4 vermutlich in erster Linie Mischwasserentlastungen, die bei Starkregenereignissen dazu führen können, dass Abwasser ohne ausreichende Reinigung direkt in den Neckar gelangt. HK4 wird daher als *Abwasserkomponente* bezeichnet.

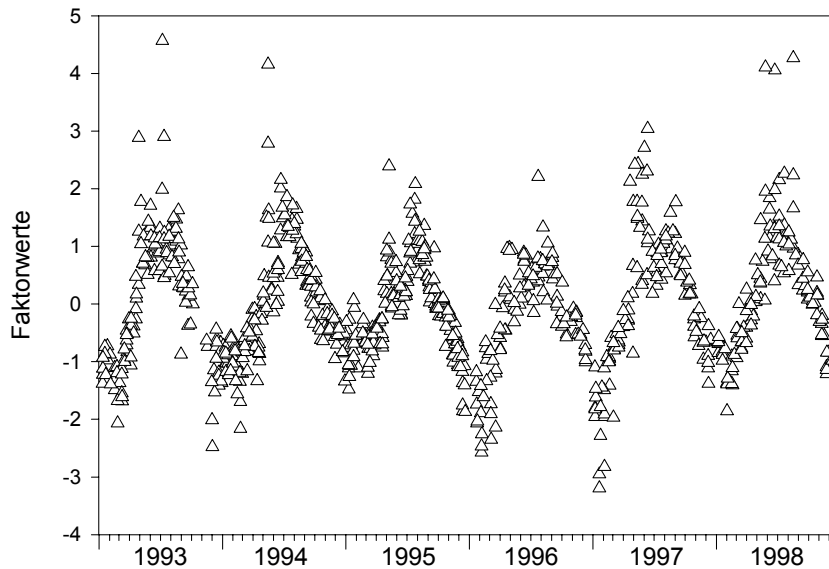


Abb. 5.12: Jahressgänge der Faktorwerte von HK3 (*saisonale Komponente*).

Hauptkomponentenanalyse nach der Eliminierung externer Einflüsse

Um die Stabilität der extrahierten Ladungsmuster und der daraus abgeleiteten Prozesse zu überprüfen, wurden die externen Einflüsse von Q und T_w eliminiert und die HKA auf die verbleibenden Residuen angewandt. Nach dieser Manipulation konnten aus den verbleibenden 9 Parametern selbstverständlich keine *Abflusskomponente* und keine *saisonale Komponente* mehr extrahiert werden.

Wie Abbildung 5.13 verdeutlicht konnten die *biologische* und die *Abwasserkomponente* auch aus den Residuen extrahiert werden. Die Ladungsmuster dieser beiden Komponenten unterscheiden sich nur unwesentlich von denen der Originaldaten. Die Werte der Eigenvektoren der beiden HKs erhöhten sich leicht von 2,36 auf 2,45 für die *biologische Komponente* und von 1,65 auf 1,82 für die *Abwasserkomponente*. Diese überraschend kleinen Veränderungen untermauern die Stabilität der beiden HKs. Es kann gesichert davon ausgegangen werden, dass weder die *biologische* noch die *Abwasserkomponente* durch lose Kovarianzen infolge ähnlicher saisonaler Muster der beteiligten Parameter entstanden sind. Haag und Westrich (2002) konnten zudem zeigen, dass aus reduzierten Datensätzen die selben Prozesskombinationen als maßgebend identifiziert werden konnten. Folglich kann davon ausgegangen werden, dass die extrahierten Hauptkomponenten stabil und im Sinne zugrundeliegender Prozesse interpretierbar sind.

Repräsentativität der extrahierten Prozesse für die einzelnen Probenahmestellen

Um zu überprüfen ob die extrahierten Prozesse an allen sechs untersuchten Probenahmestellen gleichermaßen wirksam sind, wurden die Daten der sechs Stationen getrennt mit der HKA untersucht. Bei den Originaldaten wurden an allen Stationen generell HKs extrahiert, die analog zu den für die gepoolten Daten beschriebenen Prozesse interpretiert werden konnten. Lediglich bei Mannheim konnte keine *Abwasserkomponente* extrahiert werden und für Kochendorf konnten die *biologische* und die *saisonale Komponente* nicht klar getrennt werden. Die Muster, die sich an den einzelnen Stationen ergaben sind ebenfalls in Abbildung 5.11 dargestellt.

Hieraus wird deutlich, dass sich die extrahierten Ladungsmuster der ersten 3 HKs an den einzelnen Stationen zumeist sehr ähnlich sind und größtenteils nahe bei den Mustern der gepoolten Daten liegen. Bei der *Abwasserkomponente* ist jedoch nur die hohe Ladung des BSB_5 allen Stationen gemeinsam. Auch bei den ersten 3 HKs gibt es einige signifikante Ausnahmen: Die bei den Daten aus Besigheim extrahierte hohe negative Ladung des pH-Wertes auf die *Abflusskomponente* kann physikalisch nicht erklärt werden. Die aus den Daten von Mannheim hervorgehende hohe negative Ladung von NO_2 auf die *saisonale Komponente* resultiert vermutlich aus der losen Korrelation der ohnehin sehr kleinen Nitritkonzentrationen mit den anderen Parametern dieser Hauptkomponente.

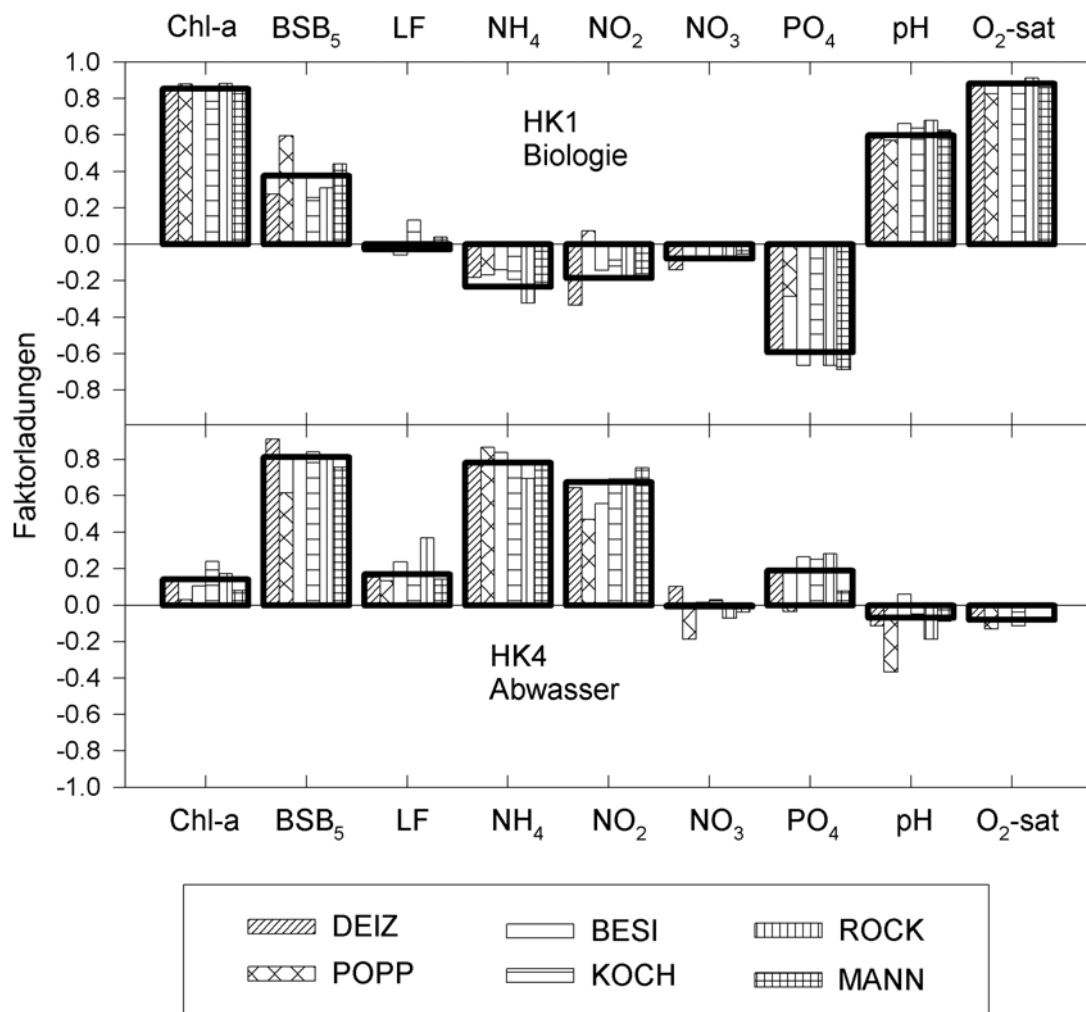


Abb. 5.13: Ladungsmuster der beiden nach der Eliminierung externer Einflüsse verbleibenden Hauptkomponenten. HKA der gepoolten Daten von allen sechs Stationen (breite fett umrandete Balken) und HKA an den einzelnen Probenahmestellen (schmale gemusterte Balken).

Aus Abbildung 5.13 wird deutlich, dass nach Eliminierung der externen Einflüsse die Ladungsmuster der verbleibenden beiden Hauptkomponenten an allen sechs Stationen nahezu identisch mit den Ladungsmustern der gepoolten Daten sind. Dies legt den Schluss nahe, dass die in Abbildung 5.11 vor allem bei HK4 auftretenden Unterschiede überwiegend auf lose Korrelationen infolge ähnlicher Jahresgänge der Parameter zurückzuführen sind.

Als weiteren Anhaltspunkt für die Repräsentativität der vier Hauptkomponenten an den einzelnen Stationen, wurde ermittelt welcher Anteil der Varianz der Parameter an den einzelnen Stationen durch die anhand der Originaldaten gewonnenen Hauptkomponenten erklärt wird. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.2 dargestellt.

Generell wird die Varianz der Parameter an den einzelnen Stationen durch die Originalhauptkomponenten ähnlich gut beschrieben wie für die gepoolten Daten. Insbesondere Sauerstoff wird an nahezu allen Stationen gleich gut erklärt, wobei sich der geringste Erklärungsanteil mit 76% in Besigheim ergibt. Keine Station fällt durch systematisch niedrigere Erklärungsanteile besonders auf. Allerdings gibt es einzelne Ausnahmen: Chl-a in Kochendorf, NO₂ in Mannheim und pH in Besigheim. Die beiden letztgenannten waren bereits in Abbildung 5.11 durch ihr Abweichen vom generellen Ladungsmuster aufgefallen. Die beobachteten Diskrepanzen sind vermutlich auf lokale Phänomene zurückzuführen, die mit den gepoolten Daten nicht adäquat erfasst werden können.

Tab. 5.2: Stationsweiser prozentualer Anteil der Varianz, die durch die anhand der gepoolten Originaldaten extrahierten Hauptkomponenten erklärt wird.

Parameter	gepoolte Daten	DEIZ	POPP	BESI	KOCH	ROCK	MANN
Chl-a	84	87	89	78	66	87	90
BSB ₅	84	88	83	77	86	82	79
Lf	75	81	75	75	75	79	70
NH ₄	75	79	70	80	75	73	66
NO ₂	55	62	62	47	46	48	31
NO ₃	79	87	81	86	81	79	78
PO ₄	63	55	66	60	70	63	65
pH	49	48	47	34	44	50	57
Tw	85	83	86	88	84	92	90
O ₂ -sat	81	77	89	76	80	85	80
Q	65	70	71	70	65	66	68

Die für den Stoffhaushalt maßgeblichen Prozesse scheinen im Wesentlichen für die gesamte Bundeswasserstraße Neckar die selben zu sein. Lediglich einzelne, vermutlich lokale Phänomene können nicht mit den vier extrahierten HKs bzw. den zugrundeliegenden Prozessen erklärt werden.

Die Bedeutung der *biologischen Komponente*

Wie Tabelle 5.1 verdeutlicht, erklärt HK1 (die *biologische Komponente*) alleine über 79% der Varianz von O₂-sat. Bezüglich der einzelnen Stationen ist der Erklärungsanteil dieser HK an der Varianz von O₂-sat in Besigheim mit immerhin noch 75% am geringsten. Offenbar ist also die biologische Dynamik und insbesondere das Wechselspiel zwischen der photosynthetischen Produktion und dem respirativen Verbrauch, entscheidend für den Sauerstoffgehalt im Gewässer. Daher erscheint es lohnenswert diese HK näher zu untersuchen.

In Abbildung 5.14 sind die Faktorwerte von HK1 als Funktion der Jahreszeit dargestellt. Gemäß der Interpretation von HK1 stehen hohe Faktorwerte für die Dominanz der phototrophen Produktion von Sauerstoff. Niedrige Faktorwerte zeigen hingegen die Dominanz des sauerstoffzehrenden Abbaus algenbürtiger und allochtoner organischer Substanz an. Aus Abbildung 5.14 wird zunächst deutlich, dass die Faktorwerte in den Wintermonaten im Mittel höher liegen als im Sommer. Dies ist wohl prinzipiell darauf zurückzuführen, dass die Abbauprozesse im Sommer infolge der höheren Temperaturen schneller ablaufen.

Besonders auffällig ist, dass die Varianz der Faktorwerte im Sommer wesentlich größer ist als in den Wintermonaten. Dies lässt sich durch die für die Faktorwerte maßgebliche Aktivität des Phytoplanktons erklären: Während des Winters wird die Aktivität des Phytoplanktons durch den Mangel an photosynthetisch aktiver Strahlung und die niedrigen Wassertemperaturen gehemmt. Dadurch bleibt das Ausmaß der Sekundärbelastung gering. Abbau und Produktion halten sich auf niedrigem Niveau die Waage. Wie im Abschnitt 5.2 gezeigt, können sich im Frühjahr und Frühsommer bei günstigen Witterungsverhältnissen hingegen dichte Algenpopulationen aufbauen. Dies bedingt zunächst die Dominanz der Produktion und somit hohe Faktorwerte. So spiegeln die höchsten Faktorwerte der Monate Mai und Juni die frühsommerlichen Algenblüten der Jahre 1997 und 1998 wider (vgl. Abb. 5.9 und 5.10). Der Zusammenbruch solcher Algenblüten durch einen Witterungsumschwung und/oder erhöhten Fraßdruck führt allerdings zur Dominanz von Abbauprozessen. Da die Phasen übermäßiger Produktion und der anschließenden Degradation zeitlich nahe zusammen liegen können (vgl. Abschnitt 5.2), drückt sich dies in einer hohen Varianz der frühsommerlichen Faktorwerte aus.

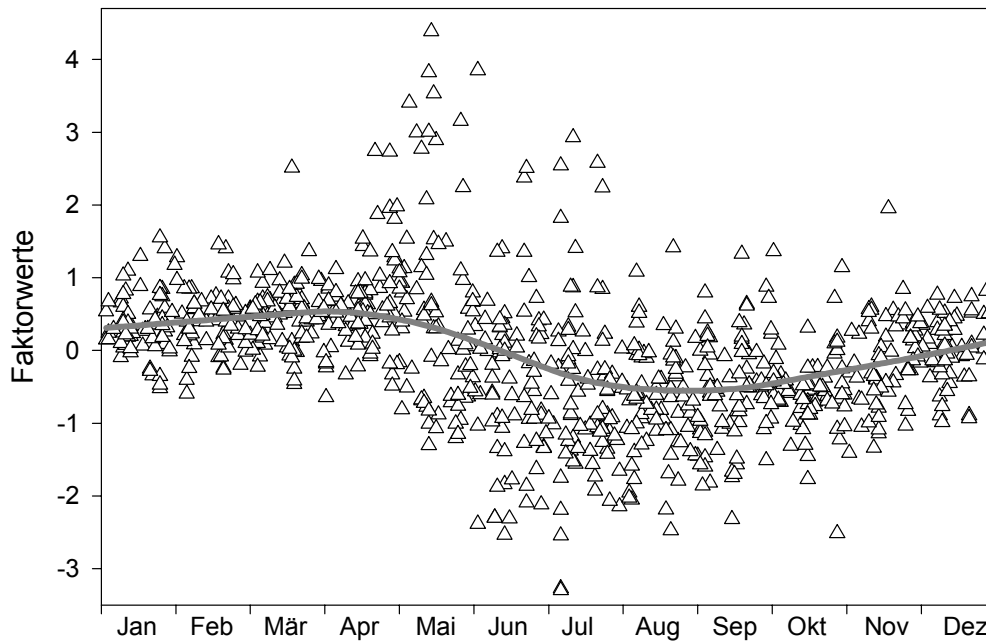


Abb. 5.14: Faktorwerte der HK1 (*biologische Komponente*) als Funktion der Jahreszeit. Die grau dargestellte Ausgleichsline wurde über LOWESS ermittelt.

Während des Sommerhalbjahres nehmen die Faktorwerte im Mittel zwischen April und August rasch ab, bevor sie ab Oktober wieder langsam ansteigen. Auch die einzelnen Maximalwerte liegen im Spätsommer tiefer als im Frühsummer. Hierfür erscheinen zwei Erklärungen plausibel: Zum einen wird das von oberstrom herantransportierte Phytoplankton ganzjährig von kleinen zentrischen Kieselalgen dominiert (Backhaus und Matthias 1997a; Backhaus und Matthias 1997b), deren optimale Wachstumstemperatur bei etwa 18°C liegt (Pöhlmann et al. 1989). Dieses Temperaturoptimum wird im Hoch- und Spätsommer im gesamten stauregulierten Neckar deutlich überschritten, so dass das Wachstum der Diatomeen gehemmt wird. Wärmeliebendere Grünalgen können sich vermutlich deshalb nicht durchsetzen, weil aus dem kühleren oberstromigen Bereich und den Nebenflüssen vor allem Kieselalgen angeliefert werden. Zum anderen lassen sich die während des Sommers tendenziell abnehmenden Faktorwerte durch den Einfluss benthischer Filtrierer – vor allem Muscheln – erklären. Deren Biomassendichte kann bei ausreichender Versorgung mit pelagischen Algen während der Sommermonate drastisch zunehmen, so dass sie im Spätsommer einen hohen Fraßdruck auf das Phytoplankton ausüben (Bachman et al. 1997; Schöl et al. 1999). Einerseits kann dadurch der Aufbau großer Algenpopulationen im Spätsommer unterbunden werden. Andererseits trägt die Respiration der Muscheln direkt zur Dominanz der Zehrungsprozesse bei. Für eine genauere Untersuchung dieser Hypothesen erscheint allerdings eine modellgestützte Systemanalyse notwendig.

Reichweite der Prozesse

Nachdem gezeigt wurde, dass im gesamten schiffbaren Neckar prinzipiell die selben Prozesse für die Steuerung des Stoffhaushalts verantwortlich sind, drängt sich die Frage auf, ob die selben Prozesse zur selben Zeit über die gesamten 200 km wirken. Ist dies der Fall, so müssen die Faktorwerte von Proben die zur selben Zeit an verschiedenen Stellen entnommen wurden, signifikant positiv korreliert sein. Um Aufschluss hierüber zu erlangen wurde der Pearson'sche Korrelationskoeffizient r für die Faktorwerte nahezu zeitgleich entnommener Proben ermittelt. Die Ergebnisse der Korrelationsanalyse sind in Tabelle 5.3 zusammengestellt. Um die Ergebnisse zu veranschaulichen, sind in Abbildung 5.15 die Korrelationen zwischen den Proben aus Kochendorf und den anderen fünf Stationen dargestellt.

Tab. 5.3: Korrelationen der Faktorwerte von Proben die zeitgleich an unterschiedlichen Probenahmestellen entnommen wurden. Proben die innerhalb von zwei Tagen entnommen wurden, wurden als zeitgleich erachtet.

kombinierte Stationen	Anzahl der Wertepaare	HK1 <i>biologische Komponente</i>	HK2 <i>Abflusskomponente</i>	HK3 <i>saisonale Komponente</i>	HK4 <i>Abwasserkomponente</i>
DEIZ - POPP	99	0,43	0,81	0,86	0,48
DEIZ - BESI	71	0,16	0,71	0,85	0,31
DEIZ - KOCH	48	-0,19	0,76	0,74	0,31
DEIZ - ROCK	46	0,12	0,73	0,80	0,48
POPP - BESI	79	0,84	0,90	0,94	0,42
POPP - KOCH	81	0,51	0,87	0,81	0,49
POPP - ROCK	58	0,46	0,80	0,83	0,60
POPP - MANN	44	0,41	0,85	0,78	0,23
BESI - KOCH	55	0,78	0,91	0,88	0,41
BESI - ROCK	56	0,69	0,78	0,92	0,55
KOCH - ROCK	111	0,77	0,91	0,88	0,64
KOCH - MANN	119	0,68	0,91	0,86	0,45
ROCK - MANN	56	0,71	0,94	0,93	0,61

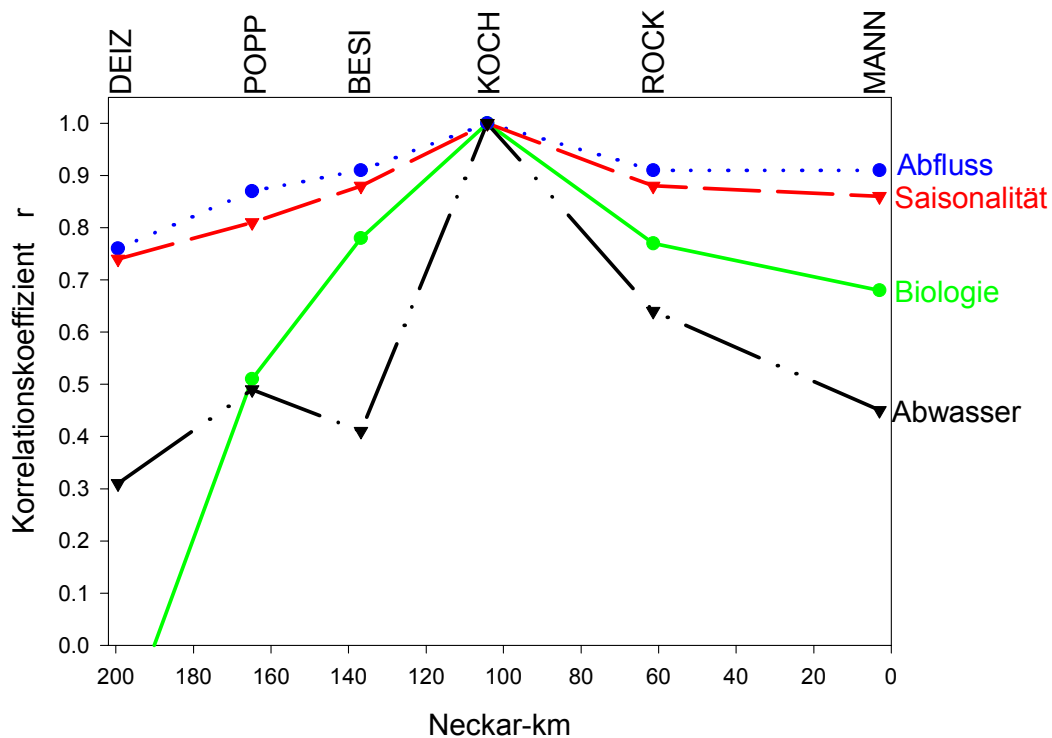


Abb. 5.15: Korrelation der Faktorwerte für Kochendorf mit zeitgleichen Faktorwerten der fünf anderen Probenahmestellen.

Sowohl die *Abflusskomponente* als auch die saisonale *Komponente* zeigen hohe Korrelationen über die gesamte untersuchte Strecke. Dies bedeutet, dass sich der Abfluss und die Jahreszeit erwartungsgemäß gleichzeitig auf den Stoffhaushalt in der ganzen Bundeswasserstraße Neckar auswirken. Dieses positive Ergebnis untermauert die Anwendbarkeit der hier gewählten Vorgehensweise zur Ermittlung räumlicher Korrelationen.

Im Gegensatz hierzu korrelieren die Faktorwerte der *Abwasserkomponente* selbst für benachbarte Probenahmestellen kaum. Wenngleich diese HK prinzipiell an allen untersuchten Stationen wirksam ist, so beschreibt sie offensichtlich nur lokale Phänomene, wie beispielsweise Stoffeinträge durch lokale sommerliche Niederschlagsereignisse (konvektive Niederschläge!).

Die *biologische Komponente* nimmt eine Zwischenstellung ein: Zwar sind die Faktorwerte zwischen benachbarten Probenahmestellen zumeist noch signifikant korreliert, bei größerem Abstand sinken die Korrelationskoeffizienten aber auf kleine, nicht signifikante Werte ab. Die in dieser HK beschriebene Prozesskombination ist also weder ein lokales Phänomen, noch wirkt sie zeitgleich über die gesamten 200 km. Petersen et al. (2001) gelangten für den Binnenbereich der Elbe zu ähnlichen Ergebnissen. Bei genauerer Betrachtung von Tabelle 5.3 fällt auf, dass zwischen den Faktorwerten von HK1 in Deizisau und Poppenweiler keine signifikante Korrelation besteht, wenngleich diese beiden Probenahmestellen nur ca. 35 km voneinander entfernt liegen. Dies deutet darauf hin, dass sich die Bedingungen für die Entwicklung des Algenwachstums mit Eintritt in den stauregulierten Bereich maßgeblich verändern. Während sich in Deizisau noch die Bedingungen des Bereichs oberhalb der Bundeswasserstraße widerspiegeln, sind für Poppenweiler offenbar bereits die veränderten Bedingungen in der Schifffahrtsstraße maßgeblich. Im Gegensatz hierzu korrelieren die Faktorwerte der Stationen Poppenweiler und Besigheim sehr stark, was darauf schließen lässt, dass die biologischen Prozesse an beiden Stationen zumeist zeitgleich wirksam sind.

Die Befunde zu der mittleren Reichweite der in der *biologischen Komponente* zusammengefassten Prozesse steht im Einklang mit den Ergebnissen aus Abschnitt 5.2: Offenbar stehen die für den Sauerstoffgehalt maßgeblichen Prozesse im Bereich zwischen Stuttgart und der Enzmündung nur in geringem Maße im Zusammenhang mit den zeitgleich ablaufenden Prozessen in Rockenau oder Mannheim (vgl. Abb. 5.4). Vermutlich werden die für den Sauerstoff maßgeblichen Prozesse durch Einflussfaktoren mit einer mittleren Reichweite beeinflusst. Hierzu zählen z.B. der Einfluss von Nebenflüssen, die die Algenkonzentrationen erhöhen oder verdünnen können, regionale Unterschiede bezüglich des Lichtdargebots und Unterschiede im Fraßdruck durch räumlich variable Abundanzen von Fischen und benthischen Filtrierern (Habitatsansprüche!).

5.4 Folgerungen aus der empirischen Analyse des Stoffhaushalts

Der Sauerstoffhaushalt des Neckars ist während langer Perioden stabil, mit Sauerstoffkonzentrationen nahe der Sättigung. Während sommerlicher Niedrigwasserphasen können jedoch extreme Übersättigungen und sehr niedrige Sauerstoffkonzentrationen in rascher Abfolge auftreten. Dabei kann es im gesamten Bereich der Bundeswasserstraße zu Unterschreitungen des LAWA Grenzwertes von 6 mg/L kommen. Mit Hilfe der Hauptkomponentenanalyse konnte gezeigt werden, dass die sommerlichen Sauerstoffextremwerte in erster Linie durch die Dynamik des Phytoplanktons gesteuert werden. Dieser Befund wird durch die deskriptive Charakterisierung des Stoffhaushalts untermauert. Demnach ist die Hauptursache für die mögliche Instabilität des Sauerstoffhaushalts in der Sekundärbelastung durch übermäßiges Algenwachstum zu suchen, wobei die Primärbelastung durch den Abbau allochtoner Stoffe jedoch nicht völlig zu vernachlässigen ist. Als wichtigstes Hindernis für eine weitere Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts im Neckar ist somit die Eutrophierung des Gewässers anzusehen.

Um den Sauerstoffhaushalt nachhaltig zu stabilisieren, müssten demzufolge die Eutrophierung und die daraus resultierende Sekundärbelastung eingedämmt werden. Diese nachhaltige Bekämpfung des Problems muss über das Nahrungsnetz erfolgen. Hier ergeben sich grundsätzlich zwei Ansätze, die Steuerung von unten („bottom-up“ Kontrolle) und die Steuerung von der Spitze der Nahrungspyramide her („top-down“ Kontrolle) (McQueen et al. 1989).

Für eine „bottom-up“ Kontrolle müsste das Wachstum des Phytoplanktons über die Reduzierung des Nährstoff- oder Lichtangebots eingeschränkt werden. Aus den Monitoringdaten geht hervor, dass sowohl die momentan im Neckar auftretenden Phosphorkonzentrationen als auch die Stickstoffkonzentrationen um mehr als das Zehnfache über dem Wert liegen, bei dem eine merkliche Limitierung des Phytoplanktonwachstums zu erwarten wäre. Berücksichtigt man, dass im Neckar ca. 40% der Phosphor- und ca. 60% der Stickstoffeinträge aus diffusen Quellen stammen (Borchardt und Geffers 1999), so wird deutlich dass eine Verringerung des Algenwachstums durch P oder N Limitierung in naher Zukunft kaum zu erreichen ist. Dennoch sollten die Nährstoffeinträge in jedem Fall (auch in Hinblick auf die Eutrophierung der Küstengewässer) weiter gesenkt werden. Im Gegensatz zu Stickstoff und Phosphor ergeben sich aus den Daten Hinweise, dass Siliziummangel das Diatomeenwachstum während Algenblüten möglicherweise mit limitiert. Die Si Gehalte im Gewässer sind jedoch nicht durch anthropogene Maßnahmen beeinflussbar. Zudem würde sich die Zusammensetzung der Algenpopulation bei akutem Siliziummangel vermutlich lediglich zu Grünalgen hin verschieben, so dass das Eutrophierungsproblem nicht grundsätzlich gelöst wäre.

Eine Reduktion des Lichtdargebots wäre grundsätzlich durch die bessere Beschattung des Gewässers zu erreichen. Für die zumeist über 100 m breite Bundeswasserstraße Neckar bestehen dahingehend jedoch kaum Möglichkeiten. Allerdings könnte durch die verstärkte Beschattung der schmaleren Nebenflüsse mit uferbegleitenden Wäldern der Phytoplanktoneintrag aus diesen reduziert werden. Solche Maßnahmen hätten vermutlich jedoch nur geringe Auswirkungen auf die Algendichten im Neckar.

Für eine „top-down“ Kontrolle müsste die Algendichte durch den Fraßdruck aus höheren trophischen Ebenen gering gehalten werden. Fischereiliche Bewirtschaftungsmaßnahmen mit diesem Ziel werden auch als Biomanipulation bezeichnet (Uhlmann und Horn 2001). Prinzipiell werden hierbei Zooplanktonfressende Friedfische durch Abfischen und/oder die Förderung von Raubfischen dezimiert. Das dadurch indirekt geförderte herbivore Zooplankton kann die Algenpopulation niedrig halten. Dieses prinzipiell einfache Vorgehen ist in der Praxis jedoch mit zahlreichen Komplikationen verbunden und zeigt nicht immer den gewünschten Erfolg (Benndorf 1995). Zudem ist die Anwendung dieses Verfahrens bislang auf stehende Gewässer begrenzt. In Fließgewässern werden die Erfolgsaussichten durch die gegenüber Seen wesentlich geringeren Aufenthaltszeiten von Wasser und Plankton reduziert. Dennoch erscheint es möglich, durch eine gezielte fischereiliche Bewirtschaftung – vor allem die Schonung der Raubfische – einen positiven Effekt hinsichtlich der Verminderung des Phytoplanktonwachstums zu erzielen. Allerdings ist es fraglich, ob die Auswirkungen stark genug wären, um einen merklichen Beitrag zur Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts zu liefern.

Da offensichtlich keine der nachhaltigen Strategien Aussicht auf einen durchgreifenden, raschen Erfolg bei der Reduzierung der Eutrophierung hat, müssen auch kurzfristige Stützungsmaßnahmen in Erwägung gezogen werden. Diese Maßnahmen werden nur zeitlich begrenzt ergriffen, solange die Sauerstoffgehalte unter einen ökologisch vertretbaren Wert absinken (oder zu hohe Übersättigungen auftreten). Hierzu sind vor allem die Wehr- und Turbinenbelüftung aber auch die Belüftung von Kläranlagenausläufen und die Kühlturmbelüftung zu zählen (Pinter 2000).

Für weiterführende Analysen des Stoffhaushaltssystems und quantitative Prognosen hinsichtlich der Wirksamkeit von Maßnahmen zur Verbesserung bzw. Stützung des Sauerstoffhaushalts sind numerische Simulationsmodelle unabdingbar. Als wichtigste Voraussetzung für ein adäquates Simulationsmodell, muss dieses neben der klassischen Primärbelastung auch die Dynamik des Phytoplanktons mit der daraus resultierenden Sekundärbelastung in angemessener Weise berücksichtigen.

6 GASAUSTAUSCH MIT DER ATMOSPHERE

6.1 Motivation und Zielsetzung

Der Gasaustausch mit der Atmosphäre ist von zentraler Bedeutung für den Sauerstoffhaushalt von Oberflächengewässern. In Gewässern, die infolge des Abbaus organischer Substanz starke Sauerstoffuntersättigungen aufweisen, stellt die sogenannte Wiederbelüftung durch den physikalischen Sauerstoffeintrag aus der Atmosphäre häufig den wichtigsten Mechanismus für die Erholung des Sauerstoffgehalts dar. In eutrophen Gewässern, in denen eine hohe Primärproduktion mit der einhergehenden biogenen Sauerstoffproduktion zu hohen Übersättigungen führen kann, ist umgekehrt der Verlust von Sauerstoff an die Atmosphäre für gewöhnlich der wichtigste Pfad, um die ökologisch ebenfalls bedenklichen Sauerstoffübersättigungen abzubauen. Darüber hinaus kann auch Stickstoff in Form von Ammoniak in die Atmosphäre entweichen. Dieser Prozess spielt allerdings nur bei hohen pH-Werten – wenn ein nennenswerter Anteil des Ammoniumstickstoffs als Ammoniak vorliegt – eine quantitativ bedeutende Rolle. Neben Sauerstoff ist der Gasaustausch von maßgeblicher Bedeutung für den Transport und Verbleib zahlreicher Treibhausgase (z.B. CO_2 , CH_4 , N_2O) und flüchtiger Mikroschadstoffe (z.B. BTEX, LCKW, Hg).

In stehenden Gewässern und bei strömendem Abfluss ohne Lufteintrag erfolgt der Gasaustausch ausschließlich über die freie Wasseroberfläche, wohingegen bei Wehrüberfällen und der Turbinenbelüftung der Austausch vor allem an Luftblasen stattfindet. Für Sauerstoff wurden für beide Austauschprozesse zahlreiche, zumeist empirische Vorhersageformeln entwickelt. Insbesondere für den Gasaustausch an freien Oberflächen liefern diese Formeln jedoch stark voneinander abweichende Ergebnisse (Moog und Jirka 1998), was dazu führt, dass die Unsicherheit bezüglich der physikalischen Wiederbelüftung häufig eine der größten Fehlerquellen bei der Simulation des Sauerstoffhaushalts darstellt (Brown und Barnwell 1987; Melching und Yoon 1996). Für eine zuverlässige Simulation des Sauerstoffhaushalts ist es folglich geboten, den Gasaustausch mit der Atmosphäre experimentell zu ermitteln, um die Anwendbarkeit geeigneter Formeln zu überprüfen. Daher wurde am Neckar ein Gastracerexperiment durchgeführt, bei dem sowohl der Stoffübergang auf der Fließstrecke als auch an einem Wehrüberfall quantifiziert wurde.

Nachfolgenden werden zunächst die untersuchte Gewässerstrecke und die verwendeten Methoden vorgestellt. Anschließend werden die theoretischen Grundlagen und die experimentellen Ergebnisse für den Gasaustausch über die freie Wasseroberfläche und beim Wehrüberfall getrennt erläutert. Dadurch sollen sowohl das grundlegende Verständnis für die maßgebenden Prozesse befördert, als auch geeignete Formeln für die numerische Simulation abgeleitet werden. Für den Wehrüberfall wird zudem ein mechanistischer Modellansatz für des Gasaustausch an Luftblasen abgeleitet. Die Untersuchungen beziehen sich dabei zwar primär auf Sauerstoff, können aber auf andere leicht flüchtige Substanzen übertragen werden, sofern der Stoffaustausch durch die selben physikalischen Parameter gesteuert wird. Eine Analyse der Turbinenbelüftung – bei der der Gasaustausch wie beim Wehrüberfall an Luftblasen gebunden ist – wurde hier nicht vorgenommen, da hierzu bereits umfangreiche experimentelle Befunde für die Anlage in Poppenweiler vorliegen (Wagner 1958; Pinter 1979).

6.2 Untersuchungsgebiet und experimentelle Methoden

Da die Sauerstoffkonzentration neben dem physikalischen Gasaustausch mit der Atmosphäre durch zahlreiche weitere Prozesse beeinflusst wird, muss die Wiederbelüftungsrate indirekt mit Hilfe eines wasserseitig kontrollierten, inerten Gastracers bestimmt werden. Schwefelhexafluorid (SF_6) wurde aufgrund seiner ökotoxikologischen Unbedenklichkeit, seiner physikochemischen Eigenschaften (leicht flüchtig, nicht sorptiv, geruchs- und farblos) und seiner sehr kleinen analytischen Nachweisgrenze als Gastracer ausgewählt (Käss 1992; Maiß 1992; Yaws 1999). SF_6 wurde bereits von zahlreichen anderen Forschungsgruppen erfolgreich zur experimentellen Bestimmung des wasserseitig kontrollierten Gasaustauschs verwendet (z.B. Canale et al. 1995; Cirpka et al. 1993; Hibbs et al. 1998; Wanninkhof et al. 1990). Zur gleichzeitigen Beobachtung des rein advektiv-dispersiven Transports wurde der Fluoreszenztracer Amidorhodamin G (ARG, acid red 50) verwendet. Dieser Farbstoff zeichnet sich durch seine ökotoxikologische Unbedenklichkeit (Anonymos 1997), hohe Fluoreszenzintensität, geringe Sorptivität und Photostabilität aus (Käss 1992).

Zwischen dem 26.9. und dem 3.10.2000 wurde im Neckar zwischen Deizisau und Poppenweiler ein Feldexperiment zur Ermittlung des Gasaustausches durchgeführt (Abb. 6.1). Während der Versuchsdauer schwankte der Abfluss am Pegel Plochingen zwischen 24 und 39 m³/s. Bei einem langjährigen mittleren Abfluss von 45,9 m³/s in Plochingen wurde mit dem Feldversuch somit der für Sauerstoffminima relevante Niedrig- bis Mittelwasserbereich weitgehend abgedeckt. Während der Versuchsdauer wurde der gesamte Abfluss durch die Kraftwerke an den Staustufen geleitet, lediglich am Staubauwerk in Esslingen (kein Kraftwerk) wurde das Wehr überströmt.

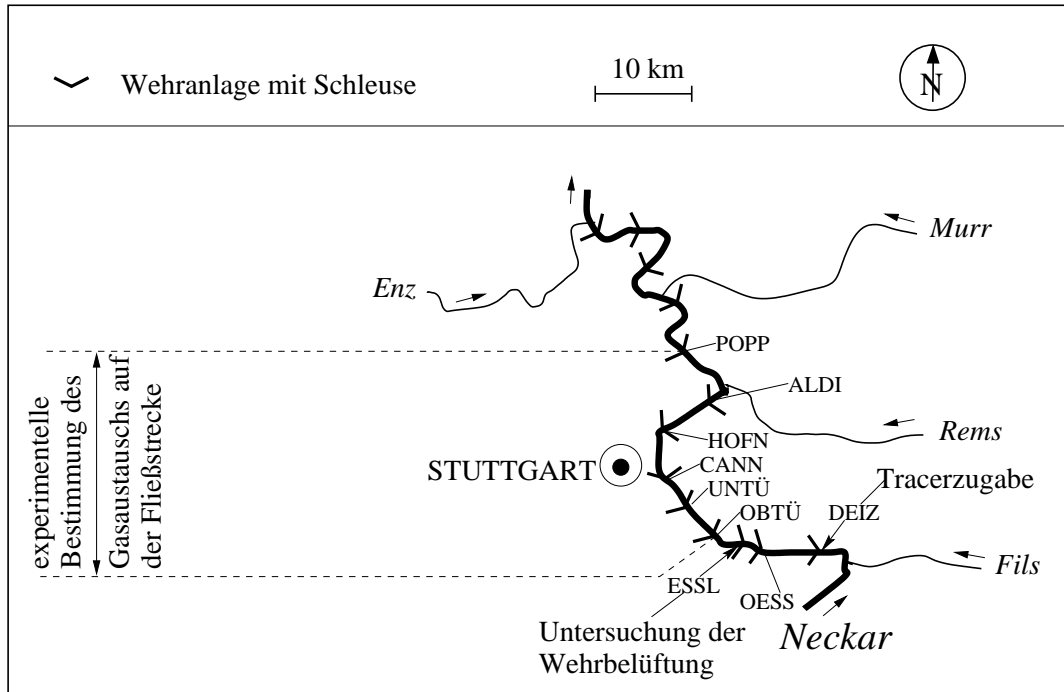


Abb. 6.1: Beim Gastracerexperiment untersuchter Abschnitt des Neckars.

Zwischen dem 26. und dem 30.9.2000 wurde direkt Oberstrom des Kraftwerkes Deizisau (Neckar-km 199,5) mit Hilfe eines Diffusors SF₆ kontinuierlich in den Neckar eingeleitet. Zu Beginn der Einleitung am 26.9. um 12:00 Uhr wurden an der selben Stelle 10 kg ARG stoßartig zugegeben. Der Durchgang der Farbtracerwolke wurde an den unterstromigen Stauwehren mit Lichtleiterfluorometern (Barczewski et al. 1996) in situ verfolgt, wodurch es möglich war, die Probenahme für die SF₆ Analyse zu steuern. Bis zum 3.10.2000 wurden entlang des Flußabschnittes zwischen Deizisau und dem Wehr Poppenweiler (Neckar-km 164,9) insgesamt 700 Proben für die nachfolgende Analyse der SF₆-Konzentrationen entnommen. Die Probenahme erfolgte einerseits an den 8 Wehren des Flußabschnittes. Andererseits wurden mit Hilfe des Forschungsschiffs Max Honsell (LfU Baden-Württemberg) Quer- und Längsprofile im Neckar aufgenommen, um die Vermischung im Gewässer zu dokumentieren. Die Beprobung erfolgte direkt mit 10 mL Headspace-Vials, die bis zur Hälfte mit Neckarwasser gefüllt und sofort verschlossen wurden. Bei jeder Probenahme wurden mindestens 3 Replikate entnommen. Die Analyse erfolgte innerhalb von 24 h im Labor der Versuchseinrichtung zur Grundwasser und Altlasten Sanierung (VEGAS) am Gaschromatographen mit Elektroneneinfangdetektoren (GC/ECD). Zur Abtrennung des SF₆ von anderen flüchtigen Substanzen wurde eine 15 m lange (Innendurchmesser 0,32 mm) GS GasPro Säule der Firma J & W Scientific verwendet (Josef 2001). Aus den gepoolten Daten der Probenreplikate wurde die Reproduzierbarkeit der Analysen auf dem 95%-igen Vertrauensniveau zu ±10% der Konzentration bestimmt.

Bei Esslingen (Neckar-km 193,9) wurden sowohl oberhalb als auch unterhalb des überströmten Wehres SF₆ Proben entnommen und die Sauerstoffkonzentration gemessen, um den Gasaustausch beim Wehrüberfall zu quantifizieren. Die Wiederbelüftung auf der freien Fließstrecke wurde zwischen den Wehren Obertürkheim (OBTÜ, km 189,5) und Poppenweiler (POPP, km 164,9) analysiert, da auf dem oberstromigen Bereich keine vollständige Durchmischung des Gastracers gewährleistet war (Abb. 6.1).

6.3 Gasaustausch auf der Fließstrecke

6.3.1 Theorie des Stoffübergangs an der freien Wasseroberfläche

Grundlagen

Der Stoffaustausch zwischen Wasser und Luft folgt einer Reaktionskinetik erster Ordnung (Rathbun und Tai 1984) und kann mathematisch wie folgt beschrieben werden:

$$\frac{dc_w}{dt} = k_2 \cdot (c_{sat} - c_w) = K \cdot \frac{A}{V} \cdot (c_{sat} - c_w) \quad (6.1)$$

Hierin sind t die Zeit, c_w die aktuelle Konzentration des Gases im Wasser und c_{sat} die Sättigungskonzentration im Wasser. Der Faktor k_2 ist die Stoffübergangsrate (in 1/d), die bei Sauerstoffhaushaltsuntersuchungen zumeist als Wiederbelüftungsrate bezeichnet wird. K ist der Stoffübergangskoeffizient, A die Oberfläche und V das beteiligte Wasservolumen. Wenn, wie bei ungeschichteten Fließgewässern üblich, eine homogene Durchmischung des Wasserkörpers vorliegt, so ist V/A gleich der mittleren Gewässertiefe y . Die Stoffübergangsrate ist dann gleich dem Quotienten aus Übergangskoeffizient und mittlerer Wassertiefe: $k_2 = K/y$. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass diese Beziehung gültig ist. Zu beachten ist, dass bei der in Gleichung 6.1 gewählten Schreibweise ein positiver Gasfluss in das Wasser hinein gerichtet ist.

Die Sättigungskonzentration (c_{sat}) eines Gases in Wasser, ist jene Konzentration die sich im Gleichgewichtszustand einstellt. Sie ergibt sich gemäß dem Henry-Dalton-Gesetz aus dem Quotienten der Gaskonzentration in der Luft c_g (in M/L^3) und dem dimensionslosen Henrykoeffizienten H des Gases: $c_{sat} = c_g/H$. Da die Konzentration eines Atmosphärgases in der Luft vom Luftdruck abhängt und der Henrykoeffizient eine temperaturabhängige Stoffeigenschaft ist, ist c_{sat} von Atmosphärgasen in erster Linie eine Funktion von Temperatur und Luftdruck. Darüber hinaus können gelöste Wasserinhaltsstoffe c_{sat} herabsetzen, was in Binnengewässern zumeist jedoch von untergeordneter Bedeutung ist. Für Spurengase mit vernachlässigbar kleinen Konzentrationen in der Atmosphäre kann $c_{sat} = 0$ gesetzt werden.

Alternativ zu der globalen Betrachtungsweise von Gleichung 6.1 kann mit Hilfe des Stoffübergangskoeffizienten K die Grenzfläche zwischen Wasser und Luft betrachtet werden. In diesem Fall wird die Massenstromdichte J (in $M/L^2/T$) eines Gases über die Grenzfläche beschrieben:

$$J = K \cdot (c_{sat} - c_w) \quad (6.2)$$

Der Kehrwert des Stoffübergangskoeffizienten $1/K$ kann als Widerstand für den Gasaustausch zwischen Wasser und Luft aufgefasst werden (Jirka 1994). Sowohl die Atmosphäre als auch Fließgewässer sind im Allgemeinen durch Turbulenzwirbel (turbulente Diffusion) homogen durchmischt. Lediglich in dünnen Schichten beiderseits der Grenzfläche wird die Turbulenz gedämpft, so dass der Massenstrom hier vor allem durch die wesentlich langsamere molekulare Diffusion bewerkstelligt wird. Der Widerstand für den Gasübergang ist daher im allgemeinen Fall in zwei dünnen Grenzschichten beiderseits der Grenzfläche lokalisiert, der Transport über die Grenzfläche wird durch diese dünnen Schichten kontrolliert (Jähne und Haußecker 1998; Thibodeaux 1996).

Konzeptionelle Modellvorstellungen

Zwei-Schicht-Modell: Ausgehend vom grundlegenden, qualitativen Verständnis des Gasaustauschs an der Grenzfläche Luft-Wasser wurde das sogenannte Zwei-Schicht-Modell zur quantitativen Beschreibung des Stoffübergangs entwickelt (Lewis und Whitman 1924; Whitman 1923). Dieses konzeptionelle Modell muss vor dem Hintergrund neuerer experimenteller Ergebnisse als zu starke Vereinfachung angesehen werden (siehe unten). Da es jedoch die Grundlage komplexerer Modellvorstellungen bildet und einen grundsätzlichen Einblick in den Prozess des Gasübergangs gewährt, wird es hier kurz erläutert. Wie Abbildung 6.2 schematisch verdeutlicht liegen dem Zwei-Schicht-Modell die folgenden Annahmen zugrunde: (1) Sowohl der Wasser- als auch der Luftkörper sind grundsätzlich homogen durchmischt. (2) Nahe der Grenzfläche liegen auf der Wasser- und der Luftseite stagnante Grenzschichten, die nicht durch turbulente Durchmischung beeinflusst sind, so dass der Stofftransport hier ausschließlich über molekulare Dif-

fusion erfolgt. (3) Direkt an der Grenzfläche herrscht ein Gleichgewicht gemäß dem Henry-Dalton-Gesetz: $c_{w,0} = c_{g,0}/H$.

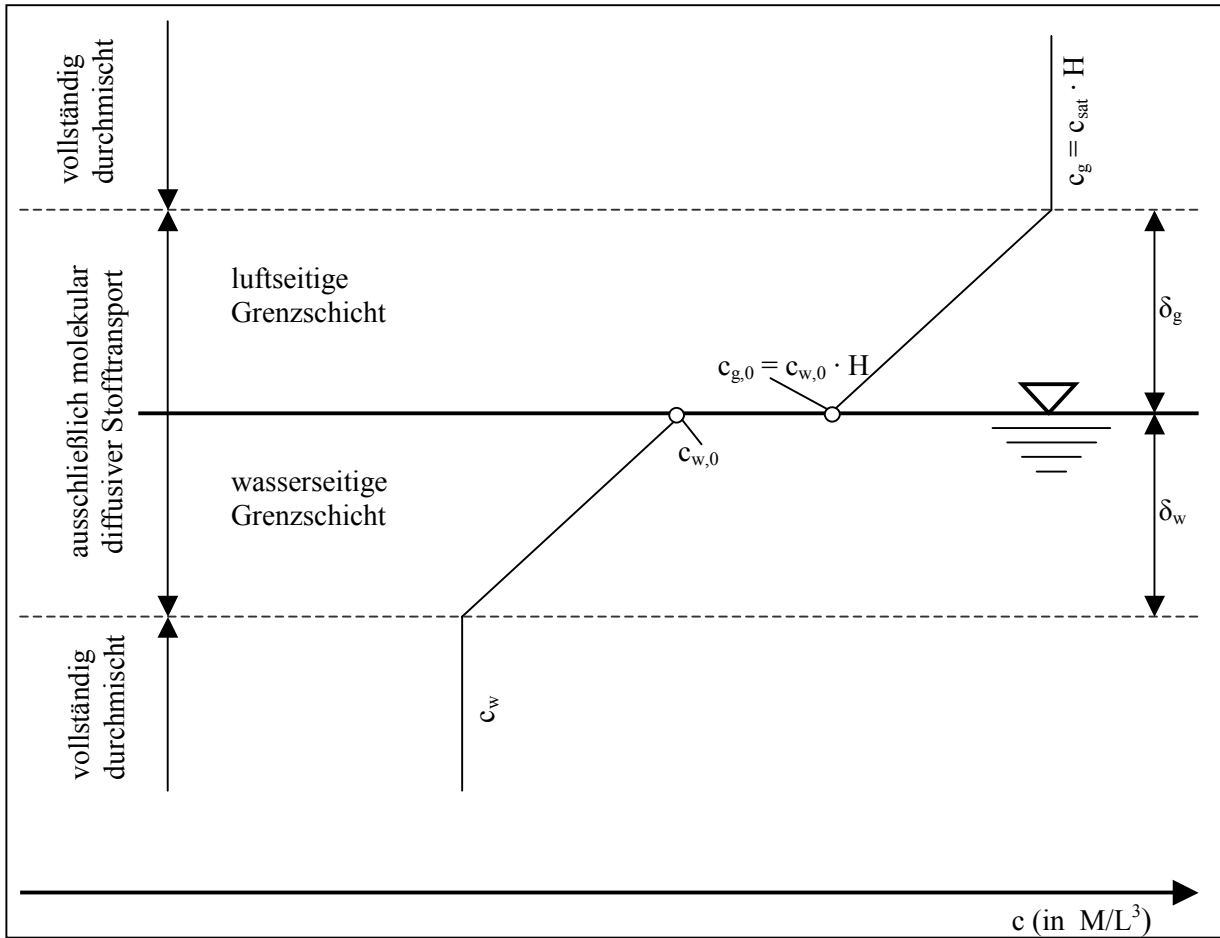


Abb. 6.2: Schematische Darstellung des Zwei-Schicht-Modells.

Da der Massenstrom in den beiden Grenzschichten auf molekularer Diffusion basiert, kann dieser mit dem 1. Fick'schen Gesetz beschrieben werden. Berücksichtigt man zusätzlich, dass aufgrund der Massenerhaltung die Massenstromdichte durch die luftseitige Grenzschicht gleich jener durch die wasserseitige sein muss, so folgt hieraus:

$$J = \frac{D_w}{\delta_w} \cdot (c_{w,0} - c_w) = \frac{D_g}{\delta_g} \cdot (c_g - c_{g,0}) \quad (6.3)$$

Wobei D_w und D_g die Diffusionskoeffizienten des betrachteten Gases in Wasser bzw. Luft sind. Die anderen Variablen sind in Abbildung 6.2 erläutert. Da die Mächtigkeiten der diffusiven Grenzschichten ohnehin nicht bekannt sind, können die Quotienten aus Diffusionskoeffizienten und Mächtigkeit der viskosen Schichten zu den wasser- bzw. luftseitigen Stoffübergangskoeffizienten (K_w bzw. K_g) zusammengefasst werden. Weiterhin lässt sich unter Berücksichtigung des Henry-Dalton-Gesetzes $(c_g - c_{g,0}) = H \cdot (c_{sat} - c_{w,0})$ setzen, so dass Gleichung 6.3 wie folgt umformuliert werden kann:

$$J = K_w \cdot (c_{w,0} - c_w) = K_g \cdot H \cdot (c_{sat} - c_{w,0}) = \frac{(c_{sat} - c_w)}{\left(\frac{1}{K_w} + \frac{1}{K_g \cdot H} \right)} \quad (6.4)$$

Wasserseitig kontrollierter Gasaustausch: Der Gesamtwiderstand für den Gasaustausch $1/K$ setzt sich demzufolge additiv aus einem wasserseitigen Widerstand $1/K_w$ und einem luftseitigen Widerstand $1/K_g/H$ zusammen. Aus Gleichung 6.4 geht weiterhin hervor, dass das Verhältnis K_g/K_w sowie der Henrykoeffizient darüber entscheiden, ob der Widerstand für den Gasaustausch primär auf der Wasser- oder der Luftseite liegt. Das Verhältnis K_g/K_w beträgt je nach den Turbulenzverhältnissen in Luft und Wasser zwischen 40 und 1000 (Emerson 1975; Jähne und Haußecker 1998; Munz und Roberts 1989; Rathbun und Tai 1981). Für Stoffe mit Henrykoeffizienten $H \geq 0,5$ liegt der Gesamtwiderstand folglich immer zu über 95 % auf der Wasserseite, weshalb man von wasserseitig kontrolliertem Gasübergang spricht. Für solche leicht flüchtigen Substanzen kann $K=K_w$ gesetzt werden (Jirka 1994; Markofsky 1980; O'Connor und Dobbins 1958). Wenngleich diese Aussage hier anhand des Zwei-Schicht-Modells abgeleitet wurde, gilt sie auch für die komplexeren Modellvorstellungen (siehe unten) und ist experimentell gut belegt (Jähne und Haußecker 1998; Munz und Roberts 1989).

Mit einem Henrykoeffizienten von etwa 30 (bei 20°C) fällt Sauerstoff wie eine Vielzahl anderer umwelt-relevanter Stoffe in die Gruppe der wasserseitig limitierten Gase (Tabelle 6.2). Da der Schwerpunkt dieser Arbeit bei Sauerstoff liegt, werden im Folgenden zur Vereinfachung nur noch leicht flüchtige, wasserseitig kontrollierte Stoffe und somit die Wasserseite betrachtet. Die vorgestellten Modelle können analog auf die Luftseite angewandt werden, so dass eine Erweiterung der Betrachtung auf beidseits oder nur luftseitig limitierte Substanzen relativ einfach möglich ist (siehe z. B. Chapra 1997). Gleichung 6.2 lässt sich bei Gültigkeit des Zwei-Schicht-Modells für ausschließlich wasserseitig kontrollierte Substanzen wie folgt ausdrücken:

$$J = K_w \cdot (c_{sat} - c_w) = \frac{D_w}{\delta_w} \cdot (c_{sat} - c_w) \quad (6.5)$$

Gleichung 6.5 verdeutlicht, dass gemäß dem Zwei-Schicht-Modell für wasserseitig kontrollierte Substanzen der Stoffübergangskoeffizient sowie die Stoffübergangsrate proportional zum Diffusionskoeffizienten in Wasser sein müssten.

Penetrationsmodell: Als Hauptkritikpunkt am Zwei-Schicht-Modell muss die Annahme eines abrupten, statischen Übergangs vom durchmischten zum molekular diffusiven Bereich angeführt werden, wohingegen in der Natur die Turbulenz lediglich allmählich gedämpft bzw. die Grenzschicht immer wieder durch Turbulenzwirbel zerstört wird. Aus dieser Erkenntnis heraus wurde das sogenannte Penetrationsmodell abgeleitet (Higbie 1935). Hier wird davon ausgegangen, dass, angetrieben von der Turbulenz im Gewässer, immer wieder neue „Wasserpakete“ an die wasserseitige Grenzfläche transportiert werden. Diese Wasserpakete halten sich dann eine bestimmte Zeit (Expositionszeit t_{ex}) an der Wasseroberfläche auf. Während dieser Zeit durchdringt (engl. penetrate) die Gasfront das Wasserpaket per molekularer Diffusion (Abb. 6.3). Nach Ende der Expositionszeit werden die Wasserpakete mit ihrem nun veränderten Gasgehalt wieder in die durchmischte Zone transportiert, während andere Wasserpakete ihre Position an der Grenzfläche einnehmen. Diese Modellvorstellung wird in Abbildung 6.3 schematisch veranschaulicht.

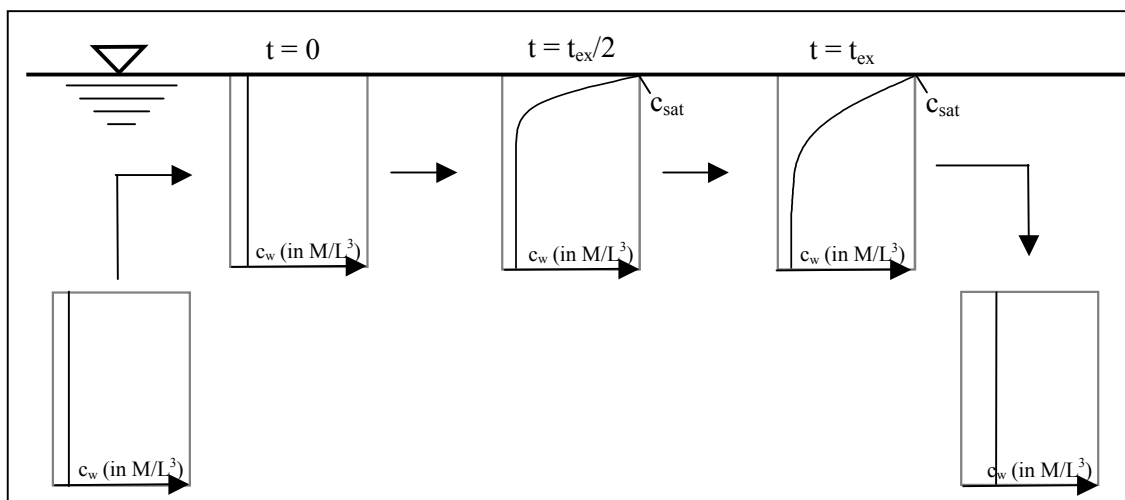


Abb. 6.3: Schematische Darstellung des Gangs eines Wasserpakets im Penetrationsmodell.

Mathematisch lässt sich die Massenstromdichte für wasserseitig kontrollierte Substanzen auf Grundlage des Penetrationsmodells wie folgt ausdrücken (Herleitung siehe z.B. Chapra 1997 S. 374-375):

$$J = K_w \cdot (c_{sat} - c_w) = \sqrt{\frac{D_w}{t_{ex} \cdot \pi}} \cdot (c_{sat} - c_w) \quad (6.6)$$

Oberflächenerneuerungsmodell: Das Penetrationsmodell erfuhr einige Weiterentwicklungen, von denen die wohl wichtigste das sogenannte Oberflächenerneuerungsmodell nach Danckwerts (1951) darstellt. Hierbei wird davon ausgegangen, dass die Erneuerung der Wasserpakete an der Grenzfläche dem Zufallsprinzip unterliegt, d.h. gerade erst dort angelangte Wasserpakete mit derselben Wahrscheinlichkeit ausgetauscht werden, wie Wasserpakete die schon lange an der Grenzfläche verweilen. Bei diesem Modellansatz ergibt sich die Massenstromdichte wasserseitig kontrollierter Gase dementsprechend aus:

$$J = K_w \cdot (c_{sat} - c_w) = \sqrt{D_w \cdot r_{OB}} \cdot (c_{sat} - c_w) \quad (6.7)$$

Hierin ist r_{OB} (mit der Einheit $1/T$) die Oberflächenerneuerungsrate (analog zu einer Abbaurrate 1. Ordnung). Da weder die Expositionszeit noch die Oberflächenerneuerungsrate messbare Größen sind, lässt sich alleine auf Grundlage des Penetrations- oder des Oberflächenerneuerungsmodells der Gasaustausch nicht prognostizieren. Die diesen beiden Modellen zugrunde liegenden Vorstellungen erscheinen aber wesentlich realitätsnäher als das Zwei-Schicht-Modell.

Einfluss der Turbulenzwirbel: Auf Grundlage des Oberflächenerneuerungsmodells lassen sich zudem das sogenannte „Large Eddy Model“ (LEM) und das „Small Eddy Model“ (SEM) ableiten. In beiden Fällen steigt die Oberflächenerneuerungsrate proportional mit der Turbulenz nahe der Grenzfläche an. Die Turbulenz wird dabei durch die Wurzel der quadrierten Geschwindigkeitsschwankungen ($\sqrt{u'^2} = |\bar{u}'|$) ausgedrückt (Schlichting 1951). Ist die Turbulenz durch Sohlreibung bedingt, so ist $|\bar{u}'|$ an der Wasseroberfläche wiederum linear proportional zur Schubspannungsgeschwindigkeit u_0^* (Moog und Jirka 1998; Nezu und Nakagawa 1993). Beim LEM wird davon ausgegangen, dass die größten Turbulenzwirbel im System für den Transport neuer Wasserpakete zur Oberfläche maßgeblich sind. Da diese größten Wirbel in etwa eine Ausdehnung der Gewässertiefe haben, ist die Oberflächenerneuerungsrate beim LEM umgekehrt proportional zur Wassertiefe y . Daraus folgt, dass beim LEM K proportional zu u_0^{*2} ist.

Beim SEM wird im Gegensatz zum LEM davon ausgegangen, dass die kleinen Turbulenzwirbel nahe der Oberfläche, die auch für die Energiedissipation verantwortlich sind, die Oberflächenerneuerungsrate bestimmen. Hieraus leitet sich ab, dass K proportional zu $u_0^{*3/4}$ ist (Lamont und Scott 1970).

Grenzschichttheorie: Über die bisher beschriebenen Modellvorstellungen hinaus kann die Massenstromdichte über die Wasser-Luft Grenze auch auf Grundlage der klassischen Grenzschichttheorie beschrieben werden (Schlichting 1951; siehe auch Kapitel 7.2.3). Die auf der Grenzschichttheorie basierenden Modellvorstellungen gehen nicht davon aus, dass der Transport nahe der Grenzfläche ausschließlich durch molekulare Diffusion erfolgt. Vielmehr setzen sie ein Zusammenwirken molekularer und turbulenter Diffusion voraus, wobei die turbulente Diffusion zur Grenzfläche hin kontinuierlich abnimmt. Setzt man – wie an der Grenzfläche Wasser-Sediment – voraus, dass direkt an der Grenzfläche Wasser-Luft keine Geschwindigkeitsfluktuationen mehr vorliegen (Haftbedingung), so gelangt man mit diesem Ansatz dazu, dass K proportional zu $D_w^{2/3}$ sein muss (Deacon 1977). Nimmt man hingegen an, dass an der Wasser-Luft Grenze keine Haftbedingung gegeben ist, sondern turbulente Fluktuationen in horizontaler und vertikaler Richtung möglich sind, sind Stoffübergangskoeffizient und –rate proportional zu $D_w^{1/2}$ (Ledwell 1984). Gemäß Hunt (1984) liegen bei rein von der Reibung an der Gewässersohle induzierter Turbulenz Geschwindigkeitsfluktuationen bis unmittelbar an die Grenzfläche vor. Infolge stärkerer Verunreinigung an der Wasseroberfläche können die Geschwindigkeitsschwankungen an der Oberfläche jedoch unterdrückt werden. Bei ausgeprägten Oberflächenfilmen ergibt sich daher ein Stofftransfer, der Proportional zu $D_w^{2/3}$ ist. Durch Wellen, die beispielsweise durch Wind induziert werden können, kann die Wirkung der Oberflächenfilme reduziert werden, wodurch sich wiederum ein Proportionalitätsfaktor nahe $D_w^{1/2}$ ergibt (Jähne und Haußecker 1998).

Übertragbarkeit auf andere Gase

Allen Modellvorstellungen zum Gasaustausch an der Wasser-Luft Grenzfläche ist gemeinsam, dass K bzw. k_2 vom Diffusionskoeffizienten der jeweiligen Substanz abhängen. Der Übergangskoeffizient eines wasserseitig kontrollierten Gases A mit $D_{w,A}$ kann somit auf ein zweites wasserseitig kontrolliertes Gas B mit $D_{w,B}$ wie folgt übertragen werden:

$$K_B = K_A \cdot \left(\frac{D_{w,B}}{D_{w,A}} \right)^n \quad (6.8)$$

Wobei K_A bzw. K_B die Übergangskoeffizienten für Substanz A bzw. B sind. Die Modelle unterscheiden sich lediglich durch den Exponenten n des Skalierungsfaktors: Beim Zwei-Schicht-Modell ist $n=1$; beim Penetrations- und Oberflächenerneuerungsmodell sowie beim Grenzschichtmodell mit mobiler Grenzfläche (reines Wasser) ist $n=1/2$; beim Grenzschichtmodell mit fester Grenzfläche (Oberflächenfilme) ist $n=2/3$.

Bei experimentellen Untersuchungen mit Gastracern unterschiedlicher Diffusivität wurden bei einer Skalierung des wasserseitigen Stoffübergangs mit Gleichung 6.8 Werte für n ermittelt, die zwischen 0,45 und 0,7 liegen (Jähne und Haußecker 1998; Munz und Roberts 1989; Roberts und Dändliker 1983; Smith et al. 1980; Tsivoglou 1967). Rathbun (1990) führte die Ergebnisse von insgesamt 14 Untersuchungen zum Gasaustausch flüchtiger organischer Substanzen zusammen. Dabei zeigte er, dass sich die wasserseitigen Übergangskoeffizienten im Mittel mit $n=0,536$ am besten aufeinander übertragen lassen. Hieraus wird deutlich, dass eine Skalierung des Stoffübergangs nicht mit Hilfe des Zwei-Schicht-Modells erfolgen sollte, da $n=1$ durch die experimentellen Befunde widerlegt ist. Wesentlich besser geeignet für Fließgewässer erscheint das Penetrations- bzw. Oberflächenerneuerungsmodell ($n=1/2$). Maximal scheint $n=2/3$ möglich zu sein, wobei dieser Maximalwert auf Grundlage des Grenzschichtmodells vor allem bei Oberflächenfilmen ohne ausgeprägte Wellen zu erwarten ist.

6.3.2 Wiederbelüftungsformeln

In den vergangenen Jahrzehnten wurde eine nahezu unermessliche Anzahl, zumeist empirischer Vorhersageformeln zur Stoffübergangsrate von Sauerstoff (Wiederbelüftungsrate) veröffentlicht. Umfassende Übersichten werden von Cirpka (1992), Moog und Jirka (1998) und McCutcheon (1989) gegeben. In Tabelle 6.1 sind einige dieser Formeln zusammengestellt, deren Anwendbarkeit auf den Neckar hier näher untersucht wird. Bei den 15 ausgewählten Formeln handelt es sich zum Einen um theoretisch gut fundierte Ansätze und zum Anderen um (halb)empirische Ansätze die entweder sehr gebräuchlich sind oder an Flüssen abgeleitet wurden, deren hydraulische Eigenschaften denen des Neckars nahe kommen.

Die meisten der angeführten halbempirischen Formeln basieren auf dem Dissipationsansatz, bei dem davon ausgegangen wird, dass der Gasaustausch in engem Zusammenhang mit der dissipierten Energie steht. Der Energieverlust wird durch das Energieliniengefälle I_E und die mittlere Fließgeschwindigkeit u gekennzeichnet. Es ist jedoch nicht klar, ob der Zusammenhang zwischen I_E und u einerseits und der Stoffübergangsrate andererseits linear ist (Roberts 1984). Letztlich bleiben die auf Grundlage des Dissipationsansatzes abgeleiteten Formeln daher empirischer Natur. Die einzelnen Autoren stellen mit statistischen Verfahren Beziehungen zwischen Messdaten zum Gasaustausch einerseits und dem Energieliniengefälle und der Fließgeschwindigkeit andererseits auf. Darüber hinaus wird häufig noch die Wassertiefe als Prädiktorvariable aufgenommen.

Die Ansätze von Churchill et al. (1962) und Lau (1972) basieren auf Dimensionsanalysen, wobei sie jedoch zu unterschiedlichen Ergebnissen bezüglich der relevanten Größen kommen (Tabelle 6.1). Wolf (1974) analysierte die von Churchill et al. (1962) und Owens et al. (1964) vorgelegten Daten und Formeln und gelangte zu dem Schluss, dass die Gerinnerauhgigkeit wesentlichen Einfluss auf den Gasaustausch hat, weshalb er den Stricklerbeiwert als zusätzliche Variable aufnahm. Seine Formel wurde durch Simulationen an größeren bayerischen Flüssen bestätigt. Moog und Jirka (1998) analysierten die Leistungsfähigkeit von insgesamt 10 Wiederbelüftungsformeln auf der Grundlage von Daten aus der Literatur, die überwiegend an relativ flachen Flüssen mit Tiefen unter 1,5 m gewonnen worden waren. Dabei leiten sie auch eigene empirische Formeln für die Wiederbelüftungsrate ab, wobei sie zwei Gefällebereiche unterschei-

den. Moog und Jirka (1998) zeigen zudem, dass bei Flüssen mit geringem Gefälle (kleiner 0,0004), der mittlere multiplikative Fehler des vorhergesagten k_2 bei der Annahme eines konstanten Wertes von $k_2=1,84$ (in 1/d) geringer ist als bei allen getesteten Vorhersageformeln. Sie führen das darauf zurück, dass der Gasaustausch bei geringem Gefälle stärker durch Windeinflüsse oder Oberflächenverunreinigungen beeinflusst wird als durch die hydraulischen Eigenschaften des Gewässers.

Tab. 6.1: In dieser Arbeit auf ihre Anwendbarkeit im Neckar untersuchte Wiederbelüftungsformeln.

Kürzel	Literaturstelle	Formel für k_2 20°C (in 1/d)	Bemerkungen
OD1	O'Connor und Dobbins (1958)	$134784 \cdot \sqrt{\frac{D_w \cdot u_0^*}{y^3}}$	Grundlage Oberflächenerneuerungsmodell; anisotrope Turbulenz (siehe Text); $\kappa = 0,41$
OD2	O'Connor und Dobbins (1958)	$86400 \cdot \sqrt{\frac{D_w \cdot u}{y^3}}$	Grundlage Oberflächenerneuerungsmodell; isotrope Turbulenz (siehe Text)
MJ1	Moog und Jirka (1999)	$13910 \cdot \left(\frac{D_w^2 \cdot u_0^{*3}}{\nu \cdot y^5} \right)^{1/4}$	Grundlage Oberflächenerneuerungsmodell; Modellversuche (siehe Text)
TK1	Thackston und Krenkel (1969)	$24,87 \cdot (1 + \sqrt{Fr}) \cdot \frac{u_0^*}{y}$	Modellversuche und Naturdaten aus der Literatur (siehe Text)
TK2	Thackston und Dawson (2001)	$4,97 \cdot (1 + 9 \cdot Fr^{1/4}) \cdot \frac{u_0^*}{y}$	Überarbeitung von TK1 auf Grundlage neuer Literaturdaten (siehe Text)
MJ2	Moog und Jirka (1998)	1,84	Daten aus 10 Publikationen; bester konstanter Wert für $I < 0,0004$ (siehe Text)
MJ3	Moog und Jirka (1998)	$5,59 \cdot I^{0,16} \cdot y^{0,73}$	Daten aus 10 Publikationen; für $I < 0,0004$ (siehe Text)
MJ4	Moog und Jirka (1998)	$1,74 \cdot u^{0,46} \cdot I^{0,79} \cdot y^{0,74}$	Daten aus 10 Publikationen; für $I > 0,0004$ (siehe Text)
LA	Lau (1972)	$1089 \cdot \frac{u_0^{*3}}{y \cdot u^2}$	Grundlage Dimensionsanalyse und Modellversuche
CH	Churchill et al. (1962)	$5,026 \cdot \frac{u}{y^{5/3}}$	Grundlage Dimensionsanalyse und Messungen am Tennessee
TN	Tsivoglou und Neal (1976)	$15300 \cdot u \cdot I$	Dissipationsansatz; Tracermessungen an 24 Flüssen; für Q zwischen 0,7 und 84 m ³ /s
KO	Krenkel und Orlob (1962)	$174 \cdot \frac{(u \cdot I)^{0,408}}{y^{0,66}}$	Dissipationsansatz; Modellversuche
RO	Roberts (1984)	$2896 \cdot (u \cdot I)^{0,808}$	Dissipationsansatz; eigene Messungen und Daten aus 8 Publikationen
MF	Melching und Flores (1999)	$142 \cdot \frac{(I \cdot u)^{0,333}}{y^{0,66} \cdot w^{0,243}}$	Empirisch; Daten aus Tracermessungen des USGS; $Q > 0,56$ m ³ /s
WO	Wolf (1974)	$\left(3 + \frac{40}{k_{st}} \right) \cdot \frac{u}{y^2} + \frac{0,5}{y}$	Dissipationsansatz mit Rauigkeitseinfluss im ATV-FGSM empfohlen

D_w [m²/s] Diffusionskoeffizient in Wasser, u_0^* [m/s] Sohlschubspannungsgeschwindigkeit; y [m] Wassertiefe; u [m] mittlere Fließgeschwindigkeit; ν [m²/s] kinematische Viskosität des Wassers; I Gefälle; hier Energieliniengefälle I_E ; Fr Froudezahl; k_{st} Stricklerbeiwert; w [m] Wasserspiegelbreite.

Die Formeln OD1, OD2 (O'Connor und Dobbins 1958), MJ1 (Moog und Jirka 1998) und TK1, TK2 (Thackston und Krenkel 1969; Thackston und Dawson 2001) basieren auf grundlegenden theoretischen Überlegungen, die in Ergänzung zu Kapitel 6.3.1 hier kurz erläutert werden sollen:

O'Connor und Dobbins (OD1/OD2): O'Connor und Dobbins (1958) bauen ihre Analyse des wasserseitig kontrollierten Stoffübergangs auf dem Oberflächenerneuerungsmodell (Gleichung 6.7) auf und versuchen die Erneuerungsrate r_{OB} aus zugänglichen hydraulischen Parametern abzuleiten. Hierzu unterscheiden sie in zwei Formen der Turbulenz, isotrope und anisotrope Turbulenz. Anisotrope Turbulenz liegt bei ausgeprägten Geschwindigkeitsprofilen vor, wohingegen isotrope Turbulenz durch vernachlässigbare Geschwindigkeitsgradienten gekennzeichnet ist. Letztere ist gemäß O'Connor und Dobbins (1958) vor allem in tiefen, langsam fließenden Gewässern zu erwarten. Wie für die Eddy Modelle (LEM und SEM) ausgeführt, gehen O'Connor und Dobbins davon aus, dass die Erneuerungsrate linear mit $|\overline{u}|$ ansteigt und r_{OB} umgekehrt linear mit der Größe der beteiligten Turbulenzwirbel (Prandtl'scher Mischungsweg) abnimmt. Da beide Größen nahe der Oberfläche zur Grenzfläche hin linear abnehmen, ist ihr Quotient konstant. Im anisotropen Fall kann daher auf Grundlage der Prandtl'schen Mischungsweganalyse (Schlichting 1951) gefolgert werden, dass die Oberflächenerneuerungsrate r_{OB} dem Geschwindigkeitsgradienten an der Oberfläche entspricht; $r_{OB} = du/dy$. Den gesuchten Geschwindigkeitsgradienten erhalten O'Connor und Dobbins (1958) indem sie vom universellen logarithmischen Geschwindigkeitsprofil ausgehen. Die Oberflächenerneuerungsrate r ergibt sich demnach für den anisotropen Fall aus: $r_{OB} = u_0^* / \kappa \cdot y$. Wobei u_0^* die Schubspannungsgeschwindigkeit und κ die dimensionslose von Kármán Konstante ist. Für κ wird im Allgemeinen ein Wert von 0,41 angesetzt (Thibodeaux 1996). Für den Stoffübergangskoeffizienten folgt daher im anisotropen Fall (OD1):

$$K = \sqrt{\frac{D_w \cdot u_0^*}{\kappa \cdot y}} \quad (6.10)$$

An der theoretischen Ableitung ist allerdings zu kritisieren, dass gemäß dem zugrunde gelegten logarithmischen Geschwindigkeitsprofil die Fließgeschwindigkeit an der Wasseroberfläche maximal und der Geschwindigkeitsgradient positiv sein müsste. Aus Messungen ist bekannt, dass die Geschwindigkeit nahe der Oberfläche wieder abnimmt und somit der Gradient negativ ist.

Im Falle isotroper Turbulenz ist der Geschwindigkeitsgradient per Definition nahe der Oberfläche quasi Null, weshalb dieser nicht zur Ableitung der Oberflächenerneuerungsrate verwendet werden kann. Für diesen Fall leiten O'Connor und Dobbins aus Messungen am Mississippi ab, dass die Länge des Mischungswegs in etwa 10 % der Wassertiefe und die Schwankungen der Geschwindigkeit in etwa 10 % der mittleren Fließgeschwindigkeit betragen. Aus der Verallgemeinerung dieser Ergebnisse ergibt sich für den Fall isotroper Turbulenz, dass $r_{OB} = 0,1 \cdot u / (0,1 \cdot y) = u / y$ ist, wobei u die mittlere Fließgeschwindigkeit bezeichnet. Für den Stoffübergangskoeffizient bei isotroper Turbulenz gilt daher (OD2):

$$K = \sqrt{\frac{D_w \cdot u}{y}} \quad (6.11)$$

Im Gegensatz zu OD1 gemäß Gleichung 6.10 hat OD2 (Gleichung 6.11), die später auch von O'Connor (1958) zur allgemeinen Anwendung empfohlen wurde, weite Verbreitung bei der Schätzung der Wiederbelüftung erlangt. Wenngleich spätere Messungen zeigten, dass die Turbulenz nahe der Wasseroberfläche immer anisotrop wird (Brumley 1984), scheint dieser zweite Ansatz insbesondere in tiefen, langsam fließenden Gewässern – für die er ursprünglich entwickelt wurde – erfolgreich zu sein (Chapra 1997). Beide von O'Connor und Dobbins abgeleiteten Ansätze sind konsistent mit dem „Large Eddy Model“. Sie können auch für andere wasserseitig kontrollierte Stoffe bzw. andere Temperaturen verwendet werden, da sie den Einfluss des Diffusionskoeffizienten explizit berücksichtigen.

Moog und Jirka (MJ1): Auch Moog und Jirka (1999) analysieren die von ihnen und anderen Autoren durchgeführten Modellversuche auf Grundlage des Oberflächenerneuerungsmodells. Im Gegensatz zu O'Connor und Dobbins (1958) gelangen sie jedoch zu dem Ergebnis, dass in den von ihnen durchgeführten Laborexperimenten der Sauerstoffübergang mit dem „Small Eddy Model“ beschrieben werden muss.

Sie leiten eine Formel für den Stoffübergangskoeffizienten bei gleichförmigem Abfluss in dimensionsloser Form ab, die dimensionsbehaftet wie folgt ausgedrückt werden kann:

$$K = \sqrt{D_w} \cdot \left(\frac{u_0^{*3}}{\nu \cdot y} \right)^{1/4} \quad (6.12)$$

Wobei ν die kinematische Viskosität des Wassers ist. Die Autoren verweisen ausdrücklich darauf, dass ihr Ansatz nur gültig ist sofern Wind keine Rolle für die oberflächennahe Turbulenz spielt. Auch dieser Ansatz kann ohne Skalierungsfaktor für andere wasserseitig kontrollierte Substanzen und andere Temperaturen verwendet werden, da der Diffusionskoeffizient explizit enthalten ist.

Thackston und Krenkel (TK1/TK2): Thackston und Krenkel (1969) stellen ebenfalls eine theoretisch basierte Formel für die Wiederbelüftung über die Wasseroberfläche vor. Ihre Analyse geht davon aus, dass die Oberflächenerneuerungsrate eine Funktion des turbulenten vertikalen Diffusionskoeffizienten ϵ_y an der Wasseroberfläche und der Wassertiefe y ist. Hieraus leitet sich die Grundannahme ab, wonach K proportional zum Quotienten aus ϵ_y an der Oberfläche und der Wassertiefe ist. Wenngleich die Autoren grundsätzlich von einer Oberflächenerneuerungsrate ausgehen, ist zu beachten, dass die Annahme $K \propto \epsilon_y / y$ nicht konsistent mit dem Oberflächenerneuerungsmodell ist. Auf Grundlage der Arbeiten von Al-Saffar (1964) leiten die Autoren ab, dass für ϵ_y an der Wasseroberfläche folgende Beziehung gilt: $\epsilon_y \propto y \cdot u_0^*$. In Verbindung mit der Grundannahme folgt daraus $K \propto u_0^*$. Der Argumentation von Dobbins (1964) folgend, versuchen Thackston und Krenkel auch zu berücksichtigen, dass die Wasseroberfläche nicht glatt sondern gewellt ist und die für den Stoffübergang tatsächlich zur Verfügung stehende Oberfläche somit größer ist, als die zweidimensionale Projektion der Wasseroberfläche. Für die notwendige Korrektur wird die Froudezahl (Fr) herangezogen. Letztlich gelangen Thackston und Krenkel auf Grundlage der Feldmessungen von Churchill et al. (1962), sowie ihrer eigenen und der von O'Connor und Dobbins (1958) vorgelegten Modellversuche, zu folgender Vorhersageformel (TK1):

$$K = 24,87 \cdot (1 + \sqrt{Fr}) \cdot u_0^* \quad (6.13)$$

In mehreren Untersuchungen wurde deutlich, dass TK1 im Bereich geringer Fließgeschwindigkeiten bzw. Froudezahlen die Wiederbelüftungsrate tendenziell überschätzt (Moog und Jirka 1998; Tsivoglou und Wallace 1972). Vor diesem Hintergrund haben Thackston und Dawson (2001) TK1 mit neueren Daten aus der Literatur kalibriert, was zu TK2 führte:

$$K = 4,97 \cdot (1 + 9 \cdot Fr^{1/4}) \cdot u_0^* \quad (6.13)$$

wobei sich im Bereich mittlerer bis hoher Froudezahlen kaum Unterschiede zu TK1 ergeben, bei geringen Froudezahlen die mit TK2 ermittelte Wiederbelüftungsrate aber deutlich unter der mit TK1 ermittelten liegt. Beide Formeln sind nur für Sauerstoff bei einer Wassertemperatur von 20 °C gültig. Da sie nicht konsistent mit dem Oberflächenerneuerungsmodell (oder einem der anderen konzeptionellen Modelle) sind, muss für andere Stoffe bzw. Temperaturen eine Korrektur erfolgen.

6.3.3 Befunde zum Gasaustausch auf der Fließstrecke zwischen Obertürkheim und Ludwigsburg

Auswertungsmethoden

Die Tauglichkeit der Wiederbelüftungsformeln wurde auf der Flussstrecke zwischen Obertürkheim und Poppenweiler ermittelt (Abb. 6.1). Für die Strecke zwischen Deizisau und Obertürkheim konnte keine solche Auswertung vorgenommen werden, da keine komplette Quervermischung des Gastracers gegeben war, bzw. im Bereich der Staustufe Obertürkheim ein beträchtlicher Teil des Abflusses über das Kanalsystem der Stadt Esslingen umgeleitet wird.

Abfluss- und Transportmodell: Die Auswertung erfolgte mit Hilfe eines eindimensionalen numerischen Transportmodells, das auf dem Programmpaket AQUASIM 2.0 basiert (Reichert 1998a; Reichert 1998b). Hierzu wurden zunächst die von der Wasser- und Schifffahrtsverwaltung erhobenen Querprofile implementiert, so dass jedem Wasserstand ein entsprechender durchflossener Querschnitt A, ein benetzter Um-

fang P und ein hydraulischer Radius r_{hy} zugeordnet werden kann (Kern et al. 1996). Die Fortpflanzung der Abflusszustände wurde mit der diffusiven Wellenapproximation der *Saint-Venant-Gleichungen* berechnet (Kapitel 2.2.1). Die hierzu notwendige Ermittlung des Energieliniengefälles I_E basiert auf der Strickler-Gleichung, wobei die Kalibrierung der Stricklerbeiwerte k_{st} anhand von Hochwasserständen erfolgte (Karnahl 1998). Der Stofftransport wird mit der eindimensionalen Advektions-Dispersionsgleichung berechnet, wobei der longitudinale Dispersionskoeffizient E_x wie folgt abgeschätzt wurde (Kapitel 2.2.1; Fischer et al. 1979):

$$E_x = 0,011 \cdot \frac{w^2 \cdot u^2}{u_0^* \cdot y} \quad (6.14)$$

Hierin ist w die Wasserspiegelbreite. Die Güte des konservativen advektiv-dispersiven Transportmodells wurde anhand der ARG Durchbruchskurven überprüft (siehe unten).

Modellierung des SF₆ Transports: Zudem wurden die in Tabelle 6.1 aufgeführten Formeln für den Gasaustausch innerhalb von AQUASIM programmiert. Bei den empirischen Formeln, die Temperatureffekte bzw. unterschiede im molekularen Diffusionskoeffizienten nicht explizit enthalten, erfolgte eine Umrechnung auf SF₆ und die gemessene Wassertemperatur. Die Temperaturkorrektur der auf 20°C normierten Wiederbelüftungsraten erfolgte mit dem bei der Modellierung der Gewässergüte üblichen Arrheniusansatz (Chapra 1997):

$$k_2(T_w) = k_2(20^\circ\text{C}) \cdot \Theta^{(T_w-20)} \quad (6.15)$$

Wobei T_w die aktuelle Wassertemperatur in °C ist und für den Korrekturfaktor Θ ein Wert von 1,024 angesetzt wurde (Biswas 1997; Brown und Barnwell 1987; Chapra 1997). Die Skalierung für die Unterschiede im Diffusionskoeffizienten von O₂ und SF₆ erfolgte gemäß Gleichung 6.8 mit $n=1/2$, also im Einklang mit Oberflächenerneuerungs- bzw. Penetrationsmodell. Dabei wurden die in Tabelle 6.2 angeführten Diffusionskoeffizienten verwendet. In Tabelle 6.2 sind zu Vergleichszwecken darüber hinaus auch die Skalierungsfaktoren für $n=2/3$ angegeben.

Tab. 6.2: Henry- und Diffusionskoeffizienten von Sauerstoff und SF₆ in Wasser, sowie Skalierungsfaktoren zur Umrechnung der Gasaustauschraten von O₂ auf SF₆ für verschiedene Wassertemperaturen und konzeptionelle Modelle.

Wasser- temp. (in °C)	O ₂		SF ₆		Skalierungsfaktor gemäß Gleichung 6.8	
	*H	§D _w (in 10 ⁻⁹ m ² /s)	*H	+D _w (in 10 ⁻⁹ m ² /s)	mit n=1/2	mit n=2/3
10	25,6	1,52	122	0,74	0,70	0,62
15	28,0	1,67	136	0,88	0,72	0,65
20	30,3	2,01	151	1,03	0,71	0,64
25	32,6	2,42	170	1,18	0,70	0,62

* (Fry et al. 1995); § (Lide 1999); + (Reid et al. 1988)

Als Eingangsdaten in die numerische Berechnung gingen die gemessenen ARG und SF₆-Konzentrationen am Wehr Obertürkheim, die gemessenen Abflüsse an den Pegeln Plochingen (Neckar) und Neustadt (Rems) sowie ein als konstant angenommener Abfluss von 2 m³/s aus der Kläranlage Stuttgart-Mühlhausen ein.

Fehlermaße: Um die Abweichungen zwischen berechneter und gemessener SF₆-Konzentration für die verschiedenen Wiederbelüftungsformeln bewertend zu vergleichen, wurden vier Fehlermaße berechnet. Der mittlere differentielle Fehler MDF ist ein Maß für die mittlere absolute Abweichung der berechneten Konzentrationen c_{ber} von den gemessenen Konzentrationen c_{gem} :

$$MDF = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n |c_{ber,i} - c_{gem,i}| \quad (6.16)$$

Der mittlere differentielle Fehler entspricht somit dem Quadrat des Standardfehlers SF, dem am weitesten verbreiteten Fehlermaß:

$$SF = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{(c_{ber,i} - c_{gem,i})^2}{n}} \quad (6.17)$$

Ebenfalls eng verknüpft mit den beiden oben angeführten Fehlermaßen ist der normierte mittlere differentielle Fehler NDF, der für die mittlere prozentuale Abweichung steht:

$$NDF = \frac{100}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{|c_{ber,i} - c_{gem,i}|}{c_{gem,i}} \quad (6.18)$$

Da die berechneten Konzentrationen auf der Seite minimaler Werte, d.h. linksseitig durch 0 begrenzt sind, sind differentielle Fehler zumeist rechtsschief verteilt (Sachs 1992). Dadurch besteht bei differentiellen Fehlermaßen die Gefahr, dass solche Wiederbelüftungsformeln, die die Gaskonzentration systematisch unterschätzen besser bewertet werden, als solche die die Gaskonzentration systematisch überschätzen. Um dem zu entgegen wurde zusätzlich noch ein multiplikatives Fehlermaß, der sogenannte mittlere multiplikative Fehler MMF gemäß Moog und Jirka (1998) berechnet:

$$MMF = \exp \left[\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \ln \left(\frac{c_{ber,i}}{c_{gem,i}} \right) \right] \quad (6.19)$$

Der MMF beruht auf dem natürlichen Logarithmus des Quotienten aus berechneter und gemessener Konzentration. Damit bewirkt eine Überschätzung der Konzentration um den Faktor 2 denselben Beitrag zum Fehler wie eine Unterschätzung um den Faktor 2. Dies ist der wesentliche Unterschied gegenüber den differentiellen Fehlermaßen, bei denen die Unterschätzung um die Hälfte als kleinerer Fehler eingestuft wird, als die Überschätzung um das Doppelte. Der MMF gibt damit an, um welchen Faktor die berechnete Konzentration im Mittel von der gemessenen abweicht. Zudem wurden lineare Regressionen der berechneten gegen die gemessenen SF₆-Konzentrationen durchgeführt. Die Abweichung des Achsenabschnitts von Null kann als Maß für systematische Fehleinschätzungen dienen, während die Abweichungen der Steigung von 1,0 ein Maß dafür ist, ob die Vorhersageformel eine Tendenz zur Verzerrung aufweist (Hooper et al. 1990).

Ergebnisse des Tracerversuchs

Konservativer Transport: Bevor eine Bewertung der Wiederbelüftungsformeln erfolgen konnte, musste zunächst überprüft werden, ob der konservative Transport mit dem numerischen Modell korrekt beschrieben wird. Abbildung 6.4 zeigt zu diesem Zweck einen Vergleich zwischen den berechneten und gemessenen Durchbruchkurven von ARG an den Wehren Hofen und Aldingen. Insgesamt wird der konservative Transport durch das numerische Modell gut beschrieben. In beiden Fällen werden die Konzentrationsspitzen jedoch leicht überschätzt. In Hofen scheint zudem die gemessene Konzentrationsspitze wenige Stunden vor der berechneten durchzubrechen, wohingegen in Aldingen der berechnete und gemessene Verlauf gut übereinstimmen. Da nicht die gesamten Durchbruchkurven erfasst wurden, war keine exakte Massenbilanzierung des ARG möglich. Eine Abschätzung für Aldingen erbrachte jedoch, dass ca. 10 kg ARG zwischen 55 und 90 h zurückerhalten wurden. Wenngleich diese Aussage aufgrund der Unsicherheiten bzgl. ARG Konzentration und Abfluss mit einer Ungenauigkeit von etwa 10 % behaftet ist, verdeutlicht die Bilanz dennoch, dass Tracerverluste nicht für die Diskrepanz zwischen berechneter und gemessener Konzentration verantwortlich sind. Als Hauptursachen für die vor allem in Hofen beobachteten Unterschiede sind daher vermutlich die bei der eindimensionalen Modellierung nicht Berücksichtigten Effekte von Schleusungsvorgängen und Totwasserbereichen zu nennen.

In Hinblick auf die Auswertung der SF₆-Konzentrationen ist zu berücksichtigen, dass der Gastracer nicht in Form eines Dirac-Impulses sondern kontinuierlich eingeleitet wurde und Dispersionseffekte daher eine

wesentlich kleinere Rolle spielen als bei den ARG-Durchbruchskurven. Folglich wurde darauf verzichtet das numerische Transportmodell anhand der ARG Durchbruchskurven zu kalibrieren, vielmehr wurde es in seiner vorliegenden Form als geeignet erachtet, um eine Bewertung der Wiederbelüftungsformeln vorzunehmen.

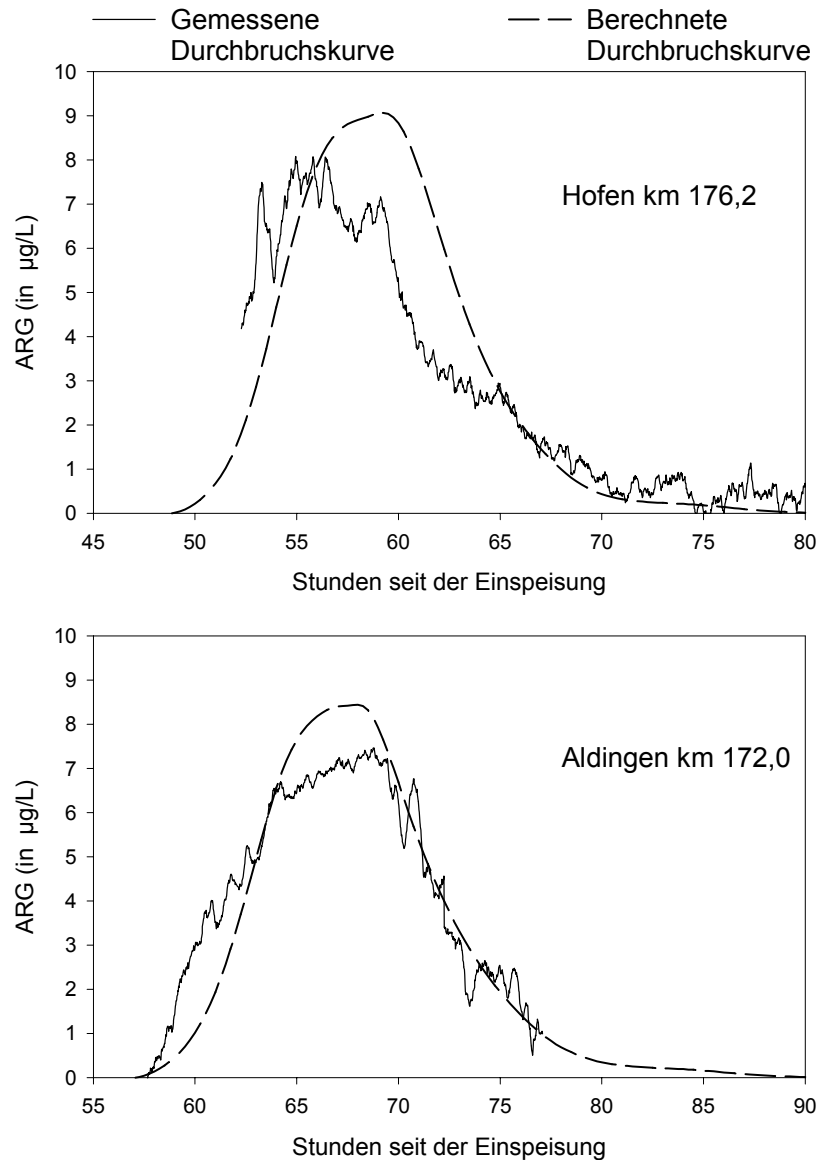


Abb. 6.4: Vergleich zwischen gemessenen und mit dem Transportmodell berechneten Durchbruchskurven des konservativen Tracers ARG.

Bewertung der Wiederbelüftungsformeln: In Tabelle 6.3 sind die Fehlermaße aufgeführt, die sich für die 15 untersuchten Vorhersageformeln anhand der 46 Mehrfachmessungen von SF_6 an den Wehren zwischen Untertürkheim und Poppenweiler ergaben. Die Verteilungen der normierten differentiellen und der multiplikativen Fehler sind in Abbildung 6.5 dargestellt. Zusätzlich zu den in Tabelle 6.1 aufgeführten Vorhersageformeln wurde untersucht, wie gut sich die Messwerte mit einer konstanten Stoffübergangsrate k_2 bzw. einem konstanten Stoffübergangskoeffizienten K beschreiben lassen. Hierzu wurden die jeweils optimalen konstanten Werte für k_2 bzw. K ermittelt, indem MMF iterativ minimiert wurde. Die Fehlermaße, die sich bei Verwendung der optimierten Stoffübergangsrate bzw. des optimierten Stoffübergangskoeffizienten ergeben, sind in Tabelle 6.3 und Abbildung 6.5 ebenfalls dargestellt. Abbildung

6.6 zeigt zur weiteren Interpretation einen Vergleich zwischen berechneten und gemessenen Konzentrationen für die beiden am besten bewerteten Formeln und die konstante Stoffübergangsrate.

Tab. 6.3: Fehlermaße für die beim Gastracerversuch am Neckar untersuchten Wiederbelüftungsformeln. Datengrundlage: 46 SF₆-Mehrfachmessungen an den 5 Wehren zwischen Untertürkheim und Poppenweiler.

Formel	MDF	SF	NDF (%)	MMF	Steigung Regression	Achsenab. Regression
OD1	2,46	1,57	18,9	1,18	0,94	3,06
OD2	1,59	1,26	12,0	1,12	0,95	1,55
MJ1	2,91	1,71	22,7	1,21	0,92	3,84
TK1	2,75	1,66	21,2	1,20	0,94	3,43
TK2	3,06	1,75	23,5	1,22	0,94	3,81
MJ2	9,40	3,07	63,8	3,81	0,71	-5,03
MJ3	8,77	2,96	59,8	3,18	0,75	-4,94
MJ4	3,47	1,86	26,6	1,25	0,93	4,31
LA	3,35	1,83	25,7	1,24	0,93	4,16
CH	2,60	1,61	20,0	1,19	0,94	3,21
TN	3,44	1,85	26,3	1,25	0,93	4,26
KO	1,98	1,41	15,2	1,15	0,94	2,43
RO	3,35	1,83	25,7	1,24	0,93	4,15
MF	2,09	1,45	16,1	1,15	0,94	2,57
WO	1,51	1,23	11,2	1,12	0,95	0,63
$k_{2,SF_6}=\text{const.}$ =0,168 1/d	1,52	1,23	11,2	1,12	0,95	0,50
$K_{SF_6}=\text{const.}$ =0,576 m/d	1,52	1,23	11,3	1,12	0,95	0,68

Von den 15 untersuchten Wiederbelüftungsformeln schneidet die von Wolf (1974) vorgeschlagene Formel für alle Fehlermaße am besten ab, wobei mittlere Abweichungen um ca. 11% bzw. den Faktor 1,12 ermittelt wurden. Lediglich die von O'Connor und Dobbins (1958) für isotrope Turbulenz vorgeschlagene Formel (OD2) kann ähnlich gut bewertet werden, danach folgen KO und MF. Sowohl mit einer konstanten Stoffübergangsrate k_{2,SF_6} als auch mit einem konstanten Stoffübergangskoeffizienten K_{SF_6} lassen sich ähnlich gute Ergebnisse wie mit der Formel nach Wolf erzielen.

Das gute Abschneiden von WO steht im Einklang mit den Empfehlungen für das ATV-FGSM (Müller 2001a), wonach dieser Ansatz vor allem für tiefe, langsam fließende Gewässer empfohlen wird. Die ebenfalls sehr guten Ergebnisse mit OD2 in dem durchschnittlich etwa 3,5 m tiefen Neckarabschnitt decken sich mit der Analyse von Thackston und Krenkel (1969), wonach OD2 vor allem bei Abflusstiefen über 2 m zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Thackston und Krenkel zeigten jedoch auch, dass die Grundannahmen von OD2 (siehe oben) nur für solche Mindestwassertiefen gelten, wohingegen für geringere Wassertiefen erhebliche Fehleinschätzungen in beide Richtungen resultieren können. Dies erklärt, wes-

halb OD2 im Gegensatz zu der vorliegenden Untersuchung in der Analyse von Moog und Jirka (1998), in die überwiegend flache Gewässer mit $y < 1,5$ m einging, schlecht bewertet wurde.

Hinsichtlich der anderen Formeln ist besonders auffällig, dass die von Moog und Jirka (1998) auf Grundlage von Literaturdaten für Fließgewässer mit geringem Gefälle abgeleiteten Formeln MJ2 und MJ3 die gemessenen SF_6 -Konzentrationen stark unterschätzen (Abb.6.5). Diese grobe Überschätzung der Stoffübergangsrate ist offenbar darauf zurückzuführen, dass MJ2 und MJ3 rein empirisch für Gewässer ermittelt wurden, die wesentlich flacher ($y < 1,5$ m) sind als der Neckar und somit einem intensiveren Gasaustausch unterliegen. Dies verdeutlicht nachdrücklich, dass rein empirische Formeln auf keinen Fall auf Gewässer mit grundlegend anderen Randbedingungen übertragen werden sollten.

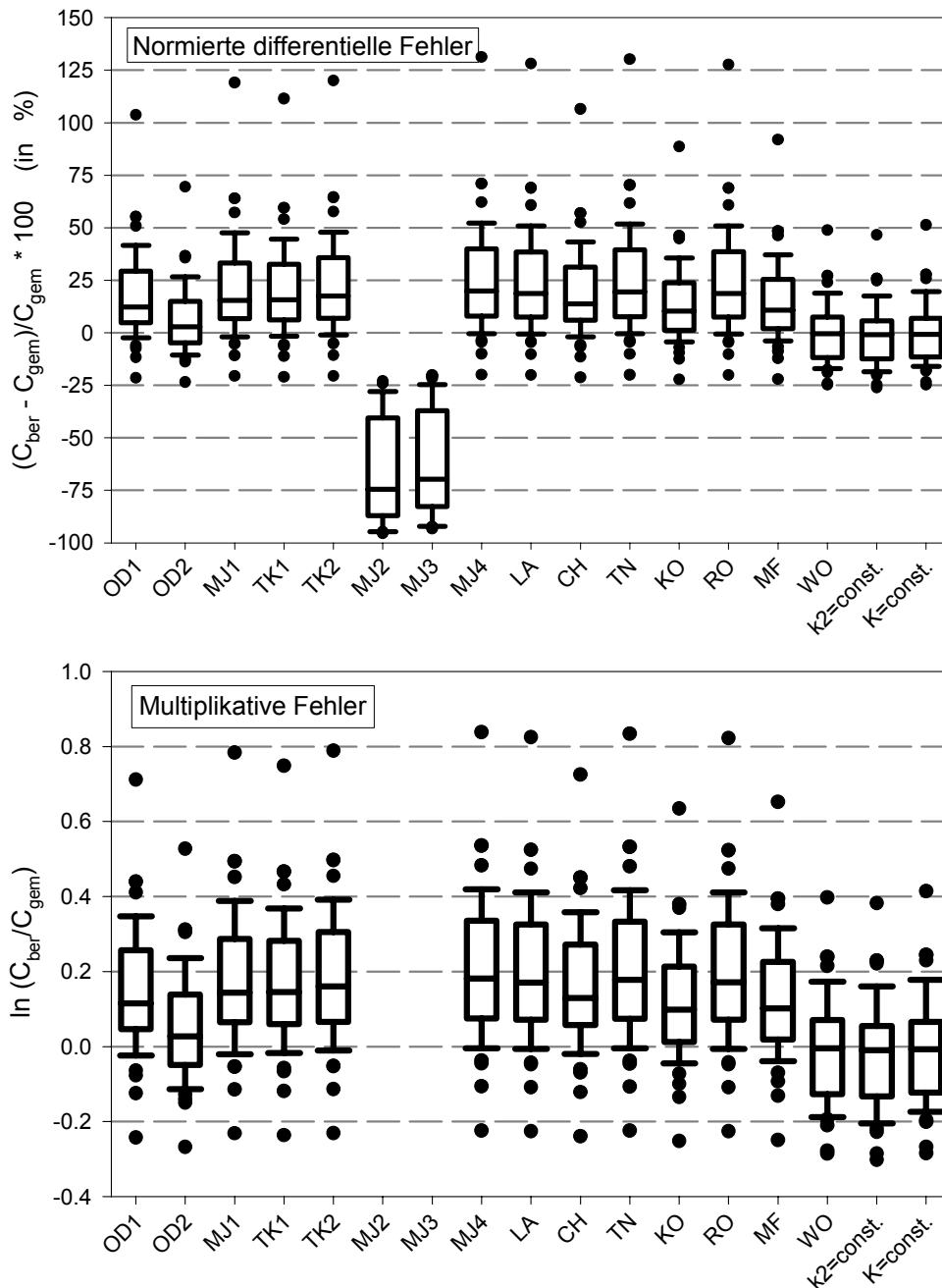


Abb. 6.5: Verteilung der normierten differentiellen Fehler und der multiplikativen Fehler für die untersuchten Wiederbelüftungsformeln. Multiplikative Fehler für MJ2 und MJ3 nicht dargestellt, da diese kleiner $-0,4$ sind.

Wie Abbildung 6.5 und die durchweg positiven Achsenabschnitte der Regressionen belegen, neigen alle anderen Formeln mit Ausnahme von WO zur Überschätzung der SF₆-Konzentration und somit zu einer Unterschätzung des Gasaustausches. Dabei ist zu beachten, dass für alle Formeln mit Ausnahme von OD1, OD2 und MJ1 eine Skalierung mit den Gleichungen 6.8 und 6.15 erfolgte, wobei in Gleichung 6.8 der Exponent n=1/2 verwendet wurde. Wäre statt dessen n=2/3 verwendet worden, der gemäß der Grenzschichttheorie bei starken Oberflächenfilmen zu verwenden ist, wäre bei den empirischen Formeln der berechnete Stoffübergang für SF₆ geringer. Für WO ergäbe sich dabei mit einem NDF von 10,9 % und einem MMF von 1,11 sogar ein geringfügig besseres Ergebnis. Bei allen anderen Formeln (mit Ausnahme von OD1, OD2 und MJ1) wären die Fehleinschätzungen bei n=2/3 etwas größer als bei n=1/2 (Daten nicht dargestellt).

Die Aussagekraft der Steigungen der Regressionen ist im vorliegenden Fall stark eingeschränkt, da nicht zu erwarten ist, dass die Fehleinschätzungen eine Funktion der Gaskonzentration sind. Daher ist es nicht überraschend, dass die Steigungen mit Ausnahme von MJ2 und MJ3 nahe bei 1,0 liegen.

Als optimale konstante Werte für den Gasaustausch von SF₆ wurden $k_{2,SF_6}=0,168$ 1/d und $K_{SF_6}=0,576$ m/d ermittelt. Die Wassertemperatur lag während der gesamten Versuchsdauer bei 15 ± 1 °C, so dass dies für Sauerstoff bei 20 °C Werten von $k_2=0,26$ 1/d bzw. $K=0,90$ m/d entspricht.

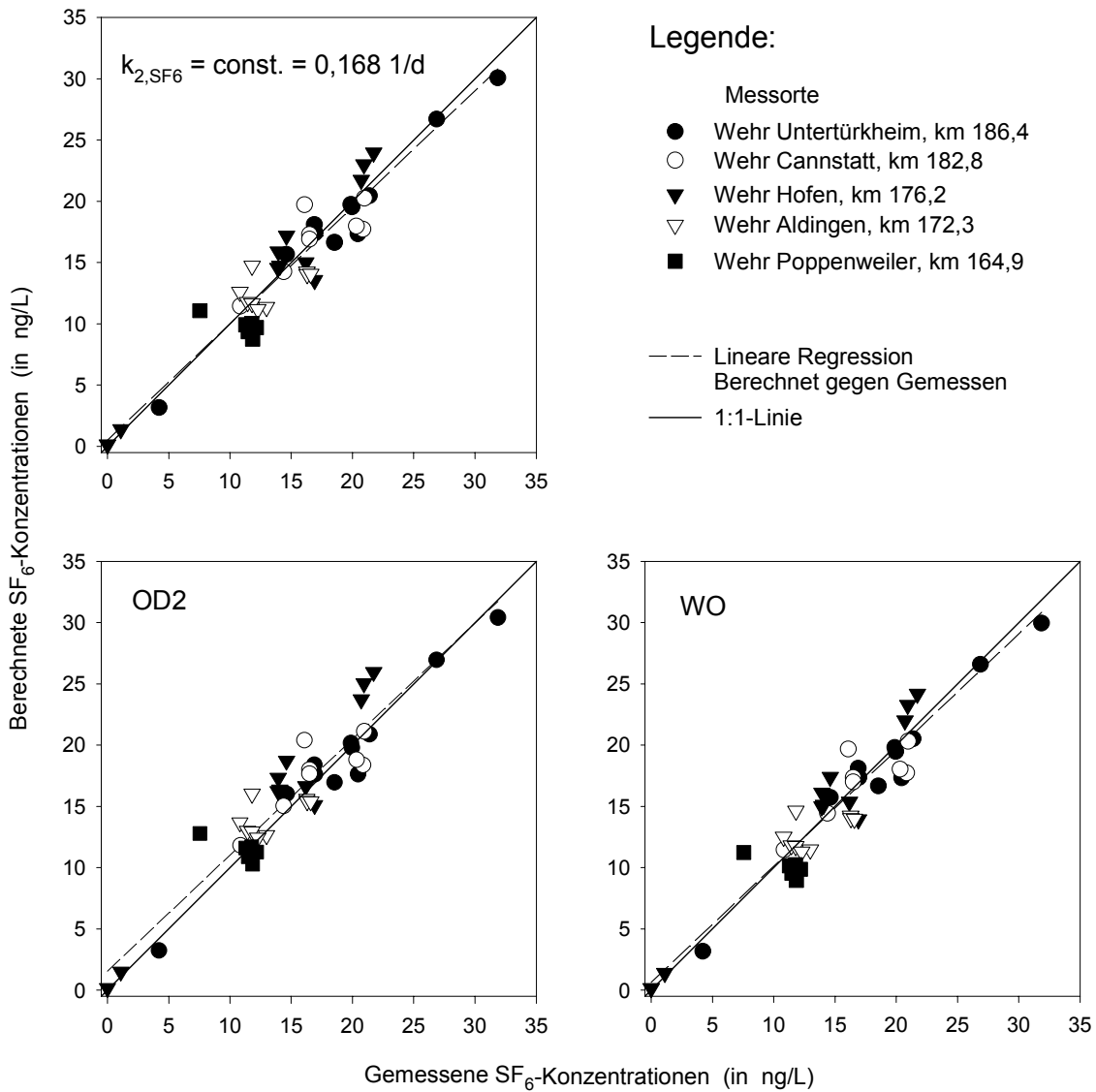


Abb. 6.6: Vergleich zwischen berechneten und gemessenen SF₆-Konzentrationen für die optimale konstante Gasübergangsrate $k_{2,SF_6}=\text{const.}$, sowie die Wiederbelüftungsformeln OD2 und WO.

Dass der experimentell ermittelte Gasaustausch mit einer konstanten Austauschrate bzw. einem konstanten Übergangskoeffizienten ähnlich gut wie mit WO beschrieben werden kann, verdeutlicht dass die Bedingungen für den Gasaustausch sowohl zeitlich als auch räumlich recht homogen sind. Die räumliche Homogenität wird auch dadurch untermauert, dass die Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten SF_6 -Konzentrationen weder bei $k_2=\text{const.}$ noch bei OD2 oder WO an bestimmten Wehren eine ausgeprägte Tendenz zur Über- oder Unterschätzung aufweisen (Abb. 6.6). Unterschieden sich die einzelnen Strecken hinsichtlich des Gasaustausches signifikant, so müsste sich dies bei einem konstanten k_2 in systematischen Fehleinschätzungen an einzelnen Probenahmestellen manifestieren.

Das gute Abschneiden des konstanten Stoffübergangskoeffizient K ließe sich auch dahingehend interpretieren, dass nicht die Turbulenz im Fluss, sondern ein anderer Faktor wie z.B. der Wind für den Gasaustausch maßgebend ist. Im vorliegenden Fall ist dieser Schluss jedoch nicht zwingend, da die hydraulischen Bedingungen gemittelt über die einzelnen Stauhaltungen nur geringfügig variieren. In Hinblick auf die mittlere Wassertiefe wird dies dadurch belegt, dass mit einer konstanten Stoffübergangsrate k_2 genauso gute Ergebnisse erzielt werden wie mit einem konstanten Übergangskoeffizienten K : Die längs gemittelten Wassertiefen der untersuchten Stauhaltungen sind mit jeweils ca. 3,5 m sehr ähnlich. Gleiches gilt für die Fließ- und Schubspannungsgeschwindigkeiten, wobei diese innerhalb einer Stauhaltung zwar stark variieren, sich die längs gemittelten Werte von Stauhaltung zu Stauhaltung jedoch kaum unterscheiden. Während der gesamten Dauer des Tracerversuchs herrschte ruhige Witterung vor. Die Windstärken an der Klimastation Stuttgart-Neckartal variierten während der Versuchsdauer zwischen 0 und 2 Beaufort (entspricht 0 bis 3 m/s in 2 m über Grund). Es erscheint also plausibel, dass bei einem durch den Wind gesteuerten Gasübergang K (und aufgrund der einheitlichen Wassertiefe auch k_2) zeitlich relativ konstant war. Allerdings wäre dann auch zu erwarten, dass die Streuung der Fehler kleiner ist als bei einer auf den hydraulischen Bedingungen basierenden Formel, was nicht der Fall ist. Anhand der Daten lässt sich nicht zweifelsfrei klären, ob der Gasaustausch durch die sohlinduzierte oder durch die vom Wind induzierte Turbulenz gesteuert wurde. Möglicherweise beeinflussen sowohl die flussspezifischen Bedingungen als auch Windeffekte den Stoffübergang in dem untersuchten Abschnitt (vgl. Jirka 1994).

Wenngleich der gemessene Gasaustausch sowohl mit WO als auch mit OD2 gut erklärt werden konnte, muss offen bleiben, ob die theoretischen Grundlagen der Formeln im vorliegenden Fall Gültigkeit besitzen. Da die Windgeschwindigkeiten während des Versuchs recht gering waren, erscheinen beide Formeln aber in jedem Fall geeignet, um im Bereich von Niedrig- bis Mittelwasser ein „worst case scenario“ hinsichtlich der Wiederbelüftung zu prognostizieren. Auf Grundlage der Ergebnisse erscheinen WO und OD2 geeignet zur Verwendung in numerischen Modellen zur Simulation des Sauerstoffhaushalts im schiffbaren Neckar. Alternativ kann für Abflüsse kleiner MQ mit einem konstanten Werte von $k_2=0,9/y$ (bei 20 °C) gerechnet werden. Für den Gasaustausch anderer leicht flüchtiger Substanzen ($H>0,5$) kann ebenfalls WO, OD2 oder ein konstanter Übergangskoeffizient verwendet werden. Wird WO oder der konstante Übergangskoeffizient verwendet, müssen diese mit Gleichung 6.8 unter Verwendung des Exponenten $n=1/2$ skaliert werden.

6.4 Gasaustausch beim freien Wehrüberfall

6.4.1 Theorie des Gasaustauschs an freien Überfällen

Grundlegendes

An dieser Stelle wird lediglich auf den Gasaustausch an Überfallwehren mit ebenem, belüftetem Strahl eingegangen, da diese Wehre am Neckar dominieren. Der Gasaustausch an solchen freien Überfällen lässt sich grundsätzlich in zwei Phasen unterteilen: die Fallphase, bei der Gas zwischen dem fallenden Strahl und der Umgebungsluft ausgetauscht wird und die Eintauchphase, bei der der Gasaustausch an Luftblasen stattfindet, die mit dem eintauchenden Strahl in das Unterwasser eingetragen wurden (Kobus 1985; Lakso 1988).

Während des Falls nimmt die Turbulenzintensität und damit die Rauheit des Strahls zu, die turbulente Grenzschicht breitet sich von den Rändern des Strahls zu dessen Zentrum hin aus. Hat die Grenzschicht das Zentrum des Strahls erreicht, so zerfällt bzw. zerstäubt dieser. Bei einem zweidimensionalen belüfteten Strahl, wie er sich an freien Überfallwehren einstellt, ergibt sich die kritische Fallhöhe (h_{krit}) bei der ein Strahl zerfällt nach Untersuchungen von Horeni (1956), die von Avery und Novak (1978) bestätigt wurden, aus folgender Beziehung:

$$h_{\text{krit}} = 5,89 \cdot q^{0,319} \quad (6.20)$$

Dabei ist q der spezifische Abfluss (in $\text{m}^3/\text{s}/\text{m}$) über das Wehr. Bei kompakten, nicht zerfallenen Strahlen ist der Gasaustausch während des freien Falls trotz vergrößerter Oberfläche und hoher Turbulenz aufgrund der kurzen Fallzeit relativ gering. Erst beim Zerstäuben der Strahlen tritt eine deutliche Erhöhung des Gasübergangs während der Fallphase auf (Hanisch 1979). Allerdings tragen kompakte, raue Strahlen wesentlich mehr Luft in das Unterwasser ein als bereits zerfallene Strahlen, weshalb der gesamte Gasaustausch bei kompakten, rauen Strahlen höher ist als bei bereits zerfallenen Strahlen (Hutarew 1977).

Für kompakte Strahlen, bzw. Überfallhöhen h kleiner h_{krit} ist für den gesamten Gasaustausch nur die Eintauchphase von Bedeutung, wohingegen die Fallphase vernachlässigt werden kann (Kobus 1985; Lakso 1988). Maßgebend für den Gasaustausch in der Eintauchphase sind: (1) wieviel Luft durch den eintauchenden Strahl mitgerissen wird, (2) wie tief die aus der mitgerissenen Luft gebildeten Blasen in das Unterwasser eintauchen, (3) wie groß die Luftblasen sind, (4) wie schnell die Blasen wieder auftauchen und (5) die Turbulenzverhältnisse, die die Austauscheffizienz an den Grenzflächen zwischen Wasser und Luftblasen beeinflussen (Bin 1993; Kobus 1985; Markofsky 1980).

Kritische Eintauchgeschwindigkeit und Lufteintrag

Eintauchgeschwindigkeit: Ein Strahl, der auf eine Wasseroberfläche auftrifft, kann nur dann Luft mit sich reißen, wenn die Eintauchgeschwindigkeit (v_e) einen kritischen Mindestwert ($v_{e,\text{krit}}$) übersteigt (Bin 1988). Bei turbulenten Strahlen wird diese kritische Mindestgeschwindigkeit von der Turbulenzintensität beeinflusst (Ervine et al. 1980). Allerdings nimmt $v_{e,\text{krit}}$ nur bis zu Turbulenzintensitäten von etwa 3 % ab, bei stärkeren Geschwindigkeitsfluktuationen wird $v_{e,\text{krit}}$ unabhängig von diesen (Cummings und Chanson 1999; Ervine et al. 1980). Für praktische Anwendungen, bei denen die Turbulenzintensität zumeist über 3 % liegt, kann daher von einer konstanten Mindestgeschwindigkeit für Lufteintrag von ca. 0,8 bis 1,1 m/s ausgegangen werden (Chanson und Cummings 1994; Cummings und Chanson 1999; Ervine und Elsayy 1975; Ervine et al. 1980). Die Eintauchgeschwindigkeit eines Strahls kann bei zu vernachlässigender Anfangsgeschwindigkeit durch $\sqrt{2 \cdot g \cdot h}$ abgeschätzt werden. Demnach wird $v_{e,\text{krit}}$ bereits ab Fallhöhen (h) von ca. 5 cm überschritten.

Lufteintrag: Ist die Eintauchgeschwindigkeit des Strahls größer als $v_{e,\text{krit}}$, so entstehen am Eintauchpunkt Turbulenzwirbel, die stark genug sind um die Oberflächenspannung des Wassers zu überwinden, wodurch Luft eingetragen werden kann (Kobus 1985). Bei moderaten Geschwindigkeiten ($v_{e,\text{krit}} < v_e < 5 \text{ m/s}$) führt die Oberflächenrauigkeit des Strahls zum Abschnüren einzelner Luftelemente, da die Wasseroberfläche im Tosbecken infolge der Oberflächenspannung der Verformung der Strahloberfläche nicht folgen kann (Cummings und Chanson 1997a; Cummings und Chanson 1997b; Hutarew 1977; Sene 1988). Der diskontinuierliche Lufteintrag ist damit eng an die Oberflächenrauigkeit des Strahls gebunden und steigt

mit wachsender Strahlrauheit an. Die einzelnen Luftpakete zerfallen beim weiteren Transport mit dem eintauchenden Strahl durch die auf sie wirkenden Scherkräfte in kleinere Blasen (Bin 1993; Cummings und Chanson 1999). Bei höheren Strahlgeschwindigkeiten ($v_e > 5$ m/s) wird eine dünne Luftschicht durch die Reibungswirkung des Strahls kontinuierlich eingetragen (Chanson und Cummings 1994; Sene 1988). Diese Luftschicht wird in unregelmäßigen Zeitintervallen abgeschnürt. Auch die so erzeugten Luftpakete zerfallen nachfolgend in kleinere Luftblasen (Cummings und Chanson 1997a).

Experimentelle Untersuchungen zur Menge eingetragener Luft liegen vor allem für runde Strahlen vor, wohingegen es nur wenige Untersuchungen für ebene Strahlen gibt. Kobus (1985) argumentiert, dass der Lufteintrag bei sehr großer Turbulenz unabhängig von der Zähigkeit werden muss und nur mehr eine Funktion von Trägheit und Schwerkraft ist. Aus einer Dimensionsanalyse ergibt sich dann:

$$\frac{q_L}{q} = const \cdot \frac{v_e^2}{g \cdot d_e} = const \cdot \left(\frac{8 \cdot g \cdot h^3}{q^2} \right)^{1/2} = const \cdot Fr_{st}^2 \quad (6.21)$$

Dabei sind q_L der spezifische Lufteintrag (in $m^3/s/m$), d_e die Dicke des eintauchenden Strahls, g die Erdbeschleunigung und Fr_{st} die Froudezahl des Strahls (Markofsky und Kobus 1978). Da d_e gleich q/v_e ist, folgt daraus, dass der spezifische Lufteintrag proportional zu v_e^3 ist. Zum selben Ergebnis gelangen Sene (1988) und Chanson (1994) auf der Grundlage theoretischer Überlegungen für Strahlen bei denen der Lufteintrag durch das Abschnüren von Luftpaketen an den Rauheitselementen erfolgt ($v_e < 5$ m/s). Der Proportionalitätsfaktor ist demnach eine Funktion der Turbulenzintensität. Für Hochgeschwindigkeitsstrahlen ($v_e > 5$ m/s) bei denen der Lufteintrag kontinuierlich über eine dünne Luftschicht erfolgt ist nach Sene (1988) und Chanson (1994) q_L proportional $v_e^{1.5}$ bzw. Fr_{st} . Diese Zweiteilung der Proportionalität mit einem zwischengeschalteten Übergangsbereich wird für runde Strahlen durch zahlreiche Modellversuche belegt (Bin 1993; Chanson 1994).

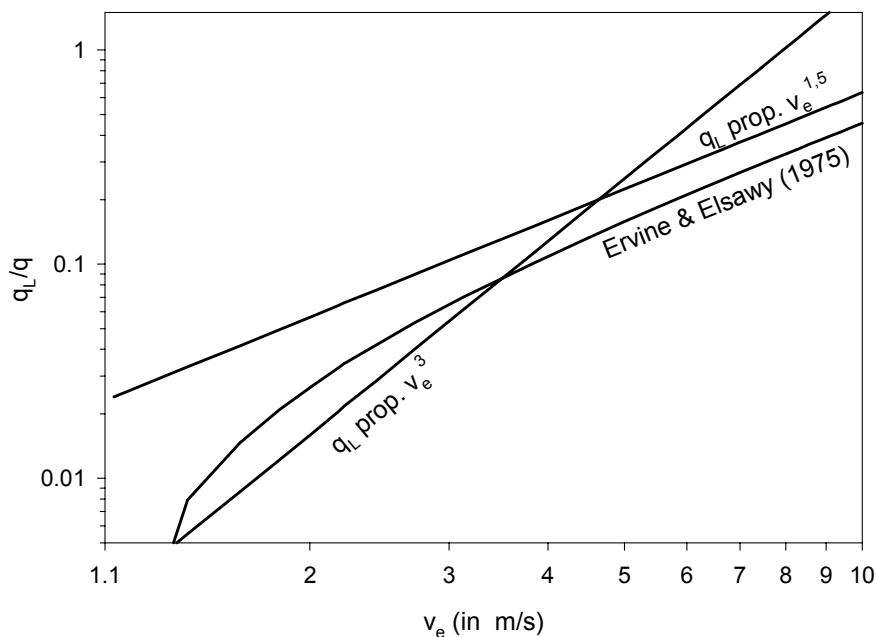


Abb. 6.7: Abhängigkeit des Lufteintrags von der Eintauchgeschwindigkeit des Wasserstrahls für verschiedene theoretisch begründete und empirische Ansätze.

Experimentelle Befunde zum Lufteintrag abgelöster ebener Strahlen werden von Ervine und Elsayy (1975) vorgelegt, wobei die Eintauchgeschwindigkeiten bis zu 10 m/s betragen (entspricht $h=5,1$ m). Die Lufteintragsrate beschreiben die Autoren mit der folgenden empirischen Formel:

$$\frac{q_L}{q} = 0,26 \cdot \left(\frac{B_{st}}{P_{st}} \right) \cdot \left(\frac{h}{d_e} \right)^{0,446} \cdot \left(1 - \frac{v_{e,krit}}{v_e} \right) \cong 0,13 \cdot \left(\frac{h}{d_e} \right)^{0,446} \cdot \left(1 - \frac{v_{e,krit}}{\sqrt{2 \cdot g \cdot H}} \right) \quad (6.22)$$

Hierin sind B_{st} und P_{st} die Breite bzw. der benetzte Umfang des eintauchenden Strahls. In den Versuchen von Ervine und Elsayy (1975) wurde $v_{e,krit}$ zu 1,1 m/s ermittelt. Der rechte Ausdruck wurde unter den Annahmen erhalten, dass $P_{st} = 2 \cdot B_{st}$ ist und die Anströmgeschwindigkeit zu vernachlässigen ist. Eine Analyse dieser empirischen Gleichung macht deutlich, dass gemäß ihr die Luftertragsrate für hohe Eintauchgeschwindigkeiten nahezu proportional mit $v_e^{1,5}$ ansteigt. Bei geringen Eintauchgeschwindigkeiten steigt der Luftertrag hingegen wesentlich steiler mit v_e an (Abb. 6.7). Somit steht die empirische Formel nach Gleichung 6.22 zumindest qualitativ im Einklang mit den theoretischen Überlegungen von Kobus (1985), Sene (1988) und Chanson (1994) und scheint daher grundlegend geeignet den Luftertrag freier, ebener Strahlen vorherzusagen.

Luftblasen im Unterwasser

Größe und Form der Luftblasen: Im Bereich des eintauchenden Strahls, wo hohe Turbulenz vorherrscht und starke Scherkräfte wirken werden die eingetragenen Luftpakete in kleine Blasen zerrissen. Die mittleren Durchmesser dieser sogenannten Primärblasen liegen zumeist unter 1 mm (Bin 1993). Mit zunehmender Eindringtiefe und abnehmender Scherkraft bilden sich aus diesen Primärblasen durch Koaleszenz Sekundärblasen (Sevik und Park 1973). Diese werden so tief in den Unterwasserkörper transportiert bis die Auftriebskraft die Impulskraft des eingetauchten Strahls überwindet und die Blasen wieder aufsteigen. Der mittlere Durchmesser der aufsteigenden Sekundärblasen liegt zahlreichen Untersuchungen zufolge etwa zwischen 3 und 7 mm, wobei keine Abhängigkeit von den hydraulischen Bedingungen festgestellt werden konnte (Übersicht in Bin 1993). Wengleich diese größeren Blasen die Form eines abgeflachten Rotationsellipsoids annehmen, können sie als Kugeln gleichen Volumens approximiert werden. Die Größenverteilung der Blasen, kann zumeist durch eine Normalverteilung beschrieben werden, vereinzelt wurden jedoch auch bimodale Verteilungen beobachtet (Evans et al. 1992).

Aufstiegsgeschwindigkeit: Die Aufstiegsgeschwindigkeit von Blasen mit Durchmessern zwischen 1 und 20 mm wird sowohl von der Schwerkraft als auch von der Viskosität beeinflusst, so dass sich kein monotoner Anstieg der Geschwindigkeit mit zunehmender Blasengröße ergibt (Maxworthy et al. 1996). Für Luftblasen zwischen 3 und 7 mm Größe liegen die Aufstiegsgeschwindigkeiten in reinem bis leicht verschmutztem Wasser zwischen 0,2 und 0,3 m/s (Habermann und Morton 1954; Maxworthy et al. 1996; Motarjemi und Jameson 1978). Steigen Blasen in einem stagnanten Wasserkörper innerhalb eines Blasen-schleiers auf, so erhöht sich die Aufstiegsgeschwindigkeit um das zwei- bis dreifache, da die Blasen eine aufwärtsgerichtete Strömung induzieren. Allerdings wirken bereits geringe Horizontalgeschwindigkeiten des Wassers diesem Effekt entgegen, so dass sich die Aufstiegsgeschwindigkeit wieder etwa auf die einer einzelnen Blase reduziert (Kobus 1985). Die mittlere Aufstiegsgeschwindigkeit der Luftblasen unterhalb eines Wehrüberfalls kann daher mit ca. 0,3 m/s angenommen werden.

Eintauchtiefe der Luftblasen: Sofern keine Begrenzung durch die Unterwassertiefe vorliegt, dringen die Luftblasen bis zu jener Tiefe ins Unterwasser ein, in der die Auftriebskraft der Impulskraft des eingetauchten Strahls entspricht, bzw. die Mitführungsgeschwindigkeit im Strahl gleich der Aufstiegsgeschwindigkeit der Luftblasen ist. Clanet und Laheras (1997) erklärten die Eindringtiefe der Blasen bei den von ihnen untersuchten kleinmaßstäblichen runden Strahlen mit der Annahme eines reinen Impulsstrahls. Die Eindringtiefe der Blasen ist demnach jene Entfernung vom Eintauchpunkt in der die mittlere Geschwindigkeit in dem Impulsstrahl gleich der Aufstiegsgeschwindigkeit der Blasen ist. Dabei gehen die Autoren von einer konstanten Strahlausbreitung mit einem Halbwinkel von $12,5^\circ$ und einer Aufstiegsgeschwindigkeit von 0,22 m/s aus. In ähnlicher Weise lassen sich die ebenfalls für runde Strahlen an kleinmaßstäblichen Modellen gewonnenen Ergebnisse von Suciú und Smigelschi (1976) erklären. Eine Analyse der zahlreichen experimentellen Daten an runden Strahlen, die in einer Übersichtsarbeit von Bin (1993) zusammengestellt sind, verdeutlicht allerdings, dass die Annahme eines reinen Impulsstrahls offenkundig nur für Strahlen angewendet werden kann, bei denen das Produkt aus Strahldurchmesser und Eintauchgeschwindigkeit kleiner ca. $0,01 \text{ m}^2/\text{s}$ ist. Bei Strahlen mit größerem Durchmesser gewinnt die Auftriebswirkung der mit dem Strahl transportierten Luft offenbar stark an Bedeutung, so dass die Eindringtiefen wesentlich kleiner sind, als dies bei der Annahme eines

wesentlich kleiner sind, als dies bei der Annahme eines Impulsstrahls der Fall wäre. Auch bei breiten ebenen Strahlen muss davon ausgegangen werden, dass eine theoretische Herleitung der Blaseneindringtiefe durch die von der Luft induzierte Auftriebswirkung erschwert wird. Wenngleich keine direkten Messungen der Blaseneindringtiefe für ebene Strahlen vorliegen, deuten die Untersuchungen von Avery und Novak (1978) darauf hin, dass die Blaseneindringtiefen von großmaßstäblichen, ebenen Strahlen wesentlich geringer sind als dies bei der Annahme eines reinen Impulsstrahls der Fall wäre. Die Autoren geben eine optimale Tiefe des Unterwassers z_{\min} (in m) an, für die der Sauerstoffaustausch an einem freien Wehrüberfall maximal ist (Novak 1999):

$$z_{\min} = 0,86 \cdot q^{0,27} \cdot h^{0,18} \quad (6.23)$$

Avery und Novak zeigen, dass eine Vertiefung des Unterwassers über z_{\min} hinaus keine weitere Verbesserung des Sauerstoffübergangs bewirkt und interpretieren dies so, dass die Luftblasen bei tiefem Unterwasser nur maximal bis z_{\min} eindringen und somit die Aufenthaltszeit der Luftblasen durch Unterwassertiefen größer z_{\min} nicht weiter erhöht wird. Demzufolge entspräche z_{\min} in etwa der Eindringtiefe der Luftblasen (Kobus 1985). Wenngleich dieser Befund nur auf wenigen Modelluntersuchungen basiert sind die Eindringtiefen bei ebenen Strahlen, die breiter als wenige Millimeter sind, zweifellos wesentlich geringer, als dies bei der Annahme eines reinen Impulsstrahls zu erwarten wäre.

Aufenthaltszeit der Luftblasen: Berücksichtigt man, dass die Strahlgeschwindigkeit im Mittel wesentlich größer ist als die Steiggeschwindigkeit der Blasen und vernachlässigt man Turbulenzeffekte, kann man die Aufenthaltszeit der Luftblasen im Unterwasser näherungsweise als Quotient aus Eindringtiefe und Blasenauftiegschwindigkeit ausdrücken.

Der Stoffübergang zwischen Wasser und eingetauchten Luftblasen

Die grundsätzliche Triebfeder für den Gasaustausch ist die Differenz zwischen der aktuellen Konzentration eines flüchtigen Stoffes im Wasser und der zugehörigen Sättigungskonzentration ($c_w - c_g/H$). Für den Gasaustausch an der Wasseroberfläche konnte gezeigt werden, dass der Stoffübergang von Sauerstoff und leichtflüchtigen Xenobiotika ($H > 0,5$) wasserfilmlimitiert ist. Legt man das Penetrations- oder Oberflächenenerneuerungsmodell zugrunde, so hängt der Stoffübergangskoeffizient K also vom Diffusionskoeffizienten des Stoffes in Wasser D_w und der Turbulenz ab, die die Oberflächenenerneuerung antreibt (Kapitel 6.3.1). Dies gilt grundsätzlich auch für den Austausch an Gasblasen, hier ergeben sich jedoch zwei zusätzliche Komplikationen: (1) Das Volumen der eingetauchten Blasen ist begrenzt, so dass die Konzentration eines Gases darin nicht konstant ist, sondern vom Austausch mit dem Wasser beeinflusst wird. (2) Der Partialdruck eines Gases ist in einer untergetauchten Luftblase infolge des hydrostatischen Drucks höher als in der Atmosphäre, wodurch auch die zugehörige Sättigungskonzentration im Wasser erhöht ist.

Einfluss des Henrykoeffizienten: Der erste Effekt bewirkt, dass auch der Austausch wasserfilmlimitierter Stoffe vom Henrykoeffizienten abhängig sein kann (Cirpka et al. 1993; Gulliver et al. 1997). Für den Grenzfall einer unendlich langen Aufenthaltszeit einer Luftblase im Wasser wird sich für jeden flüchtigen Stoff ein Gleichgewicht zwischen der Gasphasenkonzentration in der Blase und der Konzentration im Wasser einstellen. Für diesen Grenzfall wäre der Stoffübergang somit ausschließlich durch den Henrykoeffizienten bestimmt. Für den entgegengesetzten Grenzfall einer sehr kurzen Aufenthaltszeit, wären die Stoffkonzentrationen in Luftblase und Wasser beim Auftauchen der Blase noch sehr weit vom Gleichgewicht entfernt, die Henrykonstante wäre ohne Einfluss auf den Stofftransfer. Ob der Einfluss des Henrykoeffizienten berücksichtigt werden muss, hängt neben der Aufenthaltszeit der Luftblasen von deren Größe und von der Geschwindigkeit des Stofftransfers sowie in erster Linie von H selbst ab. Bei sehr hohen Henrykoeffizienten muss sehr viel des Stoffes transferiert werden, um dem Gleichgewicht nahe zu kommen.

Erhöhter Gaspartialdruck: Der zweite Effekt bewirkt, dass die Konzentration eines flüchtigen Stoffes im Wasser einem Gleichgewicht mit dem erhöhten Gaspartialdruck in den Blasen entgegen strebt. Daher kann die Konzentration die sich einstellt über der Gleichgewichtskonzentration mit dem atmosphärischen Gaspartialdruck liegen. Dies ist die Ursache für die Gasübersättigungen (O_2 , N_2), die häufig unterstrom von Überfallwehren und Schussrinnen oder auch bei Tiefenwasserbelüftungen in Seen beobachtet werden (Gulliver et al. 1997; Wilhelms und Schneider 1997; Wüest et al. 1992).

Eine näherer Analyse dieser Effekte folgt in Kapitel 6.4.3. Dort wird auch aufgezeigt unter welchen Umständen sie berücksichtigt werden müssen, bzw. vernachlässigt werden können.

6.4.2 Vorhersageformeln für den Sauerstoffeintrag und deren Bewertung

Maßzahlen für die Sauerstoffanreicherung

Bei der Untersuchung des Gasaustausches an freien Überfällen wird prinzipiell davon ausgegangen, dass die Unterschiede zwischen den Konzentrationen des gelösten Gases im Oberwasser ($c_{w,o}$) und Unterwasser ($c_{w,u}$) ausschließlich auf den Gasübergang infolge des Wehrüberfalls zurückgeführt werden können. Der gesamte Gasmassenstrom j (in M/T) zufolge der Wehrbelüftung ergibt sich demnach aus:

$$j = Q \cdot (c_{w,u} - c_{w,o}) \quad (6.24)$$

wobei Q der Abfluss über das Wehr ist und ein positiver Massenstrom ins Wasser gerichtet ist. Da der Massenstrom vom Abfluss abhängig ist, können unterschiedliche Wehre mit unterschiedlichen Abflüssen nur schwer auf Grundlage von j verglichen werden. Klassischerweise haben sich daher zwei dimensionslose Maße für den Gasaustausch an Bauwerken etabliert. Dies ist zum einen der Defizitquotient r :

$$r = \frac{c_{sat} - c_{w,o}}{c_{sat} - c_{w,u}} = 1 + \frac{j}{Q \cdot (c_{w,u} - c_{sat})} \quad (6.25)$$

wobei c_{sat} die Sättigungskonzentration des Gases im Gleichgewicht mit der Atmosphäre ist ($c_{sat} = c_g/H$). Der Defizitquotient ist also das Verhältnis zwischen den Untersättigungen im Oberwasser und Unterwasser; r kann Werte größer gleich 1 annehmen, wobei $r=1$ bedeutet, dass kein Gasaustausch am Bauwerk stattgefunden hat. Die sogenannte Austauscheffizienz E ist ein alternatives, mit r verknüpftes Maß:

$$E = \frac{c_{w,u} - c_{w,o}}{c_{sat} - c_{w,o}} = \frac{r - 1}{r} \quad (6.26)$$

Die Austauscheffizienz gibt an, um welchen Anteil die Unter- oder Übersättigung im Oberwasser durch das Bauwerk reduziert wird. E sollte Werte zwischen 0 (kein Austausch) und 1 (erreichen der Sättigungskonzentration) annehmen. In Kapitel 6.4.3 wird in einer genaueren Analyse darauf eingegangen, dass E infolge des hydrostatischen Drucks der auf die eingetauchten Luftblasen wirkt auch Werte über 1 und unter 0 annehmen kann. Dies wird allerdings in den Vorhersageformeln nicht berücksichtigt. Da die Austauscheffizienz ein sehr anschaulicher Parameter ist, werden alle im Folgenden vorgestellten Vorhersageformeln auf E bezogen, wenngleich sie originär häufig anhand anderer Maßzahlen (z.B. r) abgeleitet wurden.

Vorhersageformeln

Ähnlich wie bei der Wiederbelüftung auf der freien Fließstrecke gibt es auch zum Sauerstoffübergang an Wasserbauwerken zahlreiche Vorhersageformeln, die zumeist auf Grundlage von Modell- oder Naturversuchen, z.T. in Verbindung mit Dimensionsanalysen abgeleitet wurden. Manche dieser Formeln wurden explizit für freie Überfälle entwickelt, während andere für unterschiedliche Bauwerkstypen gelten sollen. Hier wird eine Auswahl von 4 sehr gebräuchlichen oder gut fundierten Formeln vorgestellt und anhand von Literaturdaten auf ihre Vorhersagegenauigkeit überprüft. Die ausgewählten Formeln sind in Tabelle 6.4 zusammengestellt.

Die Formeln nach Butts und Evans (1983) (BU) und Londong (1973) (LO) sind empirischer Natur. BU basiert auf einer Literaturstudie zahlreicher Vorhersageformeln und auf Naturmessdaten. Diese Formel kann mit unterschiedlichen Koeffizienten für die Art des Wehres und den Verschmutzungsgrad des Wassers versehen werden. In Tabelle 6.4 wurden bereits ein freier Wehrüberfall und „leicht verschmutztes Wasser“ angenommen. BU beinhaltet zudem einen expliziten Temperaturkorrekturterm. Auch die sehr einfache Formel nach Londong, die im deutschsprachigen Raum weit verbreitet ist, kann prinzipiell auf verschiedene Wehrtypen angewandt werden. Dabei wird allerdings davon ausgegangen, dass der Sauerstoffeintragswert ω eine Funktion des Wehrtyps und des spezifischen Abflusses ist (Markofsky 1980).

Von Pinter (1979) vorgestellte Ergebnisse zur Belüftung an Überfallwehren in Main und Neckar verdeutlichen, dass ω bei spezifischen Abflüssen von 1,5 bis 2,7 m³/s/m und freiem Überfall im Bereich von 0,1 bis 0,2 liegt, wobei keine Abhängigkeit von q ersichtlich wurde. Für LO wurde keine explizite Temperaturabhängigkeit angegeben. LO scheint nur für überschlägige Betrachtungen geeignet, weshalb sie hier primär verwendet wird, um zu überprüfen ob die komplexeren Formeln überhaupt bessere Vorhersagen erlauben.

Tab. 6.4: Gebräuchliche Vorhersageformeln für den Sauerstoffeintrag an freien Überfallwehren, die in der vorliegenden Arbeit anhand von Literaturdaten auf ihre Eignung überprüft wurden.

Kürzel	Literaturstelle	Formel für E für Sauerstoff bei 20°C	Bemerkungen
LO	Londong (1973)	$h \cdot \omega$	mit $\omega = 0,1 \dots 0,2$ (siehe Text)
MA	Markofsky und Kobus (1978)	$1 - (1 + 0,1 \cdot Fr_{st}^{1,2})^{-1,115}$	Dimensionsanalyse und Literaturdaten
AV	Avery und Novak (1978)	$1 - (1 + 2,4 \cdot 10^{-5} \cdot Fr_{st}^{1,78} \cdot Re_{st}^{0,53})^{-1,115}$	Dimensionsanalyse und Modellversuche
BU	Butts und Evans (1983)	$1 - [1 + 0,4864 \cdot h \cdot (1 - 0,11 \cdot h) \cdot (1 + 0,046 \cdot Tw)]^{-1}$	Empirisch aus Literaturübersicht
Mit:	h (in m) Fallhöhe; Fr_{st} Froudezahl des Strahls ($=8gh^3/q^2$) ^{1/4} ; g Erdbeschleunigung ($=9,81$ m/s ²); q (in m ³ /s/m) spezifischer Abfluss über das Wehr; Re_{st} Reynoldszahl des Strahls ($=q/v$); v (in m ² /s) kinematische Viskosität des Wassers; Tw (in °C) Wassertemperatur		

Markofsky und Kobus (1978) analysierten Literaturdaten in Verbindung mit einer Dimensionsanalyse. Sie kamen zu dem Schluss, dass bei Reynoldszahlen des Strahls von über $5 \cdot 10^5$ die Zähigkeit keine Rolle mehr für den Sauerstoffeintrag an freien Überfällen spielt (siehe auch 6.4.1). Für diesen Bereich hoher Reynoldszahlen wurde die in Tabelle 6.4 dargestellte Formel angegeben. Für kleinere Reynoldszahlen geben Markofsky und Kobus (1978) ein Nomogramm vor. Die Autoren weisen ausdrücklich darauf hin, dass es sich um keine streng quantitative Vorhersageformel handelt. Dennoch haben spätere Untersuchungen ergeben, dass MA gute Ergebnisse bei der quantitativen Vorhersage des Sauerstoffeintrags an freien Überfällen liefert (Gulliver et al. 1998), weshalb diese Formel hier mit untersucht werden soll.

Auch die Formel nach Avery und Novak (1978) basiert auf einer Dimensionsanalyse sowie der Auswertung großskaliger Modellversuche, die anhand von Naturdaten überprüft wurden. Gemäß AV ist ebenfalls die Froudezahl des Strahls die wichtigste Steuergröße für den Sauerstoffeintrag, wobei jedoch auch die Reynoldszahl mit zu berücksichtigen ist. Hier ist zu beachten, dass Avery und Novak in ihrer Ableitung Fr_{st} anders definierten, als in Tabelle 6.4. Um die Vergleichbarkeit von MA und AV zu gewährleisten, wurde AV auf Grundlage der hier verwendeten, gebräuchlicheren Form der Froudezahl umgeformt. Streng genommen ist AV nur gültig, solange der Strahl nicht zerstäubt (Gleichung 6.20) und die Unterwassertiefe mindestens z_{min} beträgt (Gleichung 6.23).

Temperaturkorrektur: Sowohl AV als auch MA wurden ursprünglich für Wassertemperaturen von 15°C abgeleitet. Gulliver et al. (1990) konnten zeigen, dass sich der Sauerstofftransfer an Luftblasen am exaktesten mit folgender Formel auf andere Temperaturen übertragen lässt:

$$E_{20} = 1 - (1 - E_{Tw})^{1/f} \quad (6.27)$$

$$\text{mit: } f = 1 + 0,02103 \cdot (Tw - 20) + 8,261 \cdot 10^{-5} \cdot (Tw - 20)^2$$

wobei E_{20} und E_{Tw} die Austauscheffizienz bei 20°C bzw. bei der aktuellen Wassertemperatur sind. Mit Hilfe von Gleichung 6.27 wurden die Formeln AV und MA auf 20°C normiert. Gleichung 6.27 fand zudem Anwendung, um die Ergebnisse aus der Literatur auf die zugehörigen Werte bei 20°C zu korrigieren.

Bewertung anhand von Literaturdaten

Datengrundlage: Bei einer intensiven Literaturrecherche konnten lediglich drei Publikationen extrahiert werden, die zuverlässige, verwertbare Daten zum Sauerstoffaustausch bei freiem Wehrüberfall im Feld beinhalteten (Gulliver und Rindels 1993; Novak und Gabriel 1997; Pinter 1979). Die insgesamt 16 Datensätze aus diesen drei Publikationen sind in Tabelle 6.5 zusammengestellt. Hieraus geht hervor, dass mit den verfügbaren Datensätzen weite Bereiche des spezifischen Abflusses, der Fallhöhe und der Wassertemperatur abgedeckt werden. Es ist zu beachten, dass die Fallhöhe h bei den Versuchen am Wehr Smirice an der Elbe höher als h_{krit} war, die Strahlen beim Auftreffen auf die Wasseroberfläche vermutlich also bereits zerstäubt waren. Hierauf ist bei der Interpretation zu achten. Sofern die Wassertiefe im Unterwasser angegeben ist, ist diese immer größer als die bei AV angesetzte Mindestwassertiefe, d.h. die Eindringtiefe der Luftblasen wird nicht durch die Wassertiefe limitiert. Wenngleich für den Neckar bei Poppenweiler und das Wehr am Anoka Rum River keine Unterwassertiefen angegeben sind, ist davon auszugehen, dass auch hier das z_{min} -Kriterium eingehalten wurde. Hinsichtlich der Reynoldszahlen des Strahls ist festzuhalten, dass diese bei allen Untersuchungen am Anoka Rum River sowie bei einigen Untersuchungen an der Elbe deutlich unter $5 \cdot 10^5$ liegen, so dass MA für diese Ergebnisse also eigentlich keine Gültigkeit hat.

Tab. 6.5: Literaturdaten, die zur Bewertung der Vorhersageformeln für die Wehrbelüftung verwendet wurden.

Quelle	Bezeichnung	q m ³ /s/m	h m	* h_{krit} m	Tw °C	[§] Uw- tiefe m	⁺ z_{min} m	Re _{st} · 10 ⁵ (-)	E ₂₀ (-)
Pinter (1979)	Neckar Poppenweiler	1,48	6,00	6,68	18,0	-	1,32	14,3	0,82
Gulliver und Rindels (1993)	Anoka Rum River	0,18 0,18	3,14 3,14	3,41 3,41	0,2 0,2	- -	0,67 0,67	1,0 1,0	0,75 0,76
		0,20 0,20	3,13 3,13	3,52 3,52	0,2 0,2	- -	0,68 0,68	1,1 1,1	0,75 0,73
	Mississippi	1,40	3,23	6,56	2,0	4,5	1,16	8,4	0,54
Novak und Gabriel (1997)	Elbe- Smirice	0,86 0,86 0,43 0,43 0,40 0,40	9,02 9,02 9,02 9,02 9,02 9,02	5,62 5,62 4,51 4,51 4,40 4,40	19,9 19,9 20,3 20,4 20,5 20,7	5,1 5,1 5,1 5,1 5,1 5,1	1,23 1,23 1,02 1,02 1,00 1,00	8,8 8,8 4,4 4,5 4,1 4,2	0,85 0,87 0,80 0,80 0,74 0,80
	Brandys	0,30 0,49 0,53	3,82 3,83 3,84	4,00 4,70 4,80	14,7 14,6 14,5	3,5 3,6 3,6	0,79 0,91 0,92	2,6 4,3 4,6	0,59 0,65 0,68
	Strekov	1,60	8,20	6,84	22,4	2,7	1,43	17,5	0,78

* nach Gleichung 6.20; [§] Wassertiefe im Unterwasser des Wehrs; ⁺ nach Gleichung 6.23

Auswertung: Die auf 20°C normierten, gemessenen Austauscheffizienzen wurden mit den durch die Formeln vorhergesagten Austauscheffizienzen verglichen. Als Fehlermaße wurden wiederum der mittlere differentielle Fehler (MDF), der Standardfehler (SF), der normierte differentielle Fehler (NDF) und der mittlere multiplikative Fehler (MMF), sowie die Ergebnisse der Regressionen von berechneten gegen gemessene Werte verwendet. Diese Fehlermaße sind in Abschnitt 6.3.3 definiert.

Auf Grundlage der Formel nach Londong wurde überprüft, ob die komplexeren Formeln die Austauscheffizienz besser vorhersagen können, als eine einfache abgeleitete Beziehung. Hierzu wurden zum einen

jene konstanten Werte für ω ermittelt, bei denen die oben genannten Fehlermaße minimal sind. Zum anderen wurde überprüft ob eine signifikante Beziehung zwischen ω und einer der hydraulischen Randbedingungen besteht, um ω als Funktion dieses Parameters auszudrücken.

Ergebnisse: In Tabelle 6.6 sind die ermittelten Fehlermaße für die einzelnen Vorhersageformeln zusammengefasst. Hieraus wird ersichtlich, dass BU die Messergebnisse nur sehr unzureichend wiedergibt. Wie die negative Steigung der Regression verdeutlicht, nimmt bei BU die Austauscheffizienz mit steigender Fallhöhe ab, was allen empirischen Erkenntnissen widerspricht. Auf Grundlage der vorliegenden Auswertung sollte BU keinesfalls zur Vorhersage der Wiederbelüftung an freien Überfällen verwendet werden, wemgleich sie von Chapra (1997) empfohlen wird.

Tab. 6.6: Güte der Formeln zur Vorhersage des Sauerstoffeintrags an freien Überfällen.

Formel	MDF	SF	NDF %	MMF	Steigung Regression	Achsenab. Regression
LO mit $\omega = \text{const.} = 0,142$	0,302	0,624	39,3	1,448	2,90	-1,31
LO mit $\omega = 0,2742 - 0,0209 \cdot h$	0,077	0,147	10,9	1,113	0,33	0,49
MA	0,067	0,152	9,2	1,096	0,58	0,32
AV	0,076	0,139	10,4	1,108	0,98	0,03
BU	0,349	0,771	44,2	2,919	-2,05	1,95

Ermittelt man den optimalen, konstanten Wert für ω in LO so hängt das Ergebnis merklich davon ab, welches der Fehlermaße zur Optimierung verwendet wird, wobei die Werte zwischen 0,1 und 0,15 schwanken. Insgesamt erschien die Güte der Ergebnisse am besten, wenn MMF als Minimierungsfaktor verwendet wurde, weshalb die hierbei ermittelte Güte beispielhaft in Tabelle 6.6 angeführt ist (LO mit $\omega = \text{const.} = 0,142$). Verwendet man einen solchen optimierten konstanten Wert schneidet LO zwar etwas besser ab als BU, erscheint aber dennoch unzulänglich für quantitative Vorhersagen der Wiederbelüftung an Wehren. Eine nähere Analyse verdeutlichte, dass ω nahezu unabhängig von q zu sein scheint ($R^2 = 0,17$), wohingegen ein signifikanter, offenbar nahezu linearer Zusammenhang zwischen ω und h besteht ($R^2 = 0,86$). Setzt man die mit einer linearen Regression erhaltene Beziehung zwischen h und ω in die Gleichung nach Londong ein, so verbessert sich die Güte der Vorhersagen merklich (LO mit $\omega = 0,2742 - 0,0209 \cdot h$). Sie ist jedoch in Bezug auf die meisten Fehlergrößen nach wie vor etwas schlechter als die Gleichungen AV und MA. Damit können MA und AV als wirkliche Verbesserung gegenüber sehr einfachen Ansätzen angesehen werden, da mit Ihnen die Vorhersagegenauigkeit offenbar gesteigert wird.

Abbildung 6.8 zeigt die gemessenen und die mit den drei am besten zu bewertenden Ansätzen berechneten Austauscheffizienzen im direkten Vergleich. Die für LO ermittelte Regressionsgerade (mit der Steigung 0,33 und einem Achsenabschnitt von 0,49) weist deutlich darauf hin, dass eine Tendenz zur Verzerrung besteht: Bei geringen Werten für E neigt LO (mit $\omega = 0,2742 - 0,0209 \cdot h$) dazu E zu überschätzen, wohingegen sie bei hohen Werten von E zur Unterschätzung tendiert. Diese Verzerrung ist auf die rein empirische Natur der abgeleiteten Gleichung zurückzuführen und verdeutlicht, dass sie keinesfalls zur Vorhersage von E außerhalb des zur Anpassung verwendeten Bereichs verwendet werden sollte.

Auch bei der Gleichung nach Markofsky und Kobus (1978) scheint bei einer Steigung der Regression von 0,58 eine ähnliche Tendenz zur Verzerrung vorzuliegen. Hier ist allerdings zu beachten, dass das Ergebnis der Regression stark von einer Messung in Brandys (gemessenes $E = 0,59$) beeinflusst ist, bei der Re_{st} lediglich $2,6 \cdot 10^5$ betrug. Führt man die Regression ohne diesen Punkt durch erhält man eine Steigung von 0,76. Die Messungen am Anoka Rum River, die ebenfalls deutlich außerhalb des Gültigkeitsbereichs von MA liegen, werden durch diese Gleichung allerdings überraschend gut vorhergesagt.

Bei der Formel nach Avery und Novak (1978) ist neben der hohen Güte aller andern Fehlermaße auch die Steigung der Regression nahe 1,0 und der Achsenabschnitt nahe 0,0. Selbst die Daten vom Wehr Smirice an der Elbe werden recht gut vorhergesagt, wenngleich am Eintauchpunkt sicher keine kompakten Strahlen mehr vorlagen. Die größten Überschätzungen ergeben sich erwartungsgemäß für jene Messungen in Smirice (E gemessen 0,8 [3 mal] bzw. 0,74) bei denen h_{krit} um mehr als das Doppelte überschritten wurde.

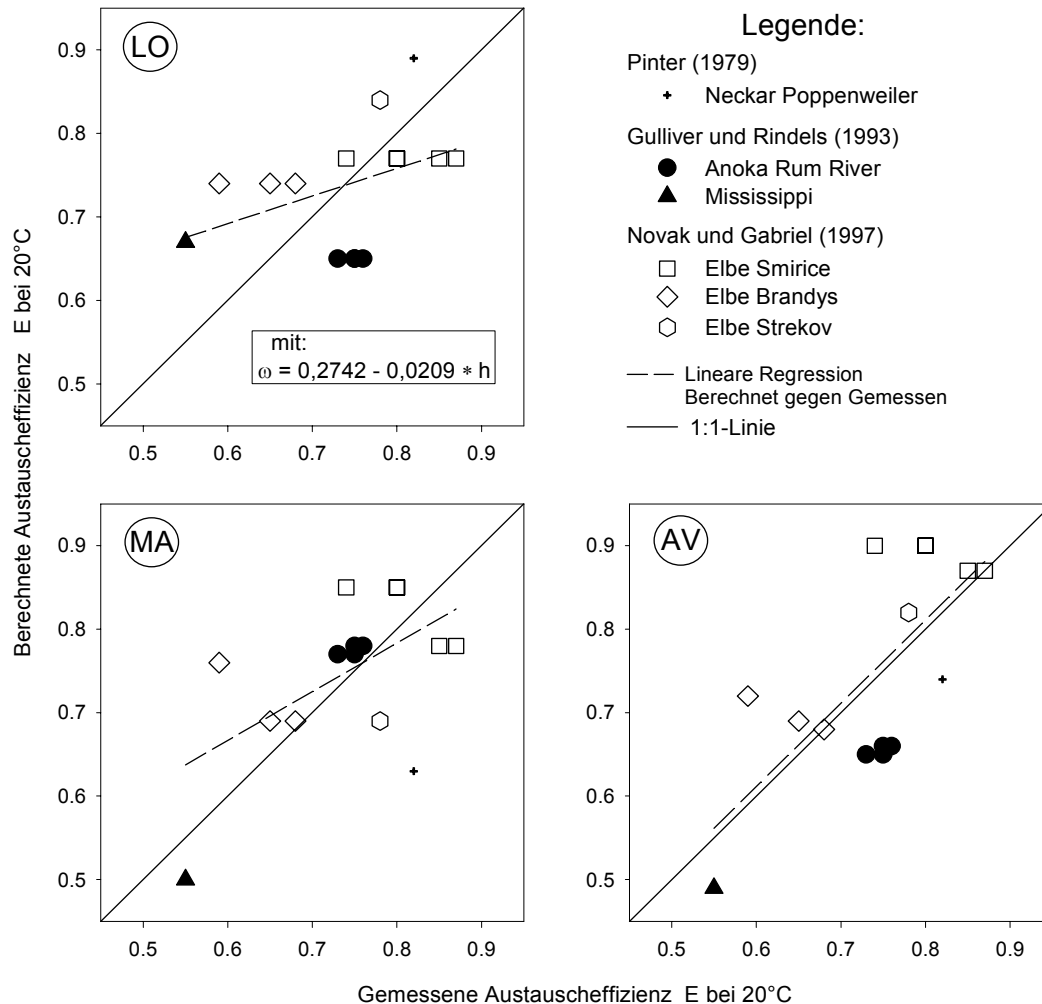


Abb. 6.8: Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Austauscheffizienzen für drei Formeln.

Vor dem Hintergrund, dass die Ergebnisse von Feldmessungen der Austauscheffizienz mit erheblichen Unsicherheiten behaftet sein können, ist bei einer abschließenden Bewertung der untersuchten Formeln auf der Grundlage von nur 16 Datensätzen entsprechende Vorsicht geboten. Es scheint aber gerechtfertigt zu folgern, dass die beiden auf Dimensionsanalysen beruhenden Formeln gut geeignet sind, um die Sauerstoffanreicherung an freien Überfällen vorherzusagen. Zudem erscheinen sie auch recht robust, wenn die Bedingungen für ihre Gültigkeit nicht streng eingehalten werden. Bei geringen spezifischen Abflüssen kann die Beschränkung von MA auf hohe Reynoldszahlen allerdings ein Problem hinsichtlich der Vorhersagegenauigkeit darstellen. Diese grundsätzlichen Folgerungen werden von den Ergebnissen einer ähnlichen Güteprüfung unterstützt, die Gulliver et al. (1998) mit einem anderen, größeren, mir nicht zugänglichen Datensatz des U.S. Army Corps of Engineers durchführten (76 Datensätze von 12 Wehren). Dabei schnitt bei der Bewertung auf Grundlage des Standardfehlers AV (SF=0,17) etwas besser ab als MA (SF=0,20). Zusammenfassend kann also gefolgert werden, dass die Formel von Avery und Novak (1978) für die Vorhersage des Sauerstoffeintrags an freien Wehrüberfällen am besten geeignet scheint. Allerdings sollte beachtet werden, dass auch mit dieser recht gut fundierten Formel Fehleinschätzungen im Bereich von 10 bis 15 % zu erwarten sind.

6.4.3 Ableitung eines mechanistischen Modells für den Gasübergang an freien Überfällen

Für die nachfolgende Analyse wird die für kompakte Strahlen zulässige Annahme getroffen, dass der gesamte Gasaustausch an der ins Unterwasser eingetragenen Luft erfolgt (Kobus 1985; Lakso 1988). Das Modell dient somit der Beschreibung des Gasaustausches an untergetauchten Luftblasen. Zudem wird davon ausgegangen, dass der Übergang der untersuchten Stoffe wasserfilmlimitiert ist, was bei untergetauchten Luftblasen für Henrykoeffizienten bis minimal etwa 0,01 der Fall sein kann (Munz und Roberts 1984).

Vollständiges Modell für den Gasaustausch an Luftblasen im Unterwasser

Dem Modellansatz liegen die folgenden Annahmen zugrunde: (1) Der Luftblasenschwarm im Unterwasser lässt sich durch eine konstante Anzahl kugelförmiger Blasen annähern. (2) Der Gasaustausch erfolgt ausschließlich beim Aufstieg dieser kugelförmigen Sekundärblasen von der maximalen Eindringtiefe des Strahls z_0 .

Der Stoffübergang an der Grenzfläche zwischen Luftblasen und Wasser wird durch das Penetrationsmodell (Gleichung 6.6) beschrieben. Hierzu wird angenommen, dass der Austausch der Turbulenzelemente an der Blasenoberfläche durch die Relativgeschwindigkeit der Luftblasen zum Wasser, d.h. die Aufstiegsgeschwindigkeit v_b bestimmt ist (Lakso 1988). Dementsprechend kann die Expositionszeit t_{ex} , wie in Higbie's Originalarbeit (Higbie 1935), aus dem Quotienten zwischen Blasendurchmesser d_b und Aufstiegsgeschwindigkeit abgeschätzt werden. Der Stoffübergangskoeffizient K ergibt sich dann gemäß dem Penetrationsmodell aus:

$$K = \left(\frac{4 \cdot D_w \cdot v_b}{\pi \cdot d_b} \right)^{1/2} \quad (6.28)$$

Zum Gasübergang an Luftblasen liegen nur wenige Messwerte vor. Motarjemi und Jameson (1978) konnten jedoch anhand einer Zusammenstellung von Literaturdaten zeigen, dass sich die vorliegenden Messergebnisse bei Blasendurchmessern über 2 mm gut mit den nach Gleichung 6.28 theoretisch zu erwartenden Werten decken. Demnach scheint das Penetrationsmodell in dem für Sekundärblasen relevanten Größenbereich gut geeignet, den Gasübergang zu beschreiben.

Geht man davon aus, dass das unterstromige Tosbecken homogen durchmischt ist, weist der flüchtige Stoff im gesamten Wasser des Tosbeckens die Konzentration $c_{w,u}$ auf. Die einzelnen Luftblasen werden ebenfalls als homogen durchmischt mit der Konzentration $c_{g,b}$ angesetzt. Die Massenstromdichte J über die Oberfläche einer Blase ergibt sich folglich aus:

$$J = - \left(\frac{4 \cdot D_w \cdot v_b}{\pi \cdot d_b} \right)^{1/2} \cdot \left(c_{w,u} - \frac{c_{g,b}}{H} \right) \quad (6.29)$$

wobei $c_{g,b}/H$ der Sättigungskonzentration c_{sat} entspricht. Die Konzentration in der Blase $c_{g,b}$ verändert sich während des Aufstiegs zum Einen durch den Stoffübergang. Zum Anderen bewirkt auch die Volumenänderung der Blase eine Veränderung der Konzentration. Die Volumenänderung ist wiederum auf 2 Faktoren zurückzuführen: den hydrostatischen Druck der auf die untergetauchte Blase wirkt und die Veränderung der Gasmenge in der Blase infolge des Stoffaustauschs. Der Ausgangspunkt für die Betrachtung dieser Volumenänderung ist daher das ideale Gasgesetz, wonach das Volumen eines Gases bzw. Gasgemisches eine Funktion der Temperatur T , des Drucks P_{ges} und der Stoffmenge n (ausgedrückt in mol) ist:

$$V_b = \frac{R \cdot T}{P_{ges}} \cdot \sum n_k \quad (6.30)$$

hierbei sind V_b das Volumen der Blase, $\sum n_k$ die Summe der molaren Stoffmengen aller in der Blase enthaltenen Gase und R die ideale Gaskonstante ($=8,3144 \text{ Pa m}^3/\text{K/mol}$). Drückt man P_{ges} als Summe des Luftdrucks P_{atm} und des hydrostatischen Drucks aus, so ergibt sich hieraus:

$$V_b = \frac{R \cdot T}{P_{atm} + \rho_w \cdot g \cdot z} \cdot \sum n_k \quad (6.31)$$

wobei ρ_w die Dichte des Wassers, g die Gravitation und z die aktuelle Eintauchtiefe der Luftblase sind. Entsprechend lassen sich der Blasendurchmesser d_b und die Blasenoberfläche A_b wie folgt ausdrücken:

$$d_b = \left(\frac{6 \cdot R \cdot T \cdot \sum n_k}{\pi \cdot (P_{atm} + \rho_w \cdot g \cdot z)} \right)^{1/3} \quad (6.32)$$

$$A_b = \pi^{1/3} \cdot \left(\frac{6 \cdot R \cdot T \cdot \sum n_k}{P_{atm} + \rho_w \cdot g \cdot z} \right)^{2/3} \quad (6.33)$$

Die (molare) Konzentration eines Gases in der Gasblase lässt sich nun wiederum als Quotient der Stoffmenge dieses Gases n_b und dem Volumen ausdrücken:

$$c_{g,b} = \frac{n_b \cdot (P_{atm} + \rho_w \cdot g \cdot z)}{R \cdot T \cdot \sum n_k} \quad (6.34)$$

Setzt man dies in Gleichung 6.29 ein und berücksichtigt zusätzlich 6.32, so erhält man die Massenstromdichte J des Stoffes:

$$J = \left[\frac{4 \cdot D_w \cdot v_b}{\pi^{2/3} \cdot \left(\frac{6 \cdot R \cdot T \cdot \sum n_k}{(P_{atm} + \rho_w \cdot g \cdot z)} \right)^{1/3}} \right]^{1/2} \cdot \left(c_{w,u} - \frac{n_b \cdot (P_{atm} + \rho_w \cdot g \cdot z)}{R \cdot T \cdot \sum n_k} \right) \quad (6.35)$$

Berücksichtigt man die zweite Grundannahme, wonach der Stoffübergang mit dem Aufstieg der Sekundärblasen beginnt, so lässt sich die aktuelle Tiefe z als Funktion der maximalen Eindringtiefe z_0 und der Aufstiegs geschwindigkeit v_b ausdrücken:

$$z = z_0 - v_b \cdot t \quad (6.36)$$

Die zeitliche Veränderung der Stoffmenge des Gases in der Luftblase ergibt sich aus dem Produkt der Massenstromdichte und der Oberfläche der Blase:

$$\frac{dn_b}{dt} = -J \cdot A_b \quad (6.37)$$

Setzt man die Gleichungen 6.33 und 6.35 ein und berücksichtigt darüber hinaus 6.36, so ergibt sich für die zeitliche Änderung der Stoffmenge:

$$\frac{dn_b}{dt} = \left(4 \cdot D_w \cdot v_b \cdot \frac{6 \cdot R \cdot T \cdot \sum n_k(t)}{P_{atm} + \rho_w \cdot g \cdot (z_0 - v_b \cdot t)} \right)^{1/2} \cdot \left(c_{w,u,i} - \frac{n_b \cdot (P_{atm} + \rho_w \cdot g \cdot (z_0 - v_b \cdot t))}{H \cdot R \cdot T \cdot \sum n_k(t)} \right) \quad (6.38)$$

Gleichung 6.38 beschreibt die zeitliche Änderung der Stoffmenge eines Gases in einer aufsteigenden Luftblase. Damit stellt sie alleine noch keinen umfassenden Ansatz für den Gastransfer an Wehrüberfällen dar. Hierfür muss ein kombiniertes Gleichungssystem gelöst werden, das theoretisch alle in der Luftblase enthaltenen Gase berücksichtigt. Praktisch müssen lediglich die Atmosphärogase N_2 und O_2 sowie gegebenenfalls zu untersuchende Tracergase in das Gleichungssystem aufgenommen werden, da alle anderen Gase unter gewöhnlichen Bedingungen mengenmäßig irrelevant sind (Liljequist und Cehak 1984).

Die Anzahl der pro Zeiteinheit eingetragenen Luftblasen ergibt sich aus der Lufteintragsrate Q_L und dem Volumen, das eine Luftblase zum Zeitpunkt $t=0$ hätte, wäre sie nicht infolge des hydrostatischen Drucks komprimiert ($V_b|_{t=0, z=0}$). Der gesamte Massenstrom j (in mol/T) eines Gases beim Wehrüberfall ergibt sich demnach aus:

$$j = \left(n_b \Big|_{t=0} - n_b \Big|_{t=\frac{z_0}{v_b}} \right) \cdot \frac{Q_L}{V_b \Big|_{t=0, z=0}} \quad (6.39)$$

Wobei $n_b \Big|_{t=0}$ und $n_b \Big|_{t=\frac{z_0}{v_b}}$ die Stoffmengen des Gases in einer Blase bei deren Eintauchen respektive Auftauchen sind. Aus Gleichung 6.39 lassen sich der Defizitquotient r und die Austauscheffizienz E ermitteln (Gleichungen 6.25 und 6.26).

Vereinfachungen des Modells

Volumenvariation infolge Stoffübergang: In einem ersten Schritt kann man den Einfluss, den der Gasaustausch (also die variable Stoffmenge je Blase) auf das Blasenvolumen hat, vernachlässigen. Dadurch wird $\sum n_k$ in Gleichung 6.39 unabhängig von der Zeit und kann der Summe der Stoffmengen zum Zeitpunkt $t=0$ gleichgesetzt werden.

Volumenvariation infolge des hydrostatischen Drucks: Vernachlässigt man im zweiten Schritt darüber hinaus die Änderung des Blasenvolumens infolge des hydrostatischen Drucks, so gelangt man zu einem Modellansatz, der bereits von Cirpka (1992) und Cirpka et al. (1993) vorgestellt wurde. In diesem Fall, in dem sich das Blasenvolumen über die Zeit nicht ändert, ist es nicht notwendig die Stoffmengen in den einzelnen Blasen zu betrachten. Vielmehr kann ausgehend von Gleichung 6.29 die Konzentrationsänderung in einer einzelnen Blase wie folgt beschrieben werden:

$$\frac{dc_{g,b}}{dt} = -J \cdot \frac{A_b}{V_b} = \left(\frac{4 \cdot D_w \cdot v_b}{\pi \cdot d_b} \right)^{1/2} \cdot \left(c_{w,u} - \frac{c_{g,b}}{H} \right) \cdot \frac{6}{d_b} = \left(\frac{144 \cdot D_w \cdot v_b}{\pi \cdot d_b^3} \right)^{1/2} \cdot \left(c_{w,u} - \frac{c_{g,b}}{H} \right) \quad (6.40)$$

Für Gleichung 6.40 existiert eine analytische Lösung: Mit der Anfangsbedingung, dass $c_{g,b}$ zum Zeitpunkt $t=0$ $c_{g,0}$ ist, erhält man nach Integration:

$$c_{g,b}(t) = H \cdot \left[c_{w,u} - \left(c_{w,u} - \frac{c_{g,0}}{H} \right) \cdot \exp \left(- \frac{t}{H} \cdot \left(\frac{144 \cdot D_w \cdot v_b}{\pi \cdot d_b^3} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (6.41)$$

Bezeichnet man die pro Zeiteinheit eingetragene Luft als Q_L und setzt die mittlere Aufenthaltszeit der Luftblasen im Tosbecken t_{tb} ein, so lässt sich der durch die Summe aller Luftblasen bewirkte Gasmassenstrom j (Gleichung 6.24) wie folgt ausdrücken:

$$j = Q_L \cdot H \cdot \left(c_{w,u} - \frac{c_{g,0}}{H} \right) \cdot \left[1 - \exp \left(- \frac{t_{tb}}{H} \cdot \left(\frac{144 \cdot D_w \cdot v_b}{\pi \cdot d_b^3} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (6.42)$$

Aus dieser von Cirpka et al. (1993) abgeleiteten Formel lässt sich nach einigen Umformungen der Defizitquotient r (Gleichung 6.25) wie folgt ausdrücken:

$$r = 1 + \frac{j}{Q \cdot \left(c_{w,u} - \frac{c_{g,0}}{H} \right)} = 1 + \frac{Q_L}{Q} \cdot H \cdot \left[1 - \exp \left(- \frac{t_{tb}}{H} \cdot \left(\frac{144 \cdot D_w \cdot v_b}{\pi \cdot d_b^3} \right)^{1/2} \right) \right] \quad (6.43)$$

Gleichung 6.43 stellt somit einen mechanistischen Ansatz zur Beschreibung des Gasaustausch an Luftblasen dar, in dem die zeitliche Veränderung des Blasenvolumens jedoch nicht berücksichtigt ist.

Vergleich der Modellvarianten

Um zu überprüfen, unter welchen Voraussetzungen die oben dargestellten Vereinfachung vorgenommen werden können, wurden numerische Experimente durchgeführt. Das komplette Modell, sowie der Ansatz unter Vernachlässigung der Volumenvariation infolge des Stoffübergangs wurden zur numerischen Simu-

lation in MATLAB 6.0 programmiert. In den Modellen wurden die Atmosphärgase Sauerstoff und Stickstoff sowie der Gastracer SF₆ berücksichtigt. Der Ansatz nach Cirpka et al. (1992; 1993), bei dem die Volumenänderung völlig vernachlässigt wurde, konnte unter Verwendung eines Tabellenkalkulationsprogramms ausgewertet werden.

Im Folgenden wird ein simuliertes Szenario mit typischen Randbedingungen vorgestellt. Die Parameterwerte und Randbedingungen, die dem Szenario zugrunde liegen sind in Tabelle 6.7 zusammengestellt. Die Sauerstoffsättigung im Unterwasser entspricht dabei etwa 95%, während für N₂ eine Übersättigung (107 %) angenommen wurde, wie sie typischer Weise im Unterwasser von Überfallwehren vorzufinden ist (Wilhelms und Schneider 1997). Die SF₆-Konzentration im Unterwasser entspricht in etwa der mittleren Konzentration, die während des Tracerversuchs im Neckar im Unterwasser des Wehrs Esslingen vorlag. Die für die Luftblasen eingesetzten Parameterwerte entsprechen Erwartungswerten, die auf Grundlage der Literatur für einen Wehrüberfall mit $h=5$ m und $q=0,5$ m³/s/m abgeleitet wurden. Die anhand dieses Szenarios erlangten Erkenntnisse wurden mit zahlreichen anderen Szenarien überprüft und können als repräsentativ für einen weiten, realistischen Bereich von Randbedingungen angesehen werden.

Tab. 6.7: Parameterwerte und Randbedingungen des Szenarios, mit dem die unterschiedlichen Modellvarianten verglichen wurden.

Parameter	Einheit	Wert			Bemerkungen
Stoffspezifische Werte					
		N ₂	O ₂	SF ₆	
H	-	56,1	28	136	für 15°C
D _w	10 ⁻⁹ m ² /s	1,60	1,67	0,88	
c _{u,w}	mmol/L	0,621	0,293	1,37 · 10 ⁻⁷	
c _{g,0}	mmol/L	32,434	8,621	0	Atmosphäre: O ₂ , N ₂ mit 21, 79 Vol. %
Allgemeine Werte					
T	K	288,15			15°C
P _{atm}	Pa	98360			Repräsentativ für 235 m ü. NN
Q	m ³ /s	5			q _L /q=0,7
Q _L	m ³ /s	3,5			
v _b	m/s	0,3			
z ₀	m	variabel			
t _{tb}	s	variabel			t _{tb} =z ₀ /v _b
d _b _{t=0,z=0}	m	0,004			bei t=0 ohne hydrostatischen Druck

In Abbildung 6.9 werden die mit den unterschiedlichen Ansätzen in Abhängigkeit von t_{tb} bzw. z₀ ermittelten Austauscheffizienzen von O₂ und SF₆ verglichen. Hieraus wird deutlich, dass die Vernachlässigung der Volumenänderung infolge des Stoffübergangs für beide Gase keine merklichen Veränderungen hinsichtlich E bewirkt: Die ermittelten Kurven können visuell nicht von jenen für das vollständige Modell unterschieden werden. Im Gegensatz hierzu wirkt sich der hydrostatische Druck mit zunehmender maximaler Eintauchtiefe merklich positiv auf den Stoffübergang von Sauerstoff aus. Im Falle der vorliegenden Untersättigung wird dadurch die Austauscheffizienz deutlich erhöht. Bei dem in der Atmosphäre nicht vorkommenden Tracergas SF₆ ist die Auswirkung des hydrostatischen Drucks von untergeordneter Bedeutung. Es ist zu beachten, dass der erhöhte Druck für SF₆ eine Verringerung von E bewirkt, da das Wasser hinsichtlich SF₆ übersättigt ist (c_{sat}=0).

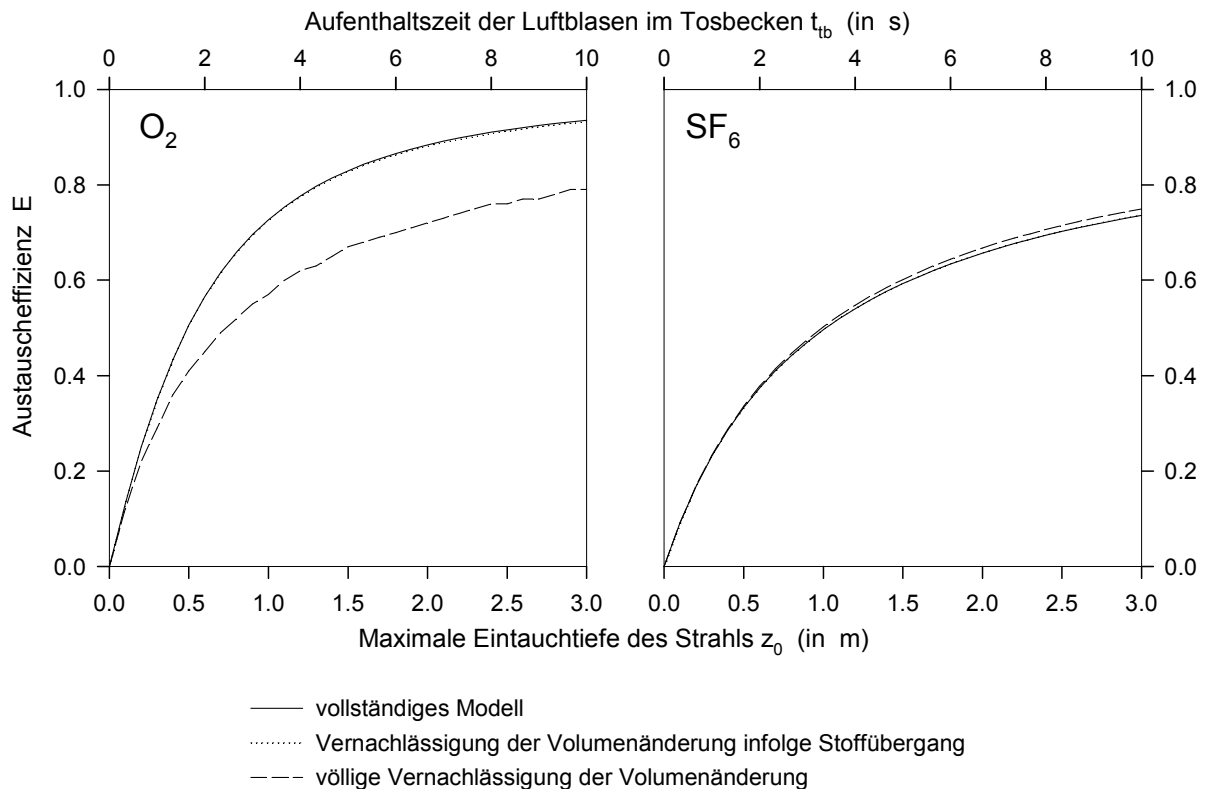


Abb. 6.9: Vergleich der mit unterschiedlichen Modellansätzen berechneten Austauscheffizienzen für Sauerstoff und Schwefelhexafluorid.

Die deutliche Wirkung, die der hydrostatische Druck auf den Sauerstoffübergang hat, ist auf die Anwesenheit von O_2 in der Atmosphäre zurückzuführen: In den untergetauchten Luftblasen befinden sich von Anfang an große Mengen an O_2 . Die O_2 -Konzentration in den Luftblasen wird durch die Komprimierung infolge des hydrostatischen Drucks merklich erhöht, dadurch ist die zugehörige Sättigungskonzentration ($c_{g,b}/H$) und folglich auch der Gasaustausch höher. Ähnliche Effekte ergeben sich für N_2 (nicht dargestellt). Im Gegensatz dazu ist zum Zeitpunkt $t=0$ kein SF_6 in den Luftblasen, das Tracergas gelangt erst durch den Stoffübergang allmählich in diese. Die dadurch bedingte Erhöhung der Sättigungskonzentration ist von untergeordneter Bedeutung, der Gradient wird nur wenig erniedrigt und die Effizienz des Stoffübergangs nur wenig beeinflusst.

Allgemein kann hieraus (und aus weiteren, nicht dargestellten Szenarien) gefolgert werden, dass die Volumenänderungen der Luftblasen infolge des Gasaustausches für gewöhnlich vernachlässigt werden kann. Der Gasaustausch von Atmosphärgasen an Wehrüberfällen wird jedoch durch den hydrostatischen Druck, der auf die eingetauchten Luftblasen wirkt, merklich beeinflusst. Für Gase, die nicht in der Atmosphäre enthalten sind und deren Konzentration in den Luftblasen weit vom Gleichgewichtszustand entfernt bleibt (z.B. SF_6), kann die Wirkung des hydrostatischen Drucks bei üblichen maximalen Eintauchtiefen ($z_0 < 5$ m) vernachlässigt werden. Für solche Gase kann somit Gleichung 6.43 in guter Näherung verwendet werden.

Zusammenfassung der Parameter im vereinfachten Modell

Nachdem gezeigt wurde, dass das vereinfachte Modell nach Cirpka (Gleichung 6.43) für SF_6 näherungsweise angewandt werden kann, werden die darin enthaltenen Parameter genauer untersucht. Hieraus leitet sich ein zusammengefasster Parameter ab, der die Auswertung von Tracerversuchen an Wehrüberfällen wesentlich erleichtert. Dieser zusammengefasste Parameter wird in einem späteren Abschnitt wieder aufgegriffen.

Parameter-Sensitivität und -Identifizierbarkeit: Neben den beiden temperaturabhängigen Stoffeigenschaften D_w und H beinhaltet Gleichung 6.43 vier weitere a priori nicht bekannte Parameter: Das Verhältnis zwischen Lufteintrag und Abfluss Q_L/Q , den effektiven Blasendurchmesser d_b , die Blasenauftiegs geschwindigkeit v_b und die effektive Aufenthaltszeit der Luftblasen im Tosbecken t_{tb} . Um den Einfluss dieser Parameter auf die Austauscheffizienz zu veranschaulichen, wurde eine lineare (lokale) Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Für die vier Parameter wurden zunächst Werte angenommen, die für einen Wehrüberfall mit $h=5$ m und $q=0,5$ m³/s/m gemäß Literaturangaben plausibel erschienen (Tabelle 6.7, $t_{tb}=6$ s). D_w wurde auf den Wert für Sauerstoff bei 15°C ($1,67 \cdot 10^{-9}$ m²/s; Tabelle 6.2) gesetzt. Mit Hilfe einer linearen Approximation wurde ermittelt, welche relative Änderung ΔE_{PM}^{rel} sich für E aus der relativen Änderung eines der 4 Parameter (PM) ergibt:

$$\Delta E_{PM}^{rel} = \frac{\Delta E}{\Delta PM} \cdot \frac{PM}{E} \quad (6.44)$$

Das Ergebnis der Sensitivitätsanalyse ist in Abbildung 6.10 in Abhängigkeit von H dargestellt. Offenkundig wird der Gasaustausch für gering flüchtige Stoffe ($H < 0,4$) im vorliegenden Fall ausschließlich durch das Verhältnis zwischen Abfluss und Lufteintrag gesteuert. Dies ist darauf zurück zu führen, dass sich unabhängig von den anderen Parametern ein Gleichgewicht zwischen Wasser und Gasphase einstellt, E also nur durch die Menge an eingetragener Luft und durch H selbst bestimmt ist. Für leicht flüchtige Stoffe mit $H > 10$ reagiert die Austauscheffizienz am sensitivsten auf die Luftblasengröße, wobei größere Blasendurchmesser geringere Austauscheffizienzen zur Folge haben. Dies ist dadurch bedingt, dass bei der selben Luftmenge geringere Durchmesser zu einer insgesamt größeren Oberfläche führen, an der der Gasaustausch stattfinden kann. Darüber hinaus wird der Gasaustausch dieser leicht flüchtigen Stoffe durch die Menge eingetragener Luft und die mittlere Aufenthaltszeit der Blasen signifikant beeinflusst. Von geringster Bedeutung ist offensichtlich die Aufstiegs geschwindigkeit, die lediglich über das Penetrationsmodell hinsichtlich des Stoffübergangskoeffizienten Einfluss hat.

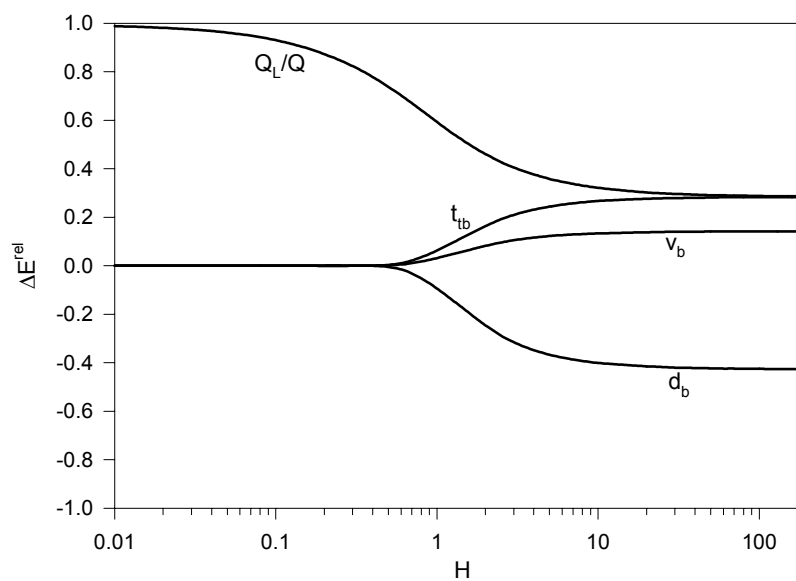


Abb. 6.10: Relative Sensitivität der Austauscheffizienz von den Parametern in Gleichung 6.43 in Abhängigkeit vom Henrykoeffizient.

Auf Grundlage der Sensitivitätsanalyse können Rückschlüsse über die Identifizierbarkeit einzelner Parameter mit Hilfe von Gastracern gezogen werden (allerdings ohne Berücksichtigung des hydrostatischen Drucks). Der relative Lufteintrag Q_L/Q kann eindeutig mit Hilfe eines Gastracers mit kleinem Henrykoeffizienten bestimmt werden. Für die anderen drei Parameter ist eine getrennte experimentelle Bestimmung durch Gastracerversuche jedoch nicht möglich, da sich Änderungen von E durch entsprechende Änderungen aller vier Parameter in gleicher Weise erklären lassen.

Zusammengefasster Parameter: Vor diesem Hintergrund erscheint es sinnvoll, die drei Parameter v_b , d_b und t_{ib} zu einem Parameter PM_b zusammenzufassen:

$$PM_b = t_{ib} \cdot \left(\frac{144 \cdot v_b}{\pi \cdot d_b^3} \right)^{1/2} \quad (6.45)$$

Setzt man 6.45 in 6.43 ein, so verbleiben zwei unbekannte Parameter. Wird $Q_L/Q=q_L/q$ mit Gleichung 6.22 (Ervine und Elsayy 1975) quantitativ abgeschätzt, so lässt sich PM_b aus E bzw. r ermitteln:

$$PM_b = -\frac{H}{\sqrt{D_w}} \cdot \ln \left(1 - \frac{r-1}{\frac{q_L}{q} \cdot H} \right) \quad (6.46)$$

Hat man mittels eines Gastracers, für den Gleichung 6.43 anwendbar ist (z.B. SF_6), die Austauscheffizienz oder den Defizitquotienten dieses Gases ermittelt, kann hieraus der Parameter PM_b bestimmt werden.

Abhängigkeit der Austauscheffizienz von den Stoffeigenschaften

Um die Abhängigkeit der Austauscheffizienz von den Stoffeigenschaften D_w und H qualitativ zu veranschaulichen, wurde Gleichung 6.43 verwendet, wenngleich diese nur eine begrenzte Gültigkeit hat (siehe oben). Dabei wurde wiederum ein freier Überfall mit $h=5$ m und $q=0,5$ m³/s/m angenommen ($q_L/q=0,7$, $v_b=0,3$ m/s, $d_b=4$ mm, $t_{ib}=6$ s, d.h. $PM_b=87950$). Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.11 als Linien gleicher Austauscheffizienz dargestellt. Zur Interpretationshilfe wurden zusätzlich einige flüchtige Stoffe mit ihren Henry- und Diffusionskoeffizienten bei 15°C eingetragen.

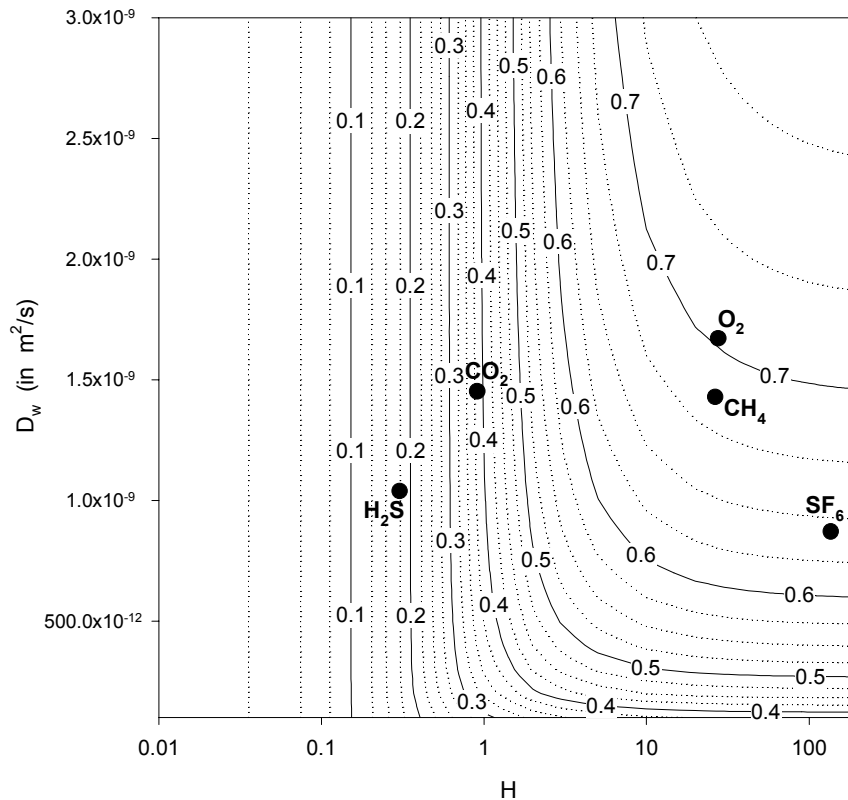


Abb. 6.11: Konturplot der Austauscheffizienz E an Luftblasen in Abhängigkeit von H und D_w . Berechnet mit Gleichungen 6.43 und 6.45 mit $Q_L/Q=0,7$ und $PM_b=87950$.

Abbildung 6.11 veranschaulicht, dass der Gasaustausch an Luftblasen mit abnehmendem Henry- und Diffusionskoeffizienten ineffizienter wird. Für Stoffe mit sehr kleinem Henrykoeffizienten (im vorliegenden Fall z.B. H_2S und CO_2) ist der Gasaustausch nur eine Funktion von H , er wird also ausschließlich vom Gleichgewichtszustand gesteuert. In diesem Bereich ist es zulässig, E von einem Stoff auf den anderen ausschließlich mit Hilfe des Henrykoeffizienten zu übertragen.

Für sehr flüchtige Stoffe hingegen (im vorliegenden Fall z.B. SF_6) wird der Gasaustausch unabhängig von H , die Konzentrationen in den Luftblasen sind so klein, dass der Austausch nur durch die Stofftransfergeschwindigkeit bestimmt wird und vom Gleichgewicht unbeeinflusst bleibt. Für diesen Bereich kann E alleine über die Diffusionskoeffizienten skaliert werden (siehe Kapitel 6.3.1, Gleichung 6.8). Für einen sehr weiten Übergangsbereich (im vorliegenden Fall z.B. O_2 und CH_4) hängt der Gasaustausch sowohl vom Henry- als auch vom Diffusionskoeffizienten ab. Soll die Austauscheffizienz für solche Stoffe aus Messungen von Stoffen mit anderen Eigenschaften berechnet werden, so muss dies – bei Vernachlässigung des hydrostatischen Drucks – über Gleichung 6.43 unter Berücksichtigung von H und D_w erfolgen.

Vorgehensweise bei der Auswertung von Feldversuchen mit SF_6 und O_2

Nachfolgend wird eine Strategie vorgeschlagen, mit der Feldversuche an Wehrüberfällen ausgewertet werden können. Prinzipiell wird davon ausgegangen, dass Messungen zur Konzentration eines sehr leicht flüchtigen Tracergases (SF_6) und von O_2 im Ober- und Unterwasser eines Überfallwehrs vorliegen.

Isobarer Defizitquotient r_{ib} : Aus Konzentrationsmessungen ober- und unterhalb eines Wehrüberfalls kann der Defizitquotient bzw. die Austauscheffizienz für SF_6 experimentell ermittelt werden (Gleichungen 6.25 und 6.26). Oben konnte gezeigt werden, dass der erhöhte hydrostatische Druck, der auf die eingetauchten Luftblasen wirkt, für den Gasaustausch von SF_6 vernachlässigt werden kann, weshalb Gleichung 6.43 gültig ist. Somit lässt sich auf Grundlage des experimentell ermittelten Defizitquotienten r_{SF_6} unter Verwendung der Gleichungen 6.22 und 6.46 der zusammengefasste Parameter PM_b ermitteln. Hiermit kann unter Berücksichtigung des Henrykoeffizienten und der Diffusivität von Sauerstoff der Defizitquotient (bzw. die Austauscheffizienz) ermittelt werden, der sich für O_2 unter Vernachlässigung des hydrostatischen Drucks ergeben würde. Diese werden als isobarer Defizitquotient $r_{\text{O}_2,ib}$ bzw. isobare Austauscheffizienz $E_{\text{O}_2,ib}$ für Sauerstoff bezeichnet.

Effektive Sättigungskonzentration und Eintauchtiefe: Wie oben dargelegt, ist die Konzentration von Sauerstoff in eingetauchten Luftblasen infolge des hydrostatischen Drucks höher als unter Luftdruck. Dadurch erhöht sich auch die zugehörige Sättigungskonzentration, die als Funktion der Eintauchtiefe wie folgt ausgedrückt werden kann:

$$c_{sat}(z) = \frac{c_{g,b}(z)}{H} = \frac{c_{g,0}}{H} \cdot \left(1 + \frac{\rho_w \cdot g \cdot z}{P_{atm}} \right) \quad (6.47)$$

Maßgebend für den Stoffübergang an den eingetauchten Blasen ist daher eine effektive Sättigungskonzentration $c_{sat,eff}$ die sich aus einer effektiven Eintauchtiefe z_{eff} ableitet. Die effektive Sättigungskonzentration ergibt sich unter Verwendung von $r_{\text{O}_2,ib}$ sowie den gemessenen Sauerstoffkonzentrationen im Ober- und Unterwasser mit Gleichung 6.25:

$$c_{sat,eff} = \frac{c_{w,o} - r_{\text{O}_2,ib} \cdot c_{w,u}}{1 - r_{\text{O}_2,ib}} \quad (6.48)$$

Mit Sauerstoffelektroden wird direkt die prozentuale Sättigung (unter Atmosphärendruck) gemessen und diese dann mit Hilfe einer temperaturabhängigen Sättigungskonzentration in eine absolute Konzentration (mg/L) umgerechnet. Daher ist es vorteilhaft die relativen Sättigungen anstelle der absoluten Konzentrationen zu verwenden, um die Unsicherheit zu eliminieren, die sich aus der Ungenauigkeit der absoluten Sättigungskonzentration ergibt (Gulliver und Rindels 1993). Die prozentuale effektive Sauerstoffsättigungskonzentration ($X_{sat,eff}$) ergibt sich damit aus:

$$X_{sat,eff} = \frac{X_{w,o} - r_{\text{O}_2,ib} \cdot X_{w,u}}{1 - r_{\text{O}_2,ib}} \quad (6.49)$$

Dabei sind $X_{w,o}$ und $X_{w,u}$ die prozentualen Sauerstoffsättigungen im Ober- und Unterwasser. Aus der effektiven Sättigungskonzentration lässt sich die effektive Eintauchtiefe (z_{eff}) der Luftblasen ermitteln:

$$z_{eff} = \left(\frac{c_{sat,eff}}{c_{sat,0}} - 1 \right) \cdot \frac{P_{atm}}{\rho_w \cdot g} = \left(\frac{X_{sat,eff}}{100} - 1 \right) \cdot \frac{P_{atm}}{\rho_w \cdot g} \quad (6.50)$$

wobei $c_{sat,0} = c_{g,0}/H$ die Sättigungskonzentration unter Atmosphärendruck ist. Die effektive Eintauchtiefe kann als eine hinsichtlich des Gasaustausches gewichtete mittlere Aufenthaltstiefe der Luftblasen im Tosbecken interpretiert werden. Im Sinne des vollständigen Modellansatzes (Gleichung 6.38) entspricht z_{eff} näherungsweise $z_0/2$. Verwendet man $r_{O_2,theo}$ und $c_{sat,eff}$ in Gleichung 6.25 und löst diese nach $c_{w,u}$ auf, so entspricht das Ergebnis näherungsweise dem vollständigen Modell gemäß Gleichung 6.38. Durch die neuen Parameter wird also der infolge des hydrostatischen Drucks erhöhte Stoffübergang implizit berücksichtigt.

Vergleich mit den herkömmlichen Maßzahlen: Der hier abgeleitete theoretische Defizitquotient bzw. die zugehörige isobare Austauscheffizienz für Sauerstoff ($E_{O_2,ib}$) sind ausschließlich eine Funktion des Gasaustausches, der sich infolge der hydraulischen Bedingungen am Wehr ergibt. Der herkömmliche Defizitquotient (r_{O_2}) bzw. die Austauscheffizienz (E_{O_2}) (Gleichungen 6.25 und 6.26) hängen im Gegensatz dazu zusätzlich von der Konzentration im Oberwasser ab, sind also nicht ausschließlich von geometrischen und hydraulischen Bedingungen bestimmt (Gulliver et al. 1997).

Dies wird in Abbildung 6.12 verdeutlicht. Zur Ermittlung der hier dargestellten Kurven wurde wiederum von Werten in Tabelle 6.7 (mit $z_{eff}=1$ m) ausgegangen. Für Untersättigungen im Oberstrom steigt E_{O_2} bei konstantem $E_{O_2,ib}$ an und übersteigt schließlich den Wert von 1. Dies widerspricht der ursprünglichen Definition der Austauscheffizienz, wonach diese angibt, welcher relative Anteil des oberstromigen Defizits am Wehr abgebaut wird. Dieses Paradoxon entsteht dadurch, dass es bei Oberwasserkonzentrationen nahe der Sättigung im Unterwasser aufgrund der erhöhten Gleichgewichtskonzentration zu Übersättigungen kommt. Darüber hinaus ist die klassische Austauscheffizienz bei hundertprozentiger Oberwassersättigung nicht definiert. Bei Übersättigung im Oberwasser ist E_{O_2} zunächst negativ, da die Übersättigung im Unterwasser noch größer ist als im Oberwasser. Für große Übersättigungen im Oberwasser nähert sich E_{O_2} asymptotisch einem Wert kleiner $E_{O_2,ib}$ an. Hinsichtlich des Sauerstoffeintrags besteht ein entscheidender Vorteil des Ansatzes mit r_{ib} bzw. E_{ib} darin, dass sich auch Sauerstoffübersättigungen im Unterwasser vorhersagen lassen. E_{O_2} erscheint aufgrund seiner Anschaulichkeit aber nach wie vor geeignet, die Effizienz der Wiederbelüftung für gegebene oberstromige Konzentrationen zu beschreiben.

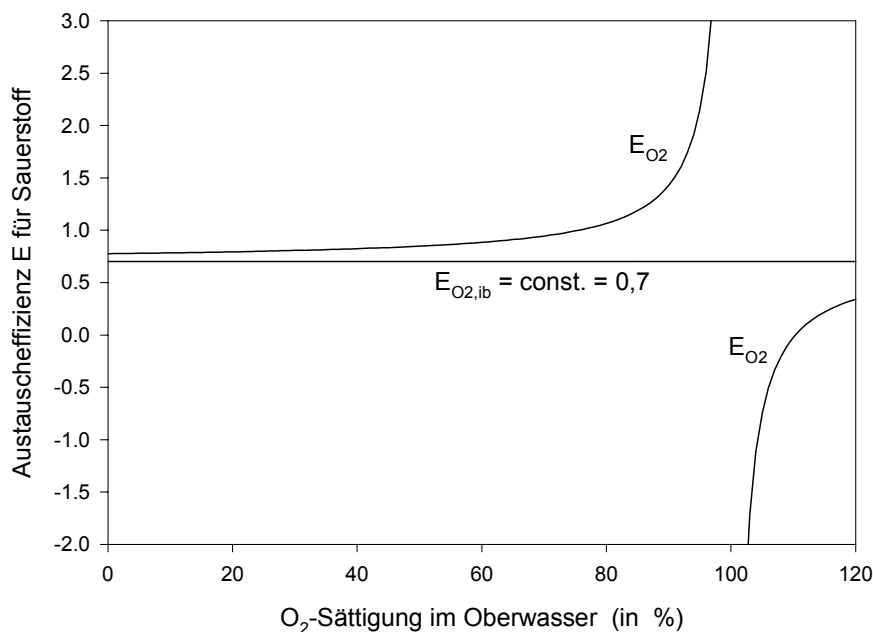


Abb. 6.12: Isobare ($E_{O_2,ib}$) und klassische Austauscheffizienz (E_{O_2}) für Sauerstoff an einem Wehrüberfall (Tabelle 6.7, $z_{eff}=1$ m) in Abhängigkeit vom Sättigungsgrad des Oberwassers.

6.4.4 Experimentelle Befunde zum Gasaustausch am Wehr Esslingen

Während des Tracerexperiments im September und Oktober 2000 wurden ober- und unterstrom des Überfallwehres in Esslingen (Neckar-km 193,9, $h=\text{const.}=5,3$ m) je 11 Beprobungen des Gastracers SF₆ durchgeführt. Zeitgleich wurden an 7 Beprobungsterminen die Sauerstoffkonzentrationen (bzw. Sättigungen) und die Wassertemperaturen ermittelt. Die Probenahme im Ober- und Unterwasser fand jeweils innerhalb weniger Minuten statt, so dass von konstanten Durchflüssen und Stoffkonzentrationen ausgegangen werden kann. An zwei der Termine wurden im Ober- und Unterwasser Querprofile von Bord des Forschungsschiffs Max Honsell aufgenommen. Diese verdeutlichten, dass sowohl SF₆ als auch Sauerstoff im Oberwasser keine lateralen Konzentrationsgradienten aufwiesen und im Unterwasser eine homogene Quervermischung bereits etwa 100 m unterhalb des Wehres gegeben war. Für Sauerstoff konnten keine Tiefengradienten festgestellt werden. An allen übrigen Terminen erfolgte die Probenahme 5 m oberhalb und ca. 150 m unterhalb des Wehres vom rechten Ufer aus. Auf Grundlage der Ergebnisse der Quer- und Tiefenprofile können diese Proben als repräsentativ angesehen werden. Bei zehn der Beprobungen wurde der Abfluss gleichmäßig über zwei Wehrfelder (B=32 m) abgeführt, während an einem Termin der gesamte Abfluss über ein Wehrfeld (B=16 m) geführt wurde, so dass zu diesem Zeitpunkt der spezifische Abfluss wesentlich größer war als zu den anderen Terminen. Wenngleich für die gegebene Fallhöhe von 5,3 m nach der Formel von Horeni (Gleichung 6.20) bei spezifischen Abflüssen kleiner 0,7 m³/s/m mit einem Zerfallen des Strahls zu rechnen ist, wurde bei den im Feld beobachteten Abflusszuständen bis minimal 0,56 m³/m/s kein Zerfallen des Strahls festgestellt. Daher wurde bei der gesamten Auswertung von einem kompakten eintauchenden Wasserstrahl ausgegangen und nur der Gasaustausch an den Luftblasen im Tosbecken als relevant erachtet.

Ergebnisse

Aus den SF₆-Messungen wurden zunächst der Defizitquotient (r_{SF_6}) und die Austauscheffizienz (E_{SF_6}) für den Gastracer ermittelt. Das Verhältnis zwischen Luftertrag und Durchfluss (Q_L/Q) wurde nach Ervine und Elsayy (1975; Gleichung 6.22) berechnet und anschließend der Parameter PM_b ermittelt (Gleichung 6.46). Hiermit wurde schließlich der isobare Defizitquotient ($r_{\text{O}_2,\text{ib}}$) und die zugehörige Austauscheffizienz ($E_{\text{O}_2,\text{ib}}$) für Sauerstoff berechnet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.8 zusammengestellt.

Tab. 6.8: Ergebnisse der SF₆-Messungen am Wehr Esslingen.

Datum	q m ³ /s/m	Tw °C	SF ₆ OW ng/L	SF ₆ UW ng/L	r_{SF_6}	E_{SF_6}	Q_L/Q	PM_b	$r_{\text{O}_2,\text{ib}}$	$E_{\text{O}_2,\text{ib}}$
27.9. 11:15	1,33	14,4	57,6 ± 3,2	31,6 ± 3,3	1,82	0,45	0,61	46000	2,10	0,52
27.9. 14:25	0,65	14,9	54,0 ± 1,0	20,4 ± 1,2	2,65	0,62	0,83	67000	3,18	0,69
27.9. 21:40	0,67	14,8	45,0 ± 1,0	16,0 ± 0,9	2,81	0,64	0,82	75000	3,38	0,70
27.9. 9:10	0,88	14,8	59,6 ± 0,9	19,4 ± 0,2	3,07	0,67	0,73	97000	3,69	0,73
28.9. 11:50	0,77	15,2	57,0 ± 2,9	20,0 ± 1,7	2,85	0,65	0,77	81000	3,42	0,71
28.9. 12:05	0,77	15,3	58,5 ± 1,6	20,6 ± 5,6	2,84	0,65	0,77	81000	3,41	0,71
28.9. 15:15	0,75	15,6	55,6 ± 3,0	23,1 ± 3,3	2,41	0,58	0,78	61000	2,87	0,65
29.9. 9:50	0,64	15,4	49,0 ± 5,6	18,4 ± 0,7	2,66	0,62	0,84	67000	3,20	0,69
29.9. 10:15	0,64	15,4	54,3 ± 4,4	20,3 ± 5,9	2,67	0,63	0,84	68000	3,21	0,69
30.9. 8:50	0,56	15,3	58,7 ± 1,0	19,3 ± 0,2	3,04	0,67	0,89	78000	3,68	0,73
30.9. 13:40	0,56	15,7	68,8 ± 4,5	19,0 ± 0,5	3,62	0,72	0,89	100000	4,40	0,77

Für die 7 Termine, an denen zeitgleiche Sauerstoffmessungen vorlagen wurden, ausgehend von $r_{\text{O}_2,\text{ib}}$, mit Hilfe der Gleichungen 6.49 und 6.50 die effektive Sauerstoffsättigung und die zugehörige effektive Tiefe für die Luftblasen ermittelt. Da keine Luftdruckmessungen vorlagen, wurde der Luftdruck mit Hilfe der

barometrischen Höhenformel (DWD 1987) unter Vernachlässigung der aktuellen Drucklage für die Höhenlage des Wehres (235 m ü. NN) zu 98360 Pa abgeschätzt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.9 dargestellt.

Tab. 6.9: Ergebnisse der zeitgleichen Sauerstoff und SF₆ Messungen am Wehr Esslingen.

Datum	q m ³ /s/m	TW °C	X _{O2} OW %	X _{O2} UW %	X _{sat,eff} %	z _{eff} m	d _b mm
27.9. 11:15	1,33	14,4	102	111	119	1,92	10,2
27.9. 14:25	0,65	14,9	96	106	111	1,06	5,4
27.9. 9:10	0,88	14,8	104	110	112	1,23	4,6
28.9. 11:50	0,77	15,2	98	108	111	1,15	4,9
28.9. 12:05	0,77	15,3	98	107	111	1,08	4,8
29.9. 9:50	0,64	15,4	97	105	108	0,85	4,6
29.9. 10:15	0,64	15,4	98	105	108	0,79	4,4

Plausibilitätskontrolle: Um die Plausibilität des Modellparameters PM_b besser einschätzen zu können, wurde der effektive Luftblasendurchmesser d_b aus den Ergebnissen abgeschätzt. Hierzu wurde angenommen, dass die Blasenauftiegs geschwindigkeit v_b mit 0,3 m/s konstant ist und die effektive Tiefe z_{eff} der halben maximalen Eindringtiefe der Luftblasen entspricht. Daraus folgt, dass die Aufenthaltszeit der Luftblasen t_{ib} aus 2z_{eff}/v_b ermittelt werden kann. Durch diese Vereinfachungen wird es möglich den effektiven Luftblasendurchmesser nach Umformen von Gleichung 6.46 wie folgt abzuschätzen:

$$d_b \cong \left(\frac{2 \cdot z_{eff}}{PM_b} \right)^{2/3} \cdot \left(\frac{144}{\pi \cdot v_b} \right)^{1/3} \quad (6.51)$$

Die auf Grundlage dieser Näherung berechneten Luftblasendurchmesser sind ebenfalls in Tabelle 6.9 angegeben. Die berechneten Durchmesser liegen zumeist im Bereich zwischen 4 und 5 mm und erscheinen damit plausibel. Für den höchsten spezifischen Abfluss wird jedoch ein Luftblasendurchmesser von etwa 1 cm berechnet, was im Vergleich zu Messungen etwas zu hoch erscheint (vgl. Kapitel 6.4.1 und Bin 1993). Die ermittelten Blasendurchmesser liegen jedoch in der richtigen Größenordnung, was eingedenk der starken Vereinfachungen die zur Berechnung von d_b gemacht wurden, für die Plausibilität von PM_b spricht.

Prognose des Sauerstoffübergangs am Wehr Esslingen

Für Vorhersagen bezüglich der Sauerstoffanreicherung bzw. -abreicherung für gegebene hydraulische Randbedingungen, müssen sowohl X_{sat,eff} bzw. z_{eff} als auch PM_b bzw. r_{O2,ib} oder E_{O2,ib} als Funktion der maßgebenden hydraulischen Parameter ausgedrückt werden. Die im Zuge des Feldexperiments gewonnenen Daten reichen sicherlich nicht aus, um eine allgemeingültige Beziehung für r_{O2,theo} zuverlässig abzuleiten, dennoch soll hier aufgezeigt werden welche Beziehungen sich anhand der wenigen Daten ergeben.

Ableitung einer Prognoseformel: Da die Überfallhöhe h bei dem gegebenen Wehr konstant ist, ist der spezifische Abfluss q die einzige veränderliche hydraulische Einflussgröße. Bei konstanter Temperatur sind alle weiteren Parameter, wie die Eintauchgeschwindigkeit (v_e), die Dicke (d_e) und somit auch die Reynolds- und Froudezahl des Strahls konstant bzw. ausschließlich eine Funktion von q. Aus Tabelle 2 geht hervor, dass die effektive Tiefe (und damit auch X_{sat,eff}) mit dem spezifischen Abfluss zunimmt. Dies erscheint intuitiv plausibel und steht in Einklang mit den Ergebnissen, die Gulliver et al. (1997) für das Tosbecken eines rundkronigen Wehres erzielten. Für eine theoretische Analyse von z_{eff} wird in erster Näherung davon ausgegangen, dass der eintauchende Strahl seinen Impuls beibehält (Impulsstrahl: M=ρ_wvQ=const). Sind d(z) und v(z) die Dicke und die mittlere Geschwindigkeit des eingetauchten

Strahls als Funktion der Eindringtiefe z , so ergibt sich bei konstanter Dichte aus der Annahme des Impulsstrahls:

$$d_e \cdot v_e^2 = d(z) \cdot v(z)^2 \quad (6.52)$$

Die maximale Eindringtiefe der Luftblasen z_0 kann als jene Tiefe definiert werden, bei der die Aufstiegs- geschwindigkeit der Blasen v_b gleich der mittleren Strahlgeschwindigkeit $v(z)$ ist. Geht man weiter davon aus, dass ein linearer Zusammenhang zwischen z_{eff} und z_0 besteht, so lässt sich z_{eff} wie folgt bestimmen:

$$z_{\text{eff}} = \text{const} \cdot d_e \cdot \left(\frac{v_e}{v_b} \right)^2 \quad (6.53)$$

Im vorliegenden Fall ist die Eintauchgeschwindigkeit des Strahls v_e infolge der gleichbleibenden Überfallhöhe konstant, während die Dicke des eintauchenden Strahls d_e ausschließlich eine Funktion des spezifischen Abflusses q ist. Nimmt man weiterhin an, dass v_b konstant ist (ca. 0,3 m/s) so vereinfacht sich Gleichung 6.53 für den gegebenen Fall zu:

$$z_{\text{eff}} = \text{const} \cdot q \quad (6.54)$$

Auf Grundlage dieser theoretischen Analyse erscheint es gerechtfertigt, die effektive Eindringtiefe der Luftblasen als lineare Funktion des spezifischen Abflusses auszudrücken. In Abbildung 6.13 sind die äquivalenten Ergebnisse der Regressionen mit den Gleichungen 6.53 und 6.54 dargestellt. Keiner der 7 Messpunkte hat einen übermäßigen Einfluss auf das Ergebnis der Regression, dies gilt auch für den extremen Abflusswert ($q=1,33\text{m}^3/\text{s}/\text{m}$). Die ermittelte Steigung der Regressionsgleichung ist also kaum von der inhärenten Ungenauigkeit einzelner Messungen beeinflusst.

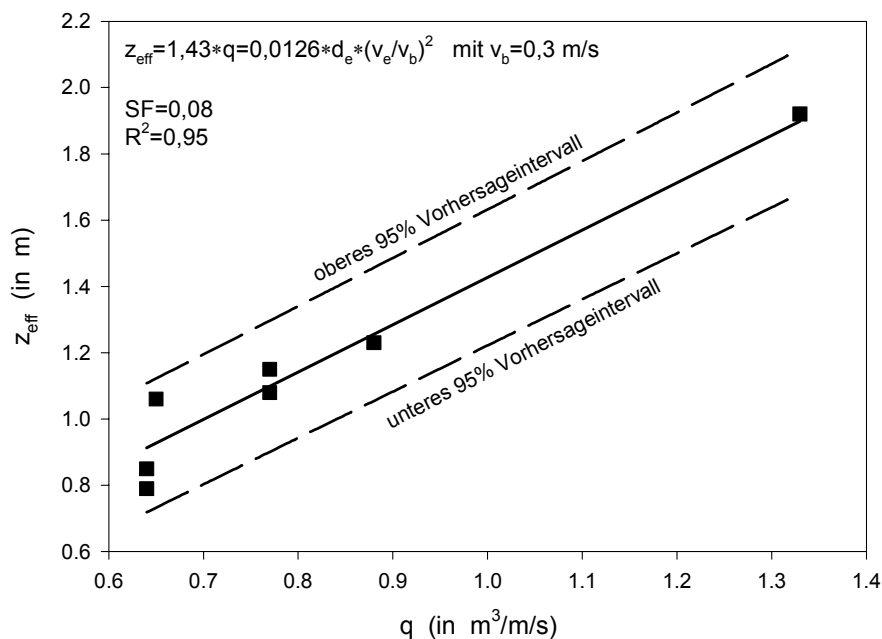


Abb. 6.13: Effektive Tiefe der Luftblasen als Funktion des spezifischen Abflusses am Wehr Esslingen.

Ist der theoretische Ansatz eines Impulsstrahls näherungsweise korrekt, dann sollte die Regression in Form von Gleichung 6.53 auch für andere freie Überfallwehre mit großen Unterwassertiefen (größer $2z_{\text{eff}}$) gültig sein. Hierzu ist allerdings zu bemerken, dass die Annahme eines reinen Impulsstrahls zweifellos eine zu große Vereinfachung darstellt (siehe Abschnitt 6.4.1). Wird der eingetauchte Strahl als Impulsstrahl mit charakteristischem Ausbreitungshalbwinkel zwischen 12° und 14° betrachtet (Fischer et al. 1979), so ergäben sich für alle vorliegenden Abflüsse Blaseneindringtiefen von mehreren Zehner Metern. Die Eindringtiefen, wären im vorliegenden Fall also durchgehend durch die Unterwassertiefe vorgegeben,

so dass auch z_{eff} nicht mit dem Abfluss variieren sollte, was durch die experimentellen Ergebnisse klar widerlegt wird. Ob der für Gleichung 6.53 ermittelte Proportionalitätsfaktor für die Übertragung auf andere Wehre verwendet werden kann, muss demnach durch weitere Naturexperimente geklärt werden. Obgleich die Regression nur auf 7 Wertepaaren beruht, spricht ihre hohe Güte jedoch dafür, dass die ermittelten Koeffizienten für das Wehr Esslingen im untersuchten Abflussbereich von 0,6 bis 1,4 m³/s/m angewandt werden können.

Aus Tabelle 6.8 wird ersichtlich, dass der theoretische Defizitquotient mit steigendem spezifischem Abfluss kleiner wird. Um eine quantitative Beziehung zwischen q und $r_{\text{O}_2, \text{theo}}$ abzuleiten, wird analog zu Avery und Novak (1978) und Markofsky und Kobus (1978) davon ausgegangen, dass $r-1$ bzw. $r_{\text{O}_2, \text{ib}}-1$ für konstante Wassertemperatur und –qualität nur eine Funktion der Reynolds- und der Froudezahl des Strahls sind. Diese beiden dimensionslosen Parameter sind bei konstanter Überfallhöhe nur vom spezifischen Abflusses abhängig. Daher lässt sich $r_{\text{O}_2, \text{ib}}-1$ für das Wehr Esslingen wie folgt ausdrücken:

$$r_{\text{O}_2, \text{ib}} = \text{const}1 \cdot q^{\text{const}2} \quad (6.55)$$

Zusätzlich eine allgemeingültige Beziehung wie im Fall von z_{eff} aufzustellen, ist nicht sinnvoll, da es bei konstantem h nicht möglich ist den Einfluss von Re und Fr zu trennen. Allerdings wäre dies prinzipiell möglich, wenn unterschiedliche Wehre mit variablem q und h untersucht würden. Hieraus könnten allgemeingültige halbempirische Formeln abgeleitet werden. Die Konstanten in Gleichung (6.55) wurden mit Hilfe einer nicht linearen Regression ermittelt. Dabei wurde ein Ausreißer, der das Regressionsergebnis sehr stark beeinflusste und offenbar auf fehlerhafte Messungen zurückzuführen ist, nicht berücksichtigt. Die verbleibenden 10 Messwerte haben dagegen nur geringen Einfluss auf das Ergebnis der Regression, so dass die inhärenten Messungenauigkeiten die ermittelten Koeffizienten nicht übermäßig beeinflussen. Die Messdaten und die angepasste Kurve sind in Abbildung 6.14 wiedergegeben. Mit einem Standardfehler von 0,33 und einer erklärten Varianz von 71 % erscheint die Güte der auf 10 Messwerten basierenden Regression nur bedingt ausreichend für eine quantitative Beschreibung von $r_{\text{O}_2, \text{theo}}$ am Wehr Esslingen.

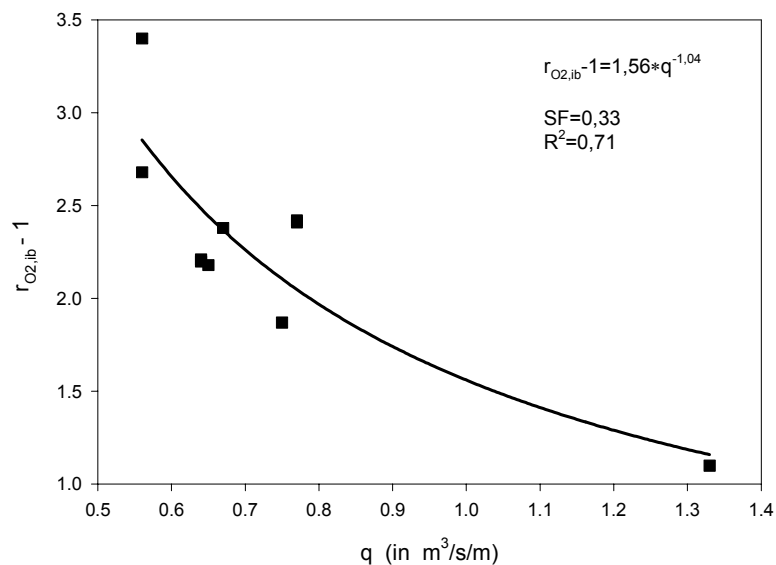


Abb. 6.14: Isobarer Defizitquotient von Sauerstoff als Funktion des spezifischen Abflusses am Wehr Esslingen.

Mit Hilfe der Ergebnisse der beiden Regressionen, kann die zu erwartende prozentuale Sauerstoffsättigung im Unterwasser des Wehrs Esslingen in Abhängigkeit des spezifischen Abflusses und der Sättigung im Oberwasser ausgedrückt werden:

$$X_{w,u} = \frac{X_{w,o} + 223 \cdot \frac{\rho_w \cdot g}{P_{\text{atm}}} \cdot q^{-0,04} + 1,56 \cdot q^{-1,04}}{1,56 \cdot q^{-1,04} + 1} \quad (6.56)$$

Diese Vorhersageformel für das Wehr Esslingen gilt für Wassertemperaturen von 15 °C und sollte nur auf den experimentell erfassten Abflussbereich von $0,6 < q < 1,4$ angewandt werden.

Güte der Prognosen: In Abbildung 6.15 werden die mit Gleichung 6.56 ($P_{\text{atm}}=98360$ Pa) berechneten Sauerstoffsättigungen im Unterwasser mit Messwerten verglichen. Bei der Interpretation der guten Übereinstimmung ist zu beachten, dass es sich mit Ausnahme von 2 Zusatzmessungen um die selben Messwerte handelt, die zur Entwicklung von Gleichung 6.56 verwendet wurden. Eine Validierung durch zusätzliche Sauerstoffmessungen ist wünschenswert. Wobei insbesondere Messungen bei starken Untersättigungen erforderlich sind, um die Gültigkeit von Gleichung 6.56 zuverlässig zu überprüfen.

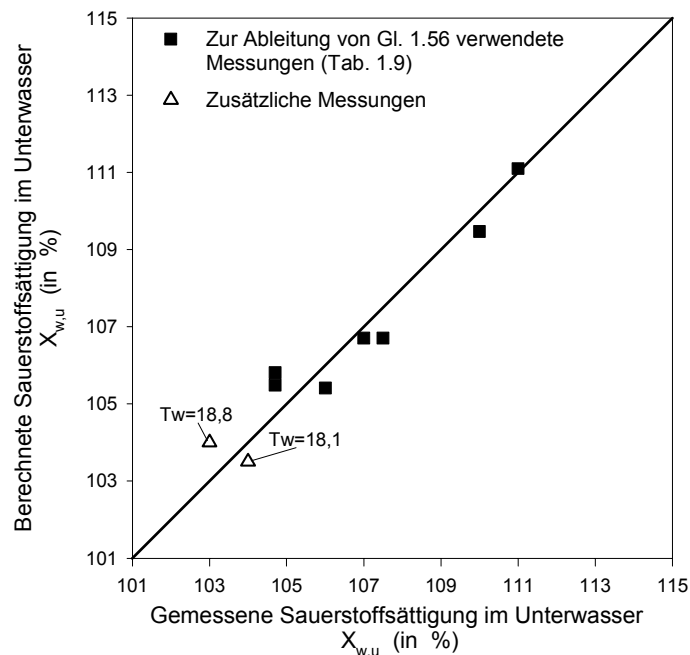


Abb. 6.15: Vergleich zwischen gemessenen und mit Gleichung 6.56 berechneten Sauerstoffsättigungen im Unterwasser des Wehrs Esslingen.

Vorhersage der Sättigung im Unterwasser: Abbildung 6.16 gibt die bei 15 °C und einem Luftdruck von 98360 Pa im Unterwasser zu erwartende Sauerstoffsättigung in Abhängigkeit der Oberwassersättigung und des spezifischen Abflusses wieder. Der Konturplot verdeutlicht, dass bei Oberwassersättigungen größer 80 % im gesamten untersuchten Abflussbereich mit einer Sauerstoffübersättigung im Unterwasser gerechnet werden muss. Zudem wird deutlich, dass bei geringen Ausgangskonzentrationen durch kleine spezifische Abflüsse eine höhere Sauerstoffaufstockung erreicht werden kann. Dies gilt allerdings nur solange der Strahl am Eintauchpunkt noch nicht zerfallen ist. Bei Untersättigung ist die Effizienz des Sauerstoffeintrags daher bei spezifischen Abflüssen knapp oberhalb des Zerfallens des Strahls am höchsten. Bis zu spezifischen Abflüssen von $0,56 \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}$ konnte kein Zerfallen des Strahls beobachtet werden, wengleich dies nach Horeni (1956; Gleichung 6.20) bereits ab etwa $0,7 \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}$ zu erwarten wäre. Daraus kann gefolgert werden, dass bei gegebenem Abfluss die Wiederbelüftung optimiert werden kann, indem die Wehrfelder so gesteuert werden, dass der spezifische Abfluss möglichst gering ist, $0,56 \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}$ aber nicht wesentlich unterschreitet. Auch die ökologisch ebenfalls unerwünschten Übersättigungen größer 120 % können mit geringen spezifischen Abflüssen besser abgebaut werden als mit hohen. Diese Aussagen lassen sich qualitativ auf andere Wehre übertragen: Prinzipiell wird der Sauerstoffein- bzw. -austrag maximiert, indem der spezifische Abfluss möglichst gering gehalten wird, der Strahl aber gerade noch nicht zerstäubt.

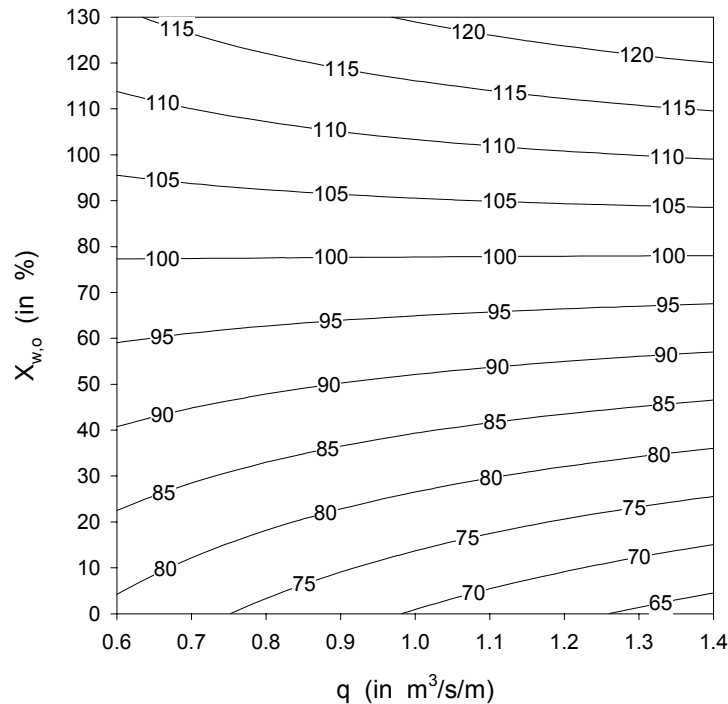


Abb. 6.16: Zu erwartende prozentuale Sauerstoffsättigungen im Unterwasser des Wehrs Esslingen in Abhängigkeit vom spezifischen Abfluss und der Sättigung im Oberwasser (Gleichung 6.56).

Vergleich mit AV: In Abbildung 6.17 werden die Vorhersagen mit Gleichung 6.56 und der Formel nach Avery und Novak (1978; Tabelle 6.4) verglichen: Die Isolinien stellen die Differenzen zwischen den mit den beiden Formeln berechneten unterstromigen Sauerstoffsättigungen dar ($T=15^\circ\text{C}$, $P_{\text{atm}}=98360\text{ Pa}$).

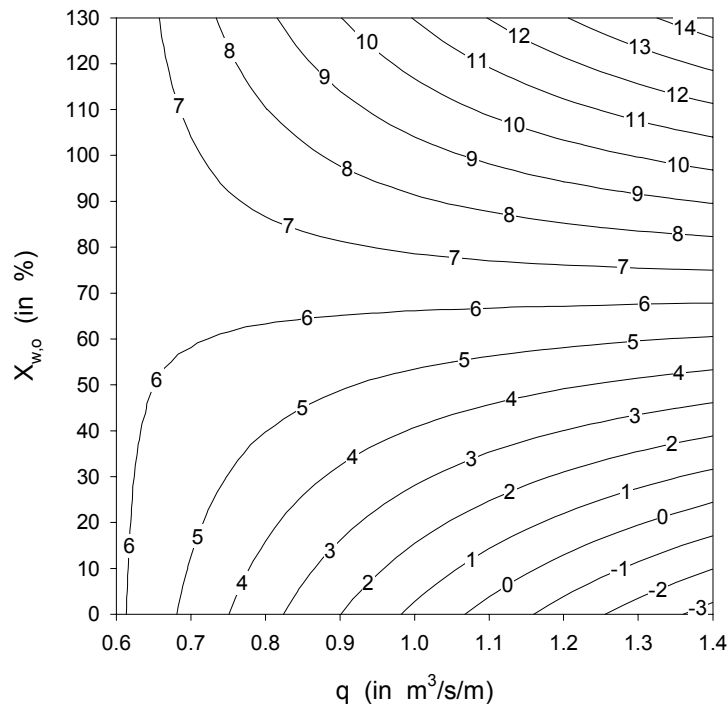


Abb. 6.17: Konturplot der Differenzen der mit Gleichung 6.56 und der Formel nach Avery & Novak (1978) vorhergesagten Sauerstoffsättigungen im Unterwasser des Wehrs Esslingen.

Der Vergleich zeigt, dass die Unterschiede in den vorhergesagten Sättigungen in erster Linie eine Funktion der Sauerstoffsättigung im Oberwasser sind. Dies ist vermutlich Ausdruck dessen, dass der klassische Defizitquotient, wie er der Avery und Novak Gleichung zugrunde liegt, eine Funktion von $X_{w,o}$ ist. Für Oberwasserdefizite größer 50 % und spezifische Abflüsse über $0,75 \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}$ differieren die vorhergesagten Sättigungen um maximal 5 %. Die größten Differenzen treten bei Übersättigungen auf. Dies ist darauf zurückzuführen, dass mit Gleichung 6.56 die durch das Eintauchen der Blasen erhöhte Sättigungskonzentration berücksichtigt wird, während Avery und Novak (1978) von einer konstanten Gleichgewichtssättigung von 100 % ausgehen. Insgesamt sind die Differenzen moderat. Vor dem Hintergrund der guten Leistungen der Avery und Novak Formel bei der Vorhersage des Sauerstoffeintrags an Wehren (Abschnitt 6.4.2), spricht dies für die Plausibilität von Gleichung 6.56.

Ausblick: Wenngleich die vorgestellten Ergebnisse nur auf wenigen Messungen beruhen, ermutigen sie dennoch dazu, die neu eingeführten Maßzahlen für den Sauerstoffübergang an Wehren $r_{\text{O}_2,\text{ib}}$ bzw. $E_{\text{O}_2,\text{ib}}$ für zukünftige Untersuchungen heran zu ziehen. Im Gegensatz zu den klassischen Maßzahlen r und E , sind sie unabhängig von der Sättigung im Oberwasser und folglich nur eine Funktion hydraulischer und geometrischer Randbedingungen. Auf der Grundlage weiterer Untersuchungen, die mit der vorgestellten Strategie an Wehren mit variablen Randbedingungen durchgeführt werden, sollte es möglich sein, allgemeingültige Beziehungen für $r_{\text{O}_2,\text{ib}}$ bzw. $E_{\text{O}_2,\text{ib}}$ in Abhängigkeit von Re_{st} und Fr_{st} abzuleiten.

7 STOFFÜBERGANG AN DER GENZFLÄCHE SEDIMENT-WASSER

7.1 Motivation

Stoffflüsse über die Sediment-Wasser Grenzfläche beeinflussen den Sauerstoffhaushalt in zweierlei Hinsicht: Zum einen bedingen die Zehrungsprozesse im Sediment eine unmittelbare Senkenwirkung für Sauerstoff. Zum anderen greifen die abgelagerten Sedimente durch die Festlegung und Freisetzung von Nährstoffen und reduzierten Substanzen (z.B. NH_4 , CH_4) mittelbar in den Sauerstoffhaushalt ein. Die Auswirkungen dieser Austauschprozesse sind bei tiefen Fließgewässern, wie dem stauregulierten Neckar, tendenziell von geringerer Bedeutung. Allerdings bestehen große Unsicherheiten bezüglich der Massenstromdichten (Chapra 1997; Clasen et al. 1997), so dass deren Relevanz für den Sauerstoff- und Nährstoffhaushalt a priori nur schwer abgeschätzt werden kann. Im Neckar wurden Messungen zu Stoffflüssen über die Sediment-Wasser Grenzfläche zuletzt Ende der 70er Jahre durchgeführt (Hoffmann et al. 1980). Vor dem Hintergrund der seit dieser Zeit merklich verbesserten Gütesituation des Neckars erscheinen erneute Messungen dringend notwendig. Nur auf Grundlage von Messergebnissen können die Bedeutung der Austauschprozesse mit dem Sediment bewertet und zuverlässige Parameterschätzungen für die Gütesimulation vorgenommen werden.

7.2 Theoretische Grundlagen

7.2.1 Empirische Ansätze zur Sauerstoffzehrung des Sediments

Sedimente können vereinfachend als Sauerstoffsinken betrachtet werden. Experimentelle Befunde weisen darauf hin, dass sich der sedimentäre Sauerstoffbedarf (SSB) zum Teil aus Sedimenteigenschaften ableiten lässt. So haben feinkörnige Sedimente im Allgemeinen einen größeren SSB als grobe Ablagerungen (Clasen et al. 1997). Zudem scheint der SSB mit dem Anteil an organischem Kohlenstoff bzw. dem sedimentären BSB oder CSB zuzunehmen (Di Toro et al. 1990; Nöthlich und Reuter 1982; Nöthlich und Reuter 1987). Wenngleich diese Zusammenhänge häufig nur sehr lose sind, werden sie genutzt, um die räumliche Verteilung des SSB direkt aus Sedimenteigenschaften bzw. indirekt aus den hydraulischen Ablagerungsbedingungen im Gewässer abzuschätzen (Canale et al. 1995; Kirchesch und Schöl 1999). Darüber hinaus ist die Temperaturabhängigkeit des SSB gut belegt (DiToro 2001). Zur Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration des überliegenden Wassers gibt es hingegen widersprüchliche Angaben (Chapra 1997).

Aufbauend auf diesen Beobachtungen wird der SSB in Gewässergütemodellen zumeist als temperaturabhängiger Verlust pro Flächeneinheit betrachtet (Chapra 1997; Rauch et al. 1998). In manchen Ansätzen wird zudem die Sauerstoffkonzentration des überlagernden Wassers in Form einer Monod-Kinetik berücksichtigt, so dass sich folgende Formulierung ergibt:

$$\frac{dO_2}{dt} = SSB_{20} \cdot \Theta_{SSB}^{(T_w-20)} \cdot \frac{O_2}{K_{S_{O_2,SSB}} + O_2} \cdot \frac{A}{V} \approx SSB_{20} \cdot \Theta_{SSB}^{(T_w-20)} \cdot \frac{O_2}{K_{S_{O_2,SSB}} + O_2} \cdot \frac{1}{y} \quad (7.1)$$

Hierin ist SSB_{20} der sedimentäre Sauerstoffbedarf bei 20 °C und optimaler Sauerstoffversorgung, Θ_{SSB} ist der Temperaturkorrekturkoeffizient und T_w die aktuelle Wassertemperatur. O_2 ist die Sauerstoffkonzentration im überlagernden Wasser und $K_{S_{O_2,SSB}}$ die Halbsättigungskonstante für Sauerstoff. A ist die Sedimentoberfläche und V das beteiligte Wasservolumen. Geht man von homogener Durchmischung über die gesamte Tiefe aus und vernachlässigt die Wirkung der Ufer, so lässt sich V/A vereinfacht als die mittlere Gewässertiefe y ausdrücken. Angaben über Θ_{SSB} schwanken im Bereich zwischen 1,04 und 1,13, zumeist wird aber ein Wert von 1,065 als repräsentativ angenommen (Chapra 1997; Chiaro und Burke 1980; Truax et al. 1995). Auf der Grundlage zahlreicher experimenteller Untersuchungen kann davon ausgegangen werden, dass die Sauerstoffkonzentration im Wasser bei Werten über ca. 5 mg/L keinen merklichen Einfluss auf den SSB hat (Chapra 1997). Die Angaben über ermittelte $K_{S_{O_2,SSB}}$ variieren innerhalb dieses Bereichs jedoch stark (Thomann und Mueller 1987; Truax et al. 1995), was vermutlich sowohl Ausdruck variabler Sedimenteigenschaften als auch unterschiedlicher experimenteller Methoden ist. Thomann und Mueller empfehlen einen Wert von 0,7 mg/L, was bedeutet, dass der SSB oberhalb von etwa 3 mg/L na-

hezu unabhängig vom Sauerstoffgehalt des überliegenden Wassers wird. Gleichung (7.1) ist rein empirischer Natur und lässt keine Rückschlüsse über die dem SSB zugrunde liegenden Mechanismen zu, auch erlaubt sie keine Aussagen über zeitliche Veränderungen infolge langfristiger Änderungen der Gewässergüte. Im Folgenden werden daher die dem SSB zugrunde liegenden Mechanismen und deren modellhafte Beschreibung näher erläutert.

7.2.2 Maßgebende Prozesse im Sediment

Ursächlich beruht der sedimentäre Sauerstoffbedarf (SSB) zum einen auf der biogeochemischen Umsetzung organischer Substanz in den abgelagerten Sedimenten, der sogenannten Frühdiagenese (Berner 1980). Zum anderen trägt die benthische Fauna durch Atmung direkt zum SSB bei (Uhlmann und Horn 2001) und beeinflusst über die Bioturbation die biogeochemischen Umsetzungen. Die genannten Prozesse sind auch maßgebend für die Freisetzung bzw. Festlegung von Nährstoffen.

Frühdiagenetische Prozesse: Die eng an den SSB gekoppelte Frühdiagenese beschreibt den mikrobiellen Ab- und Umbau des im Sediment befindlichen partikulären organischen Materials (POM). Die wichtigsten Mineralisierungsprozesse, die direkt oder indirekt zum Sauerstoffverbrauch in Sedimenten beitragen, werden in Abbildung 7.1 schematisch veranschaulicht. Die Abbildung gibt die relevanten Prozesse in stark vereinfachter Form wieder, indem nur jene Edukte aufgeführt sind die als Oxidationsmittel verwendet werden und nur jene reduzierten Produkte, deren Oxidation zusätzlich zur Sauerstoffzehrung beitragen kann. In Tabelle 7.1 sind zugehörige Reaktionsgleichungen aufgeführt, deren Stöchiometrie auf dem Redfield-Verhältnis (Redfield 1956) beruht, wobei insbesondere bei Beteiligung von Mineralphasen auch alternative Formulierungen möglich sind.

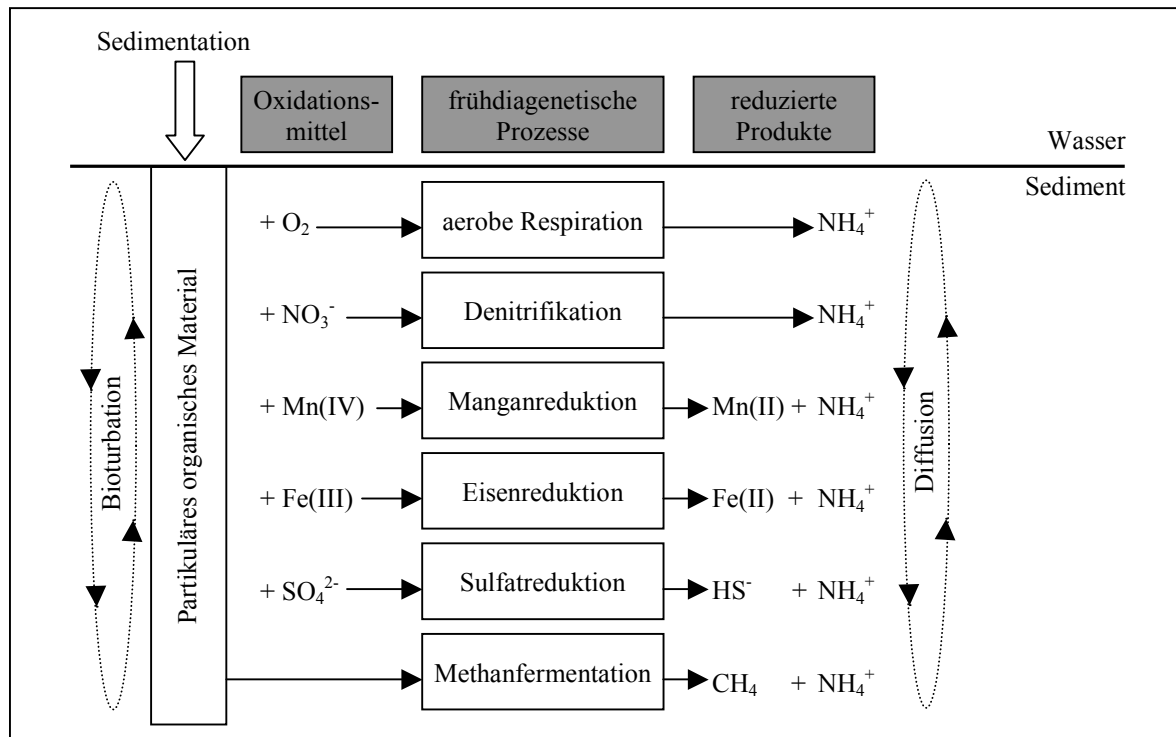


Abb. 7.1: Frühdiagenetische Prozesse und deren Wirkung auf die Stoffflüsse im Sediment.

Wie Abbildung 7.1 verdeutlicht, ist die Sedimentation von POM die treibende Kraft der für den SSB relevanten frühdiagenetischen Prozesse. Die sedimentierte organische Substanz wird durch unterschiedliche mikrobiell mediierte Prozesse mineralisiert. Die vertikale Abfolge der hierbei verwendeten Oxidationsmittel (O₂ - NO₃⁻ - Mn(IV) - Fe(III) - SO₄²⁻ - POM) wird durch die Energieausbeute der Redoxprozesse bestimmt (Berner 1980; Stumm und Morgan 1995). Die skizzierten Prozesse können dabei z.T. parallel in der selben Tiefenzone ablaufen, da sich Mikromilieus mit unterschiedlichen Redoxpotenzialen ausbilden können. Vereinfacht kann jedoch eine vertikale Schichtung, wie in Abbildung 7.1 skizziert angenommen werden. In der obersten, oxischen Schicht wird Sauerstoff unmittelbar bei der Mineralisierung des POM

verbraucht. Zudem wird, wie bei allen Mineralisierungsprozessen, Ammonium freigesetzt, dessen Nitrifikation zusätzlich zum Sauerstoffverbrauch beitragen kann. In Ablagerungen mit geringen Sedimentationsraten bzw. geringem Anteil an POM ist die aerobe Mineralisierung die dominierende Sauerstoffsенke (Boudreau 1997). In diesen Fällen kann die Sauerstoffversorgung in oberflächennahen Sedimentbereichen ausreichen, um das POM vollständig abzubauen. In stark organisch belasteten Schlämmen, die im Zusammenhang mit dem SSB zumeist von zentraler Bedeutung sind, wird O_2 jedoch in den obersten Millimetern aufgebraucht. In tieferen Zonen schließen sich anaerobe Mineralisierungsprozesse an, bei denen sukzessive energetisch ungünstigere Oxidationsmittel für die mikrobiologischen Abbauprozesse verwendet werden (Abb. 7.1, Tab. 7.1 oberer Teil).

Tab. 7.1: Reaktionsgleichungen frühdiagenetischer Prozesse, die den Sauerstoffverbrauch der Sedimente unmittelbar oder mittelbar beeinflussen. Die gewählte Stöchiometrie beruht auf dem Redfield-Verhältnis.

Prozess	Reaktionsgleichung
Mineralisierung von POM – in Abbildung 7.1 skizzierte Prozesse	
aerobe Respiration	$(CH_2O)_{106}(NH_3)_{16}(H_3PO_4) + 106O_2 + 14H^+$ $\rightarrow 106CO_2 + 16NH_4^+ + HPO_4^{2-} + 106H_2O$
Denitrifikation	$(CH_2O)_{106}(NH_3)_{16}(H_3PO_4) + 84,8NO_3 + 98,8H^+$ $\rightarrow 106CO_2 + 16NH_4^+ + HPO_4^{2-} + 42,4N_2 + 148,4H_2O$
Manganreduktion	$(CH_2O)_{106}(NH_3)_{16}(H_3PO_4) + 212MnO_2 + 438H^+$ $\rightarrow 106CO_2 + 16NH_4^+ + HPO_4^{2-} + 212Mn^{2+} + 318H_2O$
Eisenreduktion	$(CH_2O)_{106}(NH_3)_{16}(H_3PO_4) + 424FeOOH + 862H^+$ $\rightarrow 106CO_2 + 16NH_4^+ + HPO_4^{2-} + 424Fe^{2+} + 742H_2O$
Sulfatreduktion	$(CH_2O)_{106}(NH_3)_{16}(H_3PO_4) + 53SO_4^{2-} + 67H^+$ $\rightarrow 106CO_2 + 16NH_4^+ + HPO_4^{2-} + 53HS^- + 106H_2O$
Methanfermentation	$(CH_2O)_{106}(NH_3)_{16}(H_3PO_4) + 14H^+ \rightarrow 53CO_2 + 16NH_4^+ + HPO_4^{2-} + 53CH_4$
Oxidation der bei der Mineralisierung von POM gebildeten reduzierten Spezies durch O_2	
Nitrifikation	$NH_4^+ + 2O_2 \rightarrow NO_3^- + H_2O + 2H^+$
Manganoxidation	$2Mn^{2+} + O_2 + 2H_2O \rightarrow 2MnO_2 + 4H^+$
Eisenoxidation	$4Fe^{2+} + O_2 + 6H_2O \rightarrow 4FeOOH + 8H^+$
Sulfidoxidation	$HS^- + 2O_2 \rightarrow SO_4^{2-} + H^+$
Methanoxidation	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$

Bei den anaeroben Abbauprozessen werden reduzierte Spezies gebildet (NH_4^+ , Mn(II) , Fe(II) , S(-II) , CH_4), die dem Konzentrationsgradienten folgend zur Sedimentoberfläche hin diffundieren können, wo sie unter Sauerstoffverbrauch oxidiert werden bzw. in das überliegende Wasser entweichen. Die sauerstoffzehrenden Redoxreaktionen mit den reduzierten Substanzen sind im unteren Teil von Tabelle 7.1 aufgeführt. Die Oxidation der aus der Mineralisierung stammenden reduzierten Produkte kann in stark belasteten feinkörnigen Sedimenten zur dominierenden sedimentären Sauerstoffs Senke werden (DiToro 2001; Park und Jaffe 1999). Der Gesamtmechanismus wird allerdings durch weitere Prozesse verkompliziert: Sorptionsprozesse sind vor allem für die Mobilität der Metalle und Ammonium mitentscheidend. Hinzu kommt die mögliche Fällung und Lösung von Fe- bzw. Mn-Sulfiden und -Oxiden/Hydroxiden sowie die Kopräzipitation mit Carbonaten. Physikalisch gelöstes Methan steht im Gleichgewicht mit der Gasphase und kann somit auch in Form von Gasblasen aus dem Sediment entweichen.

Abbildung 7.1 und Tabelle 7.1 veranschaulichen zudem den Zusammenhang zwischen frühdiagenetischen Prozessen und der Dynamik der Nährstoffe Stickstoff und Phosphor. Bei der Mineralisierung wird generell sowohl Ammonium als auch Phosphat freigesetzt. Die Mobilität des Phosphates ist aber durch die starke Adsorption an Oxide/Hydroxide sowie durch die mögliche Präzipitation drastisch herabgesetzt (Dzombak und Morel 1990; Nilsson et al. 1992; Stumm 1992). Dadurch kommt es in jedem Fall zur Anreicherung von (partikulärem) Phosphor in der oxischen Schicht, jedoch meist nur zu einer geringen Freisetzung ins Wasser (Clasen et al. 1997; DiToro 2001). Ammonium wird zu NO_3^- nitrifiziert, welches wiederum denitrifiziert werden kann, wodurch der Stickstoff dem aquatischen System in Form von N_2 (z.T. auch N_2O) entzogen wird (Tab. 7.1). Insgesamt ergibt sich für mineralischen Stickstoff zumeist eine schwache Nettofreisetzung bzw. eine ausgeglichene Bilanz, wobei NH_4^+ in das Wasser freigesetzt wird, während ihm NO_3^- entzogen wird (Clasen et al. 1997; DiToro 2001).

Bioturbation und Ventilation: Schlammige Sedimente, die im Zusammenhang mit der Sauerstoffzehrung von vordringlichem Interesse sind, werden vor allem von Tubificiden (Schlammröhrenwürmer, *Oligochatae*) und Chironomiden (Zuckmückenlarven, *Chironominae*) besiedelt (Uhlmann und Horn 2001). Zum einen kann die Respiration dieser Tiere je nach Besiedlungsdichte einen merklichen Anteil am gesamten SSB tragen. Zum anderen beeinflussen die Schlammbewohner die frühdiagenetischen Prozesse durch das Heranstrudeln von Wasser (Ventilation) und durch Grabaktivitäten (Bioturbation). Die etwa 15 bis 70 mm langen Tubificiden leben in Röhren, die sich in das Sediment erstrecken. Durch die Ventilation können sie folglich sauerstoffhaltiges Wasser in Sedimenttiefen einstrudeln, die ansonsten bereits anaerob sind (Aller 2001). Bei Sauerstoffmangel können die Tiere ihre langen Körper in das überliegende Wasser strecken und somit den Stoffübergang über die diffusive Grenzschicht erhöhen (Josiam und Stefan 1999). Die Bioturbation bedingt zudem eine Durchmischung partikulärer Substanz inklusive POM sowie Mn-, Fe- und sulfidischer Mineralphasen. Darüber hinaus trägt die Bioturbation zu einer erhöhten effektiven Diffusion gelöster Stoffe bei (Reible et al. 1996; Van Rees et al. 1996). Insgesamt erhöht die Besiedlung des Schlammes die Sauerstoffzehrung also sowohl direkt durch die Respiration als auch indirekt, indem sie die frühdiagenetischen Prozesse durch erhöhte Stofftransportraten intensiviert.

Diffusion im Sediment: Transportvorgänge innerhalb des Sediments werden allgemein in Analogie zur Diffusion mit den Fick'schen Gesetzen beschrieben. Dies erscheint gerechtfertigt, solange advective Flüsse (z.B. Ex- oder Infiltration von Grundwasser oder das Durchströmen von Dünen und Rippeln) und die Ventilation vernachlässigt werden können. Bei der Ventilation (engl. bioirrigation) transportieren Organismen häufig Wasser und die darin gelösten Substanzen in bestimmte Tiefen des Sediments, was mit dem Diffusionsansatz nicht beschrieben werden kann (Aller 2001). Die Bioturbation hingegen wirkt über die gesamte Tiefe und kann somit in den Fick'schen Ansatz integriert werden.

Hinsichtlich der verwendeten Diffusionskoeffizienten herrscht zuweilen beträchtliche Verwirrung (Thibodeaux 1996), weshalb die unterschiedlichen Ansätze hier kurz definiert werden. Geht man zunächst von molekularer Diffusion aus, so muss man berücksichtigen, dass die effektive Diffusion (D_{eff}), die über das gesamte Sedimentvolumen (Poren und Matrix) wirkt, von der Porosität in zweifacher Hinsicht beeinflusst wird. Zum einen steht natürlich nur der Porenraum für den Diffusionsprozess zur Verfügung. Zum anderen bedingt die Verzweigung, Diskontinuität, Aufweitung und Verengung der Poren (Tortuosität; Krümmungsfaktor), dass die Diffusionswirkung im Porenraum geringer ist als im freien Wasser (Jury et al. 1991). Auf der Grundlage zahlreicher in der Literatur beschriebener Untersuchungen leitet (Boudreau 1997) folgende Beziehung zwischen Porosität (Φ) und Tortuosität (θ) ab:

$$\theta = \sqrt{1 - \ln(\Phi^2)} \quad (7.2)$$

Der Diffusionskoeffizient im Porenwasser (D_{pore}) ergibt sich wiederum aus dem Quotienten des molekularen Diffusionskoeffizienten (D_{mol}) mit dem Quadrat der Tortuosität: $D_{\text{pore}} = D_{\text{mol}}/\theta^2$. Die so definierten unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten hängen also wie folgt zusammen:

$$D_{\text{eff}} = \Phi \cdot D_{\text{pore}} = \Phi \cdot \frac{D_{\text{mol}}}{\theta^2} \quad (7.3)$$

Wird die Wirkung der Bioturbation in die Analyse integriert, ist es am sinnvollsten mit einem effektiven Diffusionskoeffizienten zu arbeiten, in dem der bioturbative Anteil zum molekular diffusiven addiert wird (Van Rees et al. 1996).

Mechanistische Modellansätze: Der erste mechanistische Modellansatz, mit dem versucht wurde, die im Sediment ablaufenden Prozesse hinsichtlich des Sauerstoffverbrauchs zu erklären, geht auf Bouldin (1968) zurück. In diesem Ansatz wird davon ausgegangen, dass die Sauerstoffzehrung im Sediment einer Reaktion nullter Ordnung folgt. Der Transport im Sediment wird durch einen über die Tiefe konstanten effektiven Diffusionskoeffizienten (D_{eff}) beschrieben. Hieraus ergibt sich folgende Beziehung:

$$D_{\text{eff}} \cdot \frac{d^2 O_{2,\text{sed}}}{dz^2} - R_{\text{zehr}} = 0 \quad (7.4)$$

Hierin sind R_{zehr} die konstante Sauerstoffzehrungsrate (für $O_2 > 0$), $O_{2,\text{sed}}$ die Sauerstoffkonzentration im Porenwasser und z der Abstand von der Sedimentoberfläche. Mit den Randbedingungen, dass $O_{2,z=0}$ die Konzentration an der Sediment-Wasser Grenzfläche ist und der Sauerstoffgehalt in einer Tiefe z_{oxic} Null beträgt, lässt sich Gleichung 7.4 für das Tiefenprofil der Sauerstoffkonzentration lösen:

$$O_{2,\text{sed}}(z) = \frac{R_{\text{zehr}}}{2 \cdot D_{\text{eff}}} \cdot z^2 - z \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot O_{2,z=0} \cdot R_{\text{zehr}}}{D_{\text{eff}}}} + O_{2,z=0} \quad (7.5)$$

Der SSB ergibt sich gemäß dem 1. Fick'schen Gesetz aus dem Produkt des Gradienten $dO_{2,\text{sed}}/dz$ bei $z = 0$ mit dem Diffusionskoeffizienten:

$$SSB = \sqrt{2 \cdot O_{2,z=0} \cdot R_{\text{zehr}} \cdot D_{\text{eff}}} \quad (7.6)$$

Nach dieser Modellvorstellung ist der SSB also proportional zu den Quadratwurzeln der Sauerstoffkonzentration an der Sediment-Wasser Grenzfläche, der Zehrungsrate und der effektiven Diffusivität. Setzt man $O_{2,z=0}$ gleich der Sauerstoffkonzentration im überlagernden Wasser, so ergibt sich eine Quadratwurzelbeziehung zwischen dem SSB und dem O_2 -Gehalt im Wasser. Dies scheint zumindest für hohe Sauerstoffkonzentrationen nicht zuzutreffen (siehe oben). Die Zehrungsrate wird sicherlich von der Konzentration abbaubarer organischer Substanz im Sediment (BSB, CSB) und der Temperatur beeinflusst. R_{zehr} ist damit Ausdruck der Belastung des Sediments mit POM bzw. der Gewässergüte und der Sedimentationsrate. Die effektive Diffusivität wird sowohl von der Bioturbation als auch der molekularen Diffusion beeinflusst. Damit beinhaltet dieser Ansatz bereits alle wesentlichen Einflussfaktoren auf den SSB.

Die Annahme einer Sauerstoffzehrung nullter Ordnung, die für die aerobe Respiration und gleichermaßen für die Oxidation der reduzierten Substanzen gilt, ist eine grobe Vereinfachung der oben skizzierten tatsächlich zugrunde liegenden Prozesse. Sukzessive haben verschiedene Autoren Modellansätze formuliert, die neben dem Stofftransport im Sediment Teile der in Abbildung 7.1 und Tabelle 7.1 aufgeführten Prozesse explizit berücksichtigen (z.B. Blackburn und Blackburn 1993; Blackburn et al. 1994; Goloway und Bender 1982; Jahnke et al. 1982). Jaffe und Mitarbeiter (Park und Jaffe 1996; Park und Jaffe 1999; Smith und Jaffe 1998) entwickelten ein numerisches Modell, das alle in Abbildung 7.1 und Tabelle 7.1 aufgeführten Prozesse sowie die Fällung und Lösung von Mineralphasen und die Sorption explizit berücksichtigt. Dieses Modell wurde ursprünglich zur Beurteilung der Mobilität von Spurenmetallen konzipiert (Park und Jaffe 1996; Smith und Jaffe 1998), kann jedoch auch zur Berechnung des SSB verwendet werden (Park und Jaffe 1999). Naturgemäß beinhaltet dieses Modell eine große Anzahl an Parametern, deren vollständige Kalibrierung mit keinem der in der Literatur beschriebenen Datensätze möglich ist (Park und Jaffe 1999; Smith und Jaffe 1998). Folglich hat dieses umfassende Modell nur einen eingeschränkten praktischen Nutzen, bietet aber zugleich die Möglichkeit, die für den SSB

praktischen Nutzen, bietet aber zugleich die Möglichkeit, die für den SSB relevanten Teilprozesse zu extrahieren, um zu einem vereinfachten, beherrschbaren Modellansatz zu gelangen.

Die Arbeiten von DiToro et al. (1990) und DiToro (2001) zielten von Beginn an darauf ab, ein „Sedimentmodul“ für ein Gewässergütemodell zu entwickeln, mit dessen Hilfe vor allem auch die Auswirkungen veränderter Wasserqualität auf den SSB prognostiziert werden sollte. Dementsprechend wählten DiToro und Mitarbeiter das vereinfachte Konzept, eines Zwei-Schicht Modells. Prinzipiell wird das Sediment hierbei in eine aerobe und eine anaerobe Zone mit jeweils variabler Mächtigkeit unterteilt. Der SSB bzw. die frühdiagenetischen Prozesse werden von der Sedimentation und sukzessiven Überdeckung partikulärer organischer Substanz angetrieben. Der Stoffaustausch zwischen den Sedimentschichten und mit dem Wasser wird über Austauschkoefizienten (K) parametrisiert. Während bei dem Ansatz von DiToro et al. (1990) nur die Stickstoffumsetzung und die Methanproduktion berücksichtigt wurden, erweiterte DiToro (2001) das Modell um alle anderen relevanten reduzierten Spezies. Zusätzlich wurden Sorptions- und Fällungsprozesse über Feststoff-Wasser-Verteilungskoeffizienten (K_d -Konzept) berücksichtigt. Durch die Erweiterung erlaubt das Model auch eine Berechnung der Nährstoff- und Metallfreisetzung aus dem Sediment. Trotz der konzeptionellen Vereinfachung gegenüber dem Ansatz nach Jaffe und Mitarbeitern beinhaltet auch dieses Modell eine große Zahl an Modellparametern, die kalibriert werden müssen. In einer Reihe von Anwendungsbeispielen aus dem limnischen und brackischen Bereich zeigt DiToro (2001) jedoch, dass nur wenige dieser Parameter an die jeweilige Situation angepasst werden müssen, um die Messdaten beschreiben zu können. Bei dieser Analyse bleibt allerdings unklar, ob die zahlreichen anderen Parameter universell gültig sind, oder ob die Modellergebnisse einfach nicht sensitiv auf Veränderungen dieser Parameter reagieren. Von entscheidender Bedeutung ist, dass es mit dem von DiToro und Mitarbeitern entwickelten Modellansatz möglich ist die zeitliche Veränderung des SSB infolge veränderter Gewässergüte zu beschreiben.

7.2.3 Der Einfluss der wasserseitigen Grenzschicht

Im fließenden Wasserkörper kann vereinfachend davon ausgegangen werden, dass gelöste Stoffe durch die turbulente Diffusion vertikal homogen vermischt sind. In der Grenzschicht zwischen Wasser und ruhendem Sediment wird die Turbulenzintensität jedoch gedämpft und beträgt an der Kontaktfläche Null. Dies bedingt, dass der Stofftransport innerhalb einer sogenannten diffusiven Grenzschicht (DGS) vor allem durch molekulare Diffusion bewerkstelligt wird. Je nach Größe des Konzentrationsgradienten, der molekularen Diffusivität und Mächtigkeit der DGS kann dies limitierend für den Stoffaustausch zwischen Sediment und Wasser sein.

Zur Beschreibung des turbulenten Diffusionskoeffizienten (D_{turb}) in der Grenzschicht zwischen Wasser und einer festen Berandung (z.B. ruhendes Sediment) gibt es mehrere empirische Ansätze, wobei jener nach Reichardt (1951) der am besten belegte und gebräuchlichste ist (Boudreau 2001; Hondzo 1998):

$$D_{turb}(Z) = \kappa \cdot \nu \cdot Z \cdot \left(1 - \frac{11}{Z} \cdot \tanh\left(\frac{Z}{11}\right) \right) \quad (7.7)$$

mit $Z = \frac{z \cdot u_0^*}{\nu}$

Wobei κ die von Kármán Konstante (=0,41), ν die kinematische Viskosität, u_0^* die Sohlschubspannungsgeschwindigkeit und z der Abstand von der Sedimentoberfläche sind. Mit Hilfe von Gleichung (7.7) kann der Effekt der zur Grenzfläche hin abnehmenden turbulenten Diffusivität auf den Sauerstofftransport über die Sediment-Wasser Grenzfläche verdeutlicht werden. In Abbildung 7.2 ist der turbulente Diffusionskoeffizient als Funktion des Abstands von der Sedimentoberfläche für zwei Sohlschubspannungsgeschwindigkeiten dargestellt. Die gewählten Schubspannungsgeschwindigkeiten umfassen in etwa den Bereich der im Neckar bei Niedrig- bis Mittelwasser auftretenden Werte. Außerdem sind die kinematische Viskosität von Wasser und der molekulare Diffusionskoeffizient (D_{mol}) von Sauerstoff in Wasser für 5 und 25 °C angegeben. Aus der Abbildung wird ersichtlich, dass ab einem bestimmten Abstand von der Grenzfläche die Viskosität bzw. die molekulare Diffusion beim Transport von Impuls bzw. Sauerstoff dominiert. Für den Impulsaustausch gilt dies je nach u_0^* und Temperatur bei Abständen kleiner 100 bis 3000 μm , während dies für den Sauerstofftransport erst ab etwa 0,1 bis 5 μm der Fall ist. Folglich ist die laminare (viskose) Unterschicht (δ_v) wesentlich mächtiger als die DGS (δ_d). Allgemein gilt das δ_v/δ_d pro-

portional $Sc^{1/3}$ ist, wobei die Schmidtzahl Sc als das Verhältnis zwischen ν und D_{mol} des betrachteten Stoffes definiert ist (Thibodeaux 1996).

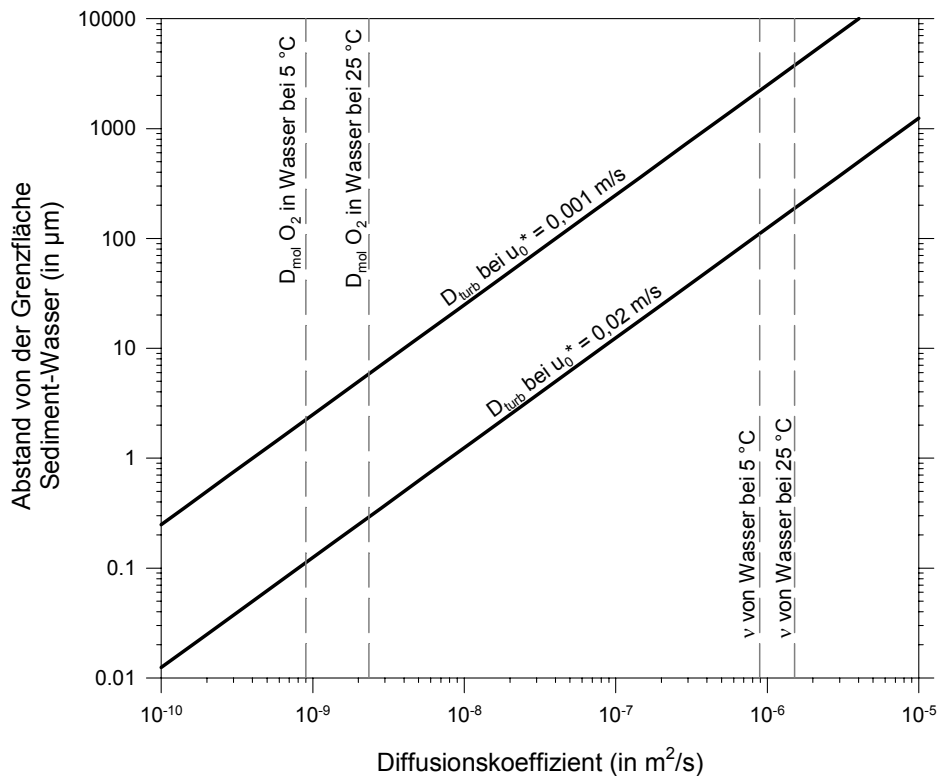


Abb. 7.2: Turbulenter Diffusionskoeffizient als Funktion des Abstandes von der Sediment-Wasser Grenzfläche (nach Gleichung 7.7).

Unter stationären Verhältnissen kann der Stofffluss in der DGS mit dem ersten Fick'schen Gesetz beschrieben werden, wobei sich der Diffusionskoeffizient additiv aus einem molekularen und einem turbulenten Anteil zusammensetzt:

$$SSB = J = -(D_{turb}(z) + D_{mol}) \cdot \frac{dO_2}{dz} \quad (7.8)$$

Hierin ist J die Massenstromdichte über die Grenzfläche, die gleich dem SSB ist, sofern keine weiteren Transportprozesse z.B. Ventilation vorliegen. In Abbildung 7.3 ist dargestellt welches Konzentrationsprofil für Sauerstoff sich hieraus theoretisch ergibt. Der Darstellung liegen die Gleichungen 7.7 und 7.8 mit einem u_0^* von 0,01 m/s und einer Temperatur von 25°C sowie Sauerstoffkonzentrationen von 2 mg/L an der Grenzfläche und 8 mg/L in der durchmischten Zone zugrunde. Da der turbulente Anteil am Diffusionskoeffizienten in unmittelbarer Nähe der Grenzfläche vernachlässigbar klein ist (Abb. 7.2), ist der Diffusionskoeffizient hier konstant, so dass das Profil nahezu linear verläuft (Abb. 7.3). Erst in größerer Entfernung knickt das Konzentrationsprofil ab und nähert sich asymptotisch dem Wert im durchmischten Bereich an. Dieser theoretisch erwartete Verlauf ist durch Messungen mit Mikroelektroden experimentell belegt (Boudreau 2001; Güss 1998; Steinberger und Hondzo 1999). Auf Grundlage des anfänglich linearen Konzentrationsverlaufs, kann die Massenstromdichte vereinfacht mit Hilfe einer finiten Differenz angegeben werden:

$$SSB = J = \frac{D_{mol}}{\delta_{d,eff}} \cdot (O_{2,z=0} - O_{2,bulk}) = K \cdot (O_{2,z=0} - O_{2,bulk}) \quad (7.9)$$

Hierin sind $\delta_{d,eff}$ die effektive Mächtigkeit der DGS, $O_{2,z=0}$ und $O_{2,bulk}$ die Sauerstoffkonzentrationen an der Grenzfläche bzw. im durchmischten Wasser und K ($= D_{mol}/\delta_{d,eff}$) der Stoffübergangskoeffizient. Alternativ wird Gleichung 7.9 häufig mit einem Widerstand für den Stoffübergang ($R = 1/K$) ausgedrückt. Abbildung 7.3 verdeutlicht die Bedeutung von $\delta_{d,eff}$. Hierbei handelt es sich um jenen Abstand von der

Grenzfläche bei dem mit der linearen Approximation die Konzentration $O_{2,bulk}$ erreicht wird. Somit ist gewährleistet, dass die Gleichungen 7.8 und 7.9 das selbe Ergebnis für SSB liefern.

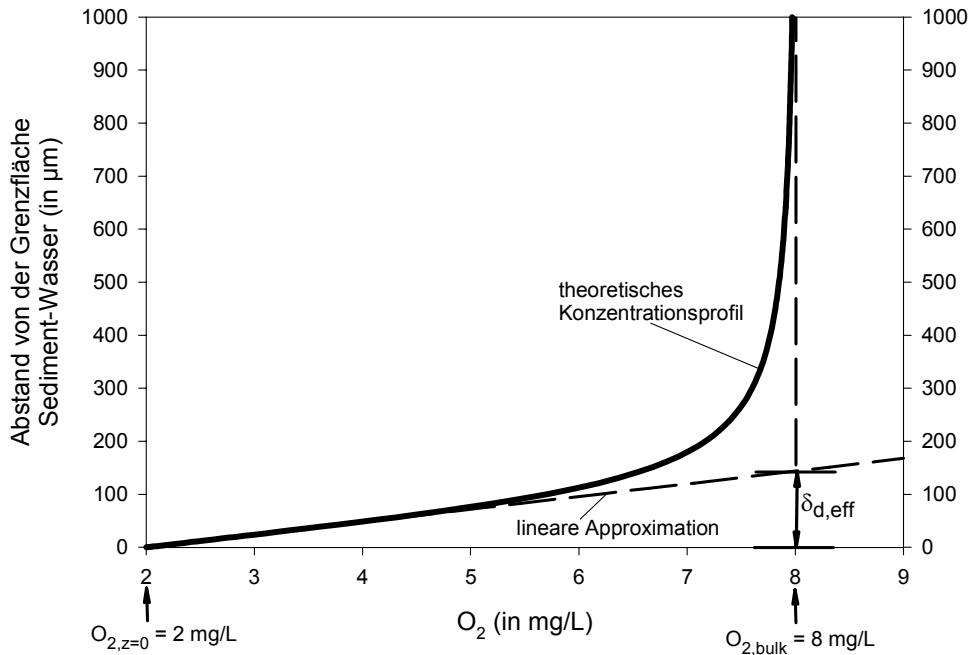


Abb. 7.3: Theoretisches Sauerstoffkonzentrationsprofil in der diffusiven Grenzschicht und dessen lineare Approximation.

Auf Grundlage dieser Betrachtungen und experimenteller Befunde wird es möglich, Stoffübergangskoeffizienten (bzw. die Mächtigkeit von $\delta_{d,eff}$) als Funktion der Schmidtzahl und der Schubspannungsgeschwindigkeit abzuleiten. Shaw und Hanratty (1977) leiteten für den Stoffübergang zwischen Fluid und fester Wand bei Schmidtzahlen zwischen 700 und 37000 folgende Beziehung ab:

$$K = 0,0889 \cdot u_0^* \cdot Sc^{-0,704} \quad (7.10)$$

Aus eigenen Laborexperimenten mit abgelagerten Sedimenten und gemessenen Sauerstoffmikroprofilen gelangten Hondzo (1998) und Steinberger und Hondzo (1999) zu einer ähnlichen Beziehung:

$$K = 0,0558 \cdot u_0^* \cdot Sc^{-2/3} \quad (7.11)$$

Für den Vorfaktor geben die Autoren eine Unsicherheit von $\pm 0,015$ an. Gleichung 7.11 ist meines Wissens die einzige Beziehung für den Stoffübergangskoeffizienten von Sauerstoff, die direkt aus Sauerstoffgradienten in der DGS über einer Sediment-Wasser Grenzfläche ermittelt wurde.

Wirkung der benthischen Besiedlung: Die obigen Ausführungen und die dargelegten Beziehungen beruhen auf der Annahme, dass der Transport unmittelbar an der Grenzfläche durch molekulare Diffusion gesteuert wird. Unter natürlichen Verhältnissen tragen benthische Organismen durch Turbation und Ventilation zusätzlich zum Stoffübergang bei (Aller 2001), so dass der SSB gesteigert wird. Den Einfluss der Biota in die obige Analyse zu integrieren wird insbesondere dadurch erschwert, dass die Ventilation häufig über die DGS hinaus reicht und im Vertikalprofil nur punktuell wirkt (Aller 2001; Archer und Devol 1992; Van Rees et al. 1996).

7.2.4 Quantitative Bedeutung der Einflussfaktoren

Um die Bedeutung der unterschiedlichen Einflussfaktoren zu verdeutlichen, wurde der Ansatz nach Bouldin (Gl. 7.4) mit dem nach Steinberger und Hondzo (Gl. 7.11) in einem numerischen Modell kombiniert. Die Prozesse wurden in AQUASIM mit Hilfe des Biofilmreaktors formuliert und simuliert. Für die Analyse wurde von einer Sauerstoffkonzentration von 8 mg/L im überlagernden Wasser und einer Sedimentporosität von 0,8 ausgegangen. Die Berechnungen wurden für zwei Sedimenttypen mit unterschiedlicher Sauerstoffzehrungsrate ($R_{zehr} = 50$ bzw. $500 \text{ g/m}^3/\text{d}$) durchgeführt, die repräsentativ für grobes Sediment

mit geringem POM-Anteil bzw. feines stark POM-haltiges Sediment aus dem Neckar sind. Für beide Sedimenttypen wurden wiederum zwei Varianten gewählt: Zum einen rein molekular diffusiver Stofftransport im Sediment ($D_{\text{mol}} = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$), wobei der Einfluss der Tortuosität gemäß Gleichung 7.2 berücksichtigt wurde. Zum anderen ein durch Bioturbation verstärkter diffusiver Stofftransport im Sediment. Hierzu wurde ein über die Sedimenttiefe konstanter effektiver Diffusionskoeffizient von $1,7 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ angesetzt, was typisch für von Meiofauna beeinflusste Sedimente ist (Van Rees et al. 1996). Für den Massenfluss über die wasserseitige DGS wurde in allen Fällen von rein diffusiven Vorgängen ausgegangen, d.h. der mögliche Einfluss von Bioturbation oder Ventilation wurde auf der Wasserseite nicht berücksichtigt. Der SSB wurde in Abhängigkeit von der Schubspannungsgeschwindigkeit berechnet, wobei jener Bereich betrachtet wurde der im Neckar bei Niedrig- bis Mittelwasser auftritt ($u_0^* = 0,001 \text{ m/s} \dots 0,02 \text{ m/s}$).

Abbildung 7.4 verdeutlicht den Einfluss der drei variierten Parameter. Der Widerstand der Grenzschicht spielt vor allem für kleine Schubspannungen eine wichtige Rolle. Insbesondere bei den Sedimenten mit hoher Zehrungsrate steigt der SSB zunächst mit zunehmender Schubspannungsgeschwindigkeit nahezu linear an, bevor er sich dann asymptotisch einem Maximalwert annähert. Bei kleinen Zehrungsraten ist die Abhängigkeit von der Schubspannung weniger ausgeprägt, da in diesem Fall Sauerstoff tiefer in das Sediment eindringt und somit der Transport im Sediment schnell zum limitierenden Faktor wird (Parkhill und Gulliver 1997). Dieses Ergebnis ist konsistent mit dem von Nakamura und Stefan (1994) auf Grundlage der Strömungsgeschwindigkeit abgeleiteten theoretisch zu erwartenden Verlauf des SSB. Josiam und Stefan (1999) und Mackenthun und Stefan (1998) legten Ergebnisse von Experimenten vor, bei denen der SSB aus der Abnahme des Sauerstoffgehalts in einem Laborgerinne – also nicht aus Mikroprofilen – ermittelt wurde. Diese Daten untermauern die Abhängigkeit des SSB von der Strömungsgeschwindigkeit bzw. der Sohlschubspannungsgeschwindigkeit in der hier theoretisch abgeleiteten Form. Bei hoher Schubspannung und folglich dünner DGS wird der SSB von den Prozessen im Sediment kontrolliert, wobei die Bedeutung der Transportprozesse im Sedimentkörper durch die Unterschiede zwischen den durch Bioturbation beeinflussten bzw. unbeeinflussten Varianten deutlich wird.

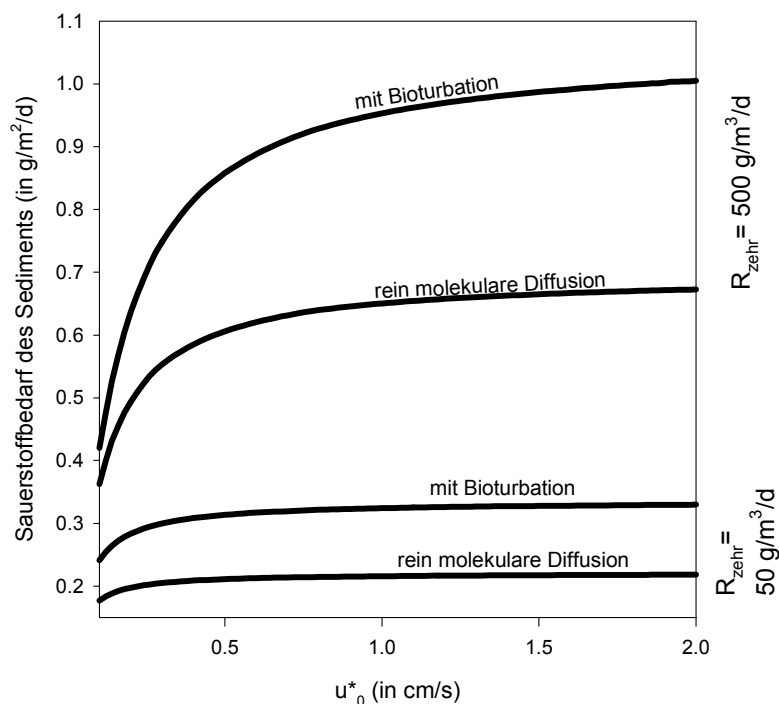


Abb. 7.4: Theoretisch zu erwartende Abhängigkeit des SSB von Zehrungsrate und effektiver Diffusivität im Sediment, sowie von der Sohlschubspannungsgeschwindigkeit.

Hinsichtlich der praktischen Relevanz für den Neckar veranschaulicht die obige Analyse, dass die diffusive Grenzschicht nur bei Niedrigwasser in Bereichen mit sehr geringen Sohlschubspannungsgeschwindigkeiten ($<0,005 \text{ m/s}$) von Bedeutung sein kann. Doch selbst hierbei ist zu beachten, dass der Einfluss

von biologischer Ventilation, die über die Grenzschicht hinweg wirken kann bei obiger Analyse nicht berücksichtigt werden konnte. Vor diesem Hintergrund scheinen die Zehrungsrate und der Einfluss der Bioturbation im Sediment, die wichtigsten Faktoren für den SSB im Neckar zu sein.

7.3 Methoden

7.3.1 Experimentelle Bestimmung des Stoffübergangs

Bedeutung des wasserseitigen Widerstands für den Stoffübergang

Versuchsstand: Um die Bedeutung des von den hydromechanischen Verhältnissen abhängigen wasserseitigen Widerstands für den Sauerstoffübergang abzuschätzen, wurde der in Abbildung 7.5 skizzierte Laborversuchsstand entwickelt. Hierbei handelt es sich um ein luftdicht geschlossenes System, bei dem der Sauerstoffverbrauch des Sediments indirekt aus der Abnahme der O_2 -Gehalte im Kreislauf ermittelt wird. Der Versuchsstand besteht aus einem langgestreckten, rechteckigen Plexiglasdruckkanal, einer regelbaren Edelstahlpumpe, einem magnetisch induktiven Durchflussmesser (MID) und den aus Edelstahlrohren gefertigten Verbindungsstücken. Das Gesamtvolumen des Systems beträgt 13,6 L. Die Pumpe fördert maximal 2 L/s. Die Verbindungsrohre sind von einem externen Kühlsystems ummantelt. Hierdurch werden das Aufwärmen des Systems durch die Pumpenabwärme verhindert und Temperaturschwankungen infolge des Tagesganges stark gedämpft. Der Druckkanal wird während der Versuchsdauer durch ein Holzgehäuse abgedunkelt, um den Einfluss photosynthetischer Sauerstoffproduktion auszuschließen. Im Zulauf des 4 cm hohen und 14,5 cm breiten Druckkanals ist ein Strömungsgleichrichter eingebracht, an den sich eine 0,8 m lange Anlaufstrecke anschließt. Am Ende der Anlaufstrecke befindet sich die 143 cm² große Testfläche. Hier können sedimentgefüllte Plexiglasröhren (Innendurchmesser 13,5 cm) mit einer maximalen Länge von 75 cm an den von unten offenen Kanal angeschraubt werden. In den Röhren kann das Sedimentmaterial mit Hilfe einer Hubspindel vertikal verschoben werden. Die Plexiglasröhren erlauben die Entnahme von ungestörten Sedimentproben aus dem Gewässer, die anschließend in ihrer natürlichen Lagerung ohne weitere Aufbereitung in dem Versuchsstand verwendet werden können (Haag et al. 1999a). In den Röhren können selbstverständlich auch künstliche oder homogenisierte Sedimente verwendet werden. Über der Testfläche ist ein verschließbarer Arbeitsschacht angebracht, in dem der Wasserstand ca. 5 cm über der Oberkante des Druckkanals gehalten wird. Der Schacht dient zum Nachfüllen von Wasser, und zum Entlüften des Systems. Zudem kann von hier eine Abdeckung über der Testfläche angebracht und entfernt werden, die gewährleistet, dass keine Zehrung an der Sedimentoberfläche stattfindet. Im Auslauf des Druckkanals kann eine Sauerstoffelektrode luftdicht eingeschraubt werden. Experimentell konnte nachgewiesen werden, dass die notwendige Mindestanströmungsgeschwindigkeit von 0,18 m/s, bei der gegebenen Verengung, bis zu Durchflüssen von mindestens 0,35 L/s gewährleistet ist.

Hydromechanik: Der maßgebende Parameter für den wasserseitigen Widerstand gegenüber dem Stoffübergang an der Grenzfläche Sediment-Wasser ist die Sohlschubspannung τ_0 bzw. die Schubspannungsgeschwindigkeit u_0^* (siehe Kapitel 7.2.3). Im Neckar – wie in anderen staugeregelten Flüssen – treten in den Bereichen mit Feinablagerungen bei Mittel- bis Niedrigwasser Schubspannungsgeschwindigkeiten von etwa 0,1 bis 2 cm/s auf. Der Versuchsstand wurde so konzipiert, dass ein möglichst großer Teil dieses Bereichs abgedeckt werden kann. Entscheidend hierfür sind die Durchflüsse und die Ausgestaltung des Druckkanals, der die Testfläche enthält. Durch die strömungsgünstige Ausgestaltung des Zulaufs, den Strömungsgleichrichter und die Anlaufstrecke, die knapp dem 13-fachen des äquivalenten Durchmessers ($D = 62,7$ mm) entspricht, ist gewährleistet, dass die Strömung im Bereich der Testfläche nahezu voll ausgebildet ist (Eck 1966). Folglich können die entsprechenden Gesetzmäßigkeiten der Rohrhydraulik angewendet werden, um die Wandschubspannung zu beschreiben. Da die Sedimentoberfläche selbst jedoch nur über eine kurze Strecke exponiert ist, kann nicht davon ausgegangen werden, dass sich auch eine stationäre Konzentrations- respektive Diffusionsgrenzschicht ausbildet, so dass die unter 7.2.3 abgeleiteten theoretischen Beziehungen keine strenge Gültigkeit haben. Dennoch erlaubt der Versuchsstand, im Falle einer Abhängigkeit des Sauerstoffbedarfs von der Mächtigkeit der diffusiven Grenzschicht, diesen Effekt qualitativ nachzuweisen.

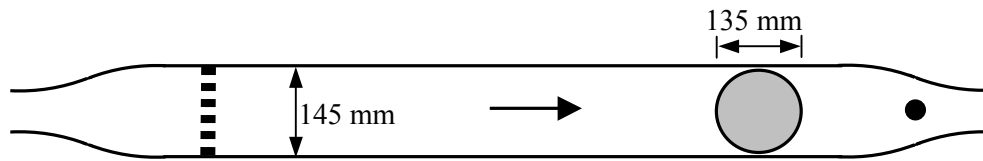
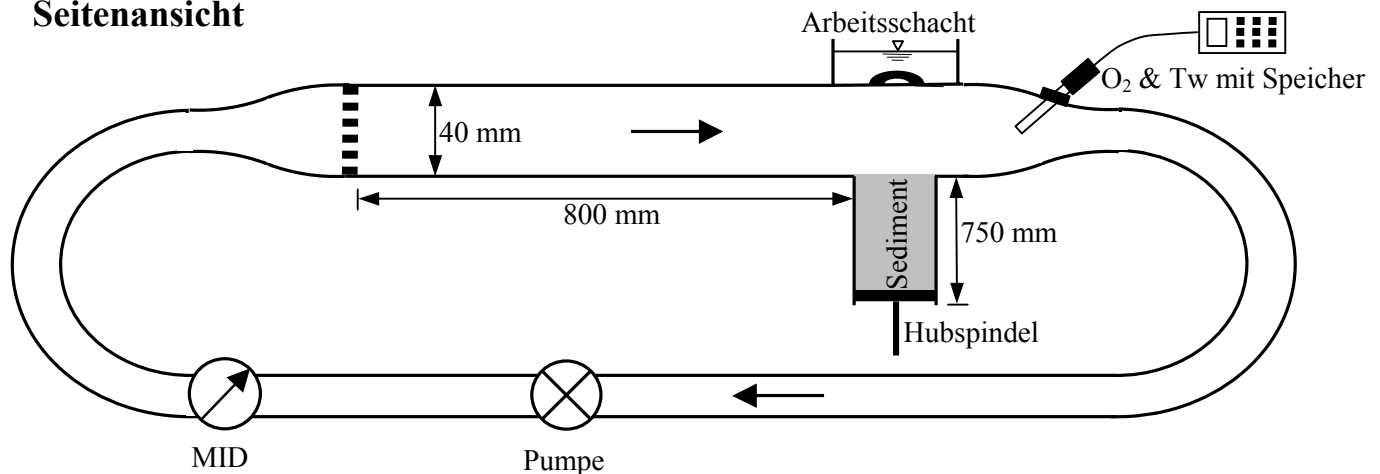
Aufsicht**Seitenansicht**

Abb. 7.5: Versuchsstand zur Ermittlung des Einflusses der wasserseitigen Grenzschicht auf den SSB.

In Tabelle 7.2 sind die hydraulischen Eigenschaften des Versuchstandes innerhalb des praktisch angewendeten Bereichs zusammengestellt. Der minimale Durchfluss wurde so gewählt, dass sowohl die Mindestanströmung für die Sauerstoffelektrode als auch vollturbulente Verhältnisse im Druckkanal gewährleistet sind. Die Schubspannungsgeschwindigkeit an der Testfläche kann für turbulente Verhältnisse als Funktion des Durchflusses Q , des durchflossenen Querschnitts A ($= 58 \text{ cm}^2$) und des Reibungsbeiwertes λ ausgedrückt werden:

$$u_0^* = \sqrt{\frac{\lambda}{8}} \cdot \frac{Q}{A} \quad (7.12)$$

Da der Kanal einen Rechteckquerschnitt aufweist, ist allerdings zu beachten, dass es sich hierbei um eine gemittelte Schubspannungsgeschwindigkeit handelt. Diese ist jedoch nahezu über die gesamte inneren Oberfläche gleich verteilt (Schlichting 1951). Für das zum Bau des Druckkanals verwendete Material konnten Kern et al. (1999) zeigen, dass es sich bei Reynoldszahlen (Re) kleiner 100 000 wie eine hydraulisch glatte Berandung verhält. Entsprechend gilt für den Reibungsbeiwert λ die implizite Beziehung (Eck 1966):

$$\frac{1}{\lambda} = -2 \cdot \log_{10} \left(\frac{2,51}{Re \cdot \sqrt{\lambda}} \right) \quad (7.13)$$

Der Reibungsbeiwert lässt sich folglich in Abhängigkeit der Reynoldszahl (respektive Durchfluss) iterativ ermitteln. Danach ergibt sich die Wandschubspannungsgeschwindigkeit mit Gleichung (7.12) aus dem zugehörigen Durchfluss.

Tab. 7.2: Hydraulische Eigenschaften des Laborversuchsstandes in dem für die Versuche gewählten Durchflussbereich.

Parameter		Einheit	Minimum	Maximum
Durchfluss	Q	L/s	0,37	1,94
Mittlere Fließgeschwindigkeit	u	cm/s	6,4	33,4
Reynoldszahl	Re	-	3 988	20 910
Reibungsbeiwert	λ	-	0,040	0,026
Wandschubspannung	τ_0	N/m ²	0,02	0,36
Schubspannungsgeschwindigkeit	u_0^*	cm/s	0,45	1,89

Versuchsdurchführung: Zur Messung der Sauerstoffkonzentrationen und der Wassertemperatur wurde eine Cellox 325® Elektrode und das zugehörige Messgerät Oxi 340® der Firma WTW verwendet. Die Elektrode wurde vor jedem Versuch kalibriert und anschließend in den Versuchsstand eingeführt. Das Kühlsystem wurde so eingestellt, dass während der Versuchszeit die Wassertemperatur im Versuchskreislauf konstant bei $20 \pm 0,5^\circ\text{C}$ gehalten wurde. Für die Zehrungsversuche wurde homogenisiertes Sediment aus dem Neckar bei Poppenweiler verwendet, dessen Zehrungspotenzial als sehr hoch eingeschätzt wurde. Das Material wurde in eine Sedimentröhre überführt und die Oberfläche geglättet. Nach einer Konsolidierungszeit von 3 Tagen wurde das überstehende Wasser abgesaugt und die Sedimentröhre an den Versuchsstand angeschraubt. Das Material wurde mit der Hubspindel so weit nach oben geschoben bis die Sedimentoberfläche plan mit dem Boden des Druckkanals verlief. Anschließend wurde die Testfläche abgedeckt und der Versuchsstand mit Neckarwasser aufgefüllt. Das verwendete Wasser war zuvor über mehrere Wochen ausgezehrt. Bei abgedecktem Sediment und geöffnetem Arbeitsschacht wurde das System entlüftet, wobei gegebenenfalls über den Arbeitsschacht Wasser nachgefüllt wurde, so dass sich der Wasserstand 5 cm über der Oberkante des Druckkanals einstellte. Nach erfolgter Entlüftung wurde der für den Versuch gewählte Durchfluss eingestellt. Bei Versuchen mit exponierter Sedimentoberfläche wurde die Abdeckung der Testfläche vorsichtig entfernt, wobei besonderes Augenmerk darauf gelegt wurde, dass es nicht zur Aufwirbelung von Sedimentmaterial kam. Anschließend wurde der Arbeitsschacht verschlossen und der Druckkanal abgedunkelt. Das geschlossene System wurde über ca. 24 Stunden betrieben, wobei die Sauerstoffkonzentrationen und Wassertemperaturen in 15-minütlichen Intervallen abgespeichert wurden.

Im Zuge zahlreicher Vorversuche wurde festgestellt, dass auch ohne exponierte Sedimentoberfläche (Testfläche abgedeckt) im Versuchsstand Sauerstoffzehrung auftrat, die weit über die Zehrung des Freiwassers hinaus ging (Quraishi 2001). Diese Zehrung konnte auf Biofilme zurückgeführt werden, die sich offenbar innerhalb kurzer Zeit an den Innenwandungen des Versuchsstandes ausbildeten. Die Biofilme ließen sich durch den Einsatz von Chlor oder Kupfersalzen nur kurzfristig entfernen. Daher wurden Versuche mit abgedeckter und exponierter Sedimentoberfläche jeweils im Wechsel gefahren. Die auf das Sediment zurückzuführende Zehrung wurde aus der Differenz der Messungen mit exponiertem und abgedecktem Sediment bestimmt. Alle durchgeführten Versuche (je 6 mit exponiertem und abgedecktem Sediment) folgten unmittelbar aufeinander. Bei allen Versuchen wurde das selbe Wasser verwendet, das zwischen zwei Versuchen jeweils bis zur Sättigungskonzentration wiederbelüftet wurde.

In situ-Messung der Stoffflüsse

Aufbau des Geräts: Das In situ-Gerät zur Messung der Stoffflüsse über die Sediment-Wasser Grenzfläche ist in Abbildung 7.6 schematisch dargestellt. Seine Funktionsweise beruht auf dem Prinzip einer benthischen Kammer (Bowman und Delfino 1980), in der die Stoffflüsse aus den Konzentrationsveränderungen im Freiwasser indirekt ermittelt werden. Die Gesamtvorrichtung besteht aus einer Bodenkammer

mit Stechkasten, einer Messkammer, einer regelbaren Pumpe und einem Flügelrad-Durchflussmesser. Die einzelnen Bestandteile sind mit Hilfe von Schläuchen untereinander verbunden, so dass sich ein geschlossener Kreislauf ergibt. Für den Bau des Gerätes wurden ausschließlich Kunststoffe und rostfreier Edelstahl verwendet. Die Bodenkammer ist aus durchsichtigem Plexiglas gefertigt, um die eingeschlossene Sedimentoberfläche direkt oder mit Hilfe einer Kamera beobachten zu können. Sie ist nach unten hin offen, wobei die $0,05 \text{ m}^2$ große Bodenöffnung von einem Stechkasten eingerahmt wird. Der Stechkasten gewährleistet die Verankerung der Bodenkammer im Sediment und minimiert advektive Flüsse infolge von Druckgradienten. Um den Stechkasten herum ist eine Plexiglasscheibe angebracht, die ein Einsinken der Bodenkammer in das Sediment verhindert. An der Oberseite der Kammer ist ein Gestänge mit variabler Länge (maximal 1,5 m) angebracht, mit dem der Stechkasten in das Sediment eingedrückt werden kann. Messkammer, Pumpe und Durchflussmesser sind auf einem Schwimmponton befestigt, wobei sich die Pumpe an der Unterseite des Schwimmkörpers, im Wasser befindet. Die Pumpe wird mit Hilfe von zwei 12 Volt Akkumulatoren betrieben und ist regulierbar. Die maximale Pumpleistung beträgt etwa 20 L/Min (abhängig von der Steighöhe). In die Messkammer können drei Messelektroden eingeführt werden: eine Elektrode mit 12 mm Durchmesser (pH) und zwei mit 15 mm Durchmesser (O_2 oder Lf). Die Sauerstoffelektrode ist an der vordersten Verschraubung anzubringen, um die Mindestanströmung bei Durchflüssen bis minimal 5 L/Min zu gewährleisten. Nicht benötigte Verschraubungen werden beim Betrieb luftdicht verschlossen. Zwischen Messkammer und Bodenkammer kann der Kreislauf mit Hilfe eines Schnellverschlusses geöffnet bzw. geschlossen werden. Für den Einsatz in unterschiedlichen Wassertiefen stehen Verbindungsschläuche mit Längen von 1,5 und 3,4 m zur Verfügung. Hieraus ergeben sich je nach gewählter Schlauchlänge für das Gesamtsystem Wasservolumina von 6,90 bzw. 8,75 L.

Versuchsdurchführung: Das Gerät wurde an relativ flachen, bis maximal 1,7 m tiefen Stellen am Neckar eingesetzt. Zunächst wurde die Pumpe und der Durchflussmesser mit der Stromquelle, der Regelung und der Datenerfassung verbunden. Die vor Ort geeichten Sauerstoff- und pH-Elektroden wurden in die Messkammer eingeführt, verschraubt und mit der Datenerfassung verbunden. Die Bodenkammer wurde vom Ufer aus oder von Bord eines Bootes vorsichtig in das Sediment eingedrückt, bis der Kontakt der Plexiglasscheibe mit der Sedimentoberfläche einen merklichen Widerstand erzeugte. Insbesondere an sehr flachen Stellen wurde die Kammer beschattet, um den Einfluss photosynthetischer Sauerstoffproduktion zu minimieren. Anschließend wurde der Ponton zu Wasser gelassen und die Pumpe mit dem Ablauf der Bodenkammer verbunden, der Schlauch auf der Zulaufseite der Bodenkammer unter die Wasseroberfläche gehalten und die Pumpe eingeschaltet. Bei geringen Pumpraten wurde Wasser durch das noch geöffnete System gepumpt, bis es luftblasenfrei war und sich bei den angeschlossenen Elektroden konstante Messwerte einstellten. Anschließend wurde ein Durchfluss von 5 L/Min eingestellt, wodurch die Fließgeschwindigkeiten in der Bodenkammer $2,1 \text{ cm/s}$ betrug. Generell wurde darauf geachtet, dass am Auslauf keine erhöhte Trübung auftrat (keine Erosion). Lediglich in einem Fall wurde die Sedimentoberfläche durch stark erhöhte Durchflüsse vorsätzlich erodiert (siehe Abschnitt 7.4). Anschließend wurden am Auslauf der Messkammer je eine Probe zur chemischen Analyse und zur Ermittlung der Sauerstoffzehrung im Freiwasser entnommen. Schließlich wurde das System mit dem Schnellverschluss unter Wasser geschlossen und dieser Zeitpunkt als Beginn der Messung festgehalten. Das System wurde über mehrere Stunden im geschlossenen Kreislauf betrieben, wobei die Veränderungen der Sauerstoffkonzentrationen und des pH-Wertes mitverfolgt wurden. Am Ende des Versuchs wurde unmittelbar nach Öffnen des Schnellverschlusses eine 1 L Probe am Auslauf der Messkammer entnommen, die bei einem Gesamtwasservolumen von 6,90 bzw. 8,75 L ausschließlich Wasser aus dem System enthielt. In der Probe zur Ermittlung der Freiwasserzehrung wurde unmittelbar nach der Probenahme und am Ende des Versuchs der Sauerstoffgehalt bestimmt. Die beiden anderen Proben wurden kühl gelagert und innerhalb von 24 Stunden im Labor der LfU Baden-Württemberg auf die folgenden Parameter analysiert: TOC, SAK 254, $\text{PO}_4\text{-P}$, $\text{NH}_4\text{-N}$, $\text{NO}_2\text{-N}$ und $\text{NO}_3\text{-N}$.

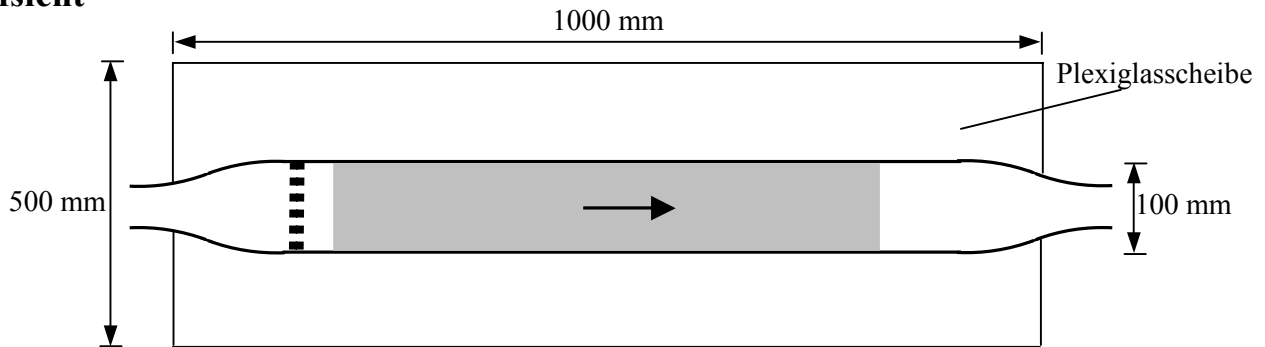
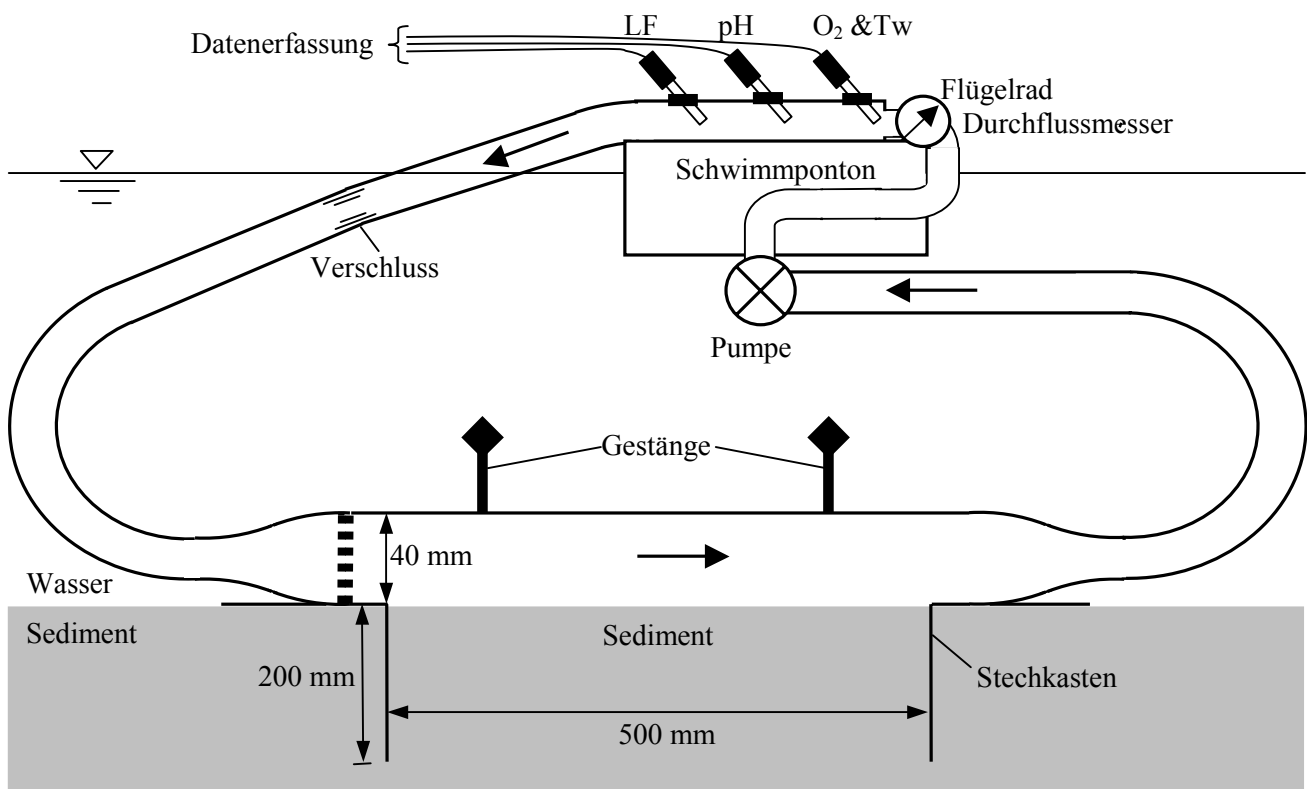
Aufsicht**Seitenansicht**

Abb. 7.6: In situ-Gerät zur Ermittlung der Stoffflüsse über die Grenzfläche Sediment-Wasser.

Bestimmung des biochemischen Sauerstoffbedarfs von Sedimentproben

Probenahme: An den Stellen, an denen die Stoffflüsse mit dem in situ-Gerät ermittelt wurden, wurden zusätzliche Sedimentproben mit Hilfe eines Van-Veen Greifers entnommen. Anhand der so gewonnenen Proben wurden zunächst Farbe, Geruch und mit der Fingerprobe die Körnung des Sediments bestimmt (Schachtschabel et al. 1992). Anschließend wurden mit Hilfe einer Einwegspritze zwei blasenfreie Teilproben mit einem Volumen von je 1 mL in Karlsruher Flaschen überführt, die mit Neckarwasser aufgefüllt wurden. Zusätzlich wurden zwei weitere, sedimentfreie Karlsruher Flaschen mit Neckarwasser gefüllt. Die Proben wurden bis zur Analyse im Labor unter Lichtausschluss gelagert (Siegmond 2001).

Labormethoden: Im Labor wurde die Sauerstoffzehrung der mit Sediment versetzten und der parallel entnommenen Wasserproben über 30 Tage nach DIN 38409 H52 ermittelt. Hierzu wurden die geschlossenen Karlsruher Flaschen in dunklen Brutschränken bei 20°C gelagert und der Sauerstoffgehalt werktäglich gemessen. Unterschritt die Sauerstoffkonzentration 3 mg/L, wurde die Probe bis zur Sättigungskonzentration belüftet (Siegmond 2001). Der BSB des Sediments wurde aus der Differenz der Zehrung der Proben mit und ohne Sediment berechnet, wobei jeweils die Mittelwerte der beiden Parallelproben zum Tragen kamen.

7.3.2 Simulationsmodell für die Stoffflüsse über die Grenzfläche Sediment-Wasser

Das im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelte numerische Simulationsmodell sollte in Verbindung mit den in situ-Experimenten primär dazu dienen, die in Hinblick auf die Stoffflüsse an der Grenzfläche Sediment-Wasser maßgebenden Prozesse besser zu analysieren. Daher wurde prinzipiell nach der Maxime gehandelt, das Modell so einfach wie möglich aber so komplex wie nötig zu gestalten. Um die Kalibrier- und Validierbarkeit des Modells zu gewährleisten, wurden nur jene Wasserinhaltsstoffe simuliert, die bei den in situ-Experimenten erfasst wurden und deren Austauschverhalten nicht durch ausgeprägte Interaktionen mit der Feststoffmatrix (Ad- und Desorption sowie Fällung und Lösung) beeinflusst ist. Zur Plausibilisierung des Modells konnten zudem Neckar-Porenwasserprofile von (Song und Müller (1995; 1999) herangezogen werden. Das Modell wurde in AQUASIM 2.0 (Reichert 1998) unter Verwendung des Biofilmreaktors implementiert. Das Simulationsmodell bildet den Aufbau des in situ-Gerätes ab, d.h. der Sedimentkörper mit einer Oberfläche von 0,05 m² und ein überlagerndes Wasservolumen (von 6,9 bzw. 8.75 L) werden simuliert.

Stoffumsätze: Die Simulation der Stoffumsätze basiert im Grundsatz auf der in Abbildung 7.1 und Tabelle 7.1 skizzierten Modellvorstellung, wobei einige Vereinfachungen aber auch Erweiterungen vorgenommen wurden. Die Reduktion und Oxidation von Mn, Fe und S wurden nicht explizit berücksichtigt, da die Stoffflüsse dieser Elemente nicht experimentell ermittelt wurden und sie zudem starken Interaktionen mit der Feststoffmatrix unterliegen. Der Einfluss, den die Redoxprozesse unter Beteiligung der genannten Elemente haben, wurde vielmehr implizit (summarisch) in der Methanfermentation und Methanoxidation berücksichtigt. In dem vorliegenden Modell steht die Methanfermentation somit auch stellvertretend für die Mineralisierung organischer Substanz durch Mn(IV), Fe(III) und SO₄, und die Oxidation des CH₄ steht stellvertretend für die Oxidation von Mn(II), Fe(II) und S(-II) (siehe Tabelle 7.1). Aufgrund der ausgeprägten Interaktionen des Phosphors mit der Feststoffmatrix, hätten die P-Flüsse nur mit geeigneten Parametern für Ad- und Desorptionsprozesse sowie Fällung und Lösung simuliert werden können. Auf die Einbeziehung des Phosphors wurde daher verzichtet. Bei der abbaubaren organischen Substanz wurde prinzipiell die elementare Zusammensetzung gemäß dem Redfield-Verhältnis angesetzt (siehe Gleichung 2.6). Es wurde davon ausgegangen, dass die Hydrolyse von POM zu abbaubarem (überwiegend gelöstem) organischem Material (DOM) für die weitere Mineralisierung nicht limitierend wirkt. Vielmehr wurde von einer über die Tiefe und die Zeit konstanten Verteilung des DOM ausgegangen, was vor dem Hintergrund der hohen POM-Versorgung der Neckarsedimente und der kurzen Versuchsdauern gerechtfertigt erscheint (vgl. Blackburn und Blackburn 1993). Somit werden im vorliegenden Modell die Konzentrationen von O₂, NO₃, NH₄ und CH₄ im Poren- und Freiwasser dynamisch simuliert. Dabei werden die folgenden Prozesse berücksichtigt: (1) Respiration des Makrozoobenthon, (2) aerobe Mineralisierung (Respiration) von DOM, (3) Nitrifikation, (4) Methanoxidation (auch stellvertretend für Mangan-, Eisen- und Sulfidoxidation), (5) Denitrifikation mit DOM als Reduktionsmittel, (6) Denitrifikation mit CH₄ als Reduktionsmittel, (7) Methanfermentation (auch stellvertretend für Mangan-, Eisen- und Sulfatreduktion) und (8) Gleichgewicht von gelöstem Methan mit der Gasphase (Bildung von Methanblasen). Hierbei ist zu beachten, dass die Prozesse (6) und (8) aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht in Abbildung 7.1 und Tabelle 7.1 aufgeführt sind. Die Redoxprozesse werden als Reaktionen erster Ordnung simuliert, wobei die Reaktionsraten durch die Verfügbarkeit des jeweiligen Oxidationsmittels in Form einer Monod-Kinetik gesteuert werden. Die beiden Denitrifikationsprozesse werden durch die Anwesenheit von Sauerstoff gehemmt, für die Methanfermentation wirkt zusätzlich Nitrat hemmend. Alle Redoxprozesse sowie die Respiration des Makrozoobenthon werden über einen Temperaturkorrekturkoeffizienten nach Arrhenius für die aktuelle Temperatur korrigiert. Die Gleichgewichtskonzentration von gelöstem Methan mit der Gasphase ist eine Funktion des Umgebungsdrucks (Wassertiefe) und der Temperatur. Die für die Beschreibung der Stoffumsätze verwendeten Differentialgleichungen sowie die zugehörigen algebraischen Gleichungen, Parameter und Variablen sind im Anhang detailliert aufgeführt.

Stofftransport: Der das Sediment überlagernde Wasserkörper (d.h. das Freiwasser des in situ-Geräts) wird als homogen durchmischelt betrachtet. Die Wirkung der wasserseitigen DGS wird nicht berücksichtigt. Für die Respiration des Makrozoobenthon wird davon ausgegangen, dass diese direkt an der Sediment-Wasser Grenzfläche lokalisiert ist und ohne weiteren Transportschritt unmittelbar auf die Stoffkonzentrationen im Freiwasser wirkt. Im Porenraum des Sediments wird von quasi-diffusivem, eindimensionalem Stofftransport ausgegangen. Hierbei wird neben der molekularen Diffusion der Einfluss der Bioturbation mit berücksichtigt. Die auf die Bioturbation zurückzuführende effektive Diffusivität im Sedimentkörper (D_{bio}) wird nach der von Cai et al. (1995) vorgeschlagenen Form als Funktion des Abstandes z von der Sedimentoberfläche berechnet:

$$D_{bio}(z) = D_{bio,0} \cdot \exp\left(-3 \cdot \left(\frac{z}{z_{bio}}\right)^4\right) \quad (7.14)$$

wobei $D_{bio,0}$ die effektive durch Turbation hervorgerufene Diffusivität an der Sedimentoberfläche ist und z_{bio} jene Tiefe, bis zu der die Bioturbation maximal wirkt. Der summarische effektive Diffusionskoeffizient (D_{eff}) ergibt sich folglich aus dem stoffspezifischen molekularen Diffusionskoeffizienten (D_{mol}) und dem bioturbativen Austausch:

$$D_{eff}(z) = D_{bio}(z) + \Phi \cdot \frac{D_{mol}}{\theta^2} \quad (7.15)$$

wobei die Porosität Φ und die mit Gleichung 7.2 berechnete Tortuosität θ über die Tiefe konstant sind. Die Massenstromdichte an der Grenzfläche ergibt sich folglich aus dem Produkt des Konzentrationsgradienten mit D_{eff} bei $z=0$ (siehe auch Anhang).

7.4 Ergebnisse und Diskussion

7.4.1 Bedeutung des wasserseitigen Widerstands für den Stoffübergang

Das für die Laborversuche gewählte Sediment aus der Stauhaltung Poppenweiler wurde gemäß der Fingerprobe als schluffiger Lehm (Lu) klassifiziert. Bei der Probenahme war ein leichter Schwefelwasserstoffgeruch unverkennbar. Zudem zeigte das Sediment bereits in geringer Tiefe die für Sulfide typische Schwarzfärbung. Dementsprechend kann das gewählte Material als typisches anoxisches Feinsediment eingeordnet werden, wie es sich häufig im Rückstaubereich der Neckarstauhaltungen findet (Haag et al. 1999b; Mayer 1988). Sowohl bei der Homogenisierung des Sediments als auch bei der Versuchsdurchführung konnten Tubificiden beobachtet werden, die typischer Weise in hohen Individuendichten im Feinsediment des Neckars auftreten (Siegmond 2001). Insbesondere bei geringen Sauerstoffkonzentrationen streckten die Schlammröhrenwürmer während der Versuche ihre langen Körper in das Freiwasser, wobei sie den Kontakt zum Sediment jedoch nicht verloren.

Es wurden jeweils zwei Versuche zur Sauerstoffzehrung an der Sedimentoberfläche bei Schubspannungsgeschwindigkeiten von 0,45, 0,64 und 1,2 cm/s durchgeführt. Bei geringeren Schubspannungen wären die Mindestanströmung der Sauerstoffelektrode und die vollturbulenten Verhältnisse im Versuchskanal nicht gewährleistet gewesen. Bei höheren Durchflüssen, respektive Schubspannungen kam es zur Resuspension an der Sedimentoberfläche, so dass die Versuche auf den genannten Bereich beschränkt bleiben mussten. Die für die drei unterschiedlichen hydraulischen Bedingungen gewonnenen Ergebnisse sind in Abbildung 7.7 dargestellt. Die Zehrungsrate an der Sedimentoberfläche liegt bei allen Versuchen etwa zwischen 1,5 und 2 g/m²/d. Aus den Wiederholungsversuchen bei gleicher Schubspannung wird deutlich, dass die Ergebnisse mit einer erheblichen Unsicherheit von etwa ±30 % behaftet sind. Dies ist wohl in erster Linie auf die Biofilme im System und die dadurch erzwungene Differenzenbildung zurückzuführen (siehe 7.3.1). Aus den Versuchen kann bei der gegebenen Unsicherheit keine signifikante Abhängigkeit des SSB von der Schubspannung im untersuchten Bereich abgeleitet werden. Dies ist konsistent mit den theoretischen Berechnungen gemäß Abbildung 7.4, wonach bei Schubspannungsgeschwindigkeiten über 0,45 cm/s nur noch ein geringer Anstieg des SSB zu erwarten ist. Zudem wirken die beobachteten Tubificiden durch die Ventilation und durch die Störung der Grenzschicht dem durch die DGS zu erwartenden Widerstand entgegen. Zu ähnlichen Folgerungen bezüglich der Schlammröhrenwürmer gelangten Mackenthun

und Stefan (1998) bei Experimenten mit einem größeren Versuchsstand. Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass zumindest im untersuchten Schubspannungsbereich der wasserseitige Widerstand den Sauerstoffbedarf feinkörniger Neckarsedimente nicht entscheidend beeinflusst. Dies ist unter anderem auf die Störung der Grenzschicht durch Tubificiden zurückzuführen, was den Schluss nahe legt, dass auch bei noch geringeren Schubspannungen kein merklicher Einfluss auf den SSB zu verzeichnen wäre. Diese Aussage lässt sich auch auf den Stoffübergang gelöster Nährstoffe übertragen, bei dem grundsätzlich die selben Mechanismen wirksam sind. Zumindest für das belebte, feinkörnige Neckarsediment scheint somit die Schubspannungsgeschwindigkeit von untergeordneter Bedeutung für den Stoffübergang an der Grenzfläche Sediment-Wasser zu sein (siehe auch 7.2.4).

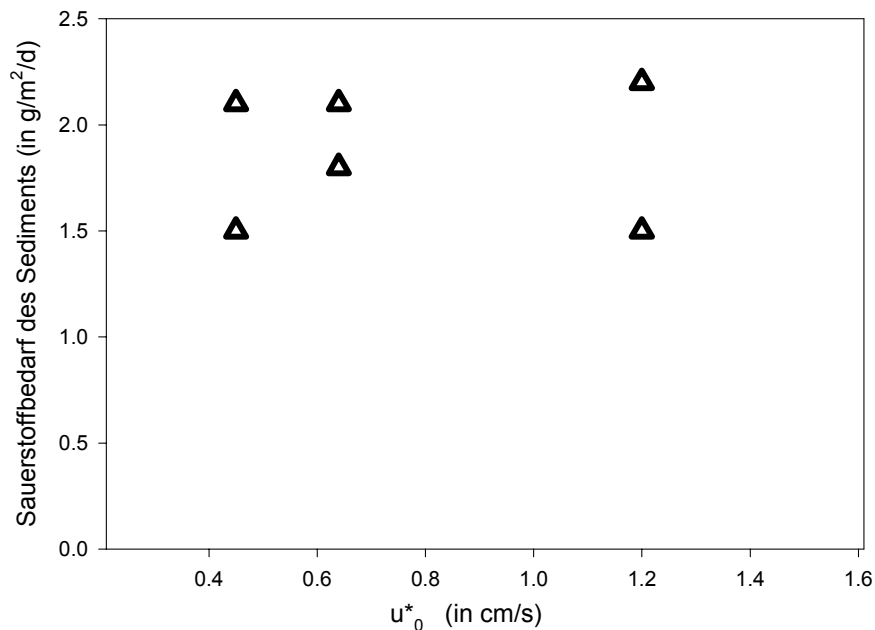


Abb. 7.7: Experimentell ermittelte Abhängigkeit des SSB von der Schubspannungsgeschwindigkeit.

7.4.2 Begleitende Simulation der in situ-Messungen

Das Simulationsmodell wird zur Begleitung der in situ-Messungen eingesetzt. In erster Linie dient es als Hilfsmittel bei der Auswertung und Interpretation der Messergebnisse und zur Durchführung numerischer Experimente. Die Anpassung des Modells an die Messergebnisse und die korrekte Auswertung der Messungen gingen hierbei als iterativer Prozess Hand in Hand. Hier werden vor der Darstellung der Messergebnisse zunächst grundlegende Simulationsergebnisse vorgestellt, die für die Interpretation der Messungen wichtig sind. Bei der späteren Diskussion der Messergebnisse werden spezielle Modellszenarien herangezogen.

Parameterwahl und Kalibrierung: Das Simulationsmodell wurde zugleich an die Mittelwerte der für Feinsedimente gemessenen Stoffflüsse als auch an Porenwasserprofile von Nitrat und Ammonium, die von Song und Müller (1999) vorgelegt wurden, angepasst. Es wurde nicht versucht das Simulationsmodell an einzelne Messungen anzupassen, da mit den Simulationen die mittleren Verhältnisse in feinkörnigen, anoxischen Neckarsedimenten beschrieben werden sollten. Auf der Grundlage eigener Messungen wurde die Porosität der Sedimente auf 0,8 gesetzt (Haag et al. 1999b). Die Werte für kinetische Parameter der mikrobiell katalysierten Stoffumsätze, die Halbsättigungskonstanten und die Hemmung der Prozesse durch energetisch günstigere Oxidationsmittel wurden zunächst anhand zahlreicher Literaturangaben geschätzt (Blackburn und Blackburn 1993; Blackburn et al. 1994; DiToro et al. 1990; DiToro 2001; Lorenzen et al. 1998; Park und Jaffe 1996; Park und Jaffe 1999). Die maximale Konzentration für gelöstes Methan im Gleichgewicht mit einer Methangasphase wurde nach den Angaben von (Yamamoto et al. 1976) berechnet. Molekulare Diffusionskoeffizienten wurden aus (Thibodeaux 1996) übernommen. Es wurde davon ausgegangen, dass das Makrozoobenthon von Tubificiden dominiert wird. Für die Beschrei-

bung der effektiven durch die Bioturbation bedingten Diffusion wurde von Angaben aus Reible et al. (1996), Uhlmann und Horn (2001) und Van Rees et al. (1996) ausgegangen. Die Respirationsrate des Makrozoobenthos wurde auf Grundlage der von Siegmund (2001) experimentell bestimmten Individuendichten und den von Strayer und Likens (1986) angegebenen Respirationswerten abgeschätzt. Aufbauend auf lokalen (linearen) Sensitivitätsanalysen wurde die Identifizierbarkeit der Parameter nach der Methode von Brun et al. (2001) untersucht (siehe Kapitel 8.4.3 für Beschreibung der Methodik). Auf dieser Grundlage wurde das Model durch Variation der Parameterwerte innerhalb plausibler Bereiche an die gemessenen Stoffkonzentrationen und die Porenwasserprofile angepasst. Die letztlich gewählten Parameterwerte sind im Anhang aufgeführt.

Grundlegendes Modellszenario: Als grundlegendes Szenario wurde ein in situ-Experiment mit typischen Anfangs- und Randbedingungen simuliert. Hierfür wurde ein Gerätevolumen von 6,9 L (1,5 m lange Schlauchungen), eine Wassertemperatur von 20°C und eine Gewässertiefe von 1 m zugrunde gelegt. Die Anfangskonzentrationen im Wasserkreislauf wurden für O₂, NO₃-N, NH₄-N und CH₄ auf respektive 6 mg/L, 5,6 mg/L, 0,15 mg/L und 0 mg/L gesetzt. Für die Anfangsbedingungen im Porenwasser wurde von einem stationären Gleichgewichtszustand ausgegangen. Um diesen Gleichgewichtszustand zu ermitteln, wurden in einem Modellvorlauf die Stoffkonzentrationen im Freiwasser über 100 Tage konstant bei den als Anfangsbedingungen genannten Werten gehalten.

Abbildung 7.8 zeigt die berechneten Porenwasserkonzentrationsprofile zu verschiedenen Zeitpunkten des simulierten Experiments. Um die Veränderungen nahe der Sediment-Wasser Grenzfläche zu verdeutlichen, sind für Ammonium und Methan die Konzentrationsprofile nahe der Sedimentoberfläche zusätzlich vergrößert abgebildet. Porenwasserkonzentrationsprofile mit ähnlichen Ausprägungen sind in der Literatur vielfach beschrieben (z.B. Güss 1998; Lorenzen et al. 1998; Song und Müller 1999; Sweerts et al. 1991). Da angenommen wurde, dass die diffusive Grenzschicht dem Stoffübergang keinen Widerstand entgegen setzt, entsprechen die berechneten Konzentrationen an der Grenzfläche den zeitgleichen Konzentrationen im Freiwasser des in situ-Geräts.

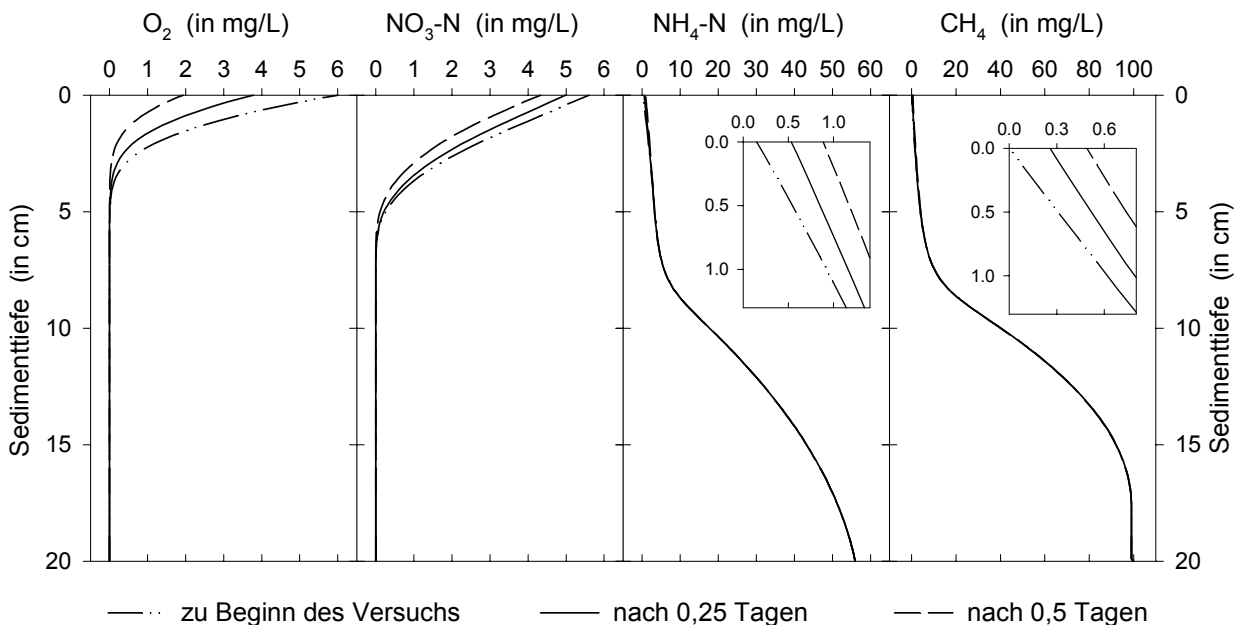


Abb. 7.8: Simulierte Porenwasserkonzentrationsprofile zu Beginn des Modellszenarios, nach 6 und nach 12 Stunden Versuchsdauer.

Für die Oxidationsmittel Sauerstoff und Nitrat weist der Konzentrationsgradient in das Sediment hinein. Beide Stoffe sind innerhalb weniger Zentimeter durch ihre Beteiligung an Oxidationsprozessen aufgebraucht (siehe Abb. 7.1 und Tab. 7.1). Im Gegensatz hierzu steigen die Konzentrationen der Mineralisierungsprodukte Ammonium und Methan mit der Sedimenttiefe an. Der Massenstrom ist zu allen Zeiten aus dem Sediment in das Freiwasser gerichtet. In der Nähe der Sedimentoberfläche wird die Ammoniumkonzentration durch die Nitrifikation und den Verlust ins Freiwasser gering gehalten. In größeren Tiefen steigt sie infolge der anhaltenden anaeroben Mineralisierung organischer Substanz fortlaufend an. Hinsichtlich der Interpretation des Methanprofils ist zu beachten, dass CH_4 im vorliegenden Modell die Schwefel-, sowie die Eisen- und Mangandynamik summarisch mit beschreibt. Da innerhalb der Redoxsequenz zunächst die oxidierten Spezies der genannten Metalle und Sulfat reduziert werden, bevor es zur Methanfermentation kommt, wird in der Natur sowohl der starke Anstieg der Methankonzentration als auch das Erreichen der Gleichgewichtskonzentration wenige Zentimeter tiefer liegen. Das Gleichgewicht mit der Gasphase wird im Modellszenario in etwa 17 cm Tiefe erreicht und liegt bei knapp 100 mg/L. Die Bildung von gasförmigem Methan ist durch das im Feld beobachtete Entweichen von Gasblasen aus dem Sediment belegt.

Zur Auswertung der Feldversuche stehen keine Porenwasserprofile, sondern lediglich die Stoffkonzentrationen im Freiwasser des in situ-Geräts zur Verfügung. Bei der Interpretation von Versuchen mit benthischen Kammern wird für gewöhnlich von zeitlich konstanten Massenstromdichten ausgegangen (Reimers et al. 2001). Allerdings verändern sich im Laufe eines Versuchs die Stoffkonzentrationen innerhalb des geschlossenen Kreislaufs durch die Massenströme über die Sediment-Wasser Grenzfläche. Wie Abbildung 7.8 verdeutlicht, bedingt dies eine Veränderung der Porenwasserkonzentrationsprofile nahe der Sedimentoberfläche und in zweiter Linie Änderungen bei den Stoffumsatzraten. Abbildung 7.9 zeigt den hieraus resultierenden zeitlichen Verlauf der Massenstromdichten über die Grenzfläche, während in Abbildung 7.10 die zeitlichen Verläufe der Stoffkonzentrationen im Freiwasser des in situ-Messgeräts dargestellt sind.

Der Sauerstoffbedarf der Sedimente nimmt infolge der rückläufigen Sauerstoffkonzentration im Freiwasser während des Versuchs nahezu linear ab (Abb. 7.9). Dabei ist zu beachten, dass im SSB eine zeitlich konstante Sauerstoffzehrung von $0,5 \text{ g/m}^2/\text{d}$ durch das Makrozoobenthos enthalten ist. Aus Abbildung 7.10 wird ersichtlich, dass sich diese deutliche Änderung des SSB nur in einer geringfügigen Nichtlinearität der Konzentrationsabnahme im Freiwasser zeigt.

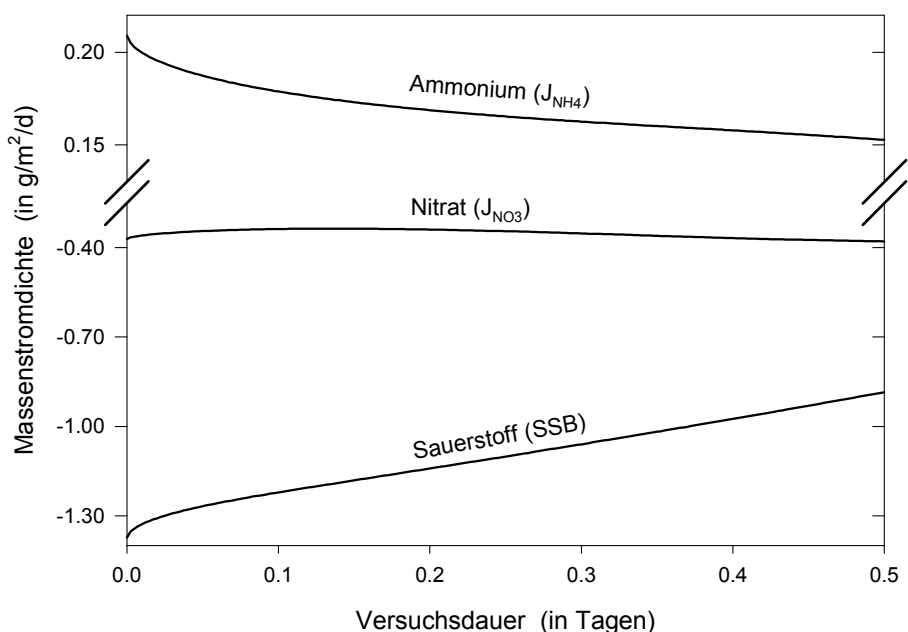


Abb. 7.9: Zeitlicher Verlauf der Massenstromdichten im Modellszenario. Positive Massenstromdichten sind in das Freiwasser gerichtet.

Die über die Versuchsdauer abnehmende Ammoniumfreisetzungsrates (Abb. 7.9) kann durch die zunehmende NH_4 -Konzentration im Freiwasser und der resultierenden Änderung im Konzentrationsprofil (Abb. 7.8) erklärt werden. Trotz dieser zeitlichen Änderung der Massenstromdichte verläuft die Konzentrationszunahme des Ammoniums im Freiwasser augenscheinlich linear (Abb. 7.10).

Im Gegensatz zu den oben genannten Spezies, verändert sich die Massenstromdichte des Nitrats nur geringfügig während der simulierten Zeit. Dies ist darauf zurückzuführen, dass J_{NO_3} durch zwei gegenläufige Mechanismen beeinflusst wird: Einerseits bedingt die abnehmende Nitratkonzentration im Freiwasser eine Erniedrigung des Gradienten, was zu geringeren Nitratverlusten ins Sediment führen müsste. Andererseits nimmt die Tiefe, bis zu der Sauerstoff ins Sediment eindringt, im Laufe des Versuchs ab (Abb. 7.8), wodurch die Zone, in der Denitrifikation stattfinden kann, näher an die Sedimentoberfläche rückt. Dies würde eine Erhöhung des Konzentrationsgradienten und des Nitratverlustes in das Sediment bedingen. Offensichtlich halten sich im vorliegenden Fall beide Effekte in etwa die Waage, so dass sich die Massenstromdichte des Nitrats über die Versuchsdauer nur geringfügig verändert.

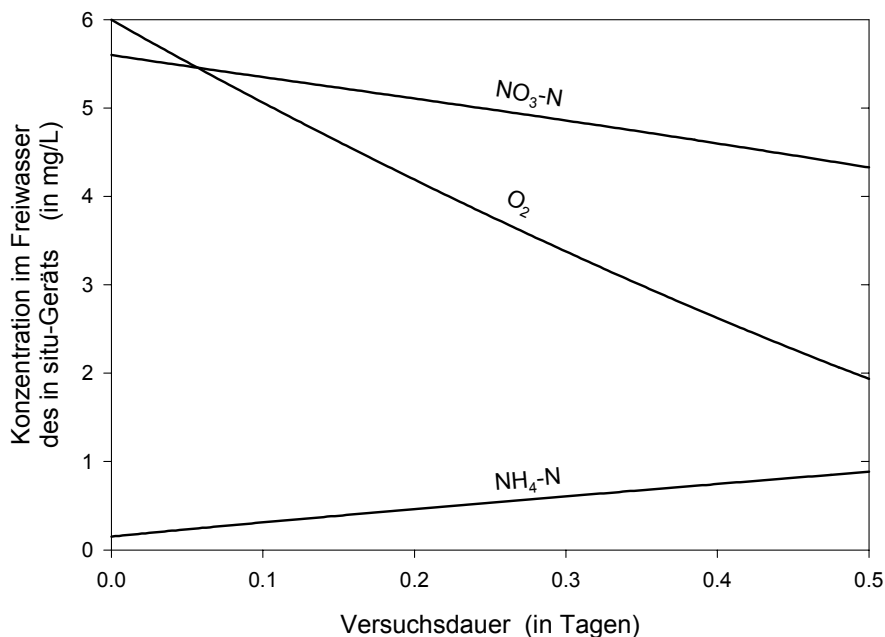


Abb. 7.10: Simulierter zeitlicher Verlauf der Stoffkonzentrationen im Freiwasser des in situ-Geräts.

Die Interpretation der in situ-Feldmessungen beruht auf der Differenzenbildung der Stoffkonzentrationen im Freiwasser zu zwei Zeitpunkten oder – im Falle von Sauerstoff – auf der Auswertung des zeitlichen Verlaufs, wie er in Abbildung 7.10 dargestellt ist. Aus Abbildung 7.9 und den obigen Ausführungen wird deutlich, dass dies streng genommen nicht korrekt ist, da sich die Massenstromdichten im Laufe eines Versuchs ändern. Die Ergebnisse des Modellszenarios wurden genutzt, um zu überprüfen wie groß die Fehler sind, die aus der Auswertung der Stoffkonzentrationen im Freiwasser resultieren. Hierzu wurden die Massenstromdichten (J) zum einen mit Hilfe der Differenzenmethode berechnet:

$$J = \frac{\Delta C}{\Delta t} \cdot \frac{V_{bk}}{A_{sed}} \quad (7.16)$$

Hierbei sind Δt die Versuchsdauer, ΔC die Differenz zwischen der Stoffkonzentration zu Beginn und am Ende des Versuchs, V_{bk} das Wasservolumen im Versuchssystem (6,9 L) und A_{sed} die exponierte Sedimentoberfläche (0,05 m²). Zum anderen wurde angenommen, dass die Stoffkonzentrationen in fünfminütlichen Intervallen aufgezeichnet werden. An den zeitlichen Verlauf dieser (fiktiven) Messwerte wurde mit der Methode kleinster Fehlerquadrate eine Regressionsgerade angepasst (lineare Regression). Das Produkt aus der Steigung der Regressionsgeraden mit V_{bk}/A_{sed} ergibt dann die Massenstromdichte. Die mit

den beiden Auswertungsmethoden erhaltenen Ergebnisse werden in Tabelle 7.3 mit den tatsächlichen Massenstromdichten verglichen.

Der Vergleich verdeutlicht, dass die Ergebnisse, die mit den beiden unterschiedlichen Methoden ermittelt wurden, mit einer Ausnahme identisch sind. Zur Auswertung von Feldmessungen, die mit zufälligen Messfehlern behaftet sind, sollte dennoch nach Möglichkeit die Regressionsmethode vorgezogen werden, um den Einfluss einzelner Messfehler zu minimieren. Diese Ergebnisgleichheit ist ein Beleg für die nur geringfügige Nichtlinearität der Stoffkonzentrationen im Freiwasser. Die lediglich geringfügige Abweichung von linearen Konzentrationsveränderungen (Abb. 7.10) drückt sich auch darin aus, dass das Bestimmtheitsmaß aller durchgeführten linearen Regressionen größer 0,99 war. Die Nichtlinearität der zeitlichen Konzentrationsänderungen lässt sich also nicht durch dieses statistische Maß detektieren.

Tab. 7.3: Vergleich zwischen den tatsächlichen Massenstromdichten im Modellszenario und den Massenstromdichten, die aus den Stoffkonzentrationen im Freiwasser des Versuchssystems ermittelt wurden.

Stoff	tatsächliches J Versuchsbeginn (in g/m ² /d)	Versuchs- dauer (in h)	tatsächliche J Versuchsdauer (in g/m ² /d)	J aus Differenzen (in g/m ² /d)	J aus Regression (in g/m ² /d)
O ₂	-1,37	3	-1,37 ... -1,20	-1,28	-1,28
		6	-1,37 ... -1,10	-1,23	-1,22
		12	-1,37 ... -0,89	-1,12	-1,12
NO ₃ -N	-0,37	3	-0,37 ... -0,34	-0,34	-0,34
		6	-0,37 ... -0,34	-0,34	-0,34
		12	-0,38 ... -0,34	-0,35	-0,35
NH ₄ -N	0,21	3	0,18 ... 0,21	0,21	0,21
		6	0,17 ... 0,21	0,20	0,20
		12	0,15 ... 0,21	0,19	0,19

Erwartungsgemäß werden die Massenstromdichten durch die Auswertung der Konzentrationsverläufe im Freiwasser prinzipiell (vom Betrag her) unterschätzt. Aufgrund der oben beschriebenen Mechanismen nimmt diese Fehleinschätzung bei O₂ und NH₄ mit der Versuchsdauer zu (siehe Abb. 7.9). Bei Versuchsdauern von 6 Stunden wird der SSB um etwa 11 % unterschätzt. Vor dem Hintergrund der enormen zeitlichen und räumlichen Variabilität des SSB, sowie den bei Feldmessungen inhärenten Messungenauigkeiten (siehe unten), erscheint dieser durch die Auswertung bedingte Fehler akzeptabel. Auf Grundlage des Modellszenarios erscheint es daher praktikabel, die in situ-Messungen auf Grundlage der Konzentrationsveränderungen im Freiwasser auszuwerten. Die Wahl der Versuchsdauer stellt dabei einen Kompromiss dar: Einerseits muss sie so gewählt werden, dass die Konzentrationsunterschiede mit den gewählten Analysenmethoden gut nachgewiesen werden können. Andererseits darf sie nicht zu lange werden, um die im Modellszenario aufgezeigten Fehlerquellen klein zu halten.

7.4.3 Experimentelle Befunde bei der in situ-Messung des Stoffübergangs

Im Juli 2001 wurden mit Hilfe des in situ-Gerätes Stoffflüsse über die Sediment-Wasser Grenzfläche an verschiedenen Stellen entlang des Neckars ermittelt. Während der Messkampagne, die vom 2. bis zum 11. Juli lief, herrschten mit klarem sonnigem Wetter und Abflüssen unterhalb von MQ relativ einheitliche meteorologische und hydrologische Randbedingungen. Die Lage der Messorte sowie weitere Rahmenbedingungen sind in Tabelle 7.4 zusammengestellt. Mit Ausnahme der Messungen POPP 3 und NSTE wurden feinkörnige, überwiegend schluffige Sedimente unmittelbar oberstrom der Wehre untersucht. Anhand von Greiferproben wurde deutlich, dass diese feinkörnigen Ablagerungen bereits in geringer Tiefe die für Sulfide typische Schwarzfärbung aufwiesen. Bei den beiden grobkörnigeren Ablagerungen wurde dieses typische Merkmal anoxischer Sedimente in den oberflächennahen Greiferproben nicht sichtbar. Für die

Wiederholungsmessung in Poppenweiler (POPP 1b) wurde nach Beendigung der Messung POPP 1a der Schlauchanschluss unter Wasser geöffnet bis sich in dem Gerät wieder die Temperatur-, Sauerstoff- und pH-Verhältnisse des Umgebungswassers eingestellt hatten. Dann wurde der Kreislauf erneut geschlossen. Die Messung POPP 1b zeichnet sich darüber hinaus durch die außerordentlich lange Messdauer aus (siehe unten). Bei der Messung POPP 4 wurde vor Beginn der eigentlichen Messung ein sehr hoher Durchfluss am Gerät eingestellt, der zur Erosion oberflächennaher Schichten führte. Danach wurde der Durchfluss auf 5 L/Min reduziert und abgewartet, bis keine zusätzliche Trübung mehr sichtbar war. Erst dann wurde die eigentliche Messung gestartet.

Tab. 7.4: Beschreibung der Messstellen zur in situ-Messung des Stoffübergangs an der Grenzfläche Sediment-Wasser.

Bezeichnung	Datum	Lage im Gewässer	Wassertiefe	Sediment	Bemerkungen
DEIZ	9.7.01	km 199,95; linkes Ufer	0,8 m	schluffiger Lehm, sulfidisch	
POPP 1a	4.7.01	km 165; linkes Ufer	1,3 m	schluffiger Lehm, sulfidisch	Wiederholungsmessung am selben Ort
POPP 1b	4./5.7.01	(Mole)			
POPP 3	5.7.01	km 166,9; rechtes Ufer; Mündung Zipfelbach	1,0 m	lehmiger Sand mit Detritus	Kläranlage am Zipfelbach
POPP 4	6.7.01	km 165,4; linkes Ufer	1,0 m	schluffiger Lehm, sulfidisch	Erosion vor Versuchsbeginn
LAUF	3.7.01	km 125,5; linkes Ufer	0,5 m	schluffiger Lehm, sulfidisch	
NZIM	10.7.01	km 86,1; linkes Ufer (Mole)	1,4 m	schluffiger Lehm, sulfidisch	
NSTE	11.7.01	km 43; linkes Ufer	0,5 m	sandiger Lehm	Probleme mit Abschattung

Der Sauerstoffbedarf der untersuchten Sedimente

Der Sauerstoffbedarf der abgelagerten Sedimente wird aus dem zeitlichen Verlauf der kontinuierlich aufgezeichneten Sauerstoffkonzentrationen im Freiwasser des in situ-Geräts abgeleitet. Eine Korrektur um die Zehrung im Freiwasser musste nicht vorgenommen werden, da diese in allen Fällen kleiner 0,1 mg/L über die gesamte Versuchsdauer war. In Abbildung 7.11 sind die gemessenen Zeitreihen aller acht Versuche dargestellt. Hierbei ist zu beachten, dass sowohl die Konzentrations- als auch die Zeitachsen der einzelnen Plots unterschiedlich skaliert sind. Für gewöhnlich wurden die Sauerstoffgehalte alle 5 bzw. 10 Minuten aufgezeichnet. Lediglich bei dem Versuch im Neckar bei Lauffen (LAUF) fiel die Datenerfassung aus, so dass die unregelmäßigen händischen Mitschriften verwendet werden mussten.

Bei den beiden Versuchen mit grobkörnigem Sediment (POPP 3 und NSTE) sind erwartungsgemäß die geringsten Sauerstoffverluste zu verzeichnen. In NSTE kam es im flachen und zur Versuchszeit relativ klaren Wasser zu Problemen mit der Beschattung. Zwischen 0,1 und 0,18 Tagen war die Bodenkammer nicht beschattet, was offensichtlich zur Sauerstoffproduktion durch benthische Algen führte. Dies ist auch durch die während dieser Zeit gemessene Stagnation der ansonsten kontinuierlich abnehmenden pH-Werte belegt (CO₂-Verbrauch durch Photosynthese, Daten nicht dargestellt).

Nichtlineare Konzentrationsabnahme: Mit Ausnahme von POPP 4 (dem Versuch nach Erosion der Oberfläche) zeigen alle Versuche an feinkörnigem, anoxischem Sediment eine mehr oder weniger ausgeprägte Nichtlinearität bei der Konzentrationsabnahme. Im Allgemeinen treten in den ersten 1 bis 3 Stunden der Versuche deutlich höhere Sauerstoffverluste auf, die sich allmählich auf geringere nahezu lineare Verlustraten reduzieren. Mit wenigen Ausnahmen (Uchrin und Ahlert 1985) zeigen die Ergebnisse fast

aller in der Literatur dargestellten in situ-Untersuchungen mit benthischen Kammern, ähnliche Verläufe (Bowman und Delfino 1980; Chiaro und Burke 1980; Hall et al. 1989; Herzfeld et al. 2001; Hoffmann 1980; Jubb et al. 2001). Dieser häufige Befund wird von den Autoren bei der Auswertung ihrer Versuche zumeist nicht berücksichtigt (Bowman und Delfino 1980; Herzfeld et al. 2001) oder mit der Abhängigkeit des SSB von der Sauerstoffkonzentration im überlagernden Wasser erklärt (Chiaro und Burke 1980; Hall et al. 1989; Hoffmann 1980).

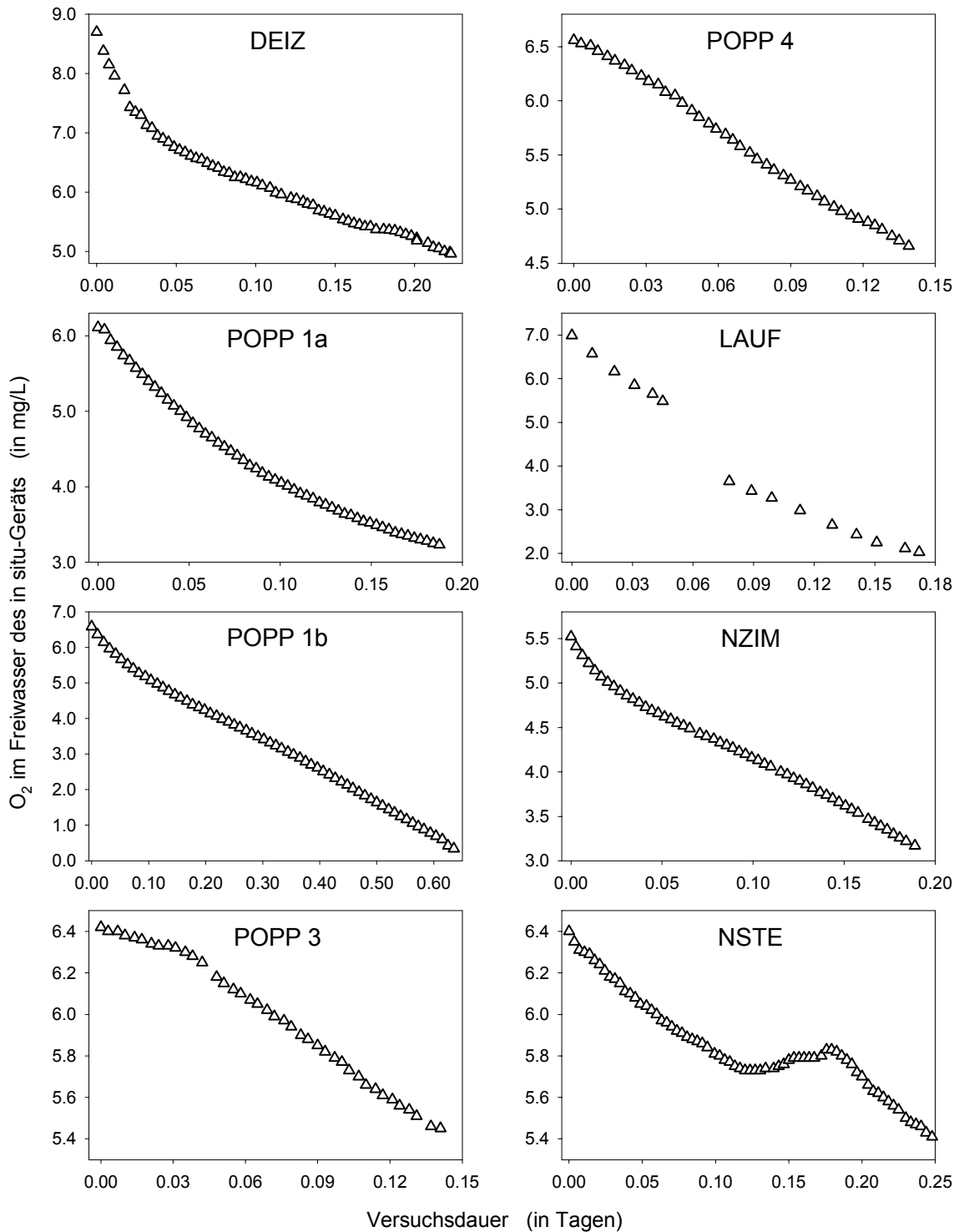


Abb. 7.11: Gemessene Verläufe der Sauerstoffkonzentrationen im Freiwasser des in situ-Geräts.

Für die korrekte Auswertung der Versuche und den Erhalt repräsentativer SSB-Werte, ist es erforderlich die Ursachen der beobachteten Nichtlinearität zu klären. Es erscheint allerdings sehr unwahrscheinlich, dass der (hier wie in den meisten Literaturstellen) beobachtete nichtlineare Verlauf auf die Abhängigkeit des SSB vom Sauerstoffgehalt im Freiwasser zurückgeführt werden kann. Legt man eine Monod-Kinetik (siehe Gleichung 7.1) zugrunde, ergäben sich bei realistischen Halbsättigungskonstanten für Sauerstoff ($K_{S_{O_2,SSB}} < 1,5 \text{ mg/L}$) andere als die beobachteten O_2 -Verläufe: Die Konzentrationskurven verliefen zunächst linear und würden erst bei kleinen Sauerstoffgehalten merklich abflachen. Darüber hinaus weist die Beobachtung, dass im Versuch POPP 1b der Sauerstoffgehalt auch bei sehr geringen Konzentrationen unter 1 mg/L weiter linear abnimmt, darauf hin, dass sich der beobachtete Effekt nicht aus der Abhängigkeit des SSB vom Sauerstoffgehalt im Freiwasser erklären lässt. Chiaro und Burke (1980) gehören zu den wenigen Autoren die eine Abhängigkeit des SSB von der Sauerstoffkonzentration im überlagernden Wasser auch bei hohen Sauerstoffkonzentrationen über 3 mg/L postulieren. Zu diesem Schluss gelangen Chiaro und Burke (1980), indem sie die O_2 -Konzentrationsverläufe in benthischen Kammern an Polynome 2. Ordnung anpassen. Der SSB ergibt sich dann unter Berücksichtigung des Kammervolumens und der exponierten Sedimentfläche aus einem Polynom 1. Ordnung. Somit setzt diese Vorgehensweise implizit eine lineare Abhängigkeit des SSB von der Versuchsdauer voraus, wodurch sich bei abnehmenden O_2 -Konzentrationen eine Abhängigkeit des SSB vom Sauerstoffgehalt ergeben muss. Wertet man die Versuche POPP 1a und POPP 1b mit dieser Vorgehensweise aus, ergeben sich für das selbe Sediment völlig unterschiedliche Abhängigkeiten des SSB vom Sauerstoffgehalt des überlagernden Wassers (Ergebnisse nicht dargestellt). Dies verdeutlicht, dass die von Chiaro und Burke (1980) vorgeschlagene Auswertungsmethode zu Verzerrungen führen kann und die beobachteten Konzentrationsverläufe nicht aus der Abhängigkeit des SSB vom O_2 -Gehalt des Freiwassers zu erklären sind.

In Abschnitt 7.4.2 wurde ausgeführt, dass die Konzentrationsänderung im Freiwasser ebenfalls nicht für Nichtlinearitäten mit der beobachteten Ausprägung verantwortlich gemacht werden können. Daher erscheint es wahrscheinlich, dass die bei Feinsedimenten beobachteten höheren Zehrungsraten am Versuchsbeginn auf Störungen infolge der Messmethode zurückzuführen sind. Die folgenden Phänomene erscheinen als Ursache für Messartefakte möglich: (1) Das Sediment wird beim Einbringen des Stechkastens gestört, was zum vermehrten Aufstieg von Methanblasen und zur Anreicherung von Methan in oberen Sedimentbereichen führt (Methan-Modell). (2) Das Makrozoobenthos erhöht infolge der Störung durch das Einbringen des Stechkastens seine Aktivität (erhöhte Bioturbation und Atmung, Zoobenthos-Modell). (3) Da die Turbulenz in der Bodenkammer geringer ist als im Fluss, wird am Versuchsbeginn suspendiertes (leicht) abbaubares Material verstärkt abgesetzt (Sedimentations-Modell).

Die Auswirkungen dieser drei Phänomene wurden mit Hilfe des Simulationsmodells untersucht. Hierzu wurde in jedem Fall zunächst von dem in Kapitel 7.4.2 verwendeten Grundmodell ausgegangen und drei Szenarien simuliert: (1) Im Methan-Modell wurde unterstellt, dass infolge des Einbaus, zu Versuchsbeginn 20 % der Poren mit Methan gesättigt sind (Gleichgewicht mit Gasphase). (2) Im Zoobenthos-Modell wurde davon ausgegangen, dass die Benthosorganismen unmittelbar nach Einbau des Geräts ihre Aktivität, d.h. die Bioturbation und die Atmung, verdoppeln und diese binnen einer Stunde wieder auf das Normalmaß zurückging. (3) Dem Sedimentations-Modell liegt die Annahme zugrunde, dass es am Versuchsbeginn zur Ablagerung von 2 mg leicht abbaubarem organischem Material kam. Dieses verteilte sich gleichmäßig über die obersten 2 cm des Sediments und ist 100fach schneller abbaubar als durchschnittliches POM. Eine hundertfach höhere Abbaurrate für das sedimentierte Material ist durchaus realistisch, wenn man berücksichtigt, dass speziell frisches Phytoplankton kleine Anteile an sehr leicht abbaubaren Substanzen enthält (Kerner und Gramm 1995), die mit diesem Szenario erfasst werden sollen.

In Abbildung 7.12 werden die Sauerstoffkonzentrationsverläufe der Szenarien und des Grundmodells für eine Versuchsdauer von 6 Stunden verglichen. Hieraus wird deutlich, dass das Methan-Modell zwar eine höherer Zehrungsrate aufweist, nicht aber den typischer Weise beobachteten Verlauf mit anfänglich höherer Zehrung, die dann wieder abnimmt. Sowohl das Zoobenthos- als auch insbesondere das Sedimentations-Modell weisen diese typischen Verläufe auf (vgl. Abb. 7.11 mit Abb. 7.12). Es erscheint also möglich, dass die bei Feinsedimenten zum Beginn der Versuche auftretende Nichtlinearität auf Artefakte infolge der Messmethodik zurückzuführen ist. Insbesondere die Sedimentation leicht abbaubaren Materials ist eine plausible Erklärung hierfür (vgl. Kerner und Gramm 1995). Letztlich kann aber nicht zweifelsfrei geklärt werden, in welchem Prozess die beobachtete Nichtlinearität hauptsächlich begründet liegt. Vielmehr ist davon auszugehen, dass alle drei untersuchten sowie möglicherweise weitere Faktoren zusammen wirken.

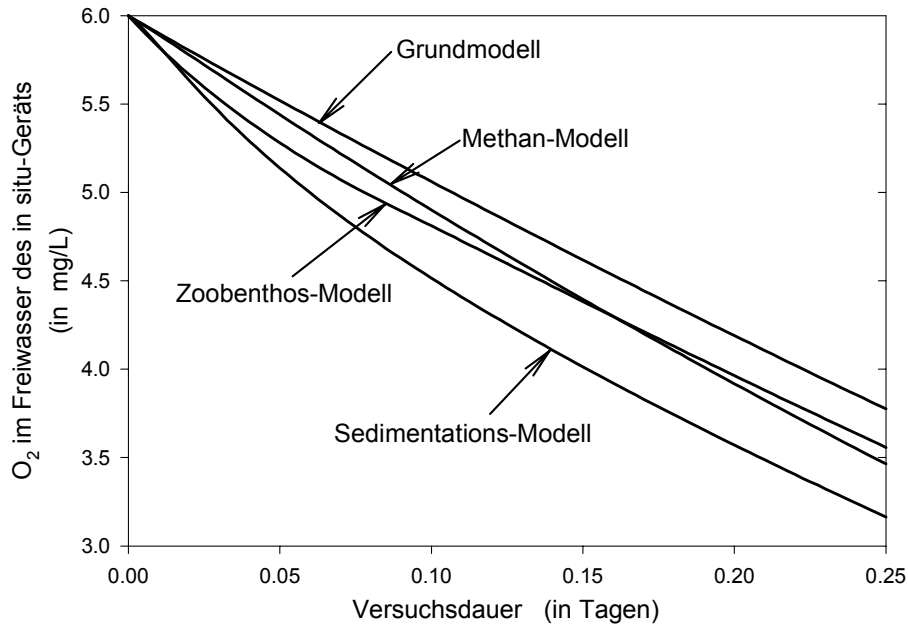


Abb. 7.12: Simulierter Verlauf der Sauerstoffkonzentration im Freiwasser des in situ-Geräts bei unterschiedlichen durch die Messmethode bedingten Artefakten.

Hinsichtlich der Auswertung der in situ-Messungen verdeutlichen die Modellszenarien mögliche Fehlerquellen: Wertet man den gesamten Verlauf mittels linearer Regression aus, so ergäbe sich insbesondere für das Sedimentations-Modell mit einem SSB von $1,50 \text{ g/m}^2/\text{d}$ gegenüber $1,22 \text{ g/m}^2/\text{d}$ im Grundscenario eine deutliche Überschätzung. Legt man hingegen nur den linearen Bereich, ab einer Versuchsdauer von 0,1 Tagen zugrunde, ergibt sich beim Sedimentations-Modell ein SSB von $1,23 \text{ g/m}^2/\text{d}$. Beim Zoobenthos-Modell verhält es sich bei geringeren Unterschieden qualitativ ähnlich. Um möglichst repräsentative Werte für den SSB zu erhalten, sollten daher lediglich die linearen Bereiche der Konzentrationsverläufe ausgewertet werden.

Repräsentative SSB-Werte: Um die Abhängigkeit des ermittelten SSB von der Auswertungsmethode zu verdeutlichen wurden 3 Auswertungsvarianten verwendet: In der ersten Variante wurde der gesamte Messbereich herangezogen und der Achsenabschnitt der Regressionsgeraden auf den ersten Messwert festgelegt. In der zweiten Variante wurde ebenfalls der gesamte Messbereich zur Auswertung herangezogen, der Achsenabschnitt jedoch nicht vorgegeben. In der dritten Variante wurde schließlich nur der lineare Bereich der Konzentrationsverläufe (ohne vorgegebenen Achsenabschnitt) ausgewertet. Alle ermittelten SSBs wurden mit $1,065^{(20-T_w)}$ auf 20°C normiert. Für den Versuch NSTE wurde lediglich der Bereich von 0 bis 0,1 Tagen zur Auswertung verwendet (vgl. Abb. 7.11). Zur Bewertung der statistischen Anpassung wurden das Bestimmtheitsmaß (R^2) sowie der Standardfehler (SF) berechnet (siehe Kapitel 4.3).

Tabelle 7.5 verdeutlicht, dass die Ergebnisse insbesondere bei den hochgradig nichtlinearen Verläufen (DEIZ und NZIM) stark von der Auswertungsmethode abhängen. Die Nichtlinearität spiegelt sich erwartungsgemäß auch in höheren Standardfehlern und geringeren Bestimmtheitsmaßen der ersten beiden Auswertungsvarianten wider. Vor dem Hintergrund der oben durchgeführten Analyse, sind die anhand der linearen Bereiche ermittelten Sauerstoffzehrungsraten als repräsentativ anzusehen. Demnach würde eine Auswertung des gesamten Bereichs – wie sie in der Literatur zumeist durchgeführt wurde (z.B. Bowman und Delfino 1980; Herzfeld et al. 2001), wengleich die selben Phänomene wie bei unseren Messungen auftraten – zu erheblichen Überschätzungen des SSB führen. Legt man die als repräsentativ erachteten Werte zugrunde, weisen alle untersuchten feinkörnigen Sedimentablagerungen bei 20°C Zehrungsraten zwischen $1,4$ und $1,7 \text{ g/m}^2/\text{d}$ auf. Dies entspricht in etwa dem Bereich, der in den Laborversuchen für homogenisiertes Feinsediment aus der Stauhaltung Poppenweiler ermittelt wurde (Abb. 7.7). Die Zehrungsraten der sandigen Ablagerungen sind mit $0,7$ bis $0,9 \text{ g/m}^2/\text{d}$ nur etwa halb so hoch.

Tab 7.5: Auswertung der in situ-Messungen zum SSB mit 3 Varianten des Regressionsansatzes. SSB auf 20°C normiert, sowie Bestimmtheitsmaß (R^2) und Standardfehler (SF) der Regressionen. Die als repräsentativ erachteten SSB-Werte sind fett gedruckt.

Messreihe	Variante 1			Variante 2			Variante 3		
	Gesamter Messbereich Achsenabschnitt fixiert			Gesamter Messbereich Achsenabschnitt frei			Nur linearer Bereich Achsenabschnitt frei		
	SSB	R^2	SF	SSB	R^2	SF	SSB	R^2	SF
DEIZ	5,9	0,52	0,238	3,7	0,93	0,095	1,4	0,99	0,020
POPP 1a	2,8	0,87	0,141	2,2	0,95	0,090	1,4	0,99	0,016
POPP 1b	1,7	0,99	0,103	1,5	1,00	0,036	1,5	1,00	0,026
POPP 3	0,8	0,97	0,024	0,9	0,99	0,015	kein Anfangseffekt		
POPP 4	1,7	0,99	0,018	1,7	0,99	0,018	kein Anfangseffekt		
LAUF	3,0	0,91	0,255	2,6	0,94	0,224	1,5	0,98	0,050
NZIM	5,0	0,95	0,068	4,2	0,99	0,026	1,6	1,00	0,006
NSTE	0,8	0,97	0,013	0,7	0,99	0,008	kein Anfangseffekt		

Nährstoffflüsse über die Grenzfläche Sediment-Wasser

Die Ermittlung der Nährstoffflüsse muss mit Hilfe der Differenzenmethode erfolgen, da nur Analysenergebnisse für den Beginn und das Ende der jeweiligen Versuche vorliegen. Im Allgemeinen sind die Nährstoffumsatzraten im Freiwasser um ein Vielfaches kleiner als im Sediment (Pauer und Auer 2000). Daher können bei der Interpretation der Ergebnisse die parallel ablaufenden Stoffumsätze im Wasser vernachlässigt werden.

Massenstromdichten: In Tabelle 7.6 sind die aus der integralen Differenzenbetrachtung abgeleiteten Stoffströme zusammengestellt, wobei positive Massenstromdichten (J) in das Wasser gerichtet sind. Hier sind auch die mit der Differenzenmethode ermittelten Sauerstoffströme angegeben ($J_{O_2} = -SSB$), wobei die als SSB bezeichneten Größen temperaturkorrigiert sind. Aus dem Vergleich mit Tabelle 7.5 wird deutlich, dass insbesondere für die Messreihen DEIZ, POPP 1a und LAUF der aus der Differenzenmethode ermittelte SSB über dem als repräsentativ angesehenen SSB-Wert liegt. Dies liegt in dem oben analysierten nichtlinearen Konzentrationsverlauf begründet. Wie auch durch Modellsimulationen gezeigt werden kann (nicht dargestellt), sind ähnliche Nichtlinearitäten in besonderem Maße auch für das Mineralisierungsprodukt Ammonium zu erwarten. Dies muss bei der Interpretation berücksichtigt werden.

Allgemein wird deutlich, dass der pH-Wert im Laufe aller Versuche geringfügig abnahm (positiver Massenstrom von Hydroniumionen). Bei organisch gebundenem Kohlenstoff ergibt sich hingegen ein uneinheitliches Bild.

Bei allen Versuchsreihen wird PO_4 in das Sediment aufgenommen. Die einzige Ausnahme stellt der Versuch POPP 4 dar, auf dessen besondere Rolle weiter unten eingegangen wird. Für die feinkörnigen Sedimente liegen die Massenstromdichten durchschnittlich bei etwa $-0,05 \text{ g/m}^2/\text{d}$ PO_4 -P. Entgegen der Annahme bei vielen Modellsimulationen stellt bei den vorliegenden Versuchen das Sediment also eine PO_4 -Senke dar.

Bei allen Versuchen wurde Ammonium aus dem Sediment frei, wohingegen Nitrat dem Wasser entzogen wurde. Insbesondere bei den Versuchen DEIZ, POPP 1a und LAUF, muss aber davon ausgegangen werden, dass die ermittelten Massenstromdichten für Ammonium nicht repräsentativ sind, vielmehr werden diese vermutlich etwa um den Faktor 1,5 bis 2 überschätzt. Für die feinkörnigen, anoxischen Sedimente liegt die NH_4 -N Massenstromdichte somit im Schnitt bei etwa $0,2 \text{ g/m}^2/\text{d}$. Für Nitrat ergeben sich als repräsentativ anzusehende Massenstromdichten von etwa $-0,4 \text{ g/m}^2/\text{d}$ für Feinsedimente und $-0,2 \text{ g/m}^2/\text{d}$ für die groben Ablagerungen. In der Summe stellt das Sediment bei fünf der Versuche eine Senke für anorganischen Stickstoff dar, wohingegen es bei zwei Versuchen als Quelle fungierte (Tab. 7.8). Hierbei ist

jedoch zu beachten, dass bei diesen beiden Versuchen (DEIZ und POPP 1a) die Ammoniumflüsse vermutlich überschätzt wurden.

Tab. 7.8: Aus der Differenzenbetrachtung ermittelte Massenstromdichten bei den in situ-Versuchen zum Stoffübergang an der Grenzfläche Sediment-Wasser.

Messreihe	Dauer Min	T _w _{mittel} °C	SSB* g/m ² /d	J _{O₂} g/m ² /d	J _{H+} mol/m ² /d	J _{TOC} g/m ² /d	J _{PO4-P} g/m ² /d	J _{NH4-N} g/m ² /d	J _{NO3-N} g/m ² /d	J _{Σ N_{min}} g/m ² /d
DEIZ	321	18,9	2,5	-2,32	17,3	0,044	-0,055	0,762	-0,347	0,414
POPP 1a	270	21,4	2,4	-2,67	16,9	-0,183	-0,052	0,457	-0,395	0,063
POPP 1b	915	21,1	1,6	-1,72	8,0	-0,124	-0,034	0,240	-0,375	-0,135
POPP 3	203	21,5	0,9	-0,95	21,1	0,005	-0,001	0,010	-0,226	-0,217
POPP 4	200	22,1	1,7	-1,89	27,1	-0,010	0,014	0,149	-0,536	-0,387
LAUF	248	26,0	2,7	-3,97	n.b.	0,046	-0,051	0,497	-0,713	-0,216
NZIM	272	22,7	1,8	-2,18	8,9	0,010	-0,016	0,204	-0,318	-0,114
NSTE	357	22,6	0,5	-0,55	1,3	0,013	-0,025	n.b.	-0,186	n.b.

* SSB mit $1,065^{20-T_w}$ auf 20°C normiert

7.4.4 Diskussion der in situ-Messungen

Zusammenhang zwischen SSB und dem BSB von Sedimentproben

Im Zuge der Untersuchungen galt es auch zu klären, ob ein signifikanter Zusammenhang zwischen dem SSB und den in Karlsruher Flaschen ermittelten Zehrungsraten der Sedimentpartikel (BSB_{Sed}) besteht. Im Falle eines engen, deterministisch begründeten Zusammenhangs wäre es zukünftig möglich, den SSB aus dem wesentlich einfacher zu ermittelnden BSB_{Sed} abzuleiten. Abb. 7.13 A zeigt den Zusammenhang zwischen den als repräsentativ erachteten Sauerstoffzehrungsraten des abgelagerten Sediments und dem biochemischen Sauerstoffbedarf von Sedimentproben, die unmittelbar neben den in situ-Messstellen entnommen worden waren. Der BSB_{Sed} ist hier als die über 30 Tage gemessene mittlere tägliche Zehrungsrate je mL Sediment dargestellt. Die angegebenen Fehlerbalken für den BSB_{Sed} beruhen auf der mittleren Abweichung, die für die Doppelproben ermittelt wurde. Wie zu erwarten war, korreliert der SSB positiv mit dem BSB_{Sed} .

Vernachlässigt man zunächst die Respiration des Makrozoobenthos, ist im Prinzip die Sedimentationsrate von POM bzw. die Verfügbarkeit von abbaubarer organischer Substanz im Sediment maßgebend für die Aktivität der frühdiagenetischen Prozesse und damit für den SSB (vgl. Kapitel 7.2.2). Mit Hilfe des Simulationsmodells kann der Zusammenhang zwischen abbaubarer organischer Substanz und dem SSB aufgezeigt werden: Hierzu wurde in dem in 7.4.2 beschriebenen Grundmodell die Konzentration an abbaubarem organischem Material über einen weiten Bereich variiert. Abbildung 7.13 B veranschaulicht, dass gemäß den Modellszenarien der SSB näherungsweise mit der Quadratwurzel der Konzentration abbaubarer organischer Substanz zunimmt. Zu einer Quadratwurzelbeziehung zwischen abbaubarem POM und dem SSB gelangen auch DiToro und Mitarbeiter, sowohl mit Laborversuchen (DiToro et al. 1990) als auch mit ihren mathematischen Modellen (DiToro et al. 1990; DiToro 2001). Da der BSB_{Sed} ein Maß für die abbaubare organische Substanz darstellt, sollte unter Vernachlässigung des Zoobenthos zwischen dem BSB_{Sed} und dem SSB ein ähnlicher Zusammenhang bestehen. Setzt man dies voraus, erhält man aus einer nichtlinearen Regression mit gewichteten kleinsten Fehlerquadraten die folgende Beziehung:

$$SSB = -0,32 + 4,00 \cdot \sqrt{BSB_{Sed}} \quad (7.17)$$

mit einem Bestimmtheitsmaß von 0,80 und einem Standardfehler von 0,17 (Abb. 7.13 A). Diese Regression basiert nur auf 8 Messpunkten und ist daher mit der angemessenen Vorsicht zu interpretieren. Zudem

ist zu beachten, dass an den unterschiedlichen Standorten verschiedene Zoobenthosgemeinschaften ausgeprägt sind, deren Einfluss durch Atmung und Bioturbation in der Regression nicht berücksichtigt ist. Prinzipiell ist davon auszugehen, dass die Aktivität des Makrozoobenthos in den Grobsedimenten weniger ausgeprägt ist, weshalb eine Quadratwurzelbeziehung, die unterschiedliche Sedimenttypen einbezieht eine grobe Vereinfachung ist. Hierauf ist vermutlich auch der negative Achsenabschnitt der berechneten Regression zurückzuführen. Im Zusammenhang mit Unterschieden in der benthischen Lebensgemeinschaft können auch die beiden „Ausreißer“, die Messungen LAUF und DEIZ, sehr gut erklärt werden: Im Neckar bei Lauffen (LAUF) treten im Vergleich mit den anderen Messstandorten sehr hohe Muscheldichten (insbesondere *Corbicula fluminalis*) auf, was den hohen SSB erklären kann. Im Gegensatz hierzu ist Deizisau (DEIZ) der einzige Standort, an dem bei den Untersuchungen von Siegmund (2001) keine Schlammröhrenwürmer gefunden wurden, weshalb hier vermutlich eine geringere Atmungs- und Turbationsaktivität vorherrscht als an den anderen Standorten. Zusammenfassend bleibt zu sagen, dass zumindest die Sauerstoffzehrung, die auf frühdiaogenetische Prozesse zurück geht, vermutlich in einer Wurzelbeziehung zum BSB_{Sed} steht. Diese Beziehung wird aber durch den Einfluss des Makrozoobenthos überlagert. Um eine zuverlässige Abschätzung des SSB aus BSB_{Sed} -Messungen zu gewährleisten, sind in jedem Fall weitere Messungen erforderlich.

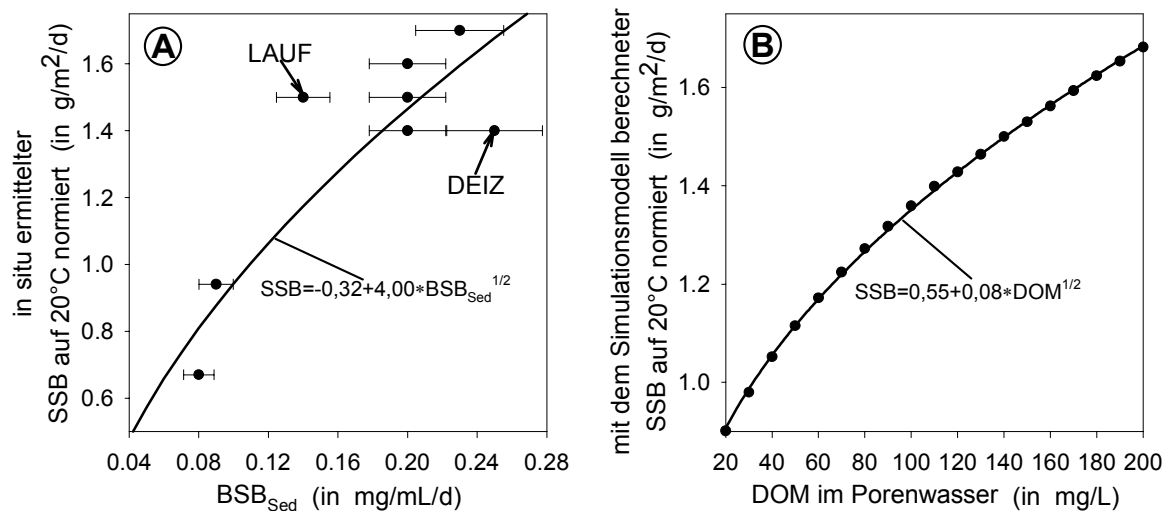


Abb. 7.13: Bei den in situ-Messungen ermittelte Abhängigkeit des SSB vom BSB_{Sed} (A) und mit dem Simulationsmodell berechneter Zusammenhang zwischen abbaubarem organischem Material im Porenwasser und dem SSB (B).

Zusammenfassung der Ergebnisse in einer konzeptionellen Modellvorstellung

Neben den absoluten Werten für die Massenstromdichten der Nährstoffe und des Sauerstoffs, dienen die ermittelten Stoffströme zur Ableitung einer umfassenden Modellvorstellung. Diese konzeptionelle Modellvorstellung ist in Abbildung 7.14 skizziert und wird im Folgenden anhand der beteiligten Stoffe diskutiert.

Sauerstoff und CO₂: Die Sauerstoffzehrung ist sowohl auf die aerobe Respiration (inklusive der Atmung der Makroorganismen) als auch auf die Oxidation reduzierter Zwischenprodukte in der aeroben Sedimentschicht zurückzuführen. Der Zusammenhang zwischen dem Sauerstofffluss und der Verfügbarkeit abbaubarer organischer Substanz wurde bereits oben diskutiert. Auch die beobachteten pH-Absenkungen gehen vor allem auf Mineralisierungsprozesse zurück, bei denen CO₂ frei und das Kalk-Kohlensäure-Gleichgewicht zu geringeren pH-Werten hin verschoben wird. Zudem führt die Oxidation reduzierter Mineralisierungsprodukte zur Säureproduktion (siehe Tabelle 7.1), die in den kalkreichen Sedimenten des Neckars durch die zusätzliche Lösung von Carbonaten jedoch weitgehend gepuffert wird. Der positive Massenfluss von H⁺ ist in jedem Fall Ausdruck sauerstoffzehrender Prozesse im Sediment.

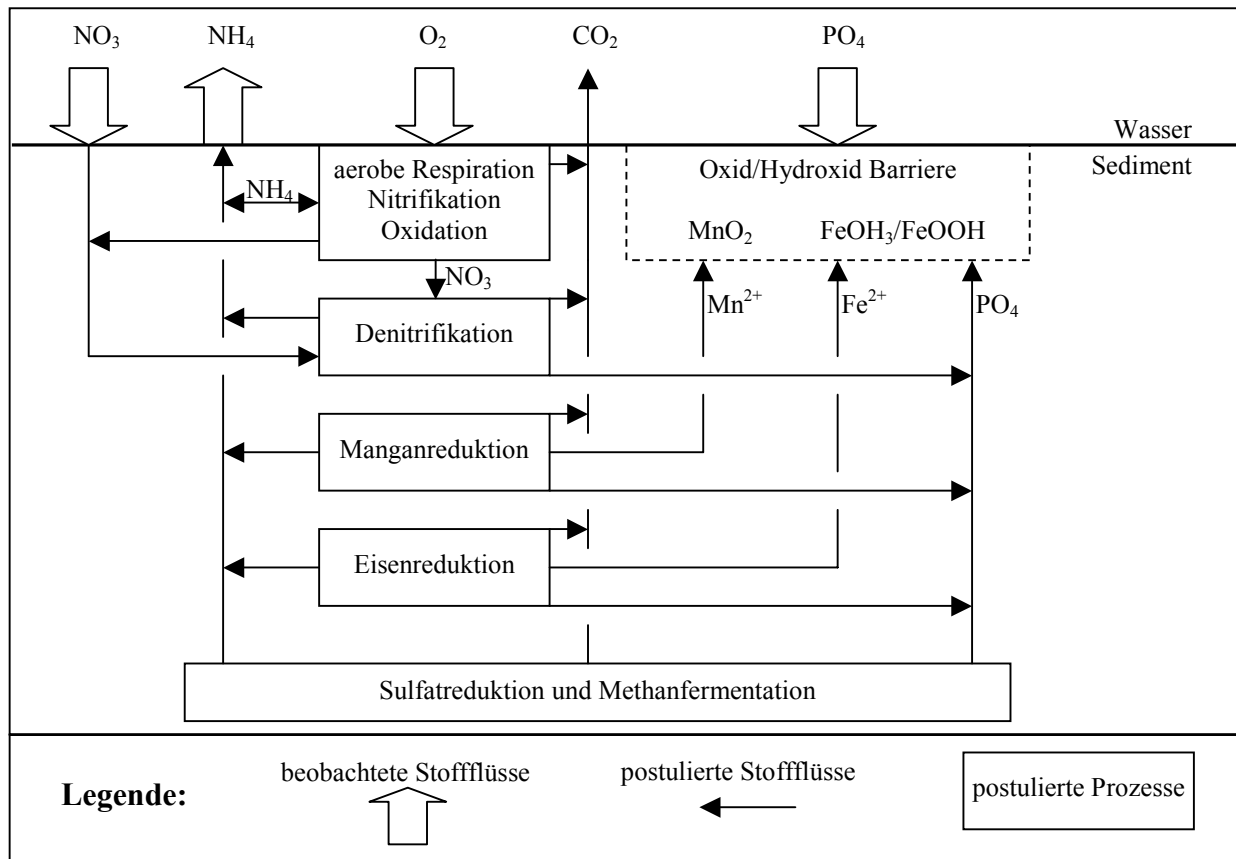


Abb. 7.14: Konzeptionelles Modell der Stoffflüsse in den untersuchten Neckarsedimenten.

Stickstoff: Ammonium resultiert aus Mineralisierungsprozessen im Sediment, wie sie für Neckarsedimente anhand von Porenwasserprofilen für alle in Abbildung 7.1 dargestellten Redoxmilieus bis in Tiefen von einigen Dezimetern nachgewiesen sind (Song und Müller 1999). Unter Sauerstoffeinfluss wird durch die aerobe Mineralisierung NH_4 frei, während durch die Nitrifikation gleichzeitig Ammonium in Nitrat überführt wird (Doppelpfeil in Abbildung 7.14). Zudem wirkt eine mögliche (unspezifische) Adsorption an Tonmineralien einer Ammoniumfreisetzung entgegen. Während Song und Müller (1999) aus ihren Porenwasserprofilen eine oberflächennahe Barriere ableiten, die eine Ammoniumfreisetzung unterbindet, belegen die vorliegenden Ergebnisse eine merkbare NH_4 -Freisetzung. Offensichtlich wird durch die Mineralisierung des POM mehr NH_4 frei als durch Nitrifikation in der oxischen Schicht umgewandelt werden kann. Tabelle 7.9 verdeutlicht, dass die Massenstromdichten von NH_4 negativ mit denen von O_2 , PO_4 , und NO_3 korreliert sind. Hohe Freisetzungsraten von Ammonium sind offenbar mit hohen Sauerstoff-, Phosphat- und Nitratflüssen in das Sediment verbunden. Vernachlässigt man Ionenaustausch und Nitrifikation, so kann die Ammoniumfreisetzungsrates als Zeiger für die Mineralisierung und die mikrobielle Aktivität im Sediment dienen. Bei hohen Mineralisierungsraten sind O_2 und NO_3 im Vertikalprofil schneller verbraucht, wodurch sich steilere Gradienten und somit höhere Massenstromdichten in das Sediment hinein ergeben. Dieser Zusammenhang wird durch die Korrelationsanalyse bestätigt.

Der bei allen Untersuchungen festgestellte Nitratverlust unterstreicht die Bedeutung der Denitrifikation in den Neckarsedimenten. In allen untersuchten Fällen wird durch die Denitrifikation in der suboxischen Schicht offenbar mehr Nitrat aufgebraucht als durch die Nitrifikation in der oxischen Schicht frei wird, so dass zusätzliches Nitrat aus dem Freiwasser denitrifiziert wird. Dies wird durch Porenwasserverticalprofile untermauert (Song und Müller 1999), die kein Nitratmaximum aufweisen, wie es bei der Dominanz von Nitrifikation der Fall sein müsste (Blackburn et al. 1994; Goloway und Bender 1982). Die Befunde zum Verhalten des anorganischen Stickstoffs stehen im Einklang mit Ergebnissen, die Hoffmann (1980) bei Labor- und in situ-Versuchen Ende der 70er Jahre im Neckar erzielte. Auch bei diesen Versuchen wurde prinzipiell eine Abnahme der Nitrat- und eine Zunahme der Ammoniumkonzentrationen ermittelt, während sich für die Summe anorganischen Stickstoffs uneinheitliche Befunde ergaben. Die von Hoff-

mann (1980) ermittelten Massenstromdichten von $-0,02$ bis $-1,17 \text{ g/m}^2/\text{d}$ für Nitrat und 0 bis $0,84 \text{ g/m}^2/\text{d}$ für Ammonium liegen im selben Bereich wie die hier ermittelten Werte. Wenngleich die Ergebnisse infolge methodischer Unterschiede und unterschiedlicher Beprobungsstellen nicht unmittelbar vergleichbar sind, zeigt dies doch, dass sich die Stickstoffumsatzraten in den Neckarsedimenten während der letzten 20 Jahre nicht grundlegend verändert haben.

Im Gegensatz hierzu schätzen Song und Müller (1999) auf Grundlage ihrer Porenwasserprofile und molekularer Diffusion für den Neckar und einige Nebenflüsse Massenstromdichten für Nitrat zwischen $-0,7$ und $-2,3 \text{ mmol/m}^2/\text{d}$ (entspricht für $\text{NO}_3\text{-N}$ $-0,01$ bis $-0,032 \text{ g/m}^2/\text{d}$) ab. Damit liegen diese Werte um etwa ein Größenordnung unter den von Hoffmann (1980) und in der vorliegenden Arbeit ermittelten Massenstromdichten. Diskrepanzen in ähnlichem Ausmaß treten häufig zwischen Kammer- und Profilmessungen auf, wobei unterschiedliche Gründe hierfür diskutiert werden (Güss 1998). Hier soll qualitativ überprüft werden, ob die im Neckar beobachteten Diskrepanzen auf die durch Tubificiden erhöhte effektive Diffusion zurückgeführt werden kann. Ein sommerliches Porenwasserprofil aus der Stauhaltung Lauffen beschreiben Song und Müller mit folgender Exponentialfunktion:

$$NO_3(z) = NO_{3,0} \cdot \exp(-34,1 \cdot z) \quad (7.18)$$

wobei die $\text{NO}_3\text{-N}$ Konzentration an der Grenzfläche ($\text{NO}_{3,0}$) $5,6 \text{ mg/L}$ beträgt. Die Massenstromdichte (J) ergibt sich aus dem Produkt zwischen dem Konzentrationsgradienten bei $z = 0$ und dem effektiven Diffusionskoeffizienten:

$$J_{NO_3\text{-N}} = D_{eff} \cdot \left. \frac{dNO_3}{dz} \right|_{z=0} = D_{eff} \cdot -34,1 \cdot NO_{3,0} \quad (7.19)$$

Geht man von rein molekularer Diffusion ($D_{\text{mol,NO}_3} = 1,64 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{d}$ bei $25 \text{ }^\circ\text{C}$) und einer Porosität von $0,8$ aus, so erhält man unter Berücksichtigung der Tortuosität (Gleichung 7.2) eine Massenstromdichte von $-0,017 \text{ g/m}^2/\text{d}$. Setzt man für die effektive Diffusivität hingegen den im numerischen Modell für die Sedimentoberfläche verwendeten Wert von $2,5 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{d}$ ein, so gelangt man zu einer Massenstromdichte von $-0,48 \text{ g/m}^2/\text{d}$. Eine effektiv Diffusivität von $2,5 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{d}$ entspricht in etwa dem Wert, der von Van Rees et al. (1996) experimentell für stark von Makrofauna beeinflusste Seesedimente ermittelt wurde. Die von Song und Müller (1995, 1999) vorgelegten Porenwasserprofile können also mit realistischen effektiven Diffusionskoeffizienten in Einklang mit den hier ermittelten Massenstromdichten für Nitrat gebracht werden.

Tab. 7.9: Korrelationsmatrix der mit der Differenzenmethode ermittelten Massenstromdichten. Rechts oben: Korrelationskoeffizienten nach Pearson. Links unten: zugehörige Irrtumswahrscheinlichkeiten.

	O ₂	PO ₄ -P	NO ₃ -N	NH ₄ -N
O ₂		0,69	0,94	-0,62
PO ₄ -P	0,086		0,62	-0,91
NO ₃ -N	0,002	0,137		-0,45
NH ₄ -N	0,187	0,011	0,377	

Phosphor: Phosphat wird bei der Mineralisierung organischer Substanz im Sediment frei. Dennoch stellt im vorliegenden Fall das Sediment offenkundig eine Senke für PO_4 dar. Die von Song und Müller (1999) vorgelegten Porenwasserprofile aus verschiedenen Neckarstauhaltungen belegen, dass die im anoxischen Bereich stark erhöhten Phosphatkonzentrationen im aeroben Bereich drastisch abnehmen. Dieser Konzentrationsverlauf ist wohl in erster Linie auf die Kopplung der Phosphatdynamik mit der Eisen- und Mangandynamik zurückzuführen. Die in tieferen Schichten unter Sauerstoffausschluss gebildeten zweiwertigen Mn und Fe Spezies besitzen trotz der möglichen Fällung als Sulfide eine wesentlich höhere Löslichkeit als die zugehörigen oxidierten Spezies (Mn(IV) und Fe(III)). Daher diffundieren Fe^{2+} und Mn^{2+}

entsprechend dem Konzentrationsgradienten zur Oberfläche. Unter dem Einfluss von Sauerstoff (im Falle von Eisen auch Nitrat), werden sie oxidiert und als Oxide/Hydroxide gefällt. Bei stabiler Lagerung baut sich so sukzessive eine Mangan- und Eisenoxid/hydroxidreiche Schicht nahe der Sedimentoberfläche auf (Oxid/Hydroxidbarriere in Abb. 7.14). Insbesondere auf Eisenoxid und -hydroxidoberflächen wird Phosphat sehr stark spezifisch adsorbiert (Dzombak und Morel 1990; Nilsson et al. 1992), so dass es im Porenwasser des oxischen Bereichs zur drastischen Abnahme der Phosphatkonzentration kommt. Im vorliegenden Fall werden die Porenwasserkonzentrationen in der oxischen Schicht offenbar so stark reduziert, dass es zu einem Phosphatgradienten vom Freiwasser zum Sediment hin und somit zum Verlust von Phosphat aus dem Freiwasser kommt. An dieser Stelle erscheint es bemerkenswert, dass es selbst während des Langzeitversuchs POPP 1b zur PO_4 -Aufnahme durch das Sediment kam, wenngleich die O_2 -Konzentration am Ende des Versuchs bis auf 0,3 mg/L abnahm. Hier verhinderte offenbar die langsame Kinetik bei der Lösung von Hydroxiden/Oxiden eine merkliche Phosphatfreisetzung.

Lediglich beim Versuch POPP 4 wurde Phosphat in das Wasser freigesetzt. Hier wurde vor Versuchsbeginn die oberflächennahe Oxid-/Hydroxidbarriere durch Erosion entfernt, so dass PO_4 ungehindert ins Freiwasser diffundieren konnte. Dies legt den Schluss nahe, dass die Neckarsedimente im Falle einer Resuspension aber auch unmittelbar nach Resuspensionsereignissen zur Phosphatquelle werden können. Erst wenn die Sedimente lang genug stabil gelagert waren, um wieder genügend Oxide/Hydroxide nahe der Sedimentoberfläche anzureichern, fungieren sie wieder als PO_4 -Senke. Das Korrelationsmuster (Tab. 7.9) legt nahe, dass Phosphat insbesondere in sehr aktiven sauerstoffzehrenden Sedimenten festgelegt wird, wenngleich in diesen Sedimenten mehr Phosphat durch Mineralisierungsprozesse frei wird. Dies liegt wohl darin begründet, dass in den mikrobiologisch aktiven Sedimenten innerhalb einer sehr dünnen oxischen Schicht eine sehr hohe Oxid/Hydroxiddichte und folglich eine hohe Dichte an spezifischen Adsorptionsplätzen für Phosphat vorliegt.

8 SIMULATIONSMODELLE FÜR DEN STOFFHAUSHALT: BESCHREIBUNG, KALIBRIERUNG UND BEWERTUNG

8.2 Einleitung

8.2.1 Problemstellung

Zur Simulation des Stoffhaushalts von Fließgewässern existieren zahlreiche Modelle unterschiedlichster Komplexität. Die am weitesten entwickelten Simulationsmodelle vereinigen den aktuellen Stand des Wissens über die Wirkungszusammenhänge im Gewässer. Häufig liegen allerdings nicht zu allen in solchen „state of the art“ Modellen beschriebenen Zielgrößen Naturmessdaten vor: Die in den meisten Monitoringprogrammen erhobenen Daten decken sich nur teilweise mit den Zielgrößen solcher komplexen Modelle. Dies ist nicht überraschend, da Gewässergütemessnetze im Allgemeinen für die Erfassung maßgeblicher Güteparameter aber nicht zur Beschreibung der Systemzusammenhänge konzipiert sind (Dixon und Chiswell 1996). Für die komplexen Modelle sind daher häufig die für die Modellierung erforderlichen Rand- und Anfangsbedingungen nicht für alle Zielgrößen verfügbar. Diese müssen geschätzt werden. Außerdem können die Simulationsergebnisse für die nicht gemessenen Zielgrößen nicht überprüft werden. Eine umfassende Modellvalidierung ist ausgeschlossen.

Die „state of the art“ Modelle basieren zudem auf einer sehr großen Zahl an Parametern. Dies erschwert eine alle Modellparameter erfassende Sensitivitätsanalyse und macht eine inverse Kalibrierung – selbst dann wenn alle Zielgrößen als Naturmessdaten vorliegen – nahezu unmöglich (Beck 1987; Reichert et al. 2001a). Die einzelnen Modellparameter müssen deshalb a priori möglichst exakt bekannt sein. Diese werden daher häufig aus Labor- oder Freilandversuchen gewonnen, wodurch die Modelle auch hinsichtlich der verwendeten Parameter auf ein solides deterministische Fundament gestellt werden. Insbesondere bei den biologischen Prozessen hängen die Parameter aber in hohem Maße davon ab, welche Arten bzw. Artengesellschaften vorliegen. Für eine gute a priori Schätzung der Parameter sind also detaillierte Kenntnisse über die Biozönose erforderlich. Auch diese Kenntnisse sind aus biologischen Monitoringprogrammen häufig nicht, oder zumindest nicht in der erforderlichen zeitlichen und/oder räumlichen Auflösung abzuleiten.

Hieraus folgt, dass trotz äußerst komplexer, deterministisch fundierter Modelle der Erfolg der Simulationen häufig durch die tatsächliche Kenntnis des Systems limitiert wird. Hieraus ließe sich die Forderung ableiten, dass ein einfaches Modell verwendet wird, das an die Datenverfügbarkeit und Systemkenntnis angepasst ist (Jakeman und Hornberger 1993). Hierdurch besteht nun allerdings die Gefahr, dass im Modell wesentliche Aspekte des tatsächlichen Systems nicht berücksichtigt werden, wodurch der Wert des Modells im Hinblick auf seine systemanalytische und prognostische Leistungsfähigkeit möglicherweise abnimmt. Folglich steht a priori nicht fest, welcher Modellansatz für die jeweilige Problemstellung am besten geeignet ist. Vielmehr gilt es bei der Wahl des Modells das Gleichgewicht zwischen Datenverfügbarkeit bzw. Systemkenntnis einerseits und der Modellkomplexität andererseits zu wahren (De Witt und Pebesma 2001).

8.2.2 Zielsetzung und Vorgehensweise

Primäres Ziel dieses Kapitels ist es, Simulationsmodelle zu identifizieren bzw. abzuleiten, die geeignet sind den Stoffhaushalt im Neckar zu analysieren und zu prognostizieren. Die zur Erreichung dieses Ziels gewählte Vorgehensweise ist schematisch in Abbildung 8.1 dargestellt.

Verfügbare Modelle: Natürliche Ausgangspunkte für die Wahl eines geeigneten Modells sind die für den Neckar verfügbaren Daten, die in den vorangegangenen Kapiteln gewonnen Erkenntnisse über das Stoffhaushaltssystem und die verfügbaren Modellansätze. Daher müssen zunächst die gängigen und öffentlich verfügbaren Simulationsmodelle dargestellt werden.

Basismodell: Auf Grundlage von Systemkenntnis und Datenverfügbarkeit soll zunächst ein Basismodell gefunden werden, für das prinzipiell gilt, dass es so komplex wie nötig und zugleich so einfach wie möglich ist. So einfach wie möglich heißt auch, dass Anfangs- und Randbedingungen durch Messdaten vor-

gegeben und die Simulationsergebnisse anhand von Messdaten überprüfbar sein sollten. Andererseits müssen für fundierte Aussagen zur Verbesserung des Sauerstoffhaushalts – was zentrales Anliegen der vorliegenden Arbeit ist – alle auf Grundlage der empirischen Analysen als relevant erachteten Prozesse simuliert werden. An dieses Basismodell zur Simulation des Sauerstoffhaushalts in der Bundeswasserstraße Neckar müssen daher prinzipiell die folgenden Anforderungen gestellt werden:

- Das Modell sollte deterministisch fundiert sein
- Es müssen alle für den Sauerstoffhaushalt relevanten Prozesse simuliert werden
- Es sollten möglichst nur solche Zielgrößen simuliert werden, die als Messdaten vorliegen

Zunächst gilt es zu überprüfen, inwiefern eines der verfügbaren Simulationsmodelle diese Anforderungen erfüllt. Sofern unter den vorhandenen Modellen kein geeignetes gefunden werden kann, muss das Basismodell gemäß den gemachten Vorgaben selbst entwickelt und implementiert werden. Da das Basismodell auf vorhandenen Messdaten fußt, kann es einer umfassenden Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse unterzogen werden. Die abgeleitete Modellstruktur sowie die Sensitivitätsuntersuchung stellen an sich bereits einen wesentlichen Teil der modellgestützten Systemanalyse dar, da hierdurch die Signifikanz einzelner Prozesse bzw. Prozesskombinationen herausgestellt wird. Auf Grundlage der Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse kann das Basismodell mit Messdaten kalibriert werden. Die Überprüfung bzw. Validierung erfolgt anhand anderer Zeitreihen und/oder Fließstrecken.

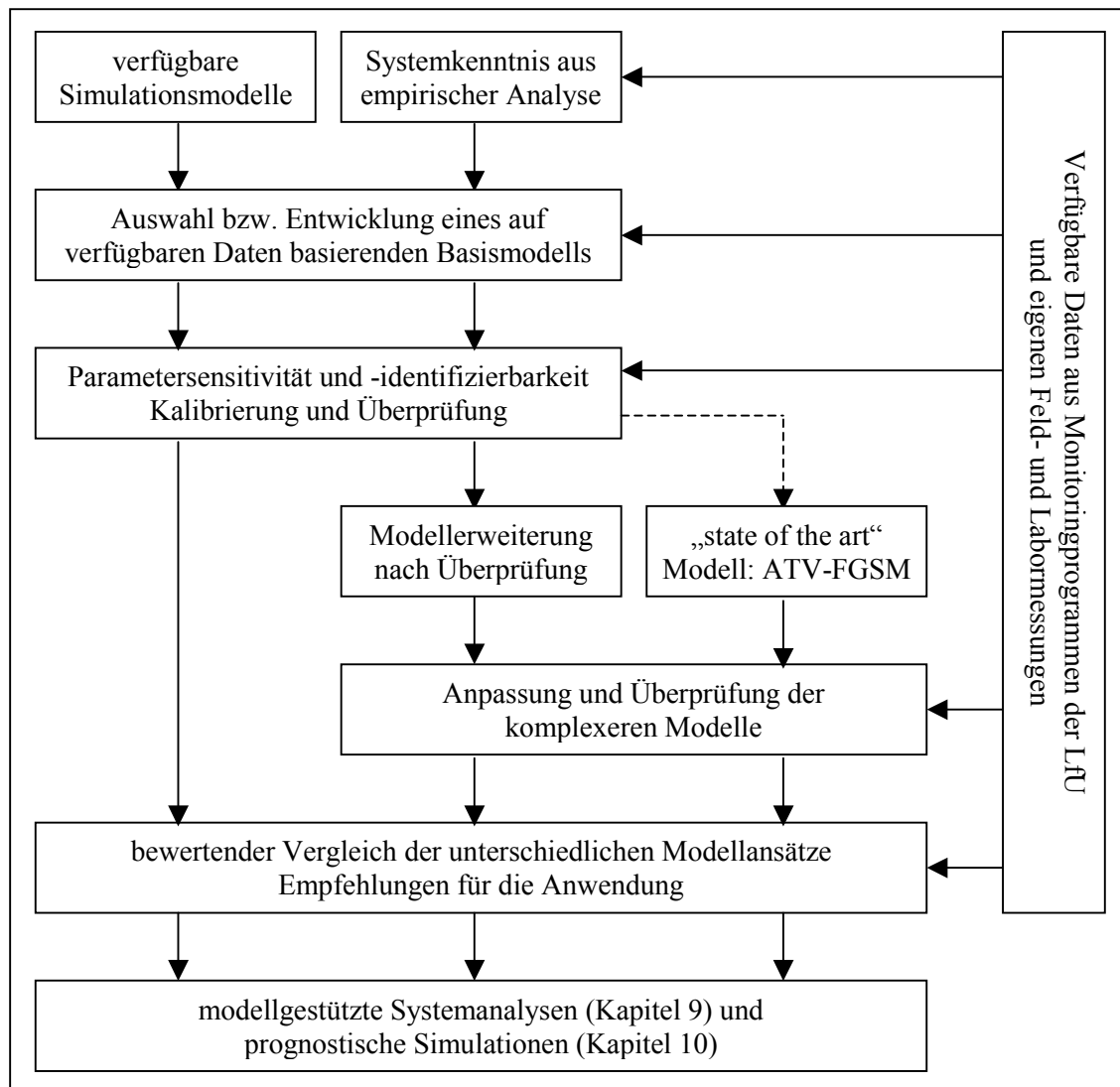


Abb. 8.1: Vorgehensweise bei der Wahl eines geeigneten Modells zur Simulation, Analyse und Prognose des Sauerstoffhaushalts im mittleren Neckar.

Erweitertes Modell: Anhand der Überprüfung des Basismodells kann einerseits dessen grundsätzliche Eignung für die Analyse und Prognose des Sauerstoffhaushalts bewertet werden. Andererseits können eventuelle Diskrepanzen zwischen Simulation und Messung genutzt werden, um Hypothesen hinsichtlich möglicher Unzulänglichkeiten der einfachen Modellstruktur aufzustellen. Auf Grundlage dieser Hypothesen soll ein erweitertes Modell abgeleitet werden. Dieses komplexere Modell muss der dritten Anforderung nicht mehr genügen, es kann also erforderlich sein, Anfangs- und Randbedingungen zu schätzen. Eine umfassende Kalibrierung des Modells schließt sich dadurch aus. Vielmehr sollen die Parameterwerte auf Grundlage des Systemwissens sowie anhand von Literaturdaten und eigenen Messungen auf deterministisch plausible Werte gesetzt werden. Anschließend soll lediglich eine händische Anpassung an die Messwerte erfolgen. Das erweiterte Modell dient in erster Linie zur qualitativen Überprüfung der aufgestellten Hypothesen und zur weiterführenden Systemanalyse. Auf Grundlage dieses Modells sind gegebenenfalls weiterführende Anforderungen an die Datenerhebung abzuleiten.

„State of the art“ Modell (ATV-FGSM): Darüber hinaus soll mit dem ATV-FGSM ein kommerziell verfügbares, in der Praxis bewährtes, komplexes Simulationsmodell zum Einsatz kommen, in dem ein Großteil des aktuellen Wissens im Bereich der Stoffhaushaltssimulation zusammengeführt ist. Da dieses Modell modular aufgebaut ist, kann bei der Auswahl der zur Anwendung kommenden Module auf die Erfahrungen mit den beiden anderen Modellen zurückgegriffen werden. Die im ATV-FGSM empfohlenen und vorgegebenen Parameter, die auf einem umfangreichen Expertenwissen beruhen, sollen bei der Anwendung nur in dem Maße modifiziert werden, wie es zur Anpassung an die Messdaten unabdingbar erscheint. Auch in Bezug auf die Anwendung des ATV-FGSM werden weitergehende Anforderungen an die Datenerhebung abgeleitet.

Bewertender Vergleich: Auf Basis der Simulationsergebnisse können letztlich alle drei Modelle bewertend verglichen werden. Hierdurch wird es möglich, Empfehlungen für deren Anwendungsbereiche zu geben. Damit ist dieser bewertende Vergleich Grundlage für die nachfolgenden Kapitel, in denen modellgestützte Systemanalysen und prognostische Simulationen durchgeführt werden sollen.

8.2 Verfügbare Modellansätze

Die Geschichte der modellhaften, mathematischen Beschreibung des Stoffhaushalts von Fließgewässern reicht nahezu achtzig Jahre bis zu den grundlegenden Arbeiten von Streeter und Phelps (1925) zurück. Seit dieser Zeit wurden zahlreiche Modelle mit unterschiedlicher Komplexität entwickelt. Im Folgenden werden die wichtigsten Entwicklungsschritte und zurzeit verfügbare Modelle kurz erläutert. Dabei beschränke ich mich auf deterministische Ansätze, da nur mit diesen systemanalytische Betrachtungen möglich sind (Beck 1987; Chapra 1997; Reichert 1994b). Für umfassendere Übersichten sei an dieser Stelle auf die Literatur verwiesen (z.B. Ambrose et al. 1996; BMU 1998; Borchardt 1999; Rauch et al. 1998).

Strömungs- und Transportmodelle

Fließgewässergütemodelle kann man prinzipiell in zwei Bestandteile unterteilen: Das zugrunde liegende Strömungs- und Transportmodell und das darauf fußende Stoffhaushaltsmodell. Bei großräumigen Stoffhaushaltssimulation wird die Strömung im Allgemeinen in eindimensionaler (querschnittsgemittelter) Form modelliert (Rauch et al. 1998; Shanahan et al. 2001). Im einfachsten Fall einer stationären Betrachtung werden häufig Mischungsreaktoren in Reihe geschaltet (z.B. Boes 1975). Für instationäre Betrachtungsweisen wird hingegen zumeist von den eindimensionalen *Saint-Venant-Gleichungen* ausgegangen. Wobei die Strömung mit dem *diffusiven Wellenansatz* im Allgemeinen ausreichend genau beschrieben wird (siehe Kapitel 2.2.1).

In den eindimensionalen Modellansätzen werden Transport und Ausbreitung der Wasserinhaltsstoffe zumeist mit der eindimensionalen *Advektions-Dispersions-Gleichung* beschrieben (siehe Kapitel 2.2.2).

Stoffhaushaltsmodelle

Die entscheidenden Unterschiede zwischen den verfügbaren Ansätzen zur Fließgewässergütesimulation liegen zumeist in den Stoffhaushaltsmodellen begründet (Rauch et al. 1998). Die Komplexität der Ansätze und die Anzahl der beschriebenen Güteparameter nahm im Laufe der Entwicklung beständig zu: In der Originalarbeit von Streeter und Phelps (1925) wird lediglich der sauerstoffzehrende Abbau einer organischen Verunreinigung (BSB) im Freiwasser unter Berücksichtigung der Wiederbelüftung beschrieben. Dieser Ansatz wurde später zunächst um die Sedimentation von BSB (Dobbins 1964) sowie um die Nitrifikation und die Sauerstoffzehrung am Sediment erweitert (TWDB 1971). In späteren Jahren wurde die Bedeutung der biogenen Belüftung erkannt. Dies führte zu Modellen, die die Sauerstoffproduktion durch Photosynthese aber auch die Zehrung durch Respiration berücksichtigten (Schreiner 1977; Wolf 1974). Diese Ansätze beinhalteten zum Teil bereits detaillierte Beschreibungen der Einzelprozesse, können aber prinzipiell als direkte Nachfolger des Streeter-Phelps Modells angesehen werden.

Einen grundlegend anderen Ansatz wählten hingegen Boes (1975) und Boes et al. (1977) mit dem Biozönotischen Modell. In diesem wird das komplexe Zusammenwirken innerhalb des biozönotischen Nahrungsnetzes – von den Bakterien bis zu den Fischen – nachgebildet. Die Konzentration von Sauerstoff und BSB wird dann aus dem Zustand der Biozönose, d.h. der relativen Häufigkeit der einzelnen trophischen Gruppen, abgeleitet (siehe auch Mödinger 2001).

In Tabelle 8.1 sind einige der heute gebräuchlichen Modelle zusammengestellt. Das weltweit am weitesten verbreitet Modell ist wohl das von der US Environmental Protection Agency entwickelte QUAL2E (Brown und Barnwell 1987). Dieses Modell steht in der Tradition des Streeter-Phelps-Ansatzes, wobei die Dynamik des Phytoplanktons unter Berücksichtigung der Nährstoffe Phosphor und Stickstoff, der Temperatur und des Lichteinflusses explizit simuliert wird. Die Sedimente werden über Quellen- und Senkenterme berücksichtigt. Da das Modell für tiefe, häufig staugeregelte Gewässer entwickelt wurde, sind benthische Algen oder Makrophyten nicht berücksichtigt. QUAL2E kann aufgrund des zugrunde liegenden einfachen Strömungsmodells in seiner ursprünglichen Form jedoch nicht für instationäre Abfluss- bzw. Belastungsverhältnisse verwendet werden (Chapra 1997; Shanahan et al. 1998).

Die Modelle WASP4 (Ambrose et al. 1988) und DESERT (Ivanov et al. 1996) beschreiben die selben Zielgrößen wie QUAL2E. In Salmon-Q (Wallingford Software 1994) wird darüber hinaus Silizium aufgenommen, was unbedingt erforderlich ist, sofern die Nährstofflimitierung von Diatomeen berücksichtigt wird. Mit Salmon-Q können zudem benthische Algen und Bakterien explizit simuliert werden.

Das modular aufgebaute Mike11 des DHI (Danish Hydraulic Institute 1992) ermöglicht darüber hinaus die Modellierung höherer trophischer Ebenen und beinhaltet ein Modul für die Umsätze im Sediment. Hiermit markiert Mike11 einen weiteren entscheidenden Fortschritt in der Modellentwicklung. Durch die explizite Anbindung der Gewässersedimente mit Sedimentation, Erosion und Stoffumsätzen werden die Massenbilanzen für die simulierten Stoffe geschlossen. In Gewässern bei denen das Sediment merklichen Einfluss auf den Stoffhaushalt hat – in erster Linie flache, eutrophe Gewässer – werden sinnvolle Langzeitsimulationen erst hierdurch ermöglicht (Shanahan et al. 1998).

In Deutschland wurde die Gütesimulation großer Fließgewässer seit den achtziger Jahren vor allem an der Bundesanstalt für Gewässerkunde voran getrieben. Auf Grundlage der Arbeiten von Wolf (1974) und Boes et al. (1977) sowie dem Modell RMA 12 (Lyons und Bach 1978), wurde das Gewässergütemodell der BfG entwickelt (Kirchesch et al. 1999). Dieses modular aufgebaute Modell, das später auch als QSIM bezeichnet wurde, wurde und wird ständig weiterentwickelt. Wenngleich es hauptsächlich in Bundeswasserstraßen und somit in tiefen Gewässern eingesetzt wird, enthält es inzwischen neben zwei planktischen Algenklassen (Grünalgen, Kieselalgen) und planktischen Primärkonsumenten (Rotatorien) auch Bausteine zur Beschreibung von Makrophyten, benthischen Algen und benthischen Filtrierern (Muscheln) (Kirchesch und Schöl 1999; Schöl et al. 2002). Damit handelt es sich bei QSIM um eine sehr komplexes ökologisches Modell. Die Massenbilanz hinsichtlich sedimentativer und erosiver Stoffübergänge zwischen Freiwasser und Sediment sind bislang aber nicht geschlossen. In einer neuen Modellversion sollen Erosions- und Sedimentationsvorgänge gemäß den Vorgaben von Kern (1997) berücksichtigt werden (Kirchesch, mündliche Mitteilung 2001). QSIM ist allerdings nicht öffentlich verfügbar.

Tab. 8.1: Gebräuchliche Simulationsmodelle für den Stoffhaushalt von Fließgewässern.

Modelle	Zielgrößen und Module	Sauerstoff und BSB	Stickstoff	Phosphor	Silizium	Phytoplankton	planktische Konsumenten	benthische Organismen	Bakterien	Sedimentmodul	Sensitivitätsanalysen	automatisierte Kalibrierung
QUAL2E	Brown und Barnwell (1987)	+	+	+	-	+	-	-	-	-	+	-
WASP4	Ambrose et al. (1988)	+	+	+	-	+	-	-	-	-	-	-
Salmon-Q	Wallingford Software (1994)	+	+	+	+	+	-	+	+	-	-	-
QSIM	Kirchesch und Schöl (1999)	+	+	+	+	+	+	+	-	(+)	-	-
Mike11	Danish Hydraulic Institute (1992)	+	+	+	+	+	+	+	+	+	-	-
ATV-FGSM	ATV (1998)	+	+	+	+	+	+	+	+	(+)	-	-
DESERT	Ivanov et al. (1996)	+	+	+	-	+	-	-	-	-	+	+
AQUASIM	Reichert (1994; 1998)	Prozesse frei programmierbar / Sedimentmodul möglich									+	+
RWQM1*	Reichert et al. (2001)	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

* Modellkonzept, kein fertiges Softwareprodukt – in diversen Abwandlungen in AQUASIM programmiert

Das in der ATV Arbeitsgruppe „Modellrechnungen in der Wassergütwirtschaft“ entwickelte Gütesimulationsmodell (ATV-FGSM) basiert in wesentlichen Teilen auf den selben Grundlagen wie QSIM und ist öffentlich verfügbar. Das ATV-FGSM wird in Kapitel 8.6 näher beschrieben.

Bei dem Modelpaket AQUASIM (Reichert 1994b; Reichert 1998b) handelt es sich im Gegensatz zu allen bisher beschriebenen Modellen um kein fertiges Gewässergütemodell. AQUASIM ist vielmehr eine Plattform in der verschiedene Kompartimente, wie z.B. ein „River Section Compartment“, zur Verfügung stehen. Der Anwender kann nun innerhalb eines solchen „River Section Compartments“ vorgeben wie die Strömungs- und Transportprozesse modelliert werden sollen. Mehrere Kompartimente können zu einem zusammenhängenden Flusslauf verbunden werden. In einem weiteren Schritt können anschließend beliebige Prozesse – im vorliegenden Fall also die relevanten Stoffhaushaltsprozesse – formuliert und in das Modellsystem implementiert werden. Die Sedimente können in AQUASIM mit Hilfe eines anderen Kompartimenttyps z.B. einem „Biofilm Reactor Compartment“ simuliert und mit den „River Section Compartments“ verknüpft werden. Das somit vom Benutzer vorgegebene gekoppelte Gleichungssystem aus algebraischen Gleichungen und Differentialgleichungen wird innerhalb von AQUASIM numerisch mit dem sehr robusten Programm DASSL gelöst (Brenan et al. 1989; Petzold 1983). AQUASIM bietet dem Modellierer damit also große Freiheiten hinsichtlich der Prozessbeschreibungen, während er sich nicht mit der numerischen Lösung der Gleichungssysteme befassen muss. Andererseits ist die Modellentwicklung und -implementierung mit wesentlich größerem Aufwand verbunden als die Implementierung vorgefertigter Modelle. Zudem verlangt insbesondere die Entwicklung und Implementierung des Stoffhaushaltsmodells ein hohes Maß an Verständnis für das zu modellierende System. Die zweite Voraussetzung ist unter wissenschaftlichen Gesichtspunkten als Vorteil anzusehen, ist aber hinsichtlich der Praxistauglichkeit als kritisch zu bewerten. Über die Modellentwicklung und -anwendung hinaus bietet AQUASIM, ähnlich wie DESERT, Möglichkeiten zur automatisierten Sensitivitätsanalyse und Modellkalibrierung.

Beim River Water Quality Model No. 1 (RWQM1) handelt es sich um ein Modellkonzept, das nicht als Softwareprodukt vorliegt. RWQM1 wurde von der IWA (früher IAWQ) Arbeitsgruppe „River Water Quality Modeling“ erarbeitet und in einer Serie von Aufsätzen dargelegt (Reichert et al. 2001b; Shanahan et al. 2001; Vanrolleghem et al. 2001), deren Inhalt in etwas ausführlicherer und leicht abgewandelter Form auch in Reichert et al. (2001a) enthalten ist. Die IWA Arbeitsgruppe ging bei der Ableitung von RWQM1 zunächst von den zur Verfügung stehenden Fließgewässergütesimulationsmodellen und deren Defiziten aus (Rauch et al. 1998; Shanahan et al. 1998). Hierauf aufbauend formulierte sie wesentliche Anforderungen für die Simulation des Stoffhaushalts in Fließgewässern (Somlyody et al. 1998). Hierzu zählten unter anderem: (1) die einheitliche Formulierung der Stoffumsatzprozesse, in einer Form die direkt kompatibel mit verfügbaren Modellen zur Abwasserreinigung (ASM 1...3; Gujer et al. 1999) ist und (2) die Einbeziehung des Sediments, um die Massenbilanzen für die modellierten Stoffe zu schließen. Auf Grundlage dieser Forderungen leiten Reichert et al. (2001b) ein Modellkonzept ab, in dem mit insgesamt 30 Prozessen 24 Zielgrößen beschrieben werden. Aufgrund dieser Komplexität ist das komplette Modell in der Praxis der Gewässergütesimulation kaum sinnvoll einsetzbar. Es enthält und beschreibt jedoch alle als relevant erachteten Prozesse und Zielgrößen und stellt somit eine umfassende Grundlage für ein zu wählendes, einfacheres Modell dar. Vanrolleghem et al. (2001) zeigen in welcher Weise das Gesamtmodell vereinfacht werden kann. Der Grad der Vereinfachung sollte sich an den verfügbaren Daten für Rand- und Anfangsbedingungen, kinetische Faktoren und stöchiometrische Konversionsfaktoren orientieren. Der Wert des RWQM1 liegt demzufolge vor allem in der rigorosen theoretischen Ableitung der relevanten Prozesse und deren einheitlicher Formulierung. Vereinfachte Formen von RWQM1 wurden in zwei Fallstudien bereits erfolgreich zur Simulation eingesetzt (Borchardt und Reichert 2001; Reichert 2001), wobei AQUASIM verwendet wurde, um die Modelle zu implementieren.

8.3 Modellgebiet

Gegenstand der Simulationen ist der mittlere Neckar zwischen der ersten Staustufe bei Deizisau und der Enzmündung bei Besigheim (Abb. 8.2). Der 63 km lange Neckarabschnitt umfasst inklusive der Haltung Deizisau insgesamt 13 Stauhaltungen. In diesem abflussarmen Abschnitt ist auch zukünftig keine nachhaltige Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts zu erwarten (Pinter 2000). Zudem besitzt er Modellcharakter für andere Bundeswasserstraßen mit geringen Abflüssen, wie Saar und Fulda (Müller 1993).

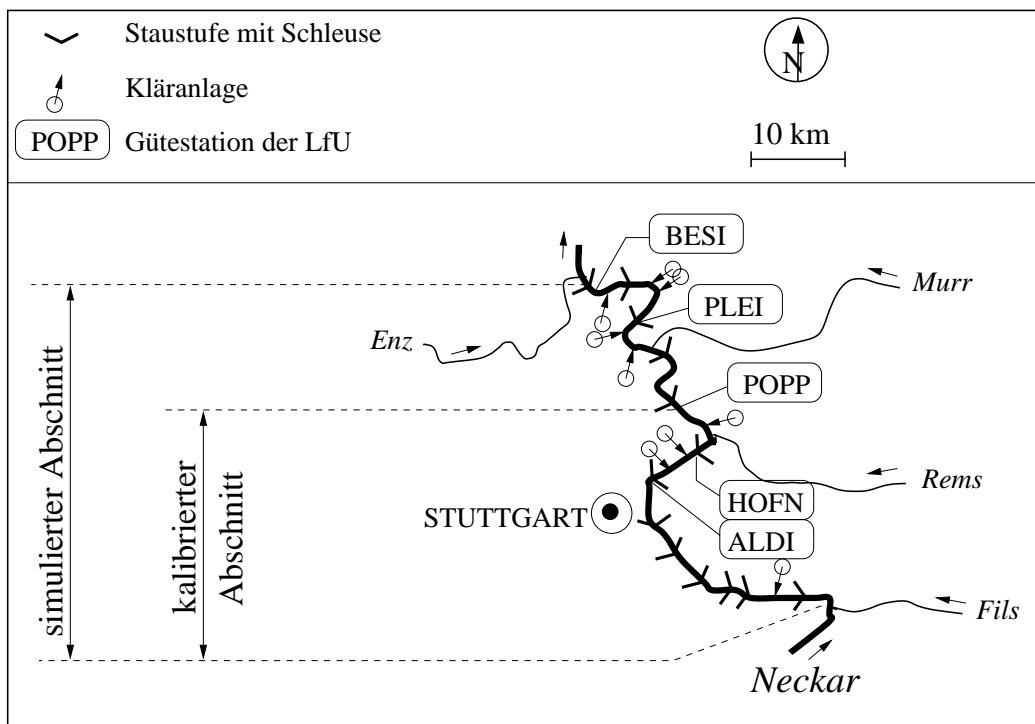


Abb. 8.2: In den Simulationen berücksichtigter Abschnitt des Neckars.

Randbedingungen und Datengrundlage: Innerhalb des modellierten Abschnittes münden insgesamt 9 Kläranlagen direkt in den Fluss (Abb. 8.2). Abflüsse und Stoffkonzentrationen für die Kläranlagen gehen aus der Eigenüberwachung hervor. Die Daten für den größten Einleiter im Abschnitt, die Kläranlage Stuttgart-Mühlhausen wurden von der Stadt Stuttgart in ihrer zeitlichen Auflösung zur Verfügung gestellt und so in den Modellen berücksichtigt. Für alle anderen Kläranlagen stellte der ATV-DVWK Landesverband Baden-Württemberg mittlere Abfluss- und Konzentrationswerte zur Verfügung, die in den Modellen als stationär betrachtet wurden. Neben den genannten neun Kläranlagen wurden die beiden wichtigsten Nebenflüsse Rems und Murr in allen verwendeten Modellen berücksichtigt. Darüber hinaus befinden sich im betrachteten Abschnitt vier Wärmekraftwerke, deren Einfluss auf die Wassertemperatur in den Modellen berücksichtigt wurde, in den untersuchten Jahren jedoch zumeist von geringer Bedeutung war. Am oberstromigen Rand des Modellgebiets, oberhalb der Staustufe Deizisau befindet sich eine Probenahmestelle der LfU Baden-Württemberg, an der Gewässergütedaten in einem zweiwöchentlichen Turnus erhoben werden. Für die Mündungen der beiden Nebenflüsse liegen Gütedaten in vierwöchentlicher Auflösung vor. Innerhalb des modellierten Abschnittes befinden sich zudem fünf Gütestationen an denen neben den zweiwöchentlichen Proben unter anderem die Sauerstoffkonzentration und die Wassertemperatur kontinuierlich aufgezeichnet werden (Abb. 8.2).

8.4 Das Basismodell zur Simulation des Stoffhaushalts: BWQM

Die verfügbaren, relativ einfachen Modelle wie QUAL2E oder WASP erfüllen die Anforderungen an das Basismodell nicht vollständig, da Silizium als ein maßgeblicher Parameter für das Wachstum des von Diatomeen dominierten Phytoplanktons nicht enthalten ist (Tab. 8.1). Daher war es erforderlich, ein adäquates Modell abzuleiten und zu implementieren. Als Plattform zur Implementierung bietet sich das Programmpaket AQUASIM 2.0 (Reichert 1998a; Reichert 1998b) an. Zum einen erlaubt es das Programmpaket die Stoffhaushaltsprozesse nach eigenen Vorgaben frei zu programmieren. Hierdurch kann das Gütesimulationsmodell schrittweise entwickelt, angepasst und zu einem späteren Zeitpunkt gegebenenfalls relativ leicht weiterentwickelt werden. Zum anderen bietet AQUASIM mit DASSL einen zuverlässigen, vielfach erprobten Lösungsalgorithmus für das gekoppelte System aus Differentialgleichungen und algebraischen Gleichungen. Außerdem wurden die Gewässerstrukturdaten des schiffbaren Neckars bereits von Kern et al. (1996) in AQUASIM implementiert und das Programmpaket erfolgreich zur Simulation des Gastracerversuchs angewandt (Kapitel 6.3).

8.4.1 Strömungs- und Transportmodell

Strukturdaten: Ausgangspunkt für das Strömungs- und Transportmodell waren die für nahezu den gesamten Bereich der Bundeswasserstraße Neckar (km 203,3 bis km 8,2) bereits in die Programmversion AQUASIM 8.1 implementierten Gewässerstrukturdaten. Hierbei wurde jedem Wasserstand auf Grundlage von Sohlpeilungsdaten der Bundesanstalt für Gewässerkunde ein durchflossener Querschnitt, ein benetzter Umfang und somit ein hydraulischer Radius sowie eine Wasserspiegelbreite zugeordnet (Kern et al. 1996). An einigen Stellen mussten Ersatzprofile vorgegeben werden (Details in Kern et al. 1996). Insgesamt wurde der 195 km lange Abschnitt in 43 „River Section Compartments“ eingeteilt. Der hier simulierte, 63 km lange Abschnitt unterteilt sich in 20 „River Section Compartments“. Die Unterteilung erfolgte dabei an den Staubauwerken sowie an signifikanten Nebenflüssen bzw. Einleitern (Wärmekraftwerke/Klärwerk Stuttgart-Mühlhausen).

Strömung: Die Strömung wird mit der *diffusiven Wellenapproximation* der *Saint-Venant-Gleichungen* beschrieben. Das Reibungsgefälle (Energiefinie) wird mit der *Strickler-Gleichung* parametrisiert. Für den gesamten schiffbaren Neckar wird hierbei ein konstanter Stricklerbeiwert von $40 \text{ m}^{1/3}/\text{s}$ verwendet, der anhand von Geschwemmsellinien von Hochwasserereignissen angepasst wurde (Karnahl 1998). Als interne Randbedingungen werden im Oberwasser der Staubauwerke die jeweiligen Normalstauhöhen vorgegeben. Am oberstromigen Rand sowie gegebenenfalls an den Zuflüssen und Einleitern wird eine Zuflussganglinie vorgegeben. Zudem können für jedes der Kompartimente Ganglinien für einen lateralen Zu- bzw. Abfluss je Längeneinheit vorgegeben werden (Reichert 1994b).

Transport: Der Transport wird mit der eindimensionalen *Advektions-Dispersions-Gleichung* simuliert. Der Längsdispersionskoeffizient wird gemäß der Gleichung von Fisher et al. (1979) abgeschätzt (Glei-

chung 2.4). Für den oberstromigen Rand, die Zuflüsse bzw. Einleiter sowie für die lateralen Zuflüsse werden Konzentrationsganglinien für die zu simulierenden Wasserinhaltsstoffe vorgegeben. Das Transportmodell wurde auf Grundlage eines Tracerexperiments für die Fließstrecke zwischen Obertürkheim (Neckar-km 189,5) und Poppenweiler (Neckar-km 164,9) als adäquat bewertet (siehe Kapitel 6.3.3).

8.4.2 Das Stoffhaushaltsmodell in BWQM

Wahl des Modellansatzes

Auf Grundlage der empirischen Analyse des Stoffhaushalts im Neckar (Kapitel 5) ist zu folgern, dass der Sauerstoffhaushalt in erster Linie von der Dynamik des Phytoplanktons gesteuert wird. In dem durchgehend recht tiefen und trüben Gewässer ist der Einfluss von Makrophyten und benthischen Algen hingegen zweifellos von untergeordneter Bedeutung. Der einfachste verfügbare deterministische Ansatz der Sauerstoff und Phytoplankton beschreibt und zudem weit verbreitet und akzeptiert ist, liegt dem Modell QUAL2E zugrunde (Tab. 8.1). Daher wurde zunächst von diesem Ansatz ausgegangen.

Die empirischen Analysen legen zwar nahe, dass das Algenwachstum nicht durch die Nährstoffe Phosphor oder Stickstoff limitiert wird. Dennoch sollten P und N simuliert werden, um eine umfassende Systemanalyse und spätere Szenarien zur Nährstofflimitierung zu ermöglichen. Da das Phytoplankton im Neckar offenbar ganzjährig von Kieselalgen dominiert wird (Backhaus und Matthias 1997a; Backhaus und Matthias 1997b), muss neben P und N als weiterer möglicherweise wachstumslimitierender Nährstoff auch Silizium modelliert werden. Somit erstreckt sich die Simulation auf die 9 Zielgrößen, die im grau unterlegten Bereich von Abbildung 8.3 aufgeführt sind. Mit Ausnahme von organisch gebundenem Stickstoff und Phosphor liegen zu diesen Güteparametern Messdaten aus dem Neckar zumeist in 14-täglicher Auflösung vor (Hertel und Lehmann 2000). Die Phytoplanktondaten stehen dabei quantitativ als Chl-a Konzentrationen zur Verfügung. Messungen zur Konzentration des an totes organisches Material gebundenen Stickstoffs (N-org) und Phosphors (P-org) liegen nur vereinzelt vor. Diese Messungen weisen jedoch darauf hin, dass beide Größen nur einer geringen zeitlichen Schwankung unterliegen, so dass sich Randbedingungen mit konstanten Werten gut annähern lassen. Alle 9 Zielgrößen können auch für die einleitenden Kläranlagen aus den Daten der Eigenüberwachung abgeleitet werden. Folglich kann die dritte Anforderung an das Basismodell, wonach nur solche Zielgrößen simuliert werden sollten zu denen auch Messdaten vorliegen, zumindest näherungsweise erfüllt werden.

Geht man von den vorhandenen Daten aus und vereinfacht das RWQM No. 1 gemäß den Vorschlägen von Vanrolleghem et al. (2001), gelangt man ebenfalls zu einem Modell, das dem QUAL2E Ansatz sehr nahe kommt. Die weite Verbreitung und Akzeptanz dieses Ansatzes ist vermutlich also auch darauf zurückzuführen, dass der Datenbedarf aus üblichen Monitoringprogrammen größtenteils abgedeckt wird.

Mit dem ursprünglichen QUAL2E Modell sind infolge des einfachen hydraulischen Ansatzes keine dynamischen Simulationen möglich. Im vorliegenden Fall liegt jedoch ein dynamisches, auf den Saint Venant Gleichungen basierendes Strömungs- und Transportmodell zugrunde und lediglich das Stoffhaushaltsmodell fußt auf der Struktur von QUAL2E. Somit sind dynamische Simulationen möglich.

Struktur des Stoffhaushaltsmodells

Die grundlegende Struktur des Basismodells zur Simulation des Stoffhaushalts BWQM (Basic Water Quality Model) ist im grau unterlegten Bereich von Abbildung 8.3 schematisch dargestellt. Abbildung 8.3 enthält darüber hinaus die als EWQM bezeichnete Erweiterung des Modells, die in Kapitel 8.5 näher erläutert wird.

Wie bereits erwähnt basiert die Struktur des BWQM prinzipiell auf QUAL2E (Brown und Barnwell 1987), wobei jedoch einige Modifikationen vorgenommen wurden: Die Nitrifikation wurde zu einem einstufigen Prozess unter Vernachlässigung des Nitrits zusammengefasst. Da beide Schritte der Nitrifikation ohne explizite Berücksichtigung der beteiligten nitrifizierenden Bakterienpopulationen simuliert werden, das Zwischenprodukt Nitrit nahezu immer in minimalen Konzentrationen auftritt und zudem lediglich Nitrat und Ammonium als Nährstoffe aufgenommen werden, verliert man durch diese Vereinfachung keine wesentlichen Informationen. Vielmehr ist die Zusammenfassung im Sinne einer möglichst

einfachen Programmstruktur geradezu geboten. Als zusätzliche Zielgröße musste Silizium in das Modell aufgenommen werden, um die mögliche Wachstumslimitierung der dominanten Kieselalgen durch diesen Stoff zu berücksichtigen. Auch in Bezug auf die Interaktionen mit dem abgelagerten Sediment wurden auf Grundlage der durchgeführten Feldmessungen zum Stoffübergang an der Grenzfläche Sediment-Wasser (Kapitel 7) Änderungen im Vergleich zu QUAL2E vorgenommen. So wurde eine Senkenwirkung für Nitrat aufgenommen, da die Denitrifikation in den anoxischen Sedimenten offenkundig zu einem Nitratverlust aus dem Freiwasser führt. Zudem wird im BWQM auf Grundlage der Feldmessungen davon ausgegangen, dass die Sedimente Phosphat binden, wohingegen in QUAL2E von einer Freisetzung ausgegangen wird.

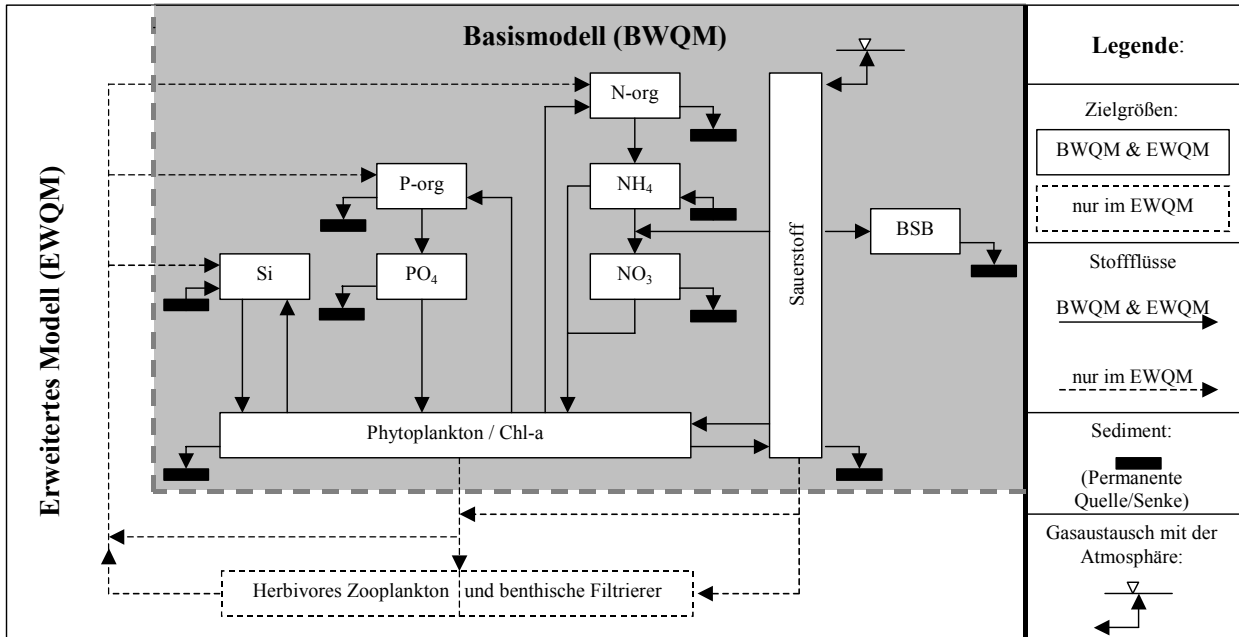


Abb. 8.3: Strukturen des zur Simulation des Stoffhaushalts im Neckar entwickelten deterministischen Basismodells (BWQM) und dessen Erweiterung (EWQM).

Maßgebende Modellgleichungen und Parameter

Eine komplette Beschreibung aller Modellparameter, der verwendeten algebraischen Beziehungen und der Differentialgleichungen, die zur Simulation der 9 Zielgrößen verwendet wurden, findet sich im Anhang. Da im vorliegenden Fall der Sauerstoff und als Hauptsteuergröße das Phytoplankton von zentraler Bedeutung sind, wird hier auf die für diese beiden Zielgrößen verwendeten Gleichungen näher eingegangen.

Sauerstoff: Die durch die Stoffumsätze bedingten Konzentrationsänderungen des Sauerstoffs werden im BWQM durch die folgende Differentialgleichung beschrieben:

$$\frac{dO_2}{dt} = -K_1 \cdot \Theta_{K1}^{(Tw-20)} \cdot BSB - 4,3 \cdot B_1 \cdot O_{2,corrB1} \cdot \Theta_{B1}^{(Tw-20)} \cdot NH_4 + k_2 \cdot \Theta_{k2}^{(Tw-20)} \cdot (O_{2,sat} - O_2) - \frac{SSB}{y} \cdot \Theta_{SSB}^{(Tw-20)} + a_3 \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - a_4 \cdot R \cdot \Theta_R^{(Tw-20)} \cdot Chl \tag{8.1}$$

Hierin sind Tw die Wassertemperatur, BSB der biochemische Sauerstoffbedarf ohne Berücksichtigung von Nitrifikation und lebender Biomasse, $O_{2,corrB1}$ ein Hemmfaktor für die Nitrifikation bei Sauerstoffmangel, NH_4 Ammoniumstickstoff, $O_{2,sat}$ die Sättigungskonzentration des Sauerstoffs, y die mittlere Abflusstiefe und Chl die Chlorophyll-a Konzentration. K_1 ist die BSB-Abbaurrate bei 20°C, B_1 die Nitrifikationsrate bei 20°C und ausreichender O_2 Versorgung, SSB der Sauerstoffbedarf je Flächeneinheit Sediment bei 20°C, k_2 ist die Wiederbelüftungsrate bei 20°C und M_{max} die maximale Wachstumsrate des Phytoplanktons unter optimalen Bedingungen. Die maximale Wachstumsrate wird um den Faktor F_{tot} redu-

ziert, der Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann und die Wirkung von Licht- und Nährstoffmangel sowie der Temperatur zusammenfasst. Der Parameter R ist die zusammengefasste Rate all jener Algenverlustprozesse, bei denen Sauerstoff verbraucht wird. R wird häufig vereinfachend als Respirationsrate bezeichnet (siehe unten). Der BSB-Abbau, die Wiederbelüftung, der Sauerstoffverlust an die Sedimente und die sogenannte Respirationsrate werden mit prozessspezifischen Arrhenius-Temperaturkorrekturfaktoren Θ von 20°C auf die tatsächliche Wassertemperatur korrigiert. Die Parameter a_3 und a_4 sind stöchiometrische Faktoren, die angeben wie viel Sauerstoff je produzierter Masseneinheit Chl-a bei der Photosynthese erzeugt wird bzw. je abgebauter Masseneinheit Chl-a bei der Respiration verbraucht wird. Neben dem advektiv-dispersiven Transport wird die Sauerstoffkonzentration also durch sechs gewässerinterne Prozesse beschrieben: Den BSB-Abbau, die Nitrifikation, den Gasaustausch mit der Atmosphäre, den Sauerstoffübergang ins Sediment, die Primärproduktion des Phytoplanktons und die sauerstoffzehrenden Algenverluste.

Phytoplankton: Die gewässerinternen Umsetzungen des Phytoplanktons werden auf Grundlage der Chlorophyll-a Konzentration wie folgt beschrieben:

$$\frac{dChl}{dt} = M_{\max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - R \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} \cdot Chl - \frac{S_{Chl}}{y} \cdot Chl \quad (8.2)$$

Wobei S_{Chl} die mittlere Sinkgeschwindigkeit des Phytoplanktons (unter turbulenten Bedingungen) repräsentiert. Neben den bereits bekannten Prozessbeschreibungen für das Algenwachstum und die sogenannte Respiration werden also Sedimentationsverluste in sehr simpler Weise beschrieben. Eine komplexere Beschreibung der Sedimentationsverluste, die die Turbulenzverhältnisse im Gewässer mit berücksichtigt, unterbleibt, da die Beschreibung des Sinkverhaltens der pelagischen Algen mit großen Unsicherheiten behaftet ist (Biswas 1997; Chapra 1997).

Wassertemperatur: Der Wassertemperatur kommt infolge der Temperaturabhängigkeit nahezu aller Gewässergüteprozesse eine besondere Bedeutung zu. Um die Wassertemperatur zu berücksichtigen können alle relevanten Prozesse des Wärmehaushalts innerhalb von AQUASIM simuliert werden. Ein entsprechendes Wärmehaushaltsmodell wurde entwickelt und erfolgreich eingesetzt (Li 2002). Im Gewässerabschnitt zwischen Plochingen und der Enzmündung bei Besigheim liegen zum einen keine signifikanten abrupten Temperaturänderungen vor. Zum anderen gibt es in diesem Bereich ein besonders enges Temperaturmessnetz. In diesem Gewässerabschnitt kann die Wassertemperatur somit alternativ zur Simulation auch aus der zeitlich-räumlichen Interpolation der Messdaten gewonnen werden.

Effektive Respirationsrate R : Mit dem effektiven Parameter R wird im Wesentlichen die Wirkung der Basisrespiration, der Photorespiration, der Mortalität der Algen und des Fraßes durch Konsumenten (vor allem herbivores Zooplankton und filtrierende Muscheln) zusammengefasst. Als annähernd konstant bzw. nur von der Temperatur abhängig können hierbei nur die Basisrespiration und die Mortalität aufgefasst werden. Die Photorespiration ist hingegen eng an die Photosynthese gebunden, während der Fraß vor allem von der variablen Abundanz der Konsumenten abhängig ist. Die Modellierung der Sauerstoff- und Phytoplanktodynamik mit dem konstanten Parameter R stellt somit eine grobe Vereinfachung dar.

Darüber hinaus ist die im BWQM stark vereinfachte Beschreibung der Stoffflüsse zu beachten (Abb. 8.3), die ebenfalls mit dem effektiven Parameter R verknüpft ist: Im Modell führt die zusammengefasste Respiration unmittelbar zum Verbrauch von Sauerstoff (und der Freisetzung von Nährstoffen). Im tatsächlichen System gilt dies nur für die Basis- und die Photorespiration. Beim Absterben der Algen (Mortalität) wird hingegen zunächst totes organisches Material gebildet (im Modell BSB, P-org und N-org) und erst der nachfolgende Abbau dieses Materials führt zur Sauerstoffzehrung. Beim Fraß wird nur ein Teil der Algenbiomasse assimiliert, während der verbleibende Anteil ausgeschieden wird. Dieser ausgeschiedene Anteil führt wieder über den Umweg des BSB-Abbaus zur Sauerstoffzehrung. Der assimilierte Anteil führt hingegen erst durch die Respiration bzw. das Absterben der Konsumenten zur Sauerstoffzehrung (und Nährstofffreisetzung). Im vorliegenden Ansatz sind also auch die mit R verknüpften Stoffflusspfade stark vereinfacht (verkürzt) dargestellt (vgl. Kapitel 2.4.3).

Nährstofflimitierung des Algenwachstums: Die Gesamthemmung des Phytoplanktonwachstums F_{tot} ergibt sich aus dem Produkt der Effekte von Nährstoffmangel (F_{nutr}), nicht optimalen Temperaturen (F_{TW}) und Lichtmangel (F_{PAR}):

$$F_{tot} = F_{nutr} \cdot F_{TW} \cdot F_{PAR} \quad (8.3)$$

Hinsichtlich der Hemmung durch Nährstoffmangel wird vom Liebig'schen Minimumfaktor ausgegangen:

$$F_{nutr} = \text{MIN} \left\{ \begin{array}{l} \frac{PO_4}{K_{PO_4} + PO_4} \\ \frac{(NO_3 + NH_4)}{K_{Ninorg} + (NO_3 + NH_4)} \\ \frac{Si}{K_{Si} + Si} \end{array} \right\} \quad (8.4)$$

Hierin sind PO_4 die Konzentration algenverfügbaren Phosphors (Gesamtorthophosphat ausgedrückt als P), NO_3 Nitrat-Stickstoff, NH_4 Ammonium-Stickstoff und Si algenverfügbares (gelöstes) Silizium. K_{PO_4} , K_{Ninorg} und K_{Si} sind die Halbsättigungskonstanten der Nährstoffe Phosphor, Stickstoff und Silizium.

Temperatureinfluss auf das Algenwachstum: Zur Beschreibung des Einflusses der Wassertemperatur auf die Wachstumsrate der Algen wurde der ursprünglich in QUAL2E vorgesehene Arrhenius-Ansatz verworfen. Nach diesem Ansatz hätte sich eine stetige Zunahme der Wachstumsrate mit der Temperatur ergeben, der durch experimentelle Befunde widerlegt wurde (siehe Kapitel 2.4.3). Die Algengesellschaft im Neckar ähnelt offenbar über das gesamte Jahr der von Pöhlmann et al. (1989) als „Frühjahresformen des Cyclotella-Komplexes“ bezeichneten Artenzusammensetzung (Backhaus und Matthias 1997a; Backhaus und Matthias 1997b). In den Untersuchungen von Pöhlmann et al. (1989) konnten für diese von kleinen konzentrischen Diatomeen dominierte Algengesellschaft eindeutige Abhängigkeiten der Wachstumsrate von der Wassertemperatur aufgezeigt werden, wobei das Optimum bei 18°C lag (Abb. 2.7). Diese Zusammenhänge wurden für das vorliegende Modell mit einem einfachen linearen Ansatz wiedergegeben:

$$F_{Tw} = \begin{cases} 0,056 \cdot Tw & Tw < 18^\circ\text{C} \\ 1 - (Tw - 18) \cdot 0,09 & Tw \geq 18^\circ\text{C} \end{cases} \quad (8.5)$$

Hierbei ist zu beachten, dass die Annahme einer jahreszeitlich unveränderlichen Dominanz der kleinen zentrischen Kieselalgen auf Grundlage von Bestandsaufnahmen der Jahre 1994 bis 1996 abgeleitet wurde. Während anderer, insbesondere sehr warmer Jahre, kann es im Spätsommer möglicherweise zur Dominanz von Grünalgen kommen, deren Wachstumsoptimum bei höheren Temperaturen liegt (vgl. Backhaus 1980). Insofern stellt die gewählte, zeitlich konstante Temperaturabhängigkeit eine Vereinfachung dar.

Lichteinfluss auf das Algenwachstum: Bei der Ermittlung der Wachstumsreduktion durch Lichtmangel wird zunächst von der Globalstrahlung über der Wasseroberfläche ausgegangen. Hierzu können entweder Messdaten (z.B. der meteorologischen Stationen in Stuttgart bzw. Mannheim) oder extern berechnete Globalstrahlungsdaten in AQUASIM eingelesen werden. Zur externen Simulation der Globalstrahlung wurde der Ansatz nach Kasten et al. (1984) in einem Tabellenkalkulationsprogramm umgesetzt. Die damit in Abhängigkeit von der Jahres- und Tageszeit sowie des Wolkenbedeckungsgrades simulierte Globalstrahlung stimmte gut mit den Messwerten der DWD-Station Stuttgart überein. Die in W/m^2 vorliegenden Globalstrahlungsdaten werden mit Hilfe einer von Hoffmann (1977) anhand von Messungen im Neckar abgeleiteten empirischen Formel in photosynthetisch aktive Strahlung PAR (in $\mu\text{E/m}^2/\text{s}$) umgerechnet. Zusätzlich wird angenommen, dass unabhängig vom Einstrahlungswinkel 10 % der Strahlung an der Wasseroberfläche reflektiert werden (Auer und Effler 1990). Um die Abschwächung der Strahlung in der Wassersäule zu ermitteln wird zunächst ein Extinktionsfaktor TR in Abhängigkeit vom Chl-a Gehalt und der nicht algenbürtigen Schwebstoffkonzentration SPM berechnet (Chapra 1997; DiToro 1978). Die SPM Konzentration wird hierbei auf der Grundlage eigener Messungen (Haag et al. 1999) als Potenzfunktion in Abhängigkeit vom Abfluss vorgegeben (die zugehörigen algebraischen Beziehungen finden sich im Anhang).

Im ursprünglichen QUAL2E wird angenommen, dass die durch Integration über die gesamte Wassertiefe ermittelte mittlere PAR repräsentativ für die Strahlung ist, die den suspendierten Algen zur Photosynthese zur Verfügung steht. Dieser statische Ansatz wurde verworfen, da er die infolge der vertikalen Durchmischung auftretenden dynamischen Lichtwechseleffekte nicht berücksichtigt (siehe Kapitel 2.4.3). Dieser Durchmischungseffekt ließe sich unter Berücksichtigung des vertikalen turbulenten Diffusionskoeffizien-

ten (z.B. Fisher et al. 1979) mit Hilfe eines von Pahl-Wostl und Imboden (1990) vorgeschlagenen semiempirischen Ansatzes simulieren. Hierfür müssten allerdings 6 zusätzliche, für die im Neckar dominierende Algengesellschaft nicht bekannte, physiologische Modellparameter eingeführt werden, die aus einer inversen Kalibrierung nicht zu identifizieren sind (Reichert 1994b).

Daher wurde im Einklang mit den von Pöhlmann (1989) am Main gewonnenen Ergebnissen ein wesentlich einfacherer Ansatz gewählt: Danach ist die Produktivität solange unabhängig von der Wassertiefe, wie die Wassertiefe kleiner/gleich der *euphotischen Tiefe* ist. Erst wenn die *euphotische Tiefe* überschritten wird, nimmt die Primärproduktion ab. Definiert man die *euphotische Tiefe* (y_{euph}) als jene Wassertiefe, in der noch 1% der unmittelbar unter der Wasseroberfläche eingehenden Strahlung ankommt, so ergibt sich unter Berücksichtigung des Extinktionsfaktors (TR) auf Grundlage des Lambert-Beer'schen Gesetzes:

$$y_{euph} = -\frac{\ln(0,01)}{TR} \quad (8.6)$$

Geht man davon aus, dass sich die Tiefenzone unterhalb von y_{euph} hinsichtlich der Produktion inert verhält, so ergibt sich für F_{PAR} die folgende Beziehung:

$$F_{PAR} = MIN \left\{ \begin{array}{l} \frac{PAR0}{K_{PAR} + PAR0} \\ \frac{y_{euph} \cdot PAR0}{y \cdot (K_{PAR} + PAR0)} \end{array} \right\} \quad (8.7)$$

Wobei PAR0 die photosynthetisch aktive Strahlung unmittelbar unterhalb der Wasseroberfläche und K_{PAR} die Halbsättigungskonstante für Strahlung sind. Dabei ist zu berücksichtigen, dass sich K_{PAR} ebenfalls auf die Strahlung unmittelbar unter der Wasseroberfläche bezieht. Damit ist der Wert von K_{PAR} nicht direkt mit Werten vergleichbar wie sie in QUAL2E Verwendung finden. Die von Pöhlmann (1989) vorgelegten Daten hinsichtlich der Produktivität für verschiedene Wassertiefen lassen sich mit Gleichung 8.7 gut beschreiben. Im BWQM wurde daher diesem einfachen Ansatz, der die Wirkung der vertikalen Durchmischung implizit beinhaltet, der Vorrang gegenüber komplexeren Ansätzen gegeben.

Darüber hinaus ist darauf hinzuweisen, dass der gewählte Monod-Ansatz in Gleichung 8.7 davon ausgeht, dass die mögliche Lichthemmung infolge zu intensiver Strahlung keine Rolle spielt. Diese Annahme ist aufgrund der Vertikaldurchmischung für Fließgewässer gerechtfertigt (Harris und Piccinin 1977; Schroeder 1997).

8.4.3 Sensitivitätsanalyse, Parameteridentifikation und Kalibrierung des BWQM

Motivation

Die Parameterwerte deterministischer Gewässergütemodelle sind im Allgemeinen und bei einem recht einfachen Ansatz wie dem BWQM im Besonderen nicht universell gültig, so dass eine Modellkalibrierung unumgänglich wird (Reichert und Vanrolleghem 2001; vanderPerk 1996). Die Modelle sind jedoch praktisch immer überparametrisiert, d.h. die Werte der verwendeten Parameter lassen sich nicht oder nur teilweise aus den vorliegenden Messdaten ableiten (Beck 1987; Brun et al. 2001). Dies gilt auch für das relativ einfache deterministische Stoffhaushaltsmodell BWQM. Die Frage nach der Wahl eines geeigneten Parametersatzes, der für die Kalibrierung des Modells herangezogen wird, ist daher bei nahezu jeder Modellanwendung zu beantworten, so auch im vorliegenden Fall. Bei den allermeisten Modellanwendungen basiert die Auswahl der für die Kalibrierung verwendeten Parameter auf der subjektiven Beurteilung des Modellanwenders. In der Fachliteratur werden jedoch einige Wege beschrieben, wie die Auswahl eines geeigneten Parametersatzes objektiviert werden kann (z.B. Beck 1987; Brun et al. 2001; Schladow und Hamilton 1997; vanderPerk und Bierkens 1997).

Diese objektivierten Verfahren basieren immer auf der Sensitivität der einzelnen Parameter, d.h. darauf wie stark die Unsicherheit eines Parameterwerts die Modellergebnisse beeinflusst. Die Sensitivitätsanalyse liefert also bereits an sich wichtige Informationen über die Bedeutung einzelner Parameter bzw. der mit diesen verknüpften Prozesse. Bei der Sensitivitätsanalyse lassen sich mehrere Ansätze unterscheiden:

Globale Sensitivitätsanalysen betrachten die Auswirkungen der Parametervariation im gesamten Unsicherheitsbereich. Für solche globalen Unsicherheitsanalysen sind im Allgemeinen Monte Carlo Simulationen und damit eine sehr große Anzahl an Simulationsläufen mit variierenden Parameterwerten erforderlich (z.B. vanderPerk 1998; vanderPerk und Bierkens 1997). Aufgrund der hohen Rechenzeit, ist die Anwendung globaler Sensitivitätsanalysen auf einfache Modelle beschränkt. Im Gegensatz hierzu werden bei lokalen Sensitivitätsanalysen lediglich die Änderungen der Modellergebnisse infolge kleiner Änderungen der Parameterwerte betrachtet, d.h. es wird nur die Sensitivität des Parameters für den aktuell gewählten Wert untersucht (Pastres et al. 1997). Für eine lokale Sensitivitätsanalyse von n Parametern müssen lediglich $n+1$ Simulationsläufe durchgeführt werden (Reichert 1994b), so dass diese Form der Sensitivitätsanalyse auch für komplexere Modelle angewendet werden kann. Der lokale Ansatz ist insbesondere dann zu empfehlen, wenn die Parameterwerte aus Vorinformationen bereits relativ sicher bekannt sind, also keine allzu großen Veränderungen durch die nachfolgende Kalibrierung zu erwarten sind. Über die genannten reinen Formen der Sensitivitätsuntersuchung hinaus gibt es noch zahlreiche andere Ansätze die im Allgemeinen als Mischformen der globalen und der lokalen Analyse verstanden werden können (Campolongo und Saltelli 1997).

Ziel dieses Abschnittes ist es eine objektivierte Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse der Parameter des BWQM vorzunehmen, einen Parametersatz zur Kalibrierung auszuwählen und das BWQM zu kalibrieren. Nachfolgend wird zunächst die Methodik der verwendeten lokalen Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse dargestellt. Anschließend werden die Ergebnisse vorgestellt und diskutiert.

Methodik

Die vorgestellte Methodik folgt weitgehend den Empfehlungen von Brun et al. (2001) zur Analyse der Identifizierbarkeit von Modellparametern in komplexen ökologischen Modellen. Ein wertvolles Fallbeispiel eines Seenmodells findet sich darüber hinaus bei Omlin et al. (2001).

Vor der Analyse wird festgelegt welche Messgrößen y_k , an welchen Messorten zu welchen Messzeiten für die Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse sowie für die anschließende Kalibrierung verwendet werden. Dabei ist darauf zu achten, dass möglichst Zeiträume mit einer hohen Dynamik gewählt werden, um eine maximale Identifizierbarkeit zu gewährleisten. Nachfolgend werden für die Zeit t , den Ort x und die Messgröße y einheitlich die Indices i , j und k verwendet, während der Index l für die Modellparameter Verwendung findet.

Sensitivitätsanalyse: In einem ersten Schritt werden alle zu untersuchenden Modellparameter einer Sensitivitätsanalyse unterzogen. Im vorliegenden Fall wurde eine lokale Sensitivitätsanalyse gewählt, da die Parameterwerte a priori bereits recht gut abgeschätzt werden konnten und der große Rechenaufwand eine globale Sensitivitätsanalyse ohnehin unmöglich machte.

Zunächst wurde die Unsicherheit aller zu untersuchenden Modellparameter PM_l auf Grundlage des a priori Wissens abgeschätzt. Mit Hilfe dieser geschätzten Unsicherheit ΔPM_l und der lokalen Sensitivität des Parameters kann die aus diesem einen Parameter resultierende Ungenauigkeit des Modellergebnisses für die Ziel- und Messgröße y_k mit der folgenden linearen Approximation berechnet werden:

$$\Delta y_{k,PM_l}(t,x) = \Delta PM_l \cdot \frac{\partial y_k}{\partial PM_l}(t,x) \quad (8.8)$$

Hierin ist $\Delta y_{k,PM_l}$ die aus der Unsicherheit des Parameters PM_l resultierende Ungenauigkeit der Zielgröße y_k , wobei diese von Ort und Zeit abhängig ist. Es ist zu beachten, dass $\Delta y_{k,PM_l}$ darüber hinaus von allen anderen Parameterwerten abhängt, da es sich um eine lokale Betrachtung handelt (Omlin et al. 2001). Die lokale absolute Sensitivität des Parameters hinsichtlich der Zielgröße $\partial y_k / \partial PM_l$ wird dabei mit finiten Differenzen berechnet. Hierzu werden die Modellergebnisse von zwei Simulationsläufen verglichen: Einem mit den ursprünglichen Parameterwerten und einem in dem lediglich der Wert des Parameters PM_l um 1% verändert wurde, während alle anderen Werte unverändert blieben.

Der mit Gleichung 8.8 berechnete Beitrag zur Unsicherheit hat dieselbe Dimension wie die betrachtete Ziel- bzw. Messgröße. $\Delta y_{k,PM_l}$ kann durch Division mit einem Skalierungsfaktor Sk_{y_k} dimensionslos gemacht werden. Über Sk_{y_k} lässt sich steuern wie stark die Daten einzelner Messgrößen in die Maßzahlen der Sensitivität eingehen. Beispielsweise ließen sich die unterschiedlichen Genauigkeiten der chemisch-

analytischen Messungen berücksichtigen, indem die Messungenauigkeit als Skalierungsfaktor verwendet wird. Im vorliegenden Fall wurden als Skalierungsfaktoren jedoch die Mittelwerte der jeweiligen Messgrößen verwendet, so dass alle Messungen – gleich welcher Zielgröße – gleich stark in die Maßzahlen der Sensitivität eingingen.

Wenn man die Quadrate dieses dimensionslosen Unsicherheitsbeitrages für einen Parameter PM_l über alle betrachteten Zielgrößen, Messorte und Messzeitpunkte aufsummiert, durch die Anzahl aller betrachteten Messungen n_{tot} teilt und die Quadratwurzel zieht, gelangt man zu folgendem Sensitivitätsmaß:

$$\delta_l^{SF} = \left[\frac{1}{n_{tot}} \cdot \sum_{k=1}^{n_{yk}} \sum_{j=1}^{n_{yk,x}} \sum_{i=1}^{n_{yk,z,t}} \left(\frac{\Delta PM_l}{Sk_{yk}} \cdot \frac{\partial y_k}{\partial PM_l}(t, x) \right)^2 \right]^{1/2} \quad (8.9)$$

Dieses Sensitivitätsmaß ist äquivalent zum Standardfehler definiert, weshalb es den Index SF erhält. Definiert man hingegen eine Maßzahl äquivalent zum mittleren differentiellen Fehler MDF so gelangt man zu folgender Gleichung:

$$\delta_l^{MDF} = \frac{1}{n_{tot}} \cdot \sum_{k=1}^{n_{yk}} \sum_{j=1}^{n_{yk,x}} \sum_{i=1}^{n_{yk,z,t}} \left| \frac{\Delta PM_l}{Sk_{yk}} \cdot \frac{\partial y_k}{\partial PM_l}(t, x) \right| \quad (8.10)$$

Die Maßzahlen erlauben es, die einzelnen Parameter hinsichtlich ihrer Sensitivität für die zur Kalibrierung zur Verfügung stehenden Messwerte zu vergleichen: Je höher die Maßzahlen, desto größer ist der Einfluss des Parameters auf die Modellergebnisse der betrachteten Zielgrößen. Damit können die Modellparameter nach ihrer Wichtigkeit geordnet werden, was einem Sensitivitätsranking gleich kommt.

Parameteridentifizierbarkeit: Für die Analyse der Parameteridentifizierbarkeit werden die Informationen aus der Sensitivitätsanalyse mit Ergebnissen der Kollinearität der Sensitivitätsfunktionen verknüpft, um den optimalen Satz an Parametern zu extrahieren, der aus den vorliegenden Messdaten kalibriert werden kann. Die Kollinearität wird hierbei verwendet, um Aufschluss darüber zu erlangen, in welchem Maß Veränderungen eines Parameterwerts durch Veränderungen der anderen Parameterwerte kompensiert werden können.

Um die Kollinearität der Parametersensitivitäten zu berechnen, werden zunächst die skalierten Unsicherheitsbeiträge eines Parameters PM_l zu allen Zielgrößen, an allen Messorten und zu allen Messzeitpunkten in einem Spaltenvektor \mathbf{s}_l zusammengefasst:

$$\mathbf{s}_l = \left[\left(\frac{\Delta PM_l}{Sk_{yk}} \cdot \frac{\partial y_k}{\partial PM_l} \right)_{\{1,1,1\}^l}, \dots, \left(\frac{\Delta PM_l}{Sk_{yk}} \cdot \frac{\partial y_k}{\partial PM_l} \right)_{\{n_{yk}, n_{yk,x}, n_{yk,z,t}\}^l} \right]^T \quad (8.11)$$

Um bei der Berechnung des Kollinearitätsindex zu gewährleisten, dass die Unsicherheitsbeiträge aller Parameter gleich stark eingehen, müssen diese Vektoren anschließend normiert werden. Hierzu wird der Vektor \mathbf{s}_l durch seine eigene Norm (d.h. die Summe aller Elemente in \mathbf{s}_l) geteilt:

$$\tilde{\mathbf{s}}_l = \frac{\mathbf{s}_l}{\|\mathbf{s}_l\|} \quad (8.12)$$

Ziel der weiteren Analyse ist es nun, ausgehend von diesen normierten Vektoren die Kollinearitäten unterschiedlicher Untermengen der Parameter zu betrachten. Das bedeutet, dass im Folgenden minimal einer bis maximal alle Parameter gleichzeitig betrachtet werden, bzw. bezüglich ihrer Kollinearität untersucht werden. Die zu betrachtende Untermenge von m Sensitivitätsfunktionen wird in einer normierten Matrix $\tilde{\mathbf{S}}$ wie folgt zusammengefasst:

$$\tilde{\mathbf{S}} = (\tilde{\mathbf{s}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{s}}_m) \quad (8.13)$$

Die Spalten der Matrix $\tilde{\mathbf{S}}$ werden als kollinear oder linear abhängig bezeichnet, wenn ein Vektor $\boldsymbol{\beta}$ ($\|\boldsymbol{\beta}\| \neq 0$) existiert, so dass $\tilde{\mathbf{S}}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}$ ist (Belsley 1991). Existiert ein Vektor $\boldsymbol{\beta}$, dessen Produkt mit der Matrix $\tilde{\mathbf{S}}$ nahe bei 0 liegt, so sind die Vektoren in $\tilde{\mathbf{S}}$ nahezu linear abhängig. Das Ausmaß der Kollinearität kann

abgeschätzt werden, indem man unter der Nebenbedingung $\|\boldsymbol{\beta}\|=1$ die lineare Kombination $\tilde{\mathbf{S}}\boldsymbol{\beta}$ ermittelt, deren Norm minimal ist. Unter Einhaltung der Nebenbedingung entspricht diese minimale Norm der Quadratwurzel des kleinsten Eigenwerts λ_m des Eigenvektors von $\tilde{\mathbf{S}}^T\tilde{\mathbf{S}}$ (Belsley 1991). Hiermit lässt sich ein Kollinearitätsindex γ für die betrachtete Untermenge der Sensitivitätsfunktionen ableiten (Brun et al. 2001):

$$\gamma = \frac{1}{\min_{\|\boldsymbol{\beta}\|=1} \|\tilde{\mathbf{S}}\boldsymbol{\beta}\|} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_m}} \quad (8.14)$$

Die entsprechenden Berechnungen wurden mit Hilfe von Matlab 6 durchgeführt. Der so definierte Kollinearitätsindex kann wie folgt interpretiert werden: Die Änderung der Simulationsergebnisse infolge der Variation eines Parameterwerts kann um den Anteil $1-1/\gamma$ durch Variationen der anderen betrachteten Parameter ausgeglichen werden. Ein Kollinearitätsindex von 5 bedeutet, dass die Ergebnisänderungen durch Veränderung eines Parameterwertes zu 80% durch adäquate Änderungen der anderen Parameterwerte kompensiert werden können. Bei einem γ von 20 können die Ergebnisänderungen bereits zu 95% kompensiert werden. Dies bedeutet auch, dass bei einem Kollinearitätsindex von 1 die Sensitivitätsfunktionen aller betrachteten Parameter von einander unabhängig sind. Praktische Erfahrungen haben gezeigt, dass eine Identifikation der Parameter – d.h. eine eindeutige Kalibrierung der Parameterwerte – bis zu γ -Werten von maximal etwa 15 (Kompensation von 93 %) möglich ist (Brun et al. 2001; Omlin et al. 2001; Reichert und Vanrolleghem 2001).

Kalibrierung: Nachdem ein identifizierbarer Satz sensibler Parameter extrahiert wurde, gilt es die Werte dieser Parameter zu kalibrieren. Hierfür werden die selben Messorte, Zeiträume und Messgrößen verwendet wie für die Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse.

Prinzipiell kann eine automatisierte Kalibrierung unter Verwendung der Methode gewichteter kleinster Fehlerquadrate in AQUASIM durchgeführt werden. Hierbei werden die gewichteten quadrierten Abweichungen der Rechenergebnisse von den Messergebnissen solange minimiert, bis die optimale Parameterkombination gefunden wird (Omlin et al. 2001; Reichert 1994a). Eine automatisierte Kalibrierung ist allerdings dann problematisch, wenn relativ hohe Gradienten auftreten. Häufig spiegelt das Modell den Konzentrationsverlauf prinzipiell gut wider, reagiert jedoch zeitlich etwas zu früh oder spät. Dies bedingt große Fehlermaße, die vom Anpassungsalgorithmus minimiert werden, wenngleich diese Ungenauigkeiten von geringer Bedeutung sind. Zudem treten systematische Diskrepanzen zwischen Messung und Rechnung auf: Beispielsweise werden die Wasserproben oberflächennah entnommen, so dass während Zeiten intensiver biogener Produktion Sauerstoffkonzentrationen gemessen werden, die über den querschnittsgemittelten Werten liegen. Im Modell wird hingegen ein querschnittsgemittelter Wert berechnet. Solche systematischen Abweichungen können von einem Optimierungsalgorithmus nicht berücksichtigt werden. Daher wurde die Kalibrierung im vorliegenden Fall durch händische Anpassung der Parameterwerte vorgenommen. Dabei wurde auf die deterministische Plausibilität der Parameterwerte geachtet.

Ergebnisse

Messdaten: Für die Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse sowie für die Kalibrierung wurden Messdaten aus dem dreimonatigen Zeitraum zwischen dem 10.4. und dem 10.7.1997 herangezogen. Dieser Zeitraum umfasste eine Algenblüte mit starken Sauerstoffübersättigungen sowie deren Zusammenbruch mit einer ausgeprägten Sauerstoffdepression. Es wurden lediglich die Messdaten der Gütestationen Hofen, Aldingen und Poppenweiler verwendet (Abb. 8.2). Im einzelnen waren dies die folgenden Daten: Je 92 Tagesmittelwerte der Sauerstoffkonzentrationen an allen 3 Stationen; für Si, NH₄, NO₃ und PO₄ je 7 Werte in Poppenweiler und je 3 Werte in Hofen und Aldingen; für Chl-a 7 Werte in Poppenweiler. Alle nachfolgenden Analysen stützen sich auf diese 335 Datenpunkte oder Untermengen daraus. Die ebenfalls verfügbaren BSB₅-Werte wurden nicht verwendet, da sie zunächst hinsichtlich des biologischen Anteils des BSB hätten korrigiert werden müssen, was zusätzliche Unsicherheiten bedingt hätte.

A priori Parameterwerte und –unsicherheiten: Insgesamt 27 kinetische und stöchiometrische Parameter wurden auf ihre Sensitivität hin untersucht. Das sind alle in BWQM enthaltenen Parameter mit Ausnahme der Arrhenius-Temperaturkorrekturkoeffizienten (Tab. 8.2).

Tab. 8.2: Parameter des BWQM, ihre für die Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse verwendeten Werte sowie die angenommene prozentuale Unsicherheit der Parameterwerte.

Parameter	Einheit	Bedeutung des Parameters	Wert	ΔPM_1 (in %)
a_3	mg/mg	Umrechnung des bei der Photosynthese produzierten Chl-a in O_2	130	20
a_4	mg/mg	Umrechnung des respirierten Chl-a in O_2 -Verbrauch	130	20
a_N	mg/mg	Umrechnung von Chl-a in algengebundenen N	7	20
a_P	mg/mg	Umrechnung von Chl-a in algengebundenen P	1	20
a_{Si}	mg/mg	Umrechnung von Chl-a in algengebundenen Si	13	20
B_1	d^{-1}	Nitrifikationsrate bei 20°C und optimaler O_2 -Versorgung	0,24	50
B_3	d^{-1}	Hydrolyserate von N-org bei 20°C	0,03	50
B_4	d^{-1}	Hydrolyserate von P-org bei 20°C	0,72	50
Den_{SSB}	mg/mg	Verhältnis des Denitrifikationsverlustes zum SSB	0,2	50
K_1	d^{-1}	Abbaurrate für allochtonen BSB	0,12	50
k_{OD}	m	Vorfaktor der Wiederbelüftungsformel OD2 (Kapitel 6.3.2)	0,164	20
K_{Ninorg}	mg/L	Halbsättigungskonzentration von N für das Algenwachstum	0,015	50
K_{PAR}	$\mu E/m^2/s$	Halbsättigungsintensität von PAR für das Algenwachstum	250	20
K_{PO_4}	mg/L	Halbsättigungskonzentration von P für das Algenwachstum	0,003	50
K_{Si}	mg/L	Halbsättigungskonzentration von Si für das Algenwachstum	0,05	50
M_{max}	d^{-1}	Maximale Algenwachstumsrate unter optimalen Bedingungen	2,2	20
N_{SSB}	mg/mg	Verhältnis zwischen NH_4 -Freisetzung und SSB	0,1	50
P_{NH_4}	-	Algenpräferenzfaktor für NH_4 gegenüber NO_3	0,9	20
P_{SSB}	mg/mg	Verhältnis zwischen PO_4 -Festlegung und SSB	0,01	50
R	d^{-1}	„Respirationsrate“ der Algen bei 20°C	0,35	20
S_1	m/h	Sinkgeschwindigkeit der Algen	0,01	50
Si_{SSB}	mg/mg	Verhältnis zwischen Si-Freisetzung und SSB	0,066	50
SSB	$g/m^2/d$	Sauerstoffbedarf der Sedimente bei 20°C	0,96	20
S_{org}	m/h	Sinkgeschwindigkeit der allochtonen organischen Substanz	0,01	50
spm_0	-	Achsenabschnitt der empirischen Beziehung zw. Q und SPM	8	60
spm_1	-	Steigung der empirischen Beziehung zw. Q und SPM	0,00778	55
spm_2	-	Exponent der empirischen Beziehung zw. Q und SPM	1,732	5
Θ_{B1}	-	Temperaturkorrekturfaktor der Nitrifikationsrate	1,083	
Θ_{B3}	-	Temperaturkorrekturfaktor der N-Hydrolyserate	1,047	
Θ_{B4}	-	Temperaturkorrekturfaktor der P-Hydrolyserate	1,047	
Θ_{K1}	-	Temperaturkorrekturfaktor der BSB-Abbaurrate	1,047	
Θ_{k2}	-	Temperaturkorrekturfaktor der Wiederbelüftungsrate	1,024	
Θ_R	-	Temperaturkorrekturfaktor der „Respirationsrate“	1,08	
Θ_{SSB}	-	Temperaturkorrekturfaktor des Sauerstoffbedarfs der Sedimente	1,06	

Vor Beginn der eigentlichen Analyse wurden plausible Parameterwerte sowie die Unsicherheiten dieser Werte geschätzt. Die hierbei zugeordneten Werte sind in Tabelle 8.2 aufgeführt. Die Parameter, die den Austausch zwischen Sediment und Wasser beschreiben (SSB , N_{SSB} , P_{SSB} und Den_{SSB}) wurden auf Grundlage der in Kapitel 7 vorgestellten in situ-Messungen abgeschätzt. Auf Basis der Ergebnisse des Gastracexperiments wurde die von O'Connor und Dobbins (1958) für isotrope Turbulenz vorgeschlagene Sauerstoffwiederbelüftungsformel OD2 ausgewählt (siehe Kapitel 6.3). Der Vorfaktor dieser Formel (k_{OD}) wurde als Parameter übernommen und auf den ursprünglich vorgeschlagenen Wert gesetzt. Die stöchiometrischen Faktoren a beruhen auf Literaturangaben zum Chl-a Gehalt zentrischer Diatomeen (ATV

1998) und der von Vollenweider (1968) vorgeschlagenen Stöchiometrie zur Beschreibung der anorganischen Bestandteile von Algen (siehe Kapitel 2.4.1). Die Halbsättigungsintensität der photosynthetisch aktiven Strahlung (direkt unterhalb der Wasseroberfläche) wurde aus den Ergebnissen von Pöhlmann (1989) abgeschätzt. Die BSB-Abbauraten wurden aus einigen Proben zu denen BSB₁, BSB₅ und BSB₃₀ Messungen vorlagen abgeleitet. Die Parameter der Potenzfunktion zur Beschreibung der allochthonen Schwebstoffkonzentration als Funktion des Abflusses wurden mittels nichtlinearer Regressionen mit der Methode gewichteter kleinsten Fehlerquadrate an eigene Messungen angepasst (Haag et al. 1999). Die Halbsättigungskonstanten der Nährstoffe, die maximale Wachstumsrate sowie die Sinkgeschwindigkeiten der Algen und der allochthonen organischen Substanz (BSB, N-org, P-org) wurden als mittlere Werte zahlreicher Literaturangaben geschätzt (ATV 1998; Biswas 1997; Brown und Barnwell 1987; Burns und Rosa 1980; Chapra 1997; Droppo 2000; Pöhlmann et al. 1989; Schöl et al. 2002; Sommer 1984). Die sogenannte Respirationsrate, die Nitrifikationsrate sowie die Hydrolyseraten für N-org und P-org wurden anhand von Literaturempfehlungen (Biswas 1997; Brown und Barnwell 1987) und einer vorab vorgenommenen groben Kalibrierung abgeleitet. Die Temperaturkorrekturkoeffizienten nach Arrhenius wurden aus den Empfehlungen für QUAL2E übernommen (Brown und Barnwell 1987).

Die Parameterunsicherheiten wurden prinzipiell in zwei Klassen eingeteilt: Jenen Parametern die aufgrund eindeutiger Literaturdaten oder eigenen Messungen als relativ sicher einzuordnen sind wurde eine Unsicherheit von 20% zugeschrieben. Dies sind neben den gemessenen Parametern vor allem stöchiometrische Faktoren. Für die Parameter, für die die Literaturangaben stark schwanken und für die keine eigenen Messungen vorliegen, wurde hingegen eine Unsicherheit von 50% angesetzt. Die Unsicherheiten der Parameter, die die Beziehung zwischen Abfluss und allochthoner Schwebstoffkonzentration beschreiben, wurden aus den Ergebnissen der Regressionsanalyse abgeleitet.

Sensitivitätsanalyse: Die beiden in den Gleichungen 8.9 und 8.10 definierten Maßzahlen für die Parametersensitivität wurden für drei Varianten berechnet: (1) auf Grundlage aller zur Verfügung stehender 335 Messdaten, (2) nur unter Berücksichtigung der Sauerstoff- und Chlorophylldaten und (3) nur unter Berücksichtigung der Sauerstoff- und Chlorophylldaten der Station Poppenweiler. Die Ergebnisse dieser drei Varianten sind in den Abbildung 8.4 bis 8.6 dargestellt, wobei die Parameter nach den Werten von δ^{SF} geordnet wurden.

Große Unterschiede zwischen δ^{SF} und δ^{MDF} weisen auf eine hohe Varianz bzw. auf Ausreißer bei der Sensitivitätsfunktion des betrachteten Parameters hin. Als auffälliges Beispiel kann der Parameter P_{NH_4} – der Algenpräferenzfaktor von NH_4 gegenüber NO_3 – angeführt werden: Dieser Parameter ist offenbar nur für die Berechnung der wenigen NH_4 Werte von großer Bedeutung. Dies bedingt bei der ersten Variante, in der NH_4 mit betrachtet wird, einen hohen Wert für δ^{SF} (Abb. 8.4). Gleichzeitig ist der Wert von δ^{MDF} aber deutlich geringer, da P_{NH_4} ohne Bedeutung für alle anderen Zielgrößen ist. Die extremen Ausreißer werden durch das Quadrieren in Gleichung 8.2 stärker bewertet. Der geringe Einfluss von P_{NH_4} auf die Berechnung von O_2 und Chl-a wird auch durch die wesentlich geringeren Werte von δ^{SF} in den Varianten 2 und 3 deutlich (Abb. 8.5 und 8.6).

In den Abbildungen 8.4 bis 8.6 erfolgte das Ranking der Wichtigkeit der Modellparameter anhand von δ^{SF} . Die fünf, in allen drei Varianten als am wichtigsten extrahierten Parameter, wären auch unter Verwendung von δ^{MDF} auf die ersten 5 Plätze gesetzt worden. Die fünf Modellparameter a_3 , a_4 , M_{max} , R und spm_0 , weisen in allen Varianten deutlich höhere Sensitivitäten auf als die anderen 22 Parameter. Hierzu ist allerdings anzumerken, dass die Sensitivitätsanalyse selbst in der ersten Variante sehr stark von der Berechnung der Sauerstoffkonzentration dominiert wird, da es sich bei 276 der 335 zu berechnenden Messdaten um Sauerstoffwerte handelt. In einer weiteren Variante der Sensitivitätsanalyse wurden die Skalierungsfaktoren Sk_{y_k} so gewählt, dass die Gesamtzahl der Messungen der einzelnen Parameter gleich stark in die Analyse eingingen. Dabei wurden die Parameter M_{max} , R und spm_0 als die wichtigsten extrahiert (Ergebnisse nicht dargestellt). Die Parameter a_3 und a_4 landeten beim Ranking hingegen im Mittelfeld, was darauf zurückzuführen ist, dass sie nur für die Sauerstoffkonzentrationen von Bedeutung sind. Da im vorliegenden Fall jedoch der Sauerstoffhaushalt im Vordergrund steht, muss die große Bedeutung der Parameter a_3 und a_4 Berücksichtigung finden.

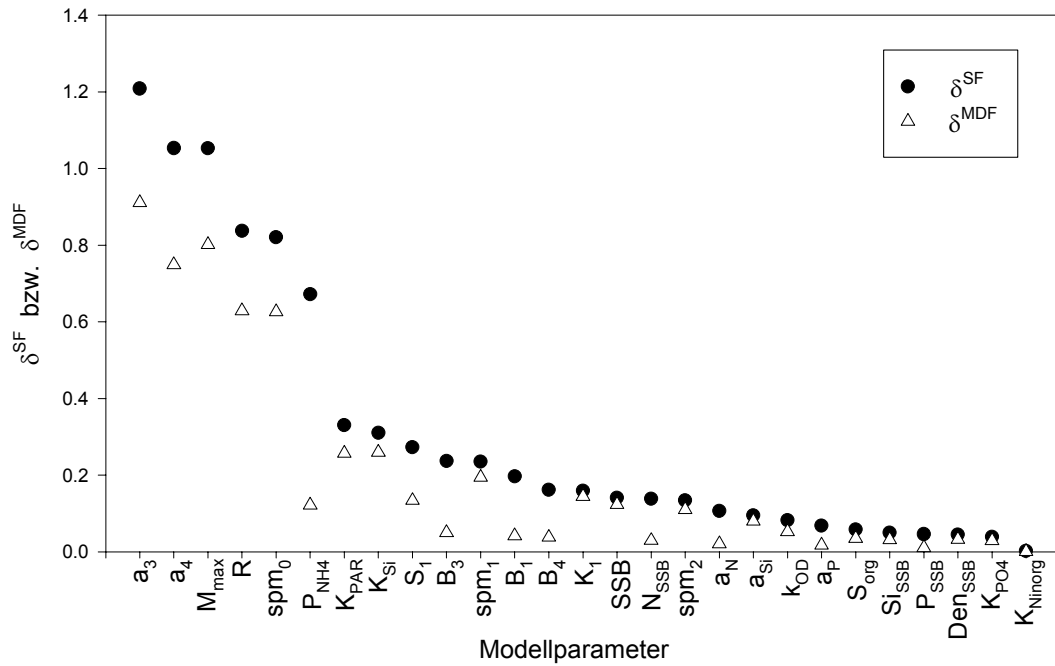


Abb. 8.4: Ranking der Modellparameter nach ihrer Sensitivität für die Berechnung aller Messdaten von O₂, Chl-a, NH₄, NO₃, PO₄ und Si an den Stationen Hofen, Aldingen und Poppenweiler.

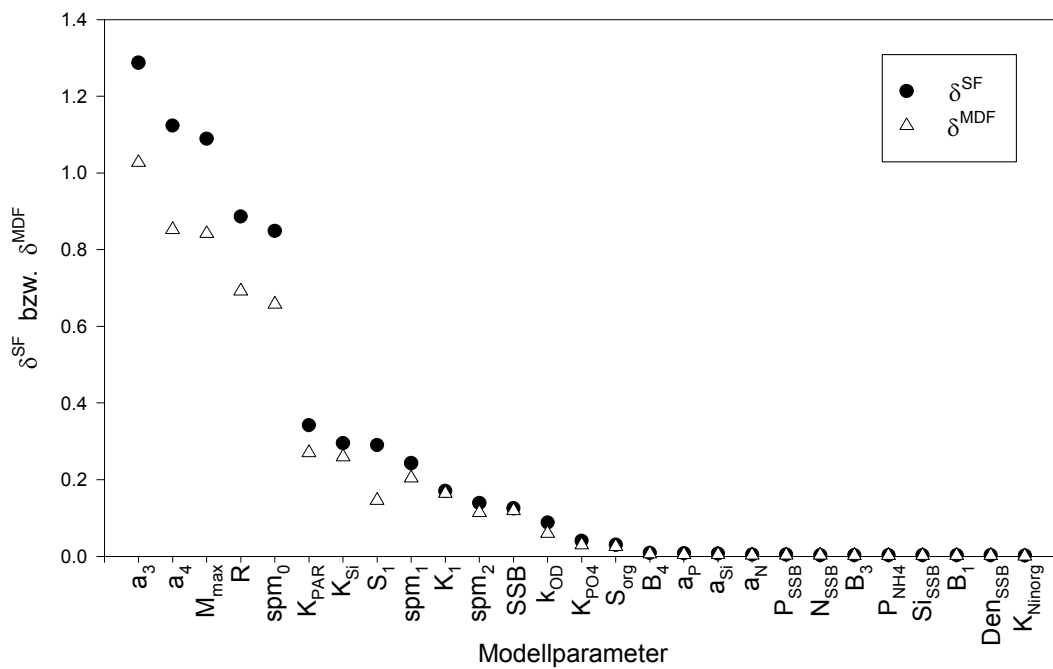


Abb. 8.5: Ranking der Modellparameter nach ihrer Sensitivität für die Berechnung der Messdaten von O₂ und Chl-a an den Stationen Hofen, Aldingen und Poppenweiler.

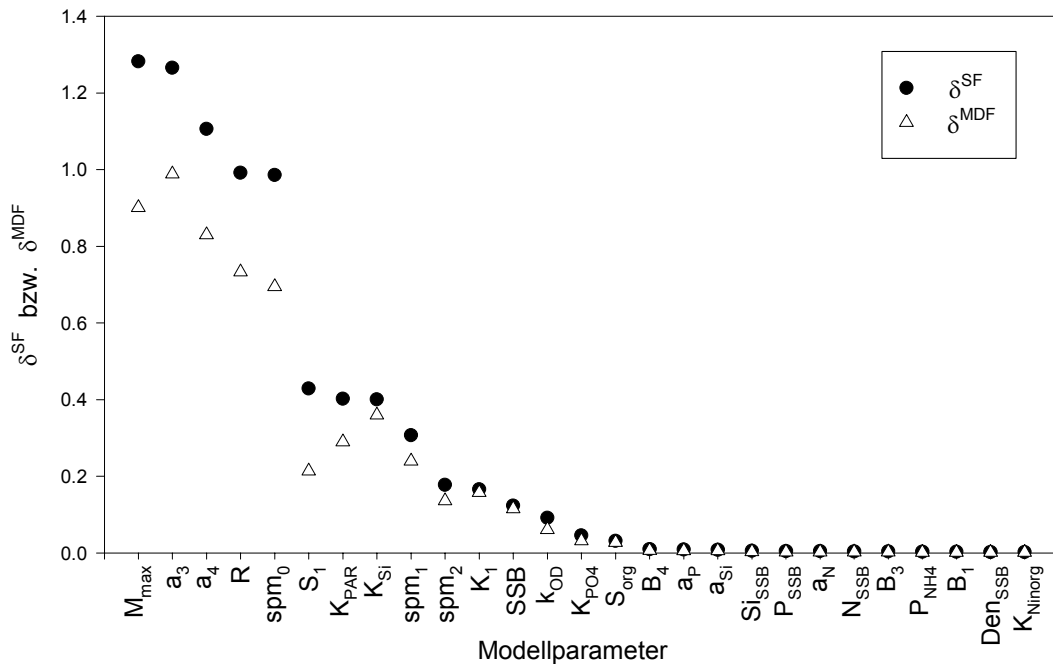


Abb. 8.6: Ranking der Modellparameter nach ihrer Sensitivität für die Berechnung der Messdaten von O_2 und Chl-a an der Station Poppenweiler.

Es muss hervorgehoben werden, dass alle fünf als am wichtigsten extrahierten Modellparameter in engem Zusammenhang mit der biogenen Sauerstoffproduktion und -zehrung stehen: M_{max} und R steuern das Wachstum und Absterben der Algen sowie in Kombination mit a_3 und a_4 die damit verbundene Sauerstoffproduktion und -zehrung. Der Parameter spm_0 ist maßgebend für die Konzentration allochtoner Schwebstoffe und damit für die Verfügbarkeit photosynthetisch aktiver Strahlung während Niedrigwasserphasen, in denen das Algenwachstum im Allgemeinen am größten ist. Im Gegensatz dazu weisen andere die Sauerstoffkonzentration direkt beeinflussende Parameter wie die BSB-Abbaurrate K_1 oder der Vorfaktor der Wiederbelüftungsformel k_{OD} nur geringe Sensitivitäten auf, sind also offenbar für den Sauerstoffhaushalt von untergeordneter Bedeutung. Diese Ergebnisse stehen in Einklang mit den Befunden der empirischen Analysen des Stoffhaushalts (siehe Kapitel 5; Haag und Westrich 2002).

Es erscheint bemerkenswert, dass trotz der offenkundigen Bedeutung des Phytoplanktons keine der Halbsättigungskonstanten unter den wichtigsten Parametern ist. Die größte Bedeutung hat die Halbsättigungsintensität der photosynthetisch aktiven Strahlung K_{PAR} . Der zweifellos wichtige Beitrag des Lichts zur Limitierung des Algenwachstums wird aber offenkundig stärker von der Trübung – also spm_0 – gesteuert als von der Halbsättigungskonstante. Die Nährstoffe sind offenbar immer nahe der Sättigung. Lediglich Si scheint zumindest zeitweise eine geringe Limitierung auszuüben, weshalb die Ergebnisse eine mäßige Sensitivität für K_{Si} aufweisen. Es ist interessant, dass K_{PO4} in den Varianten 2 und 3 an Bedeutung gewinnt. Dies deutet darauf hin, dass auch PO_4 zeitweise eine wenn auch schwache Limitierung des Algenwachstums und der O_2 -Produktion bewirkt. Im Gegensatz hierzu ist die Halbsättigungskonstante für Stickstoff völlig bedeutungslos. Stickstoff ist offenbar immer im Überschuss für das Algenwachstum vorhanden.

Alle Varianten, sowohl mit als auch ohne Nährstoffe, verdeutlichen die Bedeutung der 5 Modellparameter a_3 , a_4 , M_{max} , R und spm_0 für die Simulationsergebnisse. Alle anderen Parameter sind von untergeordneter Bedeutung, so dass ihre Werte vermutlich auch nicht identifizierbar sind. In der nachfolgenden Analyse der Parameteridentifizierbarkeit werden daher die genannten fünf sensitivsten Parameter einbezogen.

Identifizierbarkeitsanalyse: Eine händische Kalibrierung mehrerer Parameter anhand von mehr als zwei Zielgrößen erschien nicht plausibel. Daher wurde bei der Identifizierbarkeitsanalyse davon ausgegangen,

dass für die nachfolgende Kalibrierung lediglich Messwerte der beiden Zielgrößen O₂ und Chl-a verwendet werden (Variante 2 bzw. 3).

Zunächst wurden die Kollinearitätsindices für einen bis fünf Parameter auf Grundlage der Varianten 2 (O₂ und Chl-a-Daten 3 Stationen) und 3 (nur O₂ und Chl-a-Daten aus Poppenweiler) berechnet. Hierfür wurde ausgehend vom Sensitivitätsranking der Variante 2 (Abb. 8.5) mit dem sensitivsten Parameter begonnen und dann der im Ranking nachfolgende Parameter hinzu genommen. Das Ergebnis dieser Vorgehensweise ist in Abbildung 8.7 dargestellt.

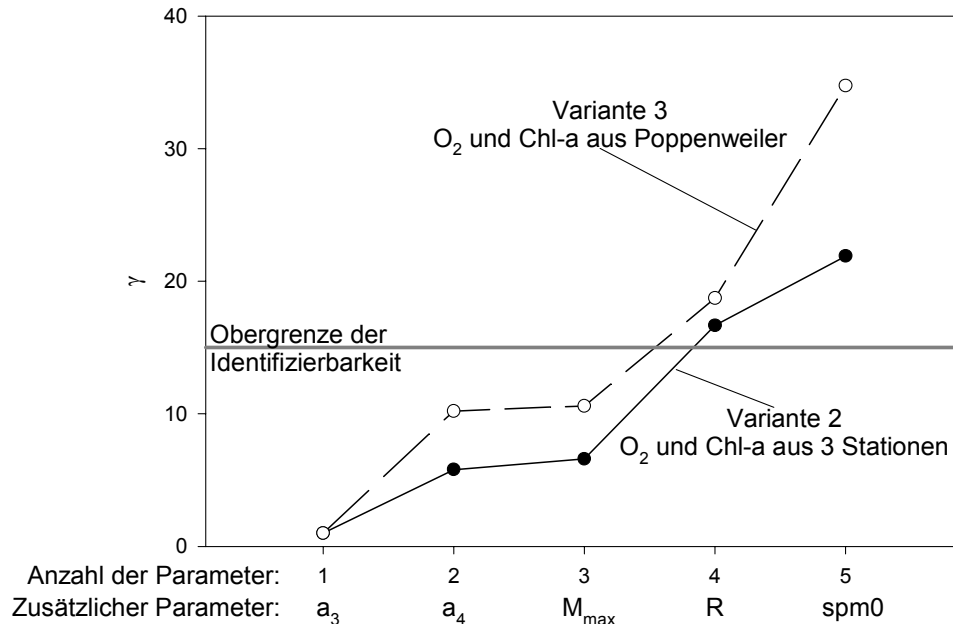


Abb. 8.7: Kollinearitätsindices bei sukzessiver Erweiterung des zu identifizierenden Parametersatzes auf Grundlage der Messdaten der Varianten 2 und 3.

Hieraus wird deutlich, dass die Kollinearitätsindices durch die zusätzlichen Sauerstoffwerte der Stationen Aldingen und Hofen geringfügig erniedrigt werden, die Identifizierbarkeit der Parameterwerte also verbessert wird. Zudem wird aber ersichtlich, dass mit beiden Varianten lediglich die drei sensitivsten Parameter identifizierbar sind, da durch die Hinzunahme von R, γ größer als der kritische Wert von 15 (93% Kompensation) wird.

Um näher zu analysieren auf welche Parameter die hohe Kollinearität des gesamten Parametersatzes zurückzuführen ist, wurden die Kollinearitäten von Parameterpaaren auf Grundlage von Variante 2 berechnet. Als weiteres Maß für die lineare Abhängigkeit der Sensitivitätsfunktionen wurde der Pearson'sche Korrelationskoeffizient für die Spaltenvektoren der Matrix \tilde{S} ermittelt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 8.3 zusammengestellt. Sie verdeutlichen, dass insbesondere die Sensitivitätsfunktionen der Modellparameter M_{max} und spm0 hochgradig negativ korreliert sind. Dies ist dadurch bedingt, dass eine Erhöhung von M_{max} das Algenwachstum und die Sauerstoffproduktion erhöht, während ein größeres spm0 und die resultierende geringere Verfügbarkeit von PAR das Gegenteil bewirken. Die durch Variation des Parameters M_{max} bewirkten Veränderungen der Simulationsergebnisse hinsichtlich O₂ und Chl-a können also weitgehend durch gegenläufige Veränderungen des Parameters spm0 ausgeglichen werden. Eine gleichzeitige Identifikation beider Parameterwerte aus O₂ und Chl-a Daten ist nur sehr schwer möglich. Hohe Kollinearitäten weisen zudem die Sensitivitätsfunktionen der Parameterpaare a₃ – a₄, M_{max} – R und R – spm0 auf.

Tab. 8.3: Kollinearitätsindices (rechtes oberes Eck) und lineare Korrelationskoeffizienten (linkes unteres Eck) für die Sensitivitätsfunktionen von Parameterpaaren.

	a_3	a_4	M_{\max}	R	spm0
a_3		5,79	2,41	3,13	2,34
a_4	-0,93		2,04	2,97	1,98
M_{\max}	0,55	-0,42		4,86	15,31
R	-0,73	0,72	-0,89		4,29
spm0	-0,52	0,38	-0,99	0,86	

Um letzten Aufschluss über die maximale Anzahl identifizierbarer Parameter zu erlangen, wurden die Kollinearitäten mehrerer Parameterkombinationen auf Grundlage von Variante 2 ermittelt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 8.4 zusammengestellt. Hieraus wird deutlich, dass lediglich eine Kombination von vier Parametern einen Kollinearitätsindex kleiner 15 aufweist: Die Kombination aus a_3 , a_4 , R und spm0. Mit einem γ von 12,6 können maximal 92% der Ergebnisveränderung infolge der Variation eines Parameters durch entsprechende Variationen der anderen Parameter ausgeglichen werden. Auf Grundlage der in der Literatur beschriebenen Erfahrungswerte scheint es folglich gerade noch möglich, diese 4 Parameter gleichzeitig aus den gemessenen O_2 und Chlorophyllkonzentrationen zu identifizieren. Alternativ wäre es auch denkbar die 4 Parameter aus Lauf 8 zu verwenden. Allerdings erscheint es dringend geboten den zusammengefassten, effektiven Parameter R invers zu kalibrieren, da über seinen Wert wenig ausgesagt werden kann. Im Gegensatz hierzu ist die maximale Wachstumsrate für zentrische Diatomeen relativ gut bekannt. Auf Grundlage der Ergebnisse der Identifizierbarkeitsanalyse wurden daher die 4 Parameter des Laufs 7 für die inverse Kalibrierung anhand der Sauerstoff- und Chlorophyllwerte der Stationen Hofen, Aldingen und Poppenweiler ausgewählt. Der Wert des Parameters M_{\max} wurde hierzu bei 2,2 1/d belassen.

Tab. 8.4: Kollinearitätsindices für unterschiedliche Parameterkombinationen.

Parameter	Lauf 1	Lauf 2	Lauf 3	Lauf 4	Lauf 5	Lauf 6	Lauf 7	Lauf 8
a_3	+	+	+	+	+	+	+	+
a_4		+	+	+	+		+	+
M_{\max}			+	+	+	+		+
R				+	+	+	+	
spm0					+	+	+	+
Kollinearitätsindex	1,0	5,8	6,6	16,7	21,9	17,2	12,6	15,8

Kalibrierung: Die Simulationsergebnisse wurden durch gezielte Variation der vier ausgewählten Modellparameter an die gemessenen Sauerstoffkonzentrationen der Gütestationen Hofen, Aldingen und Poppenweiler und die Chl-a Werte aus Poppenweiler angepasst. Hierbei wurde berücksichtigt, dass die gemessenen Sauerstoffkonzentrationen während der im Kalibrierungszeitraum enthaltenen Algenblüte nicht repräsentativ, sondern etwas zu hoch sind. Zudem wurde darauf geachtet, die Parameterwerte nur inner-

halb der als plausibel erachteten Grenzen zu variieren. Letztlich wurden die in Tabelle 8.5 angeführten Werte für die vier Parameter festgelegt.

Tab. 8.5: Bei der Kalibrierung ermittelte Parameterwerte. Alle anderen, nicht kalibrierten Parameter behielten die in Tab. 8.2 enthaltenen Werte.

Para- meter	Einheit	Wert nach der Kalibrierung
a ₃	mg/mg	125
a ₄	mg/mg	145
R	d ⁻¹	0,5
spm0	-	0

Setzt man einen für kleine zentrische Diatomeen als realistisch zu wertenden Chlorophyll-a Gehalt der Phytoplanktonbiomasse von 1% an, so ergeben sich je nach Algenstöchiometrie und Stickstoffquelle für a₃ und a₄ Werte von 100...200 mg/mg (siehe Kapitel 2.4.1). Beide kalibrierten Werte liegen innerhalb dieser theoretisch möglichen Spannweite und können somit als plausibel eingestuft werden. Der Wert von 0 für den Parameter spm0 bedeutet, dass die Potenzfunktion zur Beschreibung der Schwebstoffkonzentration keinen Achsenabschnitt hat. Dies ist äquivalent mit dem plausiblen Ergebnis, dass ohne Abfluss keine allochthonen Schwebstoffe im Gewässer transportiert werden. Die Plausibilität der sogenannten Respi-rationsrate kann nur schwer bewertet werden, da es sich bei R um einen zusammengefassten, effektiven Parameter handelt. Mit 0,5 1/d liegt der Wert aber am oberen Rand der von Brown und Barnwell (1987) empfohlenen Wertespanne.

8.4.4 Überprüfung und Bewertung des BWQM

Begriffsbestimmung

Wenn Simulationsmodelle gegen nicht zur Kalibrierung verwendete Daten getestet werden, spricht man im Allgemeinen von Validierung oder Verifikation dieser Modelle. Jedes Modell ist aber nur ein unvollständiges Abbild des untersuchten Systems, das im besten Fall durch den aktuellen Stand des Wissens oder wie im vorliegenden Fall durch die Verfügbarkeit von Messdaten limitiert ist (De Witt und Pebesma 2001; Dyck und Peschke 1989). Folglich können im System Situationen auftreten, die durch die vereinfachte Beschreibung im Modell nicht wiedergegeben werden können. Testet man nun Simulationsergebnisse gegen Messdaten, so kann das Modell für den Fall, dass es die Messergebnisse nicht wiedergibt falsifiziert werden. Umgekehrt kann ein Modell auch dadurch, dass sich Simulationsergebnisse und Messdaten für viele Situationen decken, streng genommen nicht validiert bzw. verifiziert werden (Oreskes et al. 1994). Jeder neue, positiv zu bewertende Vergleich erhöht aber das Vertrauen in das Modell, man kann sagen, dass es bestätigt wurde. Wenn sich die Simulationsergebnisse für zahlreiche auch sehr unterschiedliche Rahmenbedingungen gut mit den Messdaten decken, kann man von einem robusten Modell sprechen (Chapra 1997; Dyck und Peschke 1989). Daher soll in diesem Kapitel wie in folgenden Kapiteln von der Überprüfung und Bewertung eines Modells gesprochen werden. Wird hier der Begriff Validierung verwendet, so impliziert er nicht, dass die Korrektheit des Modells zweifelsfrei bewiesen ist (Oreskes et al. 1994).

Vorgehensweise

Das kalibrierte BWQM wurde auf seine Leistungsfähigkeit hin überprüft, indem die Monate April bis einschließlich Oktober der Jahre 1996 bis 1998 für den gesamten 63 km langen Neckarabschnitt zwischen Deizisau und Besigheim simuliert wurden. Gegenüber der Kalibrierung wurde somit nicht nur der Zeitraum sondern auch die simulierte Strecke erweitert, so dass neben den zur Kalibrierung verwendeten Gütestationen zwei weitere Probenahmestellen zur Überprüfung des Modells zur Verfügung standen (Abb.

8.2). An der Station Besigheim lagen hierfür Messdaten von Sauerstoff, Chl-a, BSB und allen Nährstoffen vor, während für Pleidelsheim nur Sauerstoffkonzentrationen vorlagen.

Um auch die BSB-Daten in die Modellüberprüfung einbeziehen zu können, wurde der simulierte BSB mit Hilfe von K_1 in den korrespondierenden BSB_5 umgerechnet und die durch Nitrifikation und Algenbiomasse bedingten BSB-Anteile hinzuaddiert. Hierfür wurde auf Grundlage von Literaturdaten angenommen, dass $100 \mu\text{g Chl-a}$ zu einer Erhöhung des BSB_5 um $0,3 \text{ mg/L}$ führen (siehe Kapitel 2.4; ATV 1998; Guhr et al. 1998; Lenhart und Steinberg 1983). Beim Vergleich der simulierten und gemessenen BSB_5 -Werte, ist die durch diese Umrechnungen bedingte Ungenauigkeit zu berücksichtigen.

Auf Grundlage des Vergleichs zwischen Simulationsergebnissen und Messdaten wird – unter Berücksichtigung der Modellstruktur – die Eignung des BWQM zur Systemanalyse und prognostischen Simulation diskutiert. Aus den beobachteten Diskrepanzen werden Hypothesen abgeleitet, die zur Erweiterung des Modells zum EWQM führten (Kapitel 8.5). Damit stellt der Vergleich zwischen Simulation und Messung bereits einen Beitrag zur Systemanalyse dar.

Ergebnisse

Für eine umfassende Übersicht, werden im Anhang die gemessenen und mit BWQM simulierten Konzentrationsverläufe von Sauerstoff, Chl-a, BSB_5 und Nährstoffen an den Gütestationen Poppenweiler (Neckar-km 165) und Besigheim (Neckar-km 136,8) für die Jahre 1996 bis 1998 verglichen.

Sauerstoff und Phytoplankton: In Abbildung 8.8 werden die simulierten O_2 und Chl-a Gehalte des Jahres 1997 mit Messwerten verglichen. Generell werden die Sauerstoff- und Chlorophyllgehalte im Neckar durch das Modell gut beschrieben. Hierbei ist allerdings zu beachten, dass der dargestellte Zeitraum die Kalibrierungsperiode 10.4. bis 10.7.97 beinhaltet.

Die generell zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Sauerstoff und Chl-a-Werten bestätigt sich auch in anderen Jahren (siehe Anhang). Die Unterschätzung der absoluten Sauerstoffmaxima im Mai und späten Juni wurde bereits bei der Kalibrierung billigend in Kauf genommen, da die oberflächennah gewonnenen Messwerte während einer Algenblüte vermutlich nicht repräsentativ für den gesamten Fließquerschnitt sind. Auffällige Diskrepanzen ergeben sich darüber hinaus beim Rückgang der Chl-a Konzentrationen im Juni. Diese gehen in der Natur rascher zurück als vom Modell vorhergesagt. Weiterhin fällt auf, dass die Chl-a Konzentrationen im späten September in Besigheim überschätzt werden, was zur Überschätzung der Sauerstoffgehalte sowohl in Besigheim als auch in Pleidelsheim führt. Diese Diskrepanz ergibt sich nicht für die beiden oberstromigen Messstellen. Ein ähnliches Phänomen tritt im September und Oktober 1998 zutage (Anhang).

BSB_5 und Nährstoffe: Um die Leistungsfähigkeit des BWQM weitergehend zu bewerten, werden auch die Simulationsergebnisse für jene Zielgrößen untersucht, die nicht Gegenstand der Kalibrierung waren. Die Abbildungen 8.9 und 8.10 zeigen Vergleiche zwischen berechneten und gemessenen Konzentrationen von BSB_5 und der Nährstoffe an den Stationen Poppenweiler und Besigheim.

Trotz einiger Diskrepanzen, beschreiben die Simulationsergebnisse die Messungen im Allgemeinen gut. Insbesondere die im Mai beobachteten Depressionen der Nährstoffe Silizium und Phosphor werden vom Modell korrekt simuliert. Dabei ist hervorzuheben, dass die Übereinstimmungen für die Gütestation Besigheim, die außerhalb des kalibrierten Bereichs liegt, genauso gut sind wie in Poppenweiler.

Diskussion

Legt man die relativ einfache Struktur des BWQM zugrunde, so sind die Übereinstimmungen zwischen Simulationen und Messungen als überraschend gut zu bewerten. Dass neben Sauerstoff und Chl-a auch die Konzentrationsverläufe der Nährstoffe in ihren wesentlichen Zügen nachgebildet werden, unterstreicht die grundsätzliche Güte der Modellstruktur. Der Vergleich der unterschiedlichen Jahre weist darauf hin, dass das kalibrierte Modell generell recht robust auf veränderte Rahmenbedingungen reagiert.

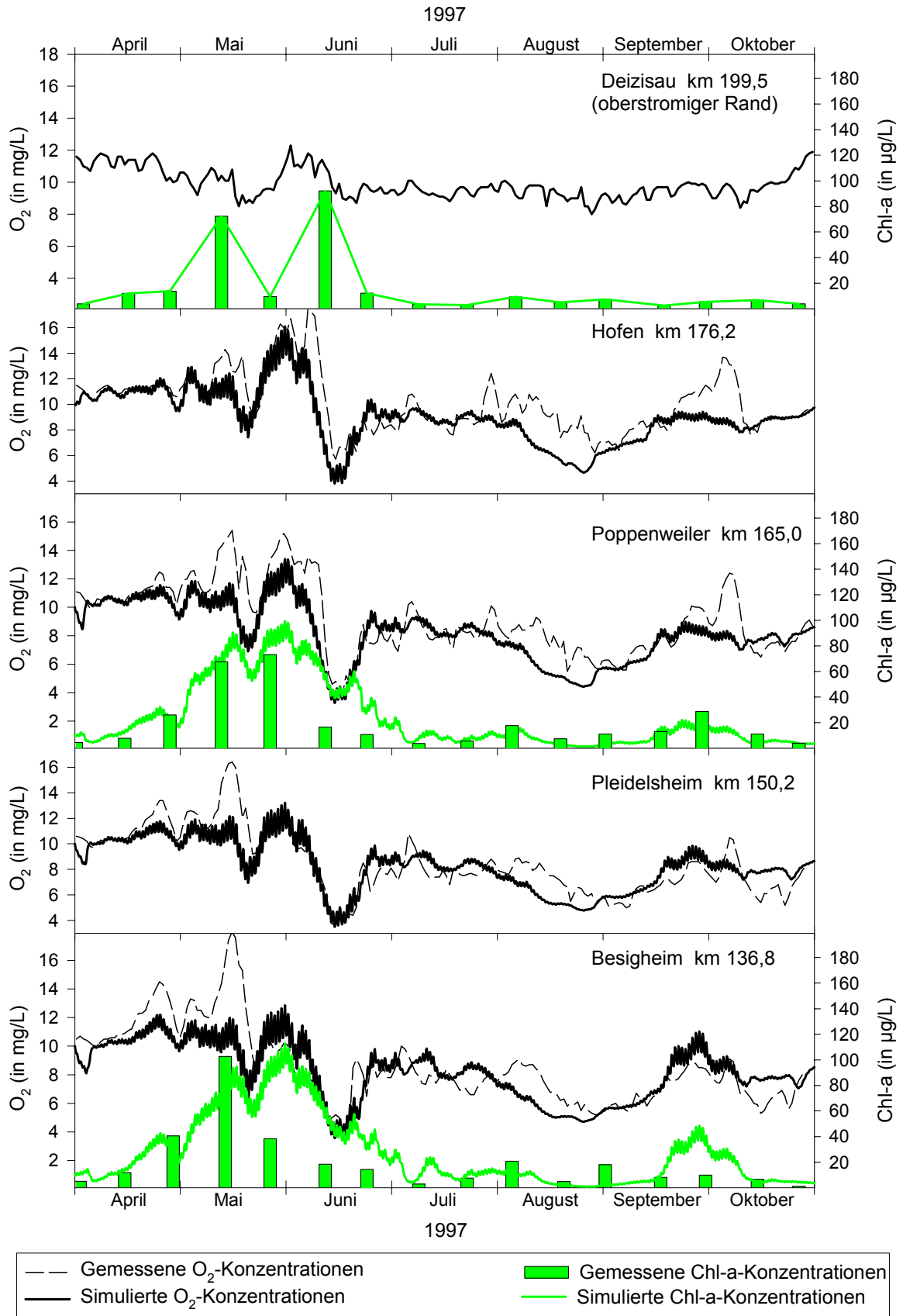


Abb. 8.8: Vergleich zwischen gemessenen und mit dem BWQM simulierten Chl-a und O_2 Konzentrationen im Neckar für das Sommerhalbjahr 1997.

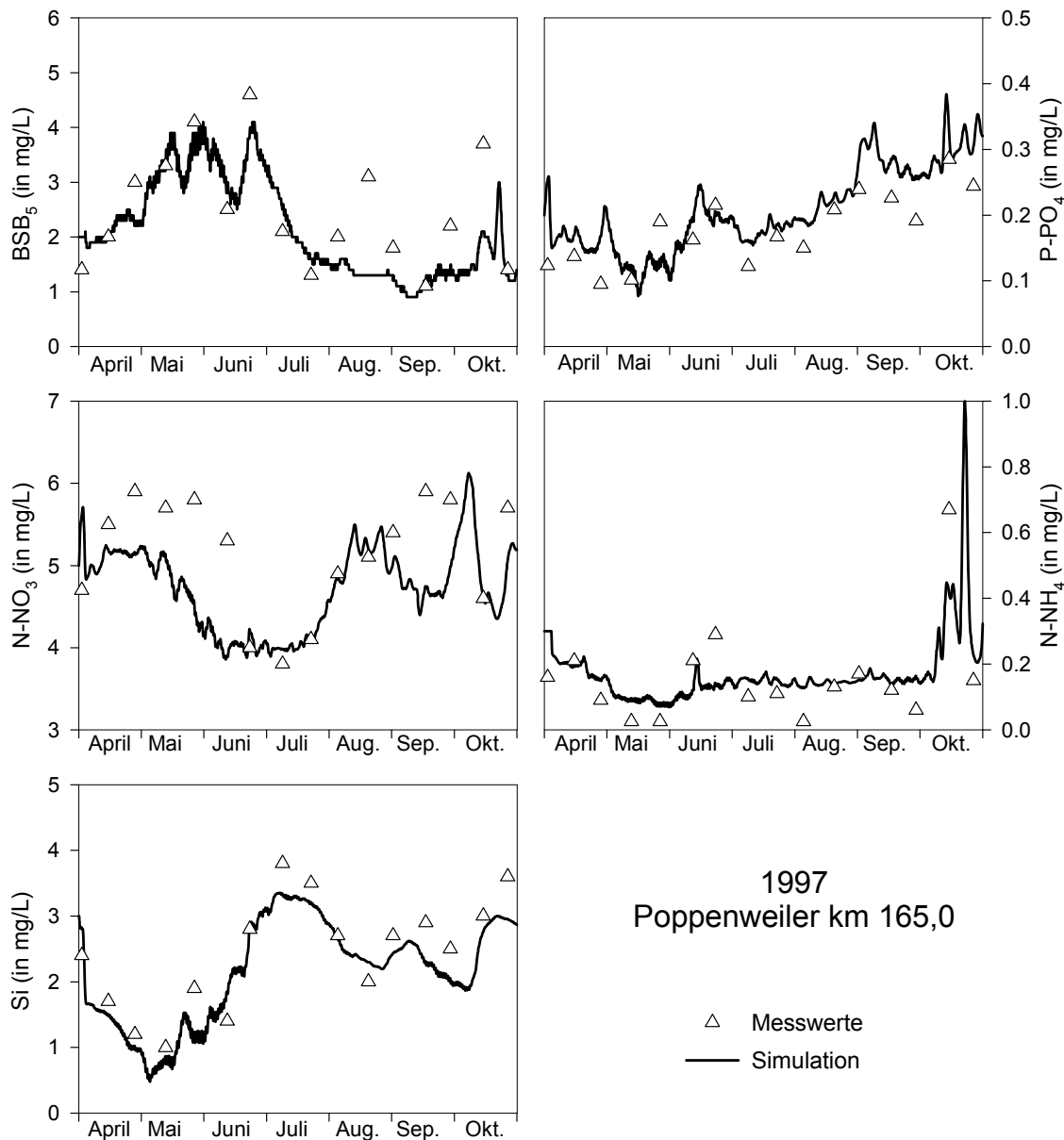


Abb. 8.9: Vergleich zwischen gemessenen und simulierten BSB_5 , $N-NH_4$, $N-NO_3$, $P-PO_4$ und Si Konzentrationen im Neckar bei Poppenweiler für das Sommerhalbjahr 1997.

Wie in Abschnitt 8.4.2 dargestellt, ist das Modell hinsichtlich der Verlustprozesse für das Phytoplankton mit einer effektiven Respirationrate sehr stark vereinfacht. Diese Vereinfachung ist in erster Linie der mangelnden Datenverfügbarkeit geschuldet. Die tatsächliche Respirationrate der Algen (Grund- und Photorespiration) beträgt inklusive der Mortalität nur etwa 0,1 1/d bis maximal 0,2 1/d. Folglich muss die verbleibende Verlustrate von etwa 0,3 1/d bis 0,4 1/d auf Fressfeinde, in erster Linie herbivores Zooplankton und Muscheln, zurückzuführen sein. Da diese Fressfeinde in einer dynamischen Räuber-Beute-Beziehung mit den Algen stehen, ist der Fraßdruck und damit die Verlustrate zeitlich nicht konstant. Vor dem Hintergrund, dass über 50% der effektiven Verlustrate auf Fressfeinde zurückgeführt werden müssen, wird die grobe Vereinfachung einer konstanten Verlustrate markant deutlich. Hierdurch lassen sich auch einige der beobachteten Diskrepanzen erklären: Vermutlich wuchs die Populationsdichte des herbivoren Zooplanktons (vor allem Rotatorien) in der Folge der Algenblüte im Mai an, was sicherlich mit zum Zusammenbruch der Algenblüte im Juni beitrug. Demzufolge war die tatsächliche Gesamtverlustrate für Algen im April sicher wesentlich geringer als im Juni. Rechnet man nun mit einer mittleren Verlustrate über den gesamten Zeitraum, so werden die Algenverluste im Juni unterschätzt, der simulierte Rückgang der Algendichte (bzw. der Chl-a Konzentration) ist langsamer als in der Natur.

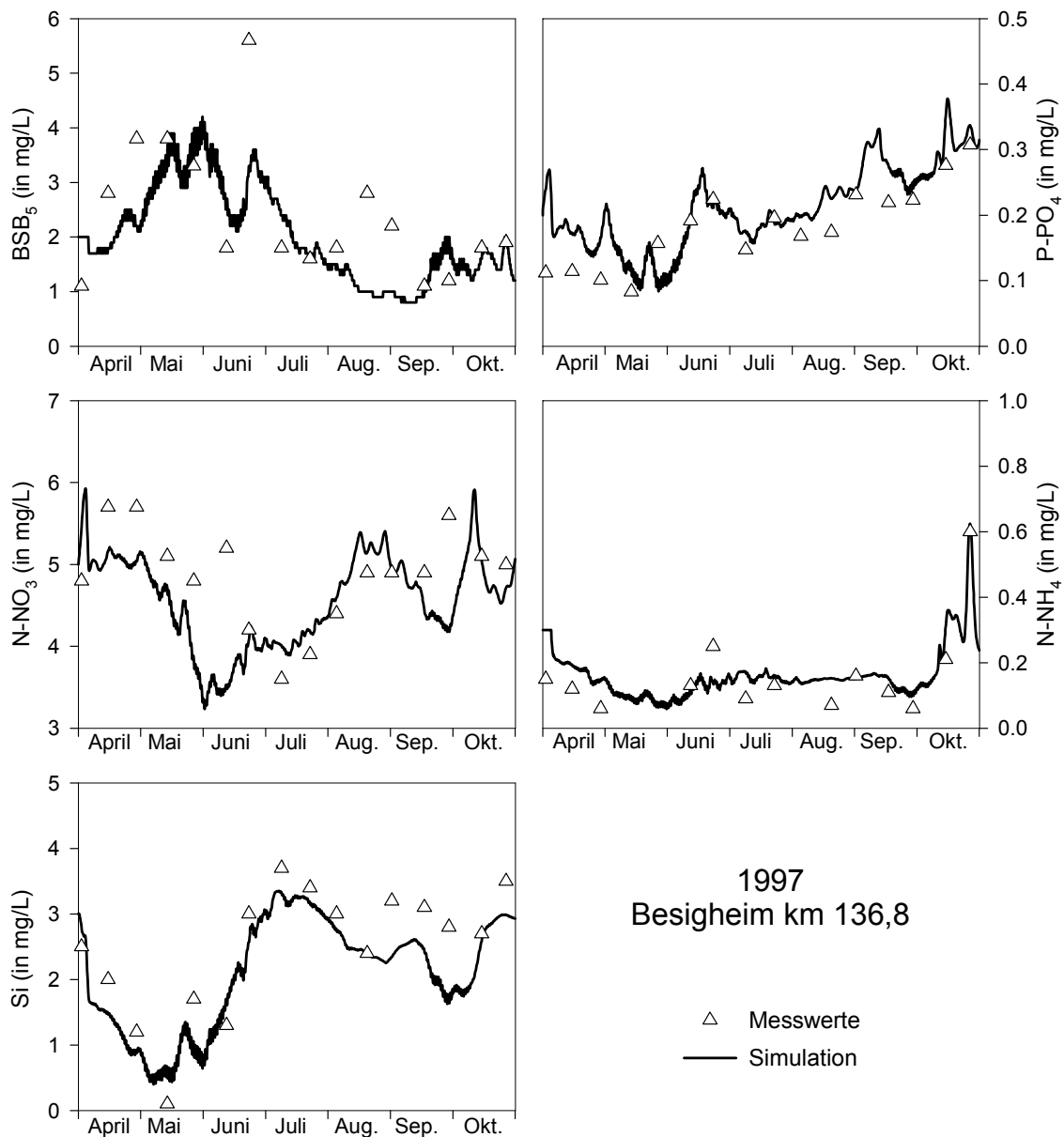


Abb. 8.10: Vergleich zwischen gemessenen und simulierten BSB_5 , $N-NH_4$, $N-NO_3$, $P-PO_4$ und Si Konzentrationen im Neckar bei Besigheim für das Sommerhalbjahr 1997.

Die insbesondere bei Pleidelsheim und Besigheim beobachtete Überschätzung der Sauerstoff- bzw. Algenkonzentration im Spätsommer lässt sich durch den Einfluss benthischer Filtrierer (Muscheln) erklären: Für gewöhnlich kann man davon ausgehen, dass die Biomassendichte der Muscheln im Frühjahr durchweg relativ gering ist, weshalb sie zu diesem Zeitpunkt nur einen geringen Fraßdruck auf das Phytoplankton ausüben. Durch die Ingestion und Assimilation von Algen erhöht sich die Muschelbiomasse im Allgemeinen während der Sommermonate. Dies bedingt, dass die benthischen Filtrierer speziell während des Spätsommers und Herbsts einen enormen Fraßdruck auf das Phytoplankton ausüben können, der insbesondere in unterstromigen Flussabschnitten in einer merklichen Reduktion der Algenbiomasse zum Tragen kommt (Pusch et al. 2001; Schöl et al. 1999; Welker und Walz 1998). Im vorliegenden Fall ist zudem zu berücksichtigen, dass die Abundanz der Dreikantmuschel *Dreissena polymorpha*, die sich durch eine besonders hohe Filtrierleistung auszeichnet, im Längsverlauf von Deizisau bis Besigheim zunimmt (siehe Kapitel 8.5.3). Dies würde erklären, weshalb die diskutierten Diskrepanzen vor allem an den unterstromigen Messstellen auftreten.

Aus obiger Diskussion lässt sich die Hypothese ableiten, dass ein Gutteil der beobachteten Diskrepanz zwischen Mess- und Simulationsergebnissen aus der stark vereinfachten Behandlung der Verlustprozesse der Algen herrührt. Folglich gilt es das BWQM in dieser Hinsicht zu verfeinern und zu erweitern. Dieser Forderung wird mit dem erweiterten Modellansatz, der im Kapitel 8.5 beschrieben wird, Rechnung getragen. Ein rigoroser Test der aufgestellten Hypothesen wird jedoch dadurch erschwert, dass die für die Modellerweiterung zusätzlich erforderlichen Daten zur Bestimmung der Rand- und Anfangsbedingungen nicht verfügbar sind. Dennoch kann die Plausibilität der Hypothesen auf der Grundlage geeigneter Schätzwerte überprüft werden.

Prognosefähigkeit: Die grobe Vereinfachung hinsichtlich der Algenverluste ist auch eine Hauptursache dafür, dass die Prognosefähigkeit des BWQM eingeschränkt ist. Auf Grundlage der Modellüberprüfung scheint das Modell geeignet, um Veränderungen der Sauerstoffkonzentrationen infolge technischer Belüftungsmaßnahmen vorherzusagen. So kann es verwendet werden, um die Effekte von Wehr- oder Turbinenbelüftung zu prognostizieren. Vorsicht ist allerdings dann geboten, wenn Veränderungen des biogenen Einflusses auf den Sauerstoffhaushalt vorhergesagt werden sollen. Dies wird am Beispiel einer möglichen Nährstofflimitierung veranschaulicht: Die Halbsättigungskonzentrationen der Nährstoffe konnten nicht kalibriert werden, da sie zum jetzigen Zeitpunkt offenbar nur geringen Einfluss auf Sauerstoffkonzentration und Algenwachstum haben. Folglich ist die Prognose einer Nährstofflimitierung selbst bei einer stabil bleibenden Artenzusammensetzung mit großen Unsicherheiten behaftet. Zudem ist davon auszugehen, dass sich die Biozönose infolge des Mangels eines spezifischen Nährstoffs verändert, z.B. würde Siliziummangel das vermehrte Aufkommen von Grünalgen fördern. Solche Konkurrenzprozesse können mit dem BWQM (und dem EWQM) nicht simuliert werden. Das BWQM scheint also zur Prognose des Sauerstoffhaushalts nur dann brauchbar, wenn keine maßgebliche Veränderung der Biozönose zu erwarten ist.

8.5 Das um Primärkonsumenten erweiterte Modell: EWQM

8.5.1 Grundlegendes

Ausgehend von den Hypothesen, die auf Grundlage der Diskrepanzen zwischen den Simulationsergebnissen des BWQM und den Messdaten aufgestellt wurden, wurde das BWQM zum EWQM (Extended Water Quality Model) weiterentwickelt. Das zugrunde liegende Strömungs- und Transportmodell wurde dabei nicht verändert.

Wie Abbildung 8.3 verdeutlicht hat das Stoffhaushaltsmodell des EWQM den selben Kern wie BWQM. Über die im Basismodell betrachteten Zielgrößen hinaus werden mit dem erweiterten Modell jedoch auch Primärkonsumenten simuliert, d.h. herbivores Zooplankton und benthische Filtrierer werden im EWQM ausdrücklich berücksichtigt. Hieraus erwachsen Unterschiede zu BWQM hinsichtlich der Algenverlustprozesse (explizite Berücksichtigung des Fraßes), der Sauerstoffzehrung (Respiration der Primärkonsumenten), und des Nährstoffrecyclings (siehe Abb. 8.3).

Zeitlich aufgelöste Messdaten zum Zooplankton liegen nur für einzelne Jahre vor (1991, 1995, 1996). Bezüglich der benthischen Besiedlung im Neckar liegen nur halbquantitative Angaben zu Fundhäufigkeiten in einer äußerst groben räumlichen und zeitlichen Auflösung vor. Daten zur Alters- bzw. Größenstruktur der Benthosorganismen sind nicht verfügbar, wenngleich diese für eine korrekte modellhafte Beschreibung der benthischen Filtrierleistung eigentlich notwendig wären (Schöl et al. 1999; Schöl et al. 2002). Hieraus wird deutlich, dass EWQM nicht ausschließlich auf Messdaten basieren kann und eine Überprüfung der Simulationsergebnisse für die Konsumenten nur bedingt möglich ist. EWQM dient damit in erster Linie zur qualitativen Überprüfung der Hypothesen und zur Systemanalyse.

8.5.2 Das Stoffhaushaltsmodell in EWQM

Infolge der Modellerweiterung müssen einige zusätzliche Parameter und algebraische Gleichungen berücksichtigt werden. Neben der Berücksichtigung von zwei weiteren Differentialgleichungen zur Beschreibung der Dynamik von herbivorem Zooplankton und benthischen Filtrierern, müssen auch die Differentialgleichungen für Sauerstoff, Chlorophyll-a, organisch gebundenen Phosphor, organisch gebunde-

nen Stickstoff und Silizium erweitert werden. Alle zusätzlich zu berücksichtigenden Parameter und algebraischen Gleichungen sowie die veränderten Differentialgleichungen sind im Anhang zusammengestellt. Aufgrund ihrer zentralen Bedeutung für den Sauerstoffhaushalt werden im Folgenden die Modellgleichungen für Sauerstoff, Phytoplankton, herbivores Zooplankton und benthische Filtrierer näher erläutert. Da es das Verständnis vereinfacht werden zunächst die beiden neuen Bausteine erklärt.

Herbivores Zooplankton

Die durch gewässerinterne Prozesse bedingte Konzentrationsänderung des herbivoren Zooplanktons wird im EWQM durch die folgende Gleichung beschrieben:

$$\frac{dZoo}{dt} = a_{Chl} \cdot Filt_{Zoo} \cdot \varepsilon_{Zoo} \cdot Chl \cdot F_{Chl} \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Zoo - \left(R_{base,Zoo} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Zoo} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Zoo} \cdot \varepsilon_{Zoo} \cdot Chl \cdot F_{Chl} \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \right) \cdot Zoo \quad (8.15)$$

Hierin sind a_{Chl} der Umrechnungsfaktor von Chlorophyll-a in Algenbiomasse, $Filt_{Zoo}$ die Filtrationsrate des Zooplanktons (in L je mg Biomasse je Tag), ε_{Zoo} der relative Anteil der ingestierten Biomasse, der assimiliert wird, F_{Chl} die Hemmung des Zooplanktonwachstums durch Nahrungsmangel (Phytoplanktonmangel), $R_{base,Zoo}$ die Basisverlustrate des Zooplanktons (Grundrespiration und Mortalität), $r_{R,Zoo}$ der relative Anteil der assimilierten Nahrung, der direkt veratmet wird und Zoo die Konzentration der Biomasse herbivoren Zooplanktons. Sowohl bei der Respiration als auch beim Wachstum wird der Einfluss der Temperatur mit Temperaturkorrekturkoeffizienten Θ berücksichtigt.

Der Konvertierungsfaktor a_{Chl} wird notwendig, weil das Zooplankton als Biomasse ausgedrückt wird, während für Phytoplankton die Messgröße Chl-a als Ersatz für die Biomasse fungiert. Die Hemmung der Filtrationsleistung durch Nahrungsmangel F_{Chl} wird mit Hilfe einer Monod-Kinetik beschrieben (Anhang). Die Entwicklung des herbivoren Zooplanktons wird folglich durch zwei gegenläufige Prozesse gesteuert: Das Wachstum infolge der Nahrungsaufnahme durch Filtration und das Absterben durch Respiration und Altersmortalität. Verluste durch Fressfeinde (carnivores Zooplankton oder Fische) werden in der Grundverlustrate implizit berücksichtigt. Aufgrund der Eigenbeweglichkeit des Zooplanktons sind Sedimentationsverluste zu vernachlässigen (Lampert und Sommer 1993).

Benthische Filtrierer - Muscheln

Die benthischen Filtrierer sind ortsfest am Gewässerbett lokalisiert. Im Gegensatz zu allen bislang betrachteten Zielgrößen unterliegen sie also nicht dem advektiv-dispersiven Transport. Allgemein ist die Biozönose des Gewässerbetts sehr heterogen zusammengesetzt (Brehm und Meijering 1990; Lampert und Sommer 1993). In größeren Flüssen sind hinsichtlich der Interaktion mit Phytoplankton jedoch die Muscheln – und häufig insbesondere die Wandermuschel (Dreikantmuschel) *Dreissena polymorpha* – entscheidend (Bachmann und Usseglio-Pollatera 1999; Caracao et al. 1997; Pusch et al. 2001; Schöl et al. 2002; Welker und Walz 1998). Unveröffentlichte Daten der LfU Baden-Württemberg, die freundlicher Weise von Herrn Vobis und Frau Semmler-Elpers zur Verfügung gestellt wurden, belegen, dass dies auch auf den Neckar zutrifft. Die in den neunziger Jahren neu eingewanderten Muscheln der Gattung *Corbicula*, deren Bedeutung in anderen Gewässern zunimmt (Schöl et al. 2002), sind im Neckar offenkundig (noch) relativ unwichtig (Abb. 8.11). Dies trifft umso mehr zu, da die Filtrierleistung von *Corbicula* nur etwa 20% jener der Dreikantmuschel beträgt (Schöl, mündliche Mitteilung).

Die Dynamik von *Dreissena polymorpha* am Gewässerbett wird durch die folgende Differentialgleichung beschrieben:

$$\frac{dBen}{dt} = a_{Chl} \cdot Filt_{Ben} \cdot \varepsilon_{Ben} \cdot Chl \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben - \left(R_{base,Ben} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Ben} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Ben} \cdot \varepsilon_{Ben} \cdot Chl \cdot F_{tot,Ben} \right) \cdot Ben \quad (8.16)$$

Wobei Ben die Biomassendichte der Muscheln (in g/m^2) an der Sedimentoberfläche ist. $F_{tot,Ben}$ ist ein Faktor, der die Hemmung des Muschelwachstums durch Nahrungsmangel (Phytoplanktonmangel) und nicht optimale Temperaturen zusammenfasst. Alle anderen Variablen sind analog zu den für Gleichung

8.15 beschriebenen Größen. Prinzipiell wird die Dynamik der Muscheln also ähnlich wie die des herbivoren Zooplanktons beschrieben, wobei sich im Detail allerdings einige Unterschiede ergeben: Der relative Anteil der ingestierten Nahrung, der assimiliert wird, wird bei den Muscheln in Abhängigkeit vom Nahrungsangebot ausgedrückt. Gemäß Schneider (1992) ergibt sich für *D. polymorpha* folgende Abhängigkeit:

$$\varepsilon_{Ben} = MAX \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{min,Ben} \\ \varepsilon_{max,Ben} - 10 \cdot Chl \end{array} \right\} \quad (8.16)$$

Wobei die Chlorophyll-a Konzentration (Chl) in mg/L angegeben ist. Bei geringer Nahrungsversorgung wird also ein größerer Anteil des ingestierten Phytoplanktons verwertet. Ab Chl-a Konzentrationen von 0,05 mg/L liegt die minimale Verwertungsrate vor.

Die Gesamthemmung des Muschelwachstums ergibt sich aus dem Produkt der Hemmung infolge von Nahrungsmangel $F_{food,Ben}$ und der Hemmung infolge des Temperatureinflusses $F_{Tw,Ben}$:

$$F_{tot,Ben} = F_{Tw,Ben} \cdot F_{food,Ben} \quad (8.17)$$

Im Unterschied zum herbivoren Zooplankton wird der Temperatureinfluss auf die Filtrationsrate nicht mit dem Arrhenius-Ansatz beschrieben, vielmehr werden die von Kuntzmann (1989) erhobenen Daten für die Temperaturabhängigkeit von *D. polymorpha* wie folgt angenähert (Schöl et al. 1999):

$$F_{Tw,Ben} = \exp\left(-0,00605 \cdot (T_{w_{Opt,Ben}} - T_w)^2\right) \quad (8.18)$$

Als optimale Temperatur $T_{w_{Opt,Ben}}$ gibt Kuntzmann (1989) 20°C an, bei höheren Temperaturen sinkt die Filtrationsrate wieder ab.

Auf Grundlage der Ergebnisse von Walz (1978) kann die Nahrungslimitierung von *D. polymorpha* mit einem linearen Ansatz besser beschrieben werden, als mit einer Monod-Kinetik.

$$F_{food,Ben} = MIN \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ \frac{Food_{Opt,Ben}}{Chl} \end{array} \right\} \quad (8.19)$$

Unterschreitet das Nahrungsangebot also den Optimalwert $Food_{Opt,Ben}$, sinkt der Wert des Hemmungsfaktors linear mit dem abnehmenden Chl-a Gehalt.

Phytoplankton – Chlorophyll-a

Die Phytoplanktonkonzentrationen werden wie im BWQM in Form von Chl-a ausgedrückt. Die maßgebliche Differentialgleichung für den gewässerinternen Umsatz der pelagischen Algen ändert sich im EWQM jedoch durch die Einbeziehung der Fressfeinde. Darüber hinaus wird im EWQM die an die Photosynthese geknüpfte Photorespiration getrennt von der Basisrespiration und Mortalität betrachtet. Hieraus ergibt sich die folgende Differentialgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{dChl}{dt} = & M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - \left(R_{base,Chl} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{photo} \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \right) \cdot Chl - \frac{S_{Chl}}{y} \cdot Chl \\ & - Filt_{Zoo} \cdot F_{Chl} \cdot Zoo \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Chl - \frac{P}{A} \cdot Filt_{Ben} \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben \cdot Chl \end{aligned} \quad (8.20)$$

Hierin sind $R_{base,Chl}$ die Grundrespirationsrate inklusive Mortalität der Algen, r_{photo} der relative Anteil der Photorespiration an der aktuellen Wachstumsrate und P/A das Verhältnis zwischen benetztem Umfang und durchflossenem Querschnitt. Die Verluste infolge des Fraßes durch Muscheln müssen um den Faktor P/A korrigiert werden, da die Muscheldichte sich auf die zur Verfügung stehende Fläche am Gewässerbett und nicht auf eine Konzentration im Freiwasser bezieht. Hinsichtlich des Wachstumsprozesses und der Sedimentation ergeben sich keine Unterschiede zum BWQM (siehe Gleichung 8.2). Die Algenverlustprozesse werden im EWQM jedoch wesentlich differenzierter betrachtet: Durch die Trennung von Basisrespiration und Mortalität von der Photorespiration ergeben sich deutlich unterschiedliche Gesamt-

respirationsraten je nach den vorherrschenden Wachstumsbedingungen. Die durch den Fraß von Zooplankton und Muscheln bedingten Verluste hängen in Erster Linie von der aktuellen Biomasse der beiden Konsumentenklassen selbst ab. Insgesamt unterliegt die Verlustrate des Phytoplanktons im EWQM damit einer wesentlich höheren Dynamik als im BWQM.

Sauerstoff

Die für die Sauerstoffkonzentration maßgebliche Differentialgleichung erweitert sich durch die zusätzlich berücksichtigten Prozesse und nimmt folgende Form an:

$$\begin{aligned}
 \frac{dO_2}{dt} = & -K_1 \cdot \Theta_{K1}^{(T_w-20)} \cdot BSB - 4,3 \cdot B_1 \cdot O_{2,corrB1} \cdot \Theta_{B1}^{(T_w-20)} \cdot NH_4 \\
 & + k_2 \cdot \Theta_{k2}^{(T_w-20)} \cdot (O_{2,sat} - O_2) - \frac{SSB}{y} \cdot \Theta_{SSB}^{(T_w-20)} \\
 & + a_3 \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - a_4 \cdot \left(R_{base,Chl} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{photo} \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \right) \cdot Chl \\
 & - a_4 \cdot (1 - \varepsilon_{Zoo}) \cdot Filt_{Zoo} \cdot F_{Chl} \cdot Zoo \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Chl \\
 & - \frac{a_4}{a_{Chl}} \cdot \left(R_{base,Zoo} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Zoo} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Zoo} \cdot \varepsilon_{Zoo} \cdot Chl \cdot F_{Chl} \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \right) \cdot Zoo \\
 & - \frac{P}{A} \cdot a_4 \cdot (1 - \varepsilon_{Ben}) \cdot Filt_{Ben} \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben \cdot Chl \\
 & - \frac{P}{A} \cdot \frac{a_4}{a_{Chl}} \cdot \left(R_{base,Ben} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Ben} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Ben} \cdot \varepsilon_{Ben} \cdot Chl \cdot F_{tot,Ben} \right) \cdot Ben
 \end{aligned} \tag{8.21}$$

Der BSB-Abbau, die Nitrifikation, die Wiederbelüftung, der sedimentäre Sauerstoffbedarf und die Sauerstoffproduktion durch die Photosynthese haben sich gegenüber BWQM nicht verändert (siehe Gleichung 8.1). Alle anderen Verlustprozesse wurden im BWQM aber mit Hilfe des effektiven Parameters R als einzelner (zusammengefasster) Prozess beschrieben. Im EWQM werden diese Sauerstoffverlustprozesse differenziert in die Respiration der Algen (dritte Zeile), die Respiration der Zooplankter (fünfte Zeile), die Respiration der Muscheln (siebte Zeile) und den Sauerstoffverlust infolge der Nahrungsanteile, die nicht assimiliert werden (vierte und sechste Zeile). Diese nicht verwerteten Ausscheidungsprodukte liegen zunächst als tote Biomasse vor, deren heterotropher Abbau zur Sauerstoffzehrung führt. Der Zwischenschritt der toten organischen Biomasse wird im Modell unterschlagen, was aber gerechtfertigt scheint, da die Algenbiomasse zum Großteil sehr schnell abgebaut wird. Zudem ist zu vermerken, dass im Modell davon ausgegangen wird, dass auch die von den Muscheln ausgeschiedene Algenbiomasse in vollem Umfang zur Sauerstoffzehrung beiträgt, also nicht implizit im SSB berücksichtigt wird.

8.5.3 Wahl der Parameterwerte im EWQM

Ausgangssituation

Durch die Erweiterung gegenüber dem BWQM wurden zusätzliche Parameter in das Modell integriert, deren Werte es zu bestimmen gilt. Die Veränderung der Struktur bedingt es zusätzlich, dass die für das BWQM abgeleiteten Parameterwerte im EWQM möglicherweise nicht mehr gültig sind. Grundsätzlich müssten daher alle Parameterwerte in Frage gestellt und neu kalibriert werden. Eine strikte inverse Kalibrierung, wie sie für das BWQM durchgeführt wurde, ist aber nicht möglich, da neben den Parameterwerten auch die nicht bekannten Anfangsbedingungen für die Muscheldichte und die Randbedingungen für das herbivore Zooplankton, die Simulationsergebnisse maßgeblich beeinflussen. Daher müssen im Falle des EWQM zunächst die Parameterwerte sowie die Anfangsbedingungen für die Muscheln und die Randbedingungen für das herbivore Zooplankton aus der Kenntnis des Systems heraus mit Hilfe von Literaturdaten möglichst exakt geschätzt werden. Auf Grundlage des Vergleichs zwischen Simulationsergebnissen und Messungen müssen dann einzelne, möglichst wenige, als sensitiv erachtete Parameter innerhalb plausibler Bereiche variiert werden, um eine bessere Anpassung des Modells an die Messdaten zu erreichen.

Parameterwerte

Grundsätzlich wurden die bereits im BWQM verwendeten Parameter auf ihren Werten belassen, da diese auch als repräsentativ für den erweiterten Modellansatz angesehen wurden. Für die zusätzlichen Parameter wurden möglichst exakte Angaben aus der Literatur übernommen (Tab. 8.6).

Tab. 8.6: Werte der zusätzlichen Parameter des EWQM und gegenüber dem BWQM geänderte Parameterwerte.

Parameter	Einheit	Wert	Bedeutung des Parameters	Quelle
a_{Chl}	-	100	Umrechnung von Chl-a in Algenbiomasse	ATV (1998)
$\text{Filt}_{\text{Ben.}}$	L/mg/d	0,025	Filtrierrate für <i>Dreissena polymorpha</i>	Schöl et al. (1999)
Filt_{Zoo}	L/mg/d	0,4	Filtrierrate für herbivores Zooplankton (Rotatorien)	Anpassung
$\text{Food}_{\text{Opt,Ben}}$	mg/L	0,05	Optimale Chl-a Konz. für das Muschelwachstum	Walz (1978)
K_{Chl}	mg/L	0,075	Halbsättigungskonz. von Chl-a für Zooplanktonfraß	ATV (1998)
$R_{\text{base,Ben}}$	1/d	0,0018	Grundreparation + Mortalität bei <i>Dreissena polymorpha</i>	Schneider (1992)
$R_{\text{base,Chl}}$	1/d	0,15	Grundreparation + Mortalität der Algen	Kirchesch (pers. Mit.)
$R_{\text{base,Zoo}}$	1/d	0,15	Grundreparation + Mortalität des herb. Zooplanktons	Kirchesch (pers. Mit.)
r_{photo}	-	0,1	Anteil der Photorespiration am aktuellen Wachstum	Gelda et al. (2001)
$r_{\text{R,Ben}}$	-	0,15	Anteil direkt veratmeter Nahrung bei Muscheln	Ebenhöh et al. (1995)
$r_{\text{R,Zoo}}$	-	0,4	Anteil direkt veratmeter Nahrung beim Zooplankton	Chapra (1997)
$TW_{\text{Opt,Ben}}$	°C	20	Optimaltemperatur für Muschelwachstum	Kuntzmann (1989)
$\epsilon_{\text{max,Ben}}$	-	0,65	Max. assimilierter Anteil ingestierter Nahrung (Muscheln)	Schneider (1992)
$\epsilon_{\text{min,Ben}}$	-	0,15	Min. assimilierter Anteil ingestierter Nahrung (Muscheln)	Schneider (1992)
ϵ_{Zoo}	-	0,6	Assimilierter Anteil der ingestierten Nahrung (Zoopl.)	Kirchesch (pers. Mit.)
Θ_{R}	-	1,08	Temperaturkorrekturfaktor der Verlustraten	Chapra (1997)
Θ_{Zoo}	-	1,08	Temperaturkorrekturfaktor für Zooplanktonwachstum	Chapra (1997)

Zusätzlich geänderter Parameterwert

M_{max}	1/d	1,5	Max. Algenwachstumsrate unter opt. Bedingungen	Anpassung
------------------	-----	-----	--	-----------

Herbivores Zooplankton: Auf Grundlage der Zooplanktonbestimmungen der Jahre 1991 (Hoppe 1992), 1995 und 1996 (Backhaus und Matthias 1997b), wird deutlich, dass das herbivore Zooplankton von Rotatorien (Rädertierchen) der Gattung *Brachionus* dominiert wird. Entsprechend wurden für die Modellierung des herbivoren Zooplanktons Daten der Rotatorienart *Brachionus angularis* übernommen, die freundlicher Weise von Herrn Kirchesch (BfG, Koblenz) zur Verfügung gestellt bzw. aus dem ATV-FGSM abgeleitet wurden. Die Filtrierleistung des herbivoren Zooplanktons wurde im Zuge der nachfolgenden Anpassung jedoch von 0,26 auf 0,4 Liter je Gramm Zooplanktonbiomasse und Tag erhöht (Tab. 8.6). Neben den herbivoren Rädertierchen treten im Neckar zeitweise auch größere Crustaceen (Kleinkrebse) in relevanten Individuendichten auf. Hierunter fallen vor allem die herbivoren Cladoceren (Wasserflöhe) und die überwiegend carnivoren Copepoden (Hüpfertlinge) (Lampert und Sommer 1993; Müller 2001a). Neben den Rotatorien können somit auch die Cladoceren für die Erniedrigung der Phytoplanktondichte mit verantwortlich sein, wobei die Filtrationsrate je Biomasse in etwa gleich groß ist. Dies erschwert eine exakte Zuordnung der simulierten Zooplanktonbiomasse zu der Rotatorienbiomasse. Die Copepoden ernähren sich hingegen in erster Linie vom herbivoren Zooplankton, werden im Modell also implizit in der Mortalität des herbivoren Zooplanktons berücksichtigt.

Für das Jahr 1996 lagen Messungen zur Individuendichte des herbivoren Zooplanktons (Rotatorien und Cladoceren) am oberstromigen Rand vor, die auf Grundlage der Angaben in ATV (1998) in Biomassenkonzentrationen umgerechnet wurden. Für die Jahre 1997 und 1998 wurden die Zuflusskonzentrationen

des herbivoren Zooplanktons, auf Grundlage der vorliegenden Messdaten der Jahre 1991, 1995 und 1996 anhand der Beziehungen zur Chl-a Konzentration und zur Wassertemperatur abgeschätzt.

Benthische Filtrierer – *Dreissena polymorpha*: Hinsichtlich der heterogenen benthischen Fauna richtet sich die Parameterwahl nach der für die Filtration von Phytoplankton wichtigsten Art, der Muschel *Dreissena polymorpha*. Die Filtrationsrate dieser Muschel hängt von ihrem Entwicklungsstadium ab. Generell fällt die Filtrationsrate je Biomasse mit zunehmendem Körpergewicht und nähert sich asymptotischen einem Minimalwert an (Kryger und Riisgard 1988; Schöl et al. 1999). Die Angaben über die Filtrierleistung von *Dreissena polymorpha* (bei gleichem Körpergewicht) variieren jedoch stärker als die Veränderungen über die Entwicklung der Muscheln (Übersicht bei Kryger und Riisgard 1988). Vor diesem Hintergrund und da hinsichtlich der Größen- bzw. Gewichtsstruktur von *Dreissena polymorpha* im Neckar ohnehin keine Angaben vorlagen, wurde mit einer mittleren, über das Jahr hinweg unveränderlichen Filtrierleistung gearbeitet. Die gewählte Filtrierleistung von 0,025 Litern je mg Biomasse und Tag entspricht in etwa den Werten wie sie von Walz (1978) und Stanczykowska et al. (1976) in Labor bzw. Feldversuchen für Muscheln mit Trockenbiomassen im Bereich von 0,025 g bis 0,1 g je Individuum ermittelt wurden.

Um die Anfangsbedingung für die benthische Besiedlung mit *Dreissena polymorpha* für den 1. April abzuschätzen, wurden zunächst die Ergebnisse der Makrozoobenthosuntersuchungen der Jahre 1995 und 1998 durch die LfU Baden-Württemberg herangezogen. Abbildung 8.11 zeigt die Untersuchungsergebnisse für *Dreissena polymorpha* und die Gattung *Corbicula* vom Juni 1998. Die erhobene Individuenhäufigkeit kann nicht in eine Individuendichte je Quadratmeter überführt werden (Semmler-Elpers, mündliche Mitteilung). Allerdings wird aus Abbildung 8.4 deutlich, dass *Corbicula* keine wichtige Rolle spielt. Zudem nimmt die Fundhäufigkeit von *Dreissena polymorpha* im Längsverlauf des Modellgebiets zu. Dies deckt sich mit den nicht dargestellten Befunden des Jahres 1995, in dem auch Beprobungen zwischen km 203 und 180 durchgeführt jedoch nur wenige Dreikantmuscheln gefunden wurden. Vermutlich ist die Zunahme der Muschelhäufigkeit in Fließrichtung auch auf die im staugeregelten Bereich zunehmende Algenkonzentration und die hieraus resultierende bessere Futterversorgung zurückzuführen.

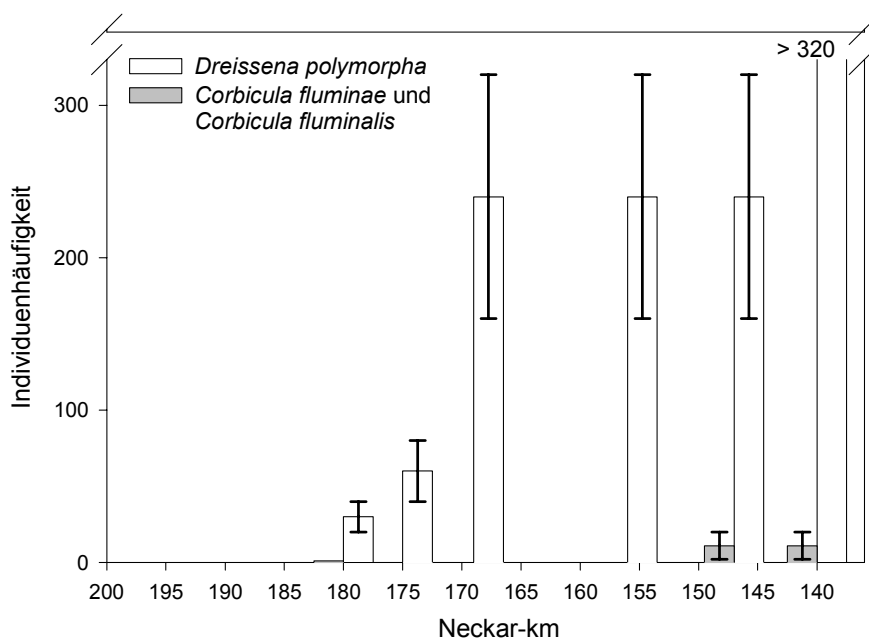


Abb. 8.11: Häufigkeit von Muscheln der Gattungen *Dreissena* und *Corbicula* bei der Benthosuntersuchung im Juni 1998 (Daten der LfU Baden-Württemberg).

In der Natur treten die Muscheln in äußerst heterogenen Mustern auf, die sich vor allem durch die Habitateansprüche ergeben (Bachmann und Usseglio-Pollatera 1999). *Dreissena polymorpha* bevorzugt generell grobes Substrat, was darauf schließen lässt, dass die Dreikantmuschel vor allem in den mit Flussbauwerken verbauten Uferzonen und in den oberstromigen Bereichen der Stauhaltungen zu finden ist, wäh-

rend sie in den durch Feinablagerungen dominierten Staubereichen direkt oberhalb der Wehre selten sein dürfte. Da bezüglich der Substratverteilung innerhalb des Neckars zu wenig bekannt ist, um hieraus Rückschlüsse auf die Besiedlungsdichte zu ziehen, wurde grundsätzlich von einer homogenen Verteilung der Muscheln über den gesamten benetzten Umfang ausgegangen. Weiterhin wurde auf Grundlage der Benthosuntersuchungen angenommen, dass die Besiedlungsdichte im Längsverlauf linear zunimmt (vgl. Abb. 8.11). Für die Wahl geeigneter Biomassendichten wurde von Erfahrungen aus der Mosel (Bachmann et al. 1997; Schöl et al. 1999) und dem Rhein (Jantz und Schöll 1998; Schöl et al. 2002) ausgegangen: Hierauf aufbauend wurde angenommen, dass die Biomassendichte jeweils zum 1. April von $0,1 \text{ g/m}^2$ bei km 202 (Deizisau) auf 5 g/m^2 bei km 137 (Besigheim) ansteigt. Diese Vorgehensweise stellt zweifellos eine grobe Vereinfachung der tatsächlichen Verhältnisse dar, repräsentiert aber den aktuellen Stand der Systemkenntnisse.

Angepasste Parameterwerte: Neben den neu zu bestimmenden Parameterwerten erfolgte eine Anpassung von zwei Parametern auf Grundlage des Vergleichs von Simulationen und Messungen. Neben der Filtrationsrate des herbivoren Zooplanktons (siehe oben) musste auch die maximale Wachstumsrate der Algen gegenüber dem BWQM stark erniedrigt werden. Nur durch den relativ niedrigen Werte von $1,5 \text{ 1/d}$, der auch im Modell von Gelda et al. (2001) verwendet wurde, konnte gewährleistet werden, dass die Chl-a Konzentration nicht durchgehend überschätzt wurde (Tab. 8.6).

8.5.4 Simulationsergebnisse mit dem EWQM

Wie im Falle des BWQM wurden auch mit dem EWQM die Monate April bis einschließlich Oktober der Jahre 1996 bis 1998 für das gesamte Modellgebiet simuliert. Im Anhang findet sich für alle drei Jahre ein Vergleich zwischen den simulierten und gemessenen Konzentrationen von O_2 , Chl-a, BSB_5 und den Nährstoffen an den Stationen Poppenweiler und Besigheim.

Sauerstoff und Phytoplankton

Abbildung 8.12 liefert einen Vergleich der mit EWQM berechneten O_2 und Chl-a Konzentrationen mit den zugehörigen Messwerten. Generell werden die Messwerte ähnlich gut nachvollzogen wie bei Anwendung des BWQM (vgl. Abb. 8.8). Dies trifft auch auf andere Jahre zu (vgl. Anhang C). Auffällig ist, dass die simulierten Chl-a Werte Ende Mai und Anfang Juni genau wie beim BWQM wesentlich langsamer zurück gehen als die gemessenen Werte. Das zweite Sauerstoffmaximum in diesem Zeitraum wird an den Stationen Pleidelsheim und Besigheim wesentlich stärker überschätzt als bei der Simulation mit dem BWQM. Hieraus wird deutlich, dass die erste aus den Ergebnissen des BWQM abgeleitete Hypothese, wonach der in der Simulation gegenüber den Messungen verzögerte Rückgang der Algendichte Anfang Juni auf die stark vereinfachte Abbildung der Algenverlustprozesse zurückzuführen ist, nicht bestätigt werden kann.

Im Gegensatz dazu werden die Chl-a Konzentrationen in Besigheim sowie O_2 in Pleidelsheim und Besigheim im späten September deutlich besser nachvollzogen als mit BWQM. Dies deutet darauf hin, dass die zweite im Zusammenhang mit den Ergebnissen des BWQM aufgestellte Hypothese, wonach der verstärkte Einfluss benthischer Filtrierer für die geringeren Chl-a Konzentrationen in Besigheim verantwortlich ist, bestätigt werden konnte. Wenngleich sehr große Unsicherheiten bezüglich der getroffenen Annahmen bestehen, muss das Ergebnis als deutlicher Hinweis auf den Einfluss der filtrierenden Muscheln auf die Phytoplanktondichte und den Sauerstoffhaushalt gewertet werden. Auch diese Erkenntnis wird in Kapitel 9 weiter vertieft.

BSB₅ und Nährstoffe

Hinsichtlich der Simulation von BSB_5 und Nährstoffen ergeben sich bei der Anwendung des EWQM kaum Unterschiede zum BWQM (siehe Anhang). Die Übereinstimmung zwischen Rechenergebnissen und Messwerten ist generell zufriedenstellend.

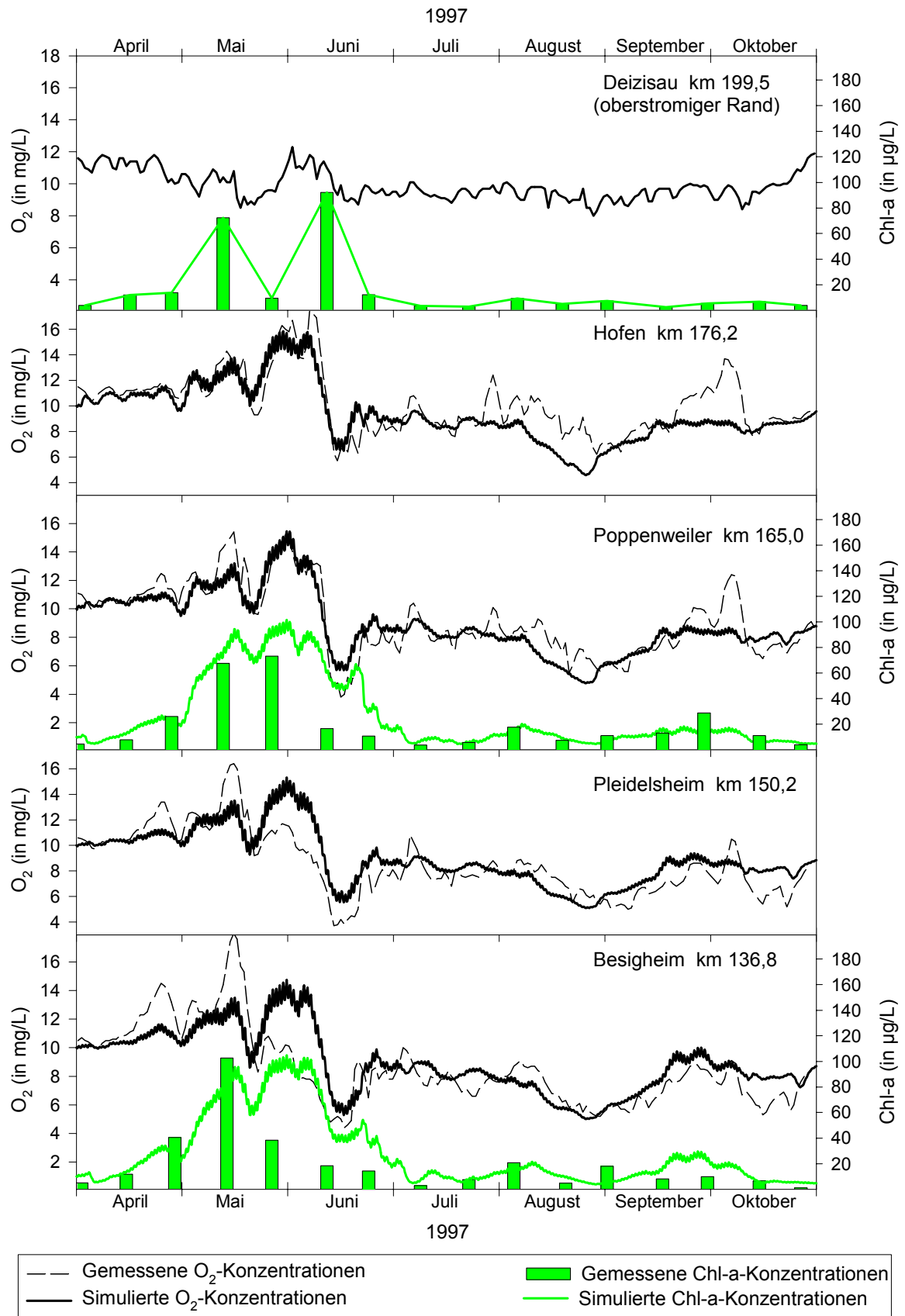


Abb. 8.12: Vergleich zwischen gemessenen und mit dem EWQM simulierten Chl-a und O₂ Konzentrationen im Neckar für das Sommerhalbjahr 1997.

Herbivores Zooplankton

Eine Überprüfung der Simulationsergebnisse für herbivores Zooplankton ist nur für das Jahr 1996 möglich, da nur für dieses Jahr Messungen zum Zooplankton in Deizasau und Poppenweiler vorliegen. Die gemessenen Individuenzahlen wurden mit Hilfe der in ATV (1998) angegebenen Beziehungen in Biomassen umgerechnet. Hiernach beträgt die durchschnittliche Masse eines Rädertierchens $0,1 \mu\text{g}$ und die eines Wasserfloh $10 \mu\text{g}$.

In Abbildung 8.13 ist der Vergleich zwischen Messwerten und Simulationsergebnissen wiedergegeben. Hierbei ist zu beachten, dass es sich bei den hohen Cladocerenbiomassen Ende April und Anfang Mai lediglich um 3 bzw. 4 Individuen je Liter handelt, die Messung also mit erheblichen Ungenauigkeiten verbunden sein kann. Insgesamt stimmen Simulation und Messungen recht gut überein. Lediglich die hohe Rotatoriendichte Anfang August (entspricht 541 Individuen je Liter) wird durch das Modell deutlich unterschätzt.

In den Jahren 1997 und 1998 traten im Neckar wesentlich höhere Algendichten auf als 1996, so dass sich in diesen Jahren zweifellos auch wesentlich größere Populationsdichten des herbivoren Zooplanktons aufbauen konnten. In den Simulationsergebnissen spiegelt sich dies darin wider, dass die maximalen berechneten Biomassenkonzentrationen bei Poppenweiler 1997 $1,0 \text{ mg/L}$ und 1998 sogar $1,3 \text{ mg/L}$ erreichten. Hoppe (1992) fand im Jahr 1991 im Neckar bei Poppenweiler maximal 12.000 Rotatorien und maximal 70 Cladoceren. Dies entspricht Biomassenkonzentrationen von ca. $1,2 \text{ mg/L}$ bzw. $0,7 \text{ mg/L}$. Vor diesem Hintergrund erscheinen die Simulationsergebnisse auch für diese beiden Jahre plausibel zu sein, wengleich die berechneten Biomassenkonzentrationen im Vergleich mit anderen Gewässern relativ hoch erscheinen (Gosselain et al. 1998).

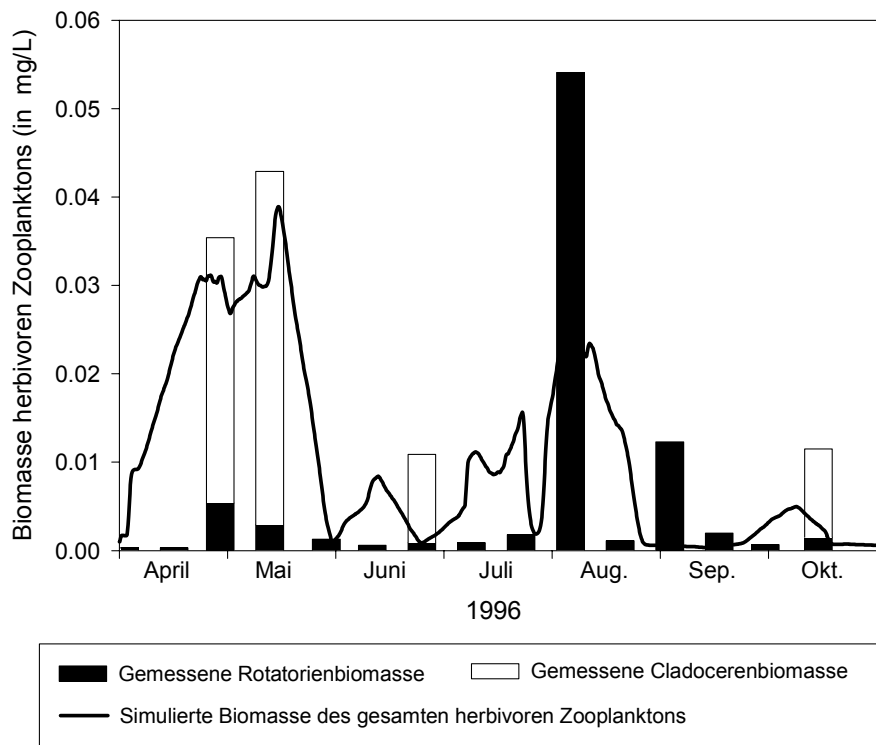


Abb. 8.13: Vergleich zwischen gemessenen und mit EWQM simulierten Konzentrationen herbivoren Zooplanktons im Neckar bei Poppenweiler für das Sommerhalbjahr 1996.

Benthische Filtrierer – *Dreissena polymorpha*

Eine direkte Überprüfung der simulierten Biomassen der Muscheln ist aufgrund der Datenlage nicht möglich (siehe oben). Daher können die Simulationsergebnisse durch den Vergleich mit anderen Flüssen lediglich plausibilisiert werden. In Abbildung 8.14 sind die an zwei Standorten simulierten Biomassenentwicklungen für das Jahr 1997 dargestellt.

Ausgehend von den unterschiedlichen Anfangsbedingungen verfünffacht bzw. versechsfacht sich die Biomassendichte bei Poppenweiler bzw. Besigheim. Wobei Ende Oktober bei Besigheim die maximalen Biomassendichten von ca. 30 g/m² simuliert werden. Das Wachstum entspricht in etwa den experimentellen Befunden von Bachmann et al. (1997) für die Mosel zwischen km 259 und km 213, wonach die Biomassendichte von *Dreissena polymorpha* zwischen Frühjahr und Herbst 1994 etwa um den Faktor 7,5 zunahm. Simulationen des Jahres 1994 für Saar und Mosel, die von Schöl et al. (1999) mit QSIM durchgeführt wurden, lieferten ähnliche Ergebnisse. Hieraus kann gefolgert werden, dass die für den Neckar erzielten Simulationsergebnisse hinsichtlich der benthischen Filtrierer zumindest plausibel sind, wenngleich eine weitergehende Überprüfung wünschenswert wäre.

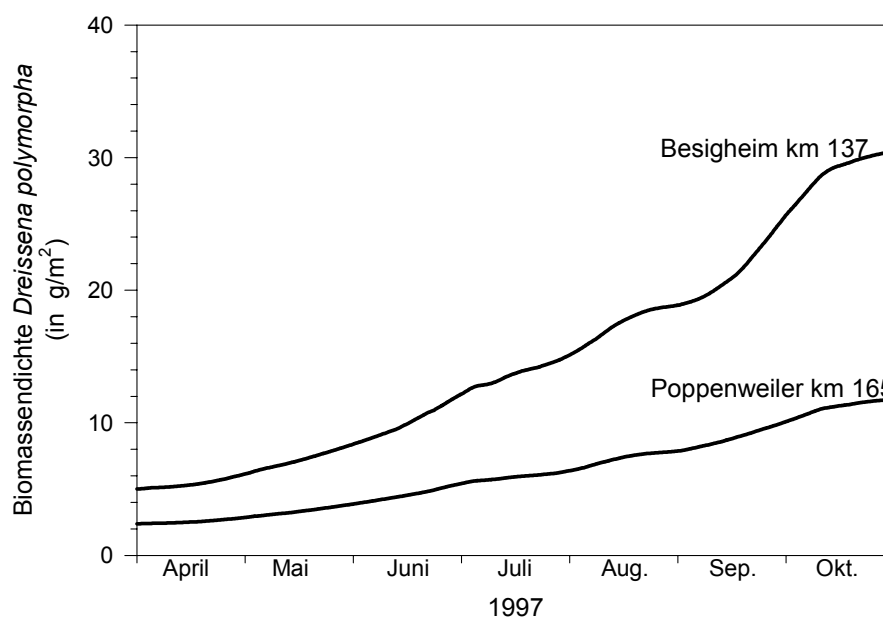


Abb. 8.14: Simulierte Entwicklungen der Muschelbiomassen an spezifischen Querschnitten der Stauhaltungen Poppenweiler und Besigheim.

8.6 Das Gewässergütesimulationsmodell ATV-FGSM

Das ATV-FGSM wurde von der Arbeitsgruppe „Modellrechnungen in der Wassergütewirtschaft“ des ATV-DVWK entwickelt und kann käuflich erworben werden. Unter den öffentlich verfügbaren Modellen zählt das ATV-FGSM zu den am weitesten entwickelten Stoffhaushaltsmodellen (Tab. 8.1; (Rauch et al. 1998). Zudem wird es in der deutschen Wasserwirtschaftsverwaltung zunehmend als Standardmodell akzeptiert (Christoffels 2001; Müller 2001b), wodurch es hohe praktische Relevanz erlangt. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit neben den eigens entwickelten Modellen auch das ATV-FGSM eingesetzt, um die Tauglichkeit dieses „state of the art“ Modells zu überprüfen und es mit den einfacheren Ansätzen im BWQM und EWQM zu vergleichen.

Der Aufbau und die prinzipielle Funktionsweise des Modells sowie Hinweise zur Anwendung finden sich in ATV (1998). Eine ausführliche Beschreibung der zugrunde liegenden Modellgleichungen ist in Müller (2001a) enthalten. Während für ausführliche Darstellungen auf diese beiden Arbeiten verwiesen wird, sollen hier kurz die Grundsätze des Modells erläutert werden.

8.6.1 Aufbau und Funktionalitäten des Modells

Modellbeschreibung

Das ATV-FGSM ist modular aufgebaut und besteht aus insgesamt 18 Modulen, den sogenannten Bausteinen (Tab. 8.7). Die einzelnen Bausteine können zu einem Gesamtmodell unterschiedlichster Komplexität zusammengefügt werden (Tab. 8.8).

Die eindimensionale Strömung wird mit den *Saint-Venant-Gleichungen* beschrieben, wobei die komplette Impulsgleichung gelöst wird (*hydrodynamische Welle*). Die eindimensionale *Advektions-Dispersions-Gleichung* wird mit einem Charakteristiken Verfahren gelöst, wodurch sichergestellt ist, dass auch hochgradig instationäre Vorgänge simuliert werden können. Zur Beschreibung der longitudinalen Dispersion können unterschiedliche Ansätze gewählt werden.

Der Baustein 1 ermöglicht eine detaillierte, wellenlängenabhängige Simulation der Strahlungsverhältnisse an der Wasseroberfläche. Zur Simulation der Strahlung werden allerdings neben geografischen Daten (Breite, Länge, Höhe) auch eine Reihe von klimatologischen Daten benötigt, die in dem erforderlichen Umfang lediglich für synoptische Wetterstationen des DWD vorliegen. Eine Vorgabe von Messwerten zur Globalstrahlung ist nicht möglich. Bei der Strahlungssimulation können auch Effekte einer Horizontüberhöhung und der Beschattung durch Ufervegetation berücksichtigt werden.

Der Wärmehaushalt und die resultierende Wassertemperatur werden auf Grundlage der berechneten Strahlung und weiterer meteorologischer Randbedingungen im Baustein 2 berechnet. Zur dabei erforderlichen Simulation des latenten Wärmestroms (Verdunstung) kann zwischen 7 gebräuchlichen Ansätzen gewählt werden.

Die einfachste Variante zur Simulation des Sauerstoffhaushalts umfasst neben der Wiederbelüftung lediglich die Primärbelastung durch den BSB ohne Nitrifikation und ohne lebende organische Biomasse. Der BSB kann als eine Mischung aus drei Stoffgruppen mit unterschiedlichen Abbaugeschwindigkeiten ausgedrückt werden. Die Mischungsverhältnisse und die Abbauraten für die drei Gruppen können vom Benutzer vorgegeben werden.

Mit den Bausteinen 5 bis 7 werden die drei wichtigsten Pflanzennährstoffe Phosphor, Stickstoff und Silizium erfasst. Hinsichtlich der organisch (aber nicht an lebende Biomasse) gebundenen Stickstoff- und Phosphoranteile wird prinzipiell davon ausgegangen, dass die einzelnen Elemente in der toten organischen Biomasse gemäß der Vollenweider-Stöchiometrie verteilt sind (siehe Kapitel 2.4.1). Konzentrationen von organisch gebundenem Phosphor und Stickstoff ergeben sich daher aus dem BSB. Lediglich für Kläranlageneinleitungen kann zusätzlicher organisch gebundener Stickstoff vorgegeben werden, da Harnstoffe einen wesentlich höheren Stickstoffanteil haben als gewöhnliche aquatische Biomasse. Im Stickstoffbaustein wird neben der Ammonifikation auch die Nitrifikation berücksichtigt, wobei die Biomasse der nitrifizierenden Bakterien anzugeben ist. Die Simulation der Primärbelastung inklusive der Nitrifikation kann folglich unter Einbeziehung des Bausteins 6 erfolgen. Ansonsten ist die Verwendung der Nährstoffbausteine nur für Simulationsvarianten unter Einbeziehung des Phytoplanktons sinnvoll, wobei Silizium lediglich bei Kieselalgen mit simuliert werden muss.

Mit den Bausteinen 8 bis 11 kann das Nahrungsnetz im Freiwasser simuliert werden. Für das Phytoplankton können dabei nur Kieselalgen, nur Grünalgen oder beide Algengruppen gemeinsam simuliert werden. Mit den Konsumenten I und II werden klassischer Weise Primärkonsumenten (herbivores Zooplankton) und Sekundärkonsumenten (carnivores bzw. omnivores Zooplankton oder Fische) simuliert. Alternativ können aber auch zwei konkurrierende Gruppen von Primärkonsumenten erfasst werden.

Tab. 8.7: Bausteine des ATV-FGSM (ATV 1998, modifiziert).

Nr.	Baustein
0	Strömung
1	Strahlung
2	Wassertemperatur
3	konservative Substanz
4	BSB/CSB
5	Phosphor
6	Stickstoff
7	Silizium
8	Kieselalgen
9	Grünalgen
10	Konsumenten I
11	Konsumenten II
12	Flussbett
13	Schwebstoffe
14	Sauerstoff
15	pH-Wert
16	Schwermetalle
17	organische Einzelsubstanzen

Tab. 8.8: Mögliche Bausteinkombinationen im ATV-FGSM (ATV 1998, modifiziert).

Simulationsvariante	Kombinierte Bausteine
Abflusssimulation	0
Strahlung	1
Wärmehaushalt	1,2
Transport konservativer Substanz	3
Primärbelastung (C-BSB)	1,2,4,14
Primärbelastung (C-BSB und N-BSB)	1,2,4,6,14
Kieselalgen	1,2,4-8,12-14
Kieselalgen + Konsumenten I	1,2,4-8,10,12-14
Kieselalgen + Konsumenten I und II	1,2,4-8,10-14
Grünalgen	1,2,4-6,9,12-14
Grünalgen + Konsumenten I	1,2,4-6,9,10,12-14
Grünalgen + Konsumenten I und II	1,2,4-6,9-14
Algen-Gesamt (Kiesel- + Grünalgen)	1,2,4-9,12-14
Algen-Gesamt + Konsumenten I	1,2,4-10,12-14
Algen-Gesamt + Konsumenten I und II	1,2,4-14
pH ohne Algeneinfluss	1,2,4,6,15
pH mit Biologie	1,2,4-15
Schwermetalle	1,2,4-16
organische Einzelsubstanzen mit Biologie	1,2,4-15,17

Mit dem Flussbettbaustein können sessile Algen, Makrophyten und das Zoobenthos simuliert werden, wobei auch die separate Simulation von nur einem dieser Bestandteile möglich ist.

Hinsichtlich der Schwebstoffe ist vor allem deren Bedeutung für die Trübung und die Lichtextinktion von Interesse. Hier ist allerdings darauf zu verweisen, dass im Modell lediglich Sedimentationsprozesse, nicht aber die Erosion berücksichtigt ist.

Einen zentralen Baustein im ATV-FGSM stellt der Sauerstoffhaushalt dar. Er ist in nahezu allen Bausteinkombinationen enthalten. Der Sauerstoffhaushalt kann demzufolge als einfache Primärbelastung oder als Resultat komplexer ökosystemarer Zusammenhänge simuliert werden, wobei viele Zwischenformen möglich sind (Tab. 8.8). Als integraler Bestandteil des Sauerstoffbausteins sind Möglichkeiten zur Simulation technischer Sauerstoffanreicherungsmaßnahmen wie Wehr- oder Turbinenbelüftung vorgegeben.

Darüber hinaus erlaubt das Modell die Simulation des pH-Wertes sowie des Transports von Schwermetallen und organischen Einzelsubstanzen. Für die organischen Einzelsubstanzen wird dabei auch die Photoolyse sowie die Volatilität berücksichtigt. Diese Bausteine sind für die Zielsetzung der vorliegenden Arbeit allerdings nicht von Relevanz und wurden daher nicht angewendet.

Vergleich mit BWQM und EWQM

Ein direkter Vergleich zwischen dem ATV-FGSM und den im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modellen, wird durch den modularen Aufbau des ATV-FGSM erschwert. Das BWQM entspricht aber in etwa der als „Kieselalgen“ bezeichneten Simulationsvariante, während das EWQM äquivalent zu „Kieselalgen + Konsumenten I“ ist (Tab. 8.8). Prinzipiell sind die Prozessformulierungen im ATV-FGSM zumeist wesentlich komplexer als im BWQM oder EWQM. Eine detaillierte Darstellung der Modellgleichung verbietet sich an dieser Stelle, da dies den Rahmen der vorliegenden Arbeit sprengen würde. Für Details wird daher auf ATV (1998) bzw. Müller (2001a) verwiesen.

Ein wesentlicher Unterschied zu den Eigenentwicklungen hängt mit der Darstellung des BSB zusammen: Im ATV-FGSM kann der BSB in drei Klassen mit unterschiedlicher Abbaubarkeit eingeteilt werden. Hierdurch können die tatsächlichen Verhältnisse im Gewässer besser beschrieben werden, in dem die tote organische Substanz quasi immer eine Mischung aus Materialien mit unterschiedlicher Abbauresistenz ist. Die abgestorbene Biomasse (tote Organismen) wird dem am leichtesten abbaubaren BSB zugeordnet, erst der anschließende Abbau führt zur Sauerstoffzehrung. Beim BWQM und EWQM wird dieser Zwischenschritt vernachlässigt, tote Biomasse führt zur unmittelbaren Sauerstoffzehrung (Abb. 8.3).

Im ATV-FGSM können Kieselalgen und Grünalgen parallel simuliert werden, wodurch auch Aussagen hinsichtlich der Konkurrenz zwischen den beiden Algenklassen möglich werden. Dies ist mit den Eigenentwicklungen nicht möglich.

Der modulare Aufbau des ATV-FGSM sowie die Möglichkeit Parameter in vorgegeben Grenzen zu variieren erlaubt eine gewisse Flexibilität bei der Modellierung. Die Prozessformulierungen sind allerdings vorgegeben, so dass eine rigorose Anpassung an die Datenverfügbarkeit – wie dies beim BWQM der Fall war – nicht möglich ist.

8.6.2 Implementierung des Modells und Anpassung der Parameter

Implementierung

Als Grundlage für die Implementierung des ATV-FGSM diente eine topographische Karte im Maßstab 1:35000, die gescannt, eingelesen, im ATV-FGSM umformatiert und durch entsprechende Georeferenzierung anhand der Gauss-Krüger Koordinaten eingepasst wurde.

Für das Modellgebiet wurde eine Region vorgegeben, in der die geographische Breite und Länge sowie die Höhenlage eines zentralen Punkts angegeben wurden. Das Modellgebiet wurde in zwei Abschnitte aufgeteilt, vor allem um unterschiedliche Anfangsbedingungen für die benthischen Filtrierer vorgeben zu können (siehe unten). In beiden Abschnitten wurde davon ausgegangen, dass Beschattung und Horizontüberhöhung keinen Einfluss auf den Strahlungseinstrom des Neckars haben. Die Beiwerte für die Berechnung des Längsdispersionskoeffizienten wurden so angepasst, dass E_x gemäß Gleichung 2.4 mit $c_f=0,011$ ermittelt wurde.

Längsdiskretisierung: Der Modellabschnitt des Neckars zwischen Deizisau und Besigheim wurde mit einem durchgehenden Polygonzug auf Grundlage der Karte abgebildet. Bei Verzweigungen zwischen Schifffahrtsstraße und Kraftwerkskanal wurde der Kraftwerkskanal abgebildet, da in diesem der Hauptteil des Abflusses abgeführt wird. Die Implementierung der 13 Stauwehre im Abschnitt erfolgte gemäß den Angaben in der Karte der Bundeswasserstraßen 1:10000 – Verkehrskarte Neckar (WSD-Südwest 1996). Für diese Querbauwerke wurde jeweils die Normalstauhöhe, das maximale Schluckvermögen der Turbinen und die Gesamtbreite der Wehre vorgegeben (Neckar-AG und WSD-Südwest 1985; WSD-Südwest 1996). Grundsätzlich wurde davon ausgegangen, dass der gesamte Abfluss durch die Turbinen abgeführt wird, solange deren Schluckvermögen nicht überschritten wird. Lediglich bei Überschreiten des Schluckvermögens wird der entsprechende Abflussanteil über die Wehre geleitet.

Auf der Modellstrecke wurden insgesamt 17 Einleitungen implementiert: Die 9 direkt in den Neckar einleitenden Kläranlagen, die 4 Wärmekraftwerke am simulierten Flussabschnitt und 4 Nebenflüsse. Von den 4 implementierten Nebenflüssen wurden bei den Simulationen nur Rems und Murr berücksichtigt, während die kleineren Nebengewässer Körsch und Zipfelbach vernachlässigt wurden. Abflüsse und Stoffkonzentrationen für die Kläranlagen sowie für Rems und Murr wurden gemäß den Erläuterungen in Kapitel 8.3 vorgegeben. Für die 4 Wärmekraftwerke wurden die jeweiligen Aufwärmspannen aus den Angaben der Kühlwassertagebücher errechnet und für die Simulationsläufe vorgegeben. Die Kühlwassertagebücher waren von der LfU Baden-Württemberg nach vorheriger Genehmigung der Kraftwerksbetreiber in anonymisierter Form zur Verfügung gestellt worden.

Gerinnegeometrie und konservativer Transport: Zur Abbildung der Querprofile wurden Sohlpeilungsdaten der Wasser und Schifffahrtsverwaltung herangezogen, die durch die BfG zur Verfügung gestellt worden waren. Die Daten wurden zunächst mit Hilfe eines in Q-BASIC entwickelten Programms in die für das ATV-FGSM erforderliche Struktur überführt. Beim Einlesen in das ATV-FGSM wurden generell Querprofile im Abstand von 500 m herangezogen. Zudem wurden die nächstgelegenen Profile ober- und unterhalb der Querbauwerke berücksichtigt. Sofern für Kraftwerkskanalstrecken keine Querprofile vorlagen, wurden die jeweils nächstgelegenen ober- und unterstromigen Daten zur Erstellung von Ersatzprofilen herangezogen.

Zur Ermittlung der Gerinnegeometrie wurde die im ATV-FGSM intern vorgegebene Funktionalität genutzt: Hierbei sollen die Sohlpeilungsdaten mit Hilfe eines vorgegebene Algorithmus durch einen Spline interpoliert werden, so dass sich aus den Querprofilen der durchflossene Querschnitt A und die mittlere Wassertiefe y in Abhängigkeit des Wasserstand ergeben (Müller 2001a). Beim Abgleich der durch das ATV-FGSM ermittelten Querschnittsflächen und Wassertiefen mit entsprechenden extern ermittelten Werten wurde jedoch deutlich, dass A und y im ATV-FGSM systematisch um 10% bis 30% unterschätzt wurden. Entsprechend ergaben sich auch zu hohe Fließgeschwindigkeiten. Nachdem die Daten vom An-

sprechpartner für Modellanwender, Herrn Kaul (Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft) überprüft worden waren, bestätigte er den Fehler im Modell. Eine Korrektur des Fehlers wurde in die Wege geleitet, erfolgte aber leider nicht mehr im Zeitraum der vorliegenden Arbeit. Daher mussten die Querprofile im ATV-FGSM händisch einzeln so angepasst werden, dass der durchflossene Querschnitt und die mittlere Tiefe den tatsächlichen, extern ermittelten Werten entsprachen. Hierdurch konnten dann auch die beim Tracerexperiment (Kapitel 6.3) ermittelten Fließgeschwindigkeiten, bzw. Durchbruchkurven erfolgreich nachgebildet werden. Nach der händischen Korrektur konnten auch die Geschwemmsellinien der Hochwasserereignisse von 1978 und 1988 mit einem konstanten Strickler-Beiwert von $40 \text{ m}^{1/3}/\text{s}$ gut nachvollzogen werden.

Wärmehaushalt

Nachdem das Gewässersystem implementiert war und Abfluss- sowie Transportsimulationen möglich waren, wurden als weitere Grundlagen von Stoffhaushaltssimulationen die Strahlungs- und Temperaturbausteine implementiert.

In einem ersten Schritt wurde eine händische Sensitivitätsanalyse jener Eingangsgrößen vorgenommen, die für die Simulation der Strahlung und des Wärmehaushalts im Modell angegeben werden müssen. Hieraus wurde deutlich, dass die Sichtweite, der Erdoberflächentyp, der Aerosoltyp und die Bewölkungsart nur marginale Auswirkungen auf die simulierte Strahlung und den Wärmehaushalt haben. Daher wurden diese Werte als zeitlich konstant angenommen. Als sensitive Parameter wurden hingegen erwartungsgemäß der Wolkenbedeckungsgrad, die Lufttemperatur, die Luftfeuchte, der Luftdruck und die Windstärke identifiziert. Die Lufttemperatur, die relative Luftfeuchte und die Windstärke wurden für die Region als Ganglinien gemäß den Messergebnissen der Klimastation Stuttgart-Neckartal vorgegeben. Ganglinien des Wolkenbedeckungsgrades und des Luftdrucks wurden aus den Messungen an der synoptischen Station am Flughafen Echterdingen abgeleitet. Der Luftdruck wurde dabei unter Verwendung der barometrischen Höhenformel (Weischet 1988) auf den Druck bei Normal Null (NN) umgerechnet. Die klimatologischen Daten waren vom DWD in digitaler Form zur Verfügung gestellt worden.

Die so simulierte Globalstrahlung deckte sich weitgehend mit den Messungen des DWD in Stuttgart (nicht dargestellt). Für die Wassertemperatur wurden die Aufwärmspannen der Kraftwerke berücksichtigt und zur Simulation des latenten Wärmeübergangs (Verdunstung/Kondensation) das Verfahren nach Rimsha und Donschenko (1958) eingesetzt. Wie Abbildung 8.15 beispielhaft für den Neckar bei Poppenweiler verdeutlicht konnte hiermit der gemessene Temperaturgang allgemein sehr gut nachvollzogen werden.

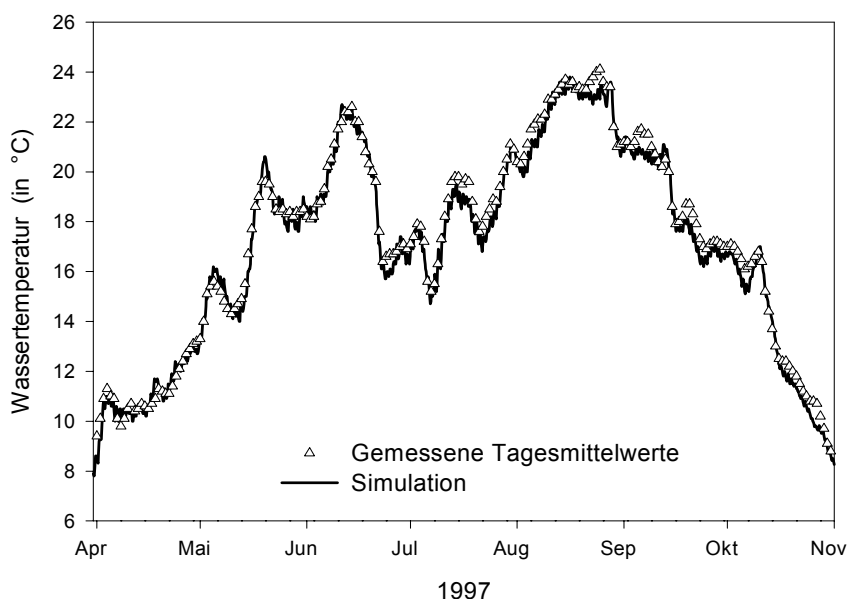


Abb. 8.15: Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Wassertemperaturen im Neckar bei Poppenweiler (km 165) während des Sommerhalbjahres 1997.

Sauerstoffhaushalt

Zur Simulation des Stoffhaushalts wurde zunächst von der Simulationsvariante „Primärbelastung (C-BSB)“ ausgegangen und Schrittweise neue Bausteine hinzugenommen (Tab. 8.8). Im Zuge dieser Vorgehensweise wurden Möglichkeiten zur Simulation und einige Randbedingungen festgelegt, für die sich innerhalb des ATV-FGSM Wahlmöglichkeiten ergeben. Die Festlegungen erfolgten soweit möglich auf Grundlage der eigenen experimentellen Befunde oder anhand von Plausibilitätsüberprüfungen der Simulationsergebnisse bzw. den Empfehlungen in ATV (1998). Die wichtigsten Vorgaben sind zu Dokumentationszwecken in Tabelle 8.9 zusammengestellt.

Tab. 8.9: Für die Simulation mit dem ATV-FGSM festgelegte Simulationsvarianten und konstante Randbedingungen.

Zu simulierender Prozess bzw. Randbedingung	Auswahl
Sauerstoffaustausch über die freie Wasseroberfläche	Nach Wolf (1974)
Sauerstoffeintrag beim freien Wehrüberfall	Nach Avery und Novak (1978)
Konzentration suspendierter Nitrifikanten bei Rems, Murr und Neckar	0,005 mg/L
Konzentration suspendierter Nitrifikanten bei Kläranlagenabläufen	0,008 mg/L
maximale NH ₄ -N Umsatzrate am Gewässerbett	3 g/m ² /d
sedimentierfähiger Anteil des BSB	50 %
sedimentierfähiger Anteil der Schwebstoffe	0 %
herbivorer Anteil der Bodenfauna	100 %

Auf Grundlage der empirischen Systemanalyse und der Erfahrungen mit dem BWQM bzw. dem EWQM wurde letztlich die Variante „Algen-Gesamt + Konsumenten I“ als adäquat zur Simulation des Sauerstoffhaushalts ausgewählt (Tab. 8.8). Neben Kieselalgen wurden also auch Grünalgen simuliert, weil diese im Laufe der Sommerhalbjahre bis zu ca. 25% der Phytoplankter im Neckar stellen können (Backhaus und Matthias 1997a; Backhaus und Matthias 1997b; Matthias 1993). Die zusätzliche Berücksichtigung von Konsumenten II stellte sich als nicht zweckmäßig heraus: Für das Sommerhalbjahr 1996 ergab sich kein Einfluss auf die Primärkonsumenten (Konsumenten I), sofern von Copepoden als einzig relevante Sekundärkonsumenten ausgegangen wurde. Über andere mögliche Sekundärkonsumenten wie Fische liegen zu wenige quantitative Angaben vor, um sinnvolle Vorgaben für den Neckar machen zu können.

Im Flussbettbaustein wurde lediglich das Zoobenthos (als Muscheln) simuliert, während Makrophyten und Phytobenthos aufgrund der Struktur des Neckars unberücksichtigt blieben.

Anfangsbedingungen

Im Gegensatz zu den gelösten und suspendierten Anteilen sind die Anfangsbedingungen für die Muschelbesiedlung von mitentscheidender Bedeutung für die Simulationsergebnisse, weshalb sie hier kurz erläutert werden. Anders als in AQUASIM ist es im ATV-FGSM nicht möglich die Anfangsbedingungen für den Flussbettbaustein linear zu interpolieren. Daher wurde eine alternative Vorgehensweise gewählt, um dem offenkundigen Längsgradienten in der Fundhäufigkeit von *Dreissena polymorpha* gerecht zu werden (siehe Abb. 8.11). Hierzu wurde das Modellgebiet in zwei Abschnitte oberstrom und unterstrom von km 172 aufgeteilt. Im Bereich oberhalb des Wehres Aldingen (km 172) wurde die Anfangsbiomasse auf 1 g/m² festgelegt und unterhalb auf 4,5 g/m² (zur Ableitung dieser Werte siehe 8.5.3).

Parameterwerte

Die Werte der Parameter (KE-Werte) wurden soweit als möglich auf den Voreinstellungen (Version 1.2) belassen, da diese auf dem fundierten Expertenwissen des Arbeitskreises „Modellrechnungen in der Wassergütwirtschaft“ beruhen. Lediglich einige sehr sensitive Parameter wurden aufgrund der Systemkenntnis oder im Zuge des Vergleichs zwischen Simulationsergebnissen und Messungen abgeändert. Wegen der sehr großen Parameterzahl wird hier lediglich auf jene Parameter eingegangen die verändert wurden. Die veränderten Parameter sind in Tabelle 8.10 zusammengestellt.

Tab. 8.10: Gegenüber den Voreinstellungen veränderte Parameterwerte (KE-Werte) für die Simulationsläufe mit dem ATV-FGSM.

Parameter	Bedeutung	Einheit	Voreinstellung	neuer Wert
Kieselalgen				
AKCHLA	Chl-a Gehalt der Kieselalgenbiomasse	µg/mg	8,2	11,0
SICHBIO	Verhältnis zwischen Si und Chl-a Gehalt	µg/µg	20,8	14,0
Konsumenten I (herbivores Zooplankton)				
ZLFTIMAX	Maximale Lebensdauer des herbivoren Zooplanktons	d	20,0	10,0
Bodenfauna (<i>Dreissena polymorpha</i>)				
BOFMAXA	Maximale Grazingrate der Bodenfauna	mg/mg/d	1,0	0,17
BOFASSGA	Assimilierter Nahrungsanteil bei geringer Algenkonz.	mg/mg	0,8	0,65
BOFASSMIN	Assimilierter Nahrungsanteil bei sehr hoher Algenkonz.	mg/mg	0,3	0,15
BOFASSNA	Reduktionsfaktor der Ass. bei zunehmender Algenkonz.	mg/mg	0,3	0,5
BOFKMA	Halbsättigungskonzentration für Algenbiomasse	mg/L	1,5	2,5

Phytoplankton: Die im ATV-FGSM vorgegeben Biomassenparameter für Kieselalgen beziehen sich auf *Asterionella formosa*, eine pennate Kieselalgenart, die im Neckar zumeist nur von mäßiger Bedeutung ist. Der Neckar wird vielmehr von kleinen zentrischen Kieselalgen der Gattung *Stephanodiscus* (vor allem *S. hantschii*) dominiert. Im Handbuch zum ATV-FGSM (ATV 1998) werden alternative Biomassenparameter für *Cyclotella cryptica* angegeben, einer anderen zentrischen Diatomeenart, die häufig mit *Stephanodiscus hantschii* vergesellschaftet ist. *Cyclotella* zeichnet sich durch wesentlich kleinere Siliziumgehalte von 10,2 µg Si je µg Chl-a (SICHBIO) und zugleich höhere Chl-a Gehalte von 12,5 µg je mg Biomasse (AKCHLA) aus. Die Simulationsergebnisse für Chl-a und Sauerstoff reagieren äußerst sensitiv auf AKCHLA, was in erster Linie darauf zurückzuführen ist, dass bei hohen Chl-a Gehalten die Selbstabschattung der Algen kleiner und ihre Primärproduktionsleistung größer ist. Eine Verringerung des Siliziumgehalts wirkt sich in den wenigen extremen Si Mangelsituationen ebenfalls Produktionssteigernd aus. Folglich wurde bei Vorgabe der *Cyclotella* Werte das Algenwachstum deutlich überschätzt, während es mit den *Asterionella* Werten merklich unterschätzt wurde. Vor diesem Hintergrund und eingedenk der Tatsache, dass die Algengesellschaft eine Mischung unterschiedlicher Arten darstellt, wurden für SICHBIO und AKCHLA Werte gewählt, die zwischen den Vorgaben, aber näher bei der zentrischen Kieselalge *Cyclotella* liegen (Tab. 8.10).

Bei den Grünalgen wurden hingegen die für *Scenedesmus subspicatus* abgeleiteten Vorgaben beibehalten, da *Scenedesmus* die dominierende Grünalgengattung im Neckar ist.

Herbivores Zooplankton: In der ursprünglichen Programmversion 1.2 ist die minimale Biomassenkonzentration der Konsumenten I auf 0,02 mg/L begrenzt, d.h. dieser Wert kann nicht unterschritten werden, um negative Konzentrationen zu vermeiden. Wie Abbildung 8.13 jedoch verdeutlicht, treten im Neckar

über weite Zeiträume wesentlich kleinere Konzentrationen des herbivoren Zooplanktons auf. Dies trifft insbesondere für den oberstromigen Rand zu. Durch diese Begrenzung kann es folglich zu Fehleinschätzungen hinsichtlich des Fraßdrucks der Konsumenten I kommen. Auf Nachfrage wurde von Herrn Kaul dankenswerter Weise eine Programmversion zur Verfügung gestellt, bei der die Konzentration des herbivoren Zooplanktons bis auf minimal 0,001 mg/L abfallen kann. Hierdurch wurde es möglich, den Einfluss der Rädertierchen und Wasserflöhe realitätsnah zu simulieren.

Da die Konsumenten I in Form des herbivoren Zooplanktons die höchste simulierte trophische Stufe darstellen, kommt es zu keinen Verlusten durch Fressfeinde. Um diese Verluste indirekt abzubilden, wurde die maximale Lebenszeit von 20 auf 10 Tage verringert, was gleichbedeutend mit einer Verdopplung der Mortalitätsrate ist.

Bodenfauna – *Dreissena polymorpha*: Die weitestreichenden Veränderungen wurden bei den Parameterwerten für die Bodenfauna durchgeführt. Dies rührt daher, dass das ATV-FGSM für Fließgewässer unterschiedlichster Größe konzipiert ist, also neben großen staugeregelten Flüssen auch kleine Bäche damit simuliert werden können. Im Gegensatz zu den Algen und Zooplanktern unterscheidet sich das Zoobenthos größerer Flüsse wesentlich von dem kleinerer Bäche, was nicht zuletzt auf unterschiedliche Habitatsangebote zurückzuführen ist (Uhlmann und Horn 2001). Die im ATV-FGSM für die Simulation der Bodenfauna vorgegebenen Parameterwerte entsprechen weitgehend denen des herbivoren Zooplanktons. Damit sind sie nicht geeignet die relativ langsame Entwicklung einer Muschelpopulation abzubilden. Daher wurden einige zentrale Parameterwerte stark verändert. Grundsätzlich wurden die Werte so angepasst, dass die Entwicklung der Bodenfauna weitgehend den Vorgaben von Schöl et al. (1999) entspricht. Da dem ATV-FGSM und dieser Neuentwicklung von QSIM zum Teil andere Konzepte zur Simulation der Bodenfauna zugrunde liegen, musste das Konzept von Schöl et al. zunächst in die ATV Konzeption überführt werden. Diese Übertragung war bis auf einen Punkt möglich: Während Schöl et al. (1999) Wachstumsprozesse von *Dreissena polymorpha* in Abhängigkeit vom Entwicklungsstand der Individuen simulieren, kann der Einfluss der Alterstruktur der Population im ATV-FGSM nicht berücksichtigt werden. Vor dem Hintergrund der inhärenten Parameterunsicherheit scheint es aber durchaus gerechtfertigt von einer über das Jahr hinweg konstanten maximalen Grazingrate auszugehen (siehe auch Kapitel 8.5.3).

8.6.3 Simulationsergebnisse mit dem ATV-FGSM

Wie mit den beiden anderen Modellen wurden auch mit dem ATV-FGSM die Monate April bis einschließlich Oktober der Jahre 1996, 1997 und 1998 simuliert. Ein Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Konzentrationen von O₂, Chl-a, BSB₅ und den Nährstoffen findet sich im Anhang.

Sauerstoff und Phytoplankton

In Abbildung 8.16 werden die Simulationsergebnisse für Chl-a und Sauerstoff mit den zugehörigen Messwerten verglichen. Die Simulationsergebnisse stimmen ähnlich gut mit den Messergebnissen überein wie beim BWQM und EWQM. Auch bei den Simulationen mit dem ATV-FGSM tritt die bereits beim EWQM beschriebene Überschätzung der Chl-a Gehalte Ende Mai Anfang Juni vor allem in Besigheim zutage.

Während die Chl-a Gehalte im Spätsommer gut nachgebildet werden, wird die Sauerstoffkonzentration im unterstromigen Bereich tendenziell unterschätzt. Das selbe Phänomen tritt 1996 und 1998 auf. Insbesondere im Juli und August 1998 wird die Sauerstoffkonzentration in Besigheim deutlich unterschätzt, wobei die Chl-a Werte gleichzeitig eher überschätzt werden (siehe Anhang D).

BSB₅ und Nährstoffe

Generell werden der biochemische Sauerstoffbedarf und die Nährstoffkonzentrationen gut abgebildet. Eine auffällige Diskrepanz wird jedoch aus den Abbildungen im Anhang deutlich: Insbesondere 1998 werden die Si Gehalte ab Juni deutlich unterschätzt, was zum Großteil auf die zeitgleiche Überschätzung der Algenkonzentration zurückzuführen ist.

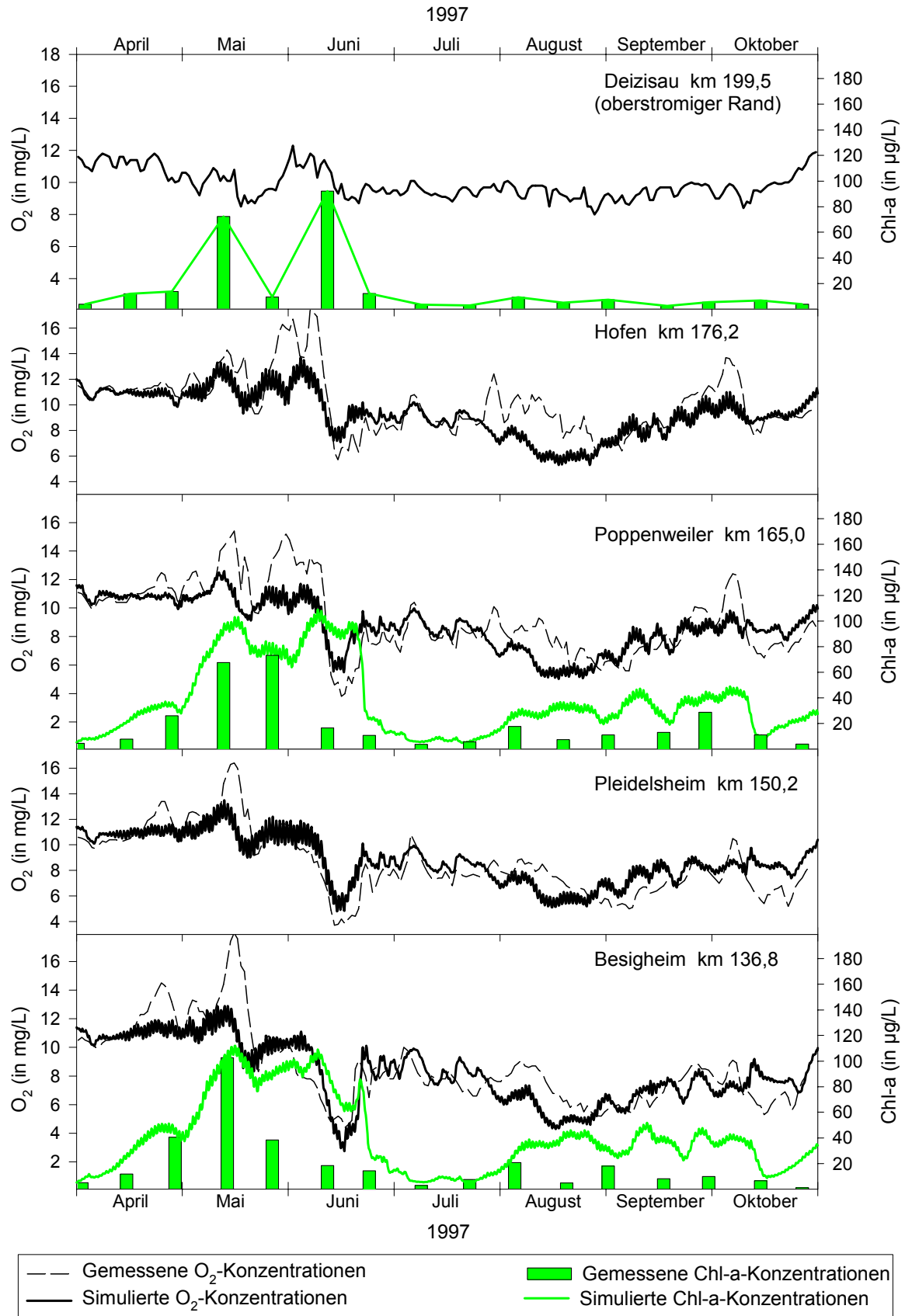


Abb. 8.17: Vergleich zwischen gemessenen und mit dem ATV-FGSM simulierten Chl-a und O₂ Konzentrationen im Neckar für das Sommerhalbjahr 1997.

Herbivores Zooplankton

Wie beim EWQM können die Simulationsergebnisse nur für das Jahr 1996 überprüft werden. Aus Abbildung 8.18 werden merkbare Unterschiede zwischen gemessenen und simulierten Biomassekonzentrationen deutlich, wobei sich diese Diskrepanzen auch bei einer Verlängerung der maximalen Lebensdauer auf 20 Tage nicht merklich abschwächen. Bei dem Vergleich zwischen Simulation und Messung ist allerdings zu beachten, dass die erhöhten Cladocerenbiomassen im April und Mai auf nur 3 bzw. 4 Individuen beruhen, die Messunsicherheit also immens ist. Allerdings wurde auch der deutliche Rotatorienpeak im August vom Modell nicht nachvollzogen. Auf eine Anpassung der Modellparameter – ähnlich wie beim EWQM – auf Grundlage der wenigen Messungen wurde verzichtet, da den Zooplanktonparametern im ATV-FGSM umfangreiches Expertenwissen und Messungen zugrunde liegen.

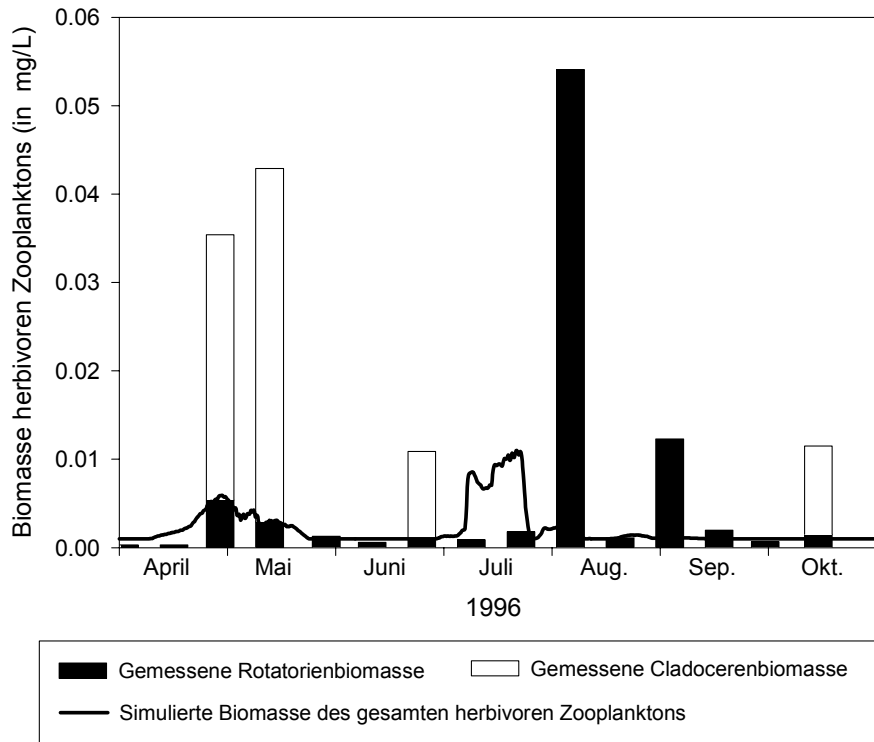


Abb. 8.18: Vergleich zwischen gemessenen und mit dem ATV-FGSM simulierten Konzentrationen herbivoren Zooplanktons im Neckar bei Poppenweiler für das Sommerhalbjahr 1996.

Für 1997 stiegen die maximalen Biomassenkonzentrationen auf 0,68 mg/L in Poppenweiler und 1,14 mg/L in Besigheim, für 1998 wurden Maximalkonzentrationen von 0,36 mg/L und 0,82 mg/L erreicht. Damit liegen die jeweiligen Maximalkonzentrationen unter den mit dem EWQM berechneten Werten. Auf Grundlage der Messungen von Hoppe (1992) sind die simulierten Maximalkonzentrationen als plausibel zu erachten.

Benthische Filtrierer – *Dreissena polymorpha*

Wie beim EWQM können die Simulationsergebnisse nur qualitativ plausibilisiert werden. Abbildung 8.19 gibt die Entwicklung der Biomassendichte für 1997 im Neckar bei Hofen und bei Besigheim wieder.

Hofen liegt im Abschnitt 1 mit der geringeren Anfangsdichte von 1 g/m², während Besigheim am unteren Ende eine Anfangsdichte von 4,5 g/m² aufweist. Die Entwicklung bei Poppenweiler, das ebenfalls im Abschnitt 2 liegt, ist sehr ähnlich wie bei Besigheim, weshalb sie hier nicht separat dargestellt ist.

Während der Sommermonate versieben- bzw. verachtfacht sich die Biomassendichte. Damit liegen die Wachstumsraten etwas höher als bei den Simulationen mit dem EWQM, was auch Ausdruck der kleineren Konzentrationen des Nahrungskonkurrenten herbivores Zooplankton ist. Zieht man die Messungen von Bachmann et al. (1997) für die Mosel und die Simulationen von Schöl et al. (1999; 2002) für Saar, Mosel und Rhein heran, so können die hier erzielten Simulationsergebnisse als genauso plausibel eingestuft werden, wie die Ergebnisse mit dem EWQM.

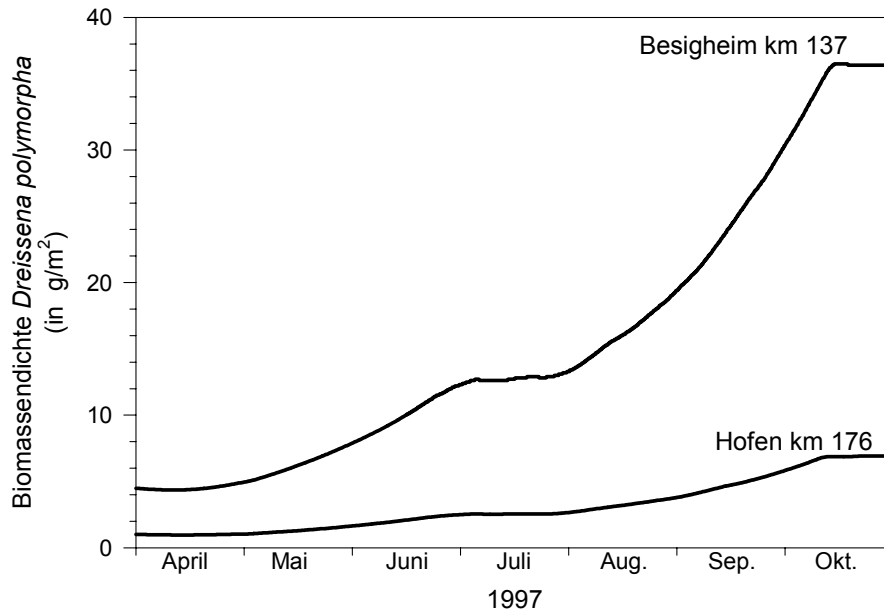


Abb. 8.19: Simulierte Entwicklung der Muschelbiomassen 1997 an Querschnitten der Stauhaltungen Hofen und Besigheim.

8.7 Bewertender Vergleich der Simulationsmodelle

Grundsätzlich konnten mit allen drei vorgestellten Modellen, die wesentlichen Züge der Algendynamik, des Sauerstoff- und des Nährstoffhaushalts im mittleren Neckar simuliert werden. Beim BWQM tritt am unterstromigen Rand vor allem in den Jahren 1997 und 1998 eine Überschätzung der Chl-a Konzentration und der Sauerstoffgehalte auf. Mit Hilfe des EWQM (und des ATV-FGSM) konnte die Hypothese bekräftigt werden, wonach diese systematische Fehleinschätzung vor allem auf die Wirkung benthischer Filrierer, speziell von *Dreissena polymorpha*, zurückzuführen ist. Dies kann mit der sehr einfachen Darstellung der Algenverluste im BWQM nicht dargestellt werden. Trotz dieser offenkundigen Unzulänglichkeit in der Modellstruktur des BWQM kann es hinsichtlich seiner Fähigkeit den Stoffhaushalt nachzubilden aber nicht schlechter bewertet werden als die beiden komplexeren Modelle (vgl. Abb. 8.8, 8.12, 8.17 und Anhang).

Abgesehen von den oben geschilderten systematischen Abweichungen treten die deutlichsten Diskrepanzen zwischen Simulationsergebnissen und Messungen bei allen drei Modellen zumeist an den selben Orten und während der selben Zeitspannen auf. Wenn man davon ausgeht, dass nicht alle drei Modelle gleichermaßen falsch sind, lässt sich dies auf zwei mögliche Ursachen zurückführen. Entweder lassen sich diese Situationen durch die sonst näherungsweise gültigen Parameterwerte nicht nachvollziehen oder zu diesen Zeiten waren die Messungen, die für die Ableitung der Randbedingungen verwendet wurden, nicht repräsentativ. Diese Möglichkeiten werden anhand von zwei auffälligen Beispielen näher besprochen: Die Algenblüte im Mai 1998, bei der ein Chl-a Wert von 170 µg/L in Poppenweiler und zugleich sehr hohe Sauerstoffübersättigungen an allen Stationen registriert wurden, wurde von keinem der Modelle in diesem Ausmaß nachgebildet. Mit Hilfe der Variation der oberstromigen Randbedingung für Chl-a konnte gezeigt werden, dass dies nicht auf falsche bzw. nicht repräsentative Messwerte in Deizisau zurückzu-

führen ist. Vielmehr scheinen in diesem Fall die physiologischen Parameter der Algen von den Durchschnittswerten abzuweichen. Vermutlich waren für die beobachtete Algenblüte Phytoplankter verantwortlich, die geringe Chl-a Gehalte aufweisen (*Cyclotella*) und oder deren Lichtsättigung bereits bei geringen Strahlungsintensitäten erreicht wird. Eine zweite bei allen Modellen deutlich zutage tretende Diskrepanz liegt in der Unterschätzung der Sauerstoffkonzentrationen im August 1998. Diese Überschätzung der Sauerstoffdepression ist teilweise auf einen einzelnen sehr hohen Chl-a Wert in Deizisau im August zurückzuführen. Allerdings kann auch in diesem Fall nicht das ganze Ausmaß der bei allen Modellen auftretenden Fehleinschätzung auf eine möglicherweise nicht repräsentative Randbedingung zurückgeführt werden.

Ein wesentlicher Faktor für die Ungenauigkeit der Modellprognosen liegt also offenkundig darin begründet, dass zeitlich konstante Parameter für die Beschreibung der biologischen Prozesse verwendet werden, wohingegen sich die Biozönose in Wirklichkeit über das Jahr verändert. Die Sensitivität des ATV-FGSM gegenüber Veränderungen der Si und vor allem der Chl-a Gehalte der Kieselalgen (Parameter SICHBIO und AKCHLA) verdeutlicht, dass hierbei nicht unbedingt ein Wechsel zwischen Kiesel- und Grünalgen sondern möglicherweise die Dominanz unterschiedlicher Kieselalgenesellschaften entscheidend ist. Im Modell ist die gleichzeitige Simulation von Grün- und Kieselalgen vorgesehen, nicht aber die zweier konkurrierender Diatomeenspezies. Im vorliegenden Fall erschwert dies Simulationen über eine Vegetationsperiode hinweg. Anders ausgedrückt erscheint es bei exakter Kenntnis der Randbedingungen sowie der Biozönose und der zugehörigen biologischen Parameter mit dem ATV-FGSM möglich, das tatsächliche System kurzzeitig sehr gut zu simulieren. Somit erbringen beispielsweise Lastfallsimulation mit exakt definierten Randbedingungen im ATV-FGSM zweifellos zuverlässige Ergebnisse. Dabei ist es aber auch wichtig die Randbedingungen inklusive der vorausgesetzten Algengesellschaft exakt anzugeben, um klar zu machen für welche Bedingungen die erstellten Prognosen gültig sind.

Im Gegensatz zu kurzfristigen Lastfallsimulationen bringt das ATV-FGSM für Simulationen des Jahresgangs keine Vorteile gegenüber einfacheren Ansätzen. Dies ist wie bereits ausgeführt darauf zurückzuführen, dass sich vor allem die Algengesellschaften im Laufe einer Vegetationszeit verändern. Entsprechend müssen unterschiedliche Algengesellschaften mit dem selben (gemittelten, effektiven) Parametersatz simuliert werden. Hier bringt ein sehr komplexes Modell, in dem das Detailwissen über eine spezifische Algenart steckt, keinen Vorteil über ein größeres, deterministisch nicht ganz so exaktes Modell. Im Gegenteil erscheint im vorliegenden Fall das einfache BWQM sogar robuster gegenüber extremen Situationen zu sein, wie das Beispiel des August 1998 zeigt.

Die obigen Ausführungen verdeutlichen vor allem folgendes:

- Keines der drei Modelle ist den anderen grundsätzlich überlegen und daher für die allgemeine Anwendung zu empfehlen
- Das ATV-FGSM ist deterministisch am besten fundiert und bei exakter Kenntnis des Systems auch ohne Kalibrierung einsetzbar
- Das BWQM ist für die aktuelle Situation des Stoffhaushalts im Neckar kalibriert und erscheint am robustesten gegenüber jahreszeitlichen Veränderungen
- Die Wahl eines geeigneten Modells hängt von der exakten Aufgabenstellung ab
- Das Vertrauen in die Simulationsergebnisse kann durch die Anwendung von zumindest zwei Modellen auf das selbe Problem erhöht werden

Das BWQM erscheint auch aufgrund seiner Einfachheit am robustesten zu sein, allerdings sollte seine Anwendung auf solche Fälle beschränkt bleiben, in denen sich das Stoffhaushaltssystem nicht grundlegend verändert (siehe Kapitel 8.4.4). Die Anwendung des BWQM empfiehlt sich also zur modellgestützten Systemanalyse, soweit dies möglich ist. Für eine differenzierte Analyse der Algenverlustprozesse ist es aufgrund der Modellstruktur natürlich nicht geeignet. Für Prognosen hinsichtlich der Auswirkungen technischer Belüftungsmaßnahmen scheint das BWQM geeignet. Das BWQM ist allerdings nur für die aktuelle Situation kalibriert, so dass die Folgen von qualitativen Veränderungen der Rahmenbedingungen mit ihm nur bedingt zu prognostizieren sind. Hier ist vor allem eine Veränderung der Algengesellschaft zu nennen.

Das ATV-FGSM ist zweifellos deterministisch fundierter als die beiden anderen Modelle. Schon aufgrund des in ihm vereinten Expertenwissens sollte es soweit als möglich zum Einsatz kommen. Bei der Systemanalyse kann es parallel zum BWQM eingesetzt werden. Durch die parallele Anwendung können Unsicherheiten aufgedeckt und das Vertrauen in die Ergebnisse der Analyse erhöht werden. Ein Einsatz bei der näheren Aufschlüsselung der Algen- und Sauerstoffumsatzraten ist mit der allgemein verfügbaren Modellversion nicht möglich. Nach Rücksprache mit Herrn Kaul (Bayer. LfW), ermöglichte er den Zugriff auf eine leicht abgeänderte Modellversion, mit der auch diese Umsatzraten ausgegeben werden können. Leider erfolgte dies erst zum Ende des Projekts, so dass diese zusätzliche Möglichkeit hier noch nicht genutzt werden konnte, für zukünftige Anwendungen aber zur Verfügung steht. Für Prognosen kann das FGSM prinzipiell auch parallel zum BWQM eingesetzt werden. Doch ergaben sich sowohl bei der Simulation der Wehr- als auch der Turbinenbelüftung Fehler mit der aktuellen Programmversion. Diese in der vorliegenden Arbeit aufgedeckten Fehler werden zusammen mit den Problemen bei der korrekten Überführung von Profildaten in der momentan in Überarbeitung befindlichen Programmversionen behoben (Müller, mündliche Mitteilung). Mit dem ATV-FGSM ist es auch möglich aufzuzeigen wie sich der Stoffhaushalt durch die Dominanz anderer Algengesellschaften verändern würde, sofern die zu diesen Gesellschaften zugehörigen Parameter bekannt sind (ATV 1998, Müller 2001a). Prognosen hinsichtlich der Wirkung von verringerten Nährstoffgehalten sind auch mit ATV-FGSM sehr unsicher, da die Halbsättigungskonstanten nicht exakt bekannt sind und viele Algen Phosphor intern speichern können (siehe Kapitel 2.4.3).

Das EWQM schließlich erscheint nicht so robust wie das BWQM und beschreibt andererseits die tatsächlichen Prozesse nicht so exakt wie das ATV-FGSM. Daher sollte es in der Systemanalyse vor allem da parallel zum ATV-FGSM eingesetzt werden, wo das BWQM nicht eingesetzt werden kann. Insbesondere für eine detailliert Betrachtung der Algenverlustprozesse sollte das EWQM zum Einsatz kommen, da das BWQM hierfür strukturell ungeeignet ist und das ATV-FGSM aufgrund (der in der allgemein verfügbaren Version) limitierten Ausgabemöglichkeiten hierzu nicht eingesetzt werden kann.

9 MODELLGESTÜTZTE SYSTEMANALYSE

9.1 Auswirkungen der Wärmeeinleitungen

Aufgrund der Bedeutung der Wassertemperatur für den Stoffhaushalt werden hier die Auswirkungen der Wärmeeinleitungen in der Modellstrecke auf den Wärmehaushalt dargestellt. Grundlage der Betrachtung sind jeweils die Monate April bis einschließlich Oktober der Jahre 1996, 1997 und 1998. Hierbei ist zu beachten, dass während dieser Zeitspannen eines der vier Wärmekraftwerke im Modellgebiet nicht in Betrieb genommen wurde und somit keine Auswirkungen auf den Wärmehaushalt zeigte.

Um die Größenordnung des Kraftwerkeinflusses abschätzen zu können, werden zunächst die Aufwärmspannen betrachtet. Dies sind die Wassertemperaturerhöhungen, die sich bei angenommener vollständiger Durchmischung direkt am Einleitungsquerschnitt ergeben. In Abbildung 9.1 sind die über die Betrachtungszeiträume der 3 Jahre gemittelten Dauerlinien der Aufwärmspannen für die drei aktiven Kraftwerke dargestellt.

Hieraus wird deutlich, dass lediglich eines der Kraftwerke über nahezu den gesamten betrachteten Zeitraum Abwärme in den Neckar einleitete. Bei den beiden anderen Kraftwerken traten lediglich während ca. 20% bzw. 5% der Zeitspanne überhaupt nennenswerte Wärmeeinleitungen auf. Bei allen drei Kraftwerken lagen die maximalen Aufwärmspannen jedoch über 1°C , wenngleich diese nur über kurze Zeiträume erreicht wurden. Dies verdeutlicht, dass während der betrachteten Zeiträume im Modellgebiet nur relativ wenig Abwärme eingeleitet wurde. Die Kraftwerke waren offenkundig nur zeitweilig im Betrieb und/oder wurden zumeist in Kreislaufkühlung betrieben.

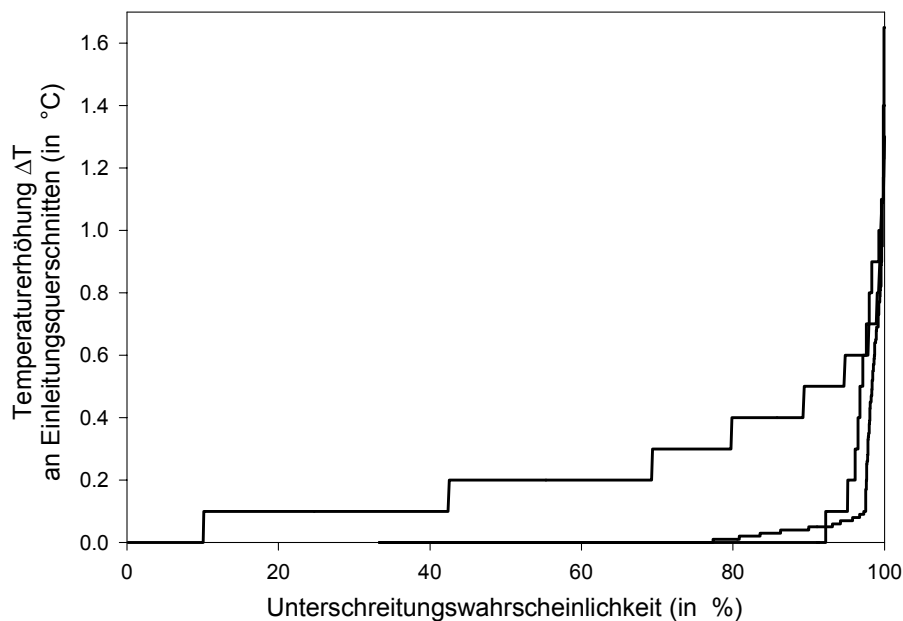


Abb. 9.1: Mittlere Dauerlinien der Aufwärmspannen von 3 Wärmekraftwerken im Modellgebiet für die Monate April bis einschließlich Oktober der Jahre 1996 bis 1998.

Um auch die Einflüsse auf der gesamten Fließstrecke beurteilen zu können, wurden mit dem ATV-FGSM Simulationsläufe mit und ohne Wärmeeinleitung durchgeführt. Da die Aufwärmspannen zumeist nur sehr kurzzeitig ansteigen, können die resultierenden Differenzen in der Wassertemperatur in zweidimensionaler (Raum-Zeit-bezogener) Form leider nicht anschaulich dargestellt werden. Zur Veranschaulichung der Auswirkungen der Wärmeeinleitungen auf die Wassertemperatur wurde daher die folgende Vorgehensweise gewählt: Die mit und ohne Wärmeeinleitung simulierten Wassertemperaturen wurden in Zeitschritten von 6 Stunden und Längsschritten von 1 km gegenübergestellt. Die hieraus resultierenden über Raum und Zeit gemittelten Temperaturdifferenzen sind in Abbildung 9.2 dargestellt.

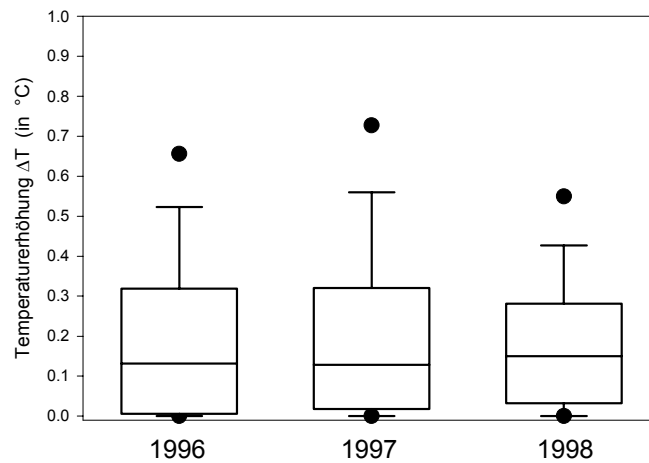


Abb. 9.2: Räumlich und zeitlich gemittelte Verteilungen der Temperaturerhöhungen infolge von Wärmeeinleitungen im Modellgebiet während der Monate April bis einschließlich Oktober. Dargestellt sind 5-, 10-, 25-, 50-, 75-, 90- und 95-Perzentile.

Aus den Box- und Whisker Plots wird deutlich, dass die mit dem ATV-FGSM simulierten Auswirkungen der Wärmeeinleitungen im Modellgebiet sehr moderat sind. Während allen drei Jahren liegen bei etwa 75% der fiktiven Messungen die aus der Wärmeeinleitung resultierenden Temperaturerhöhungen unter 0,3 °C. Im Jahr 1997 liegt das 95-Perzentil am höchsten, hier werden bei 5% der fiktiven Messungen Temperaturerhöhung von 0,75 °C und mehr ermittelt.

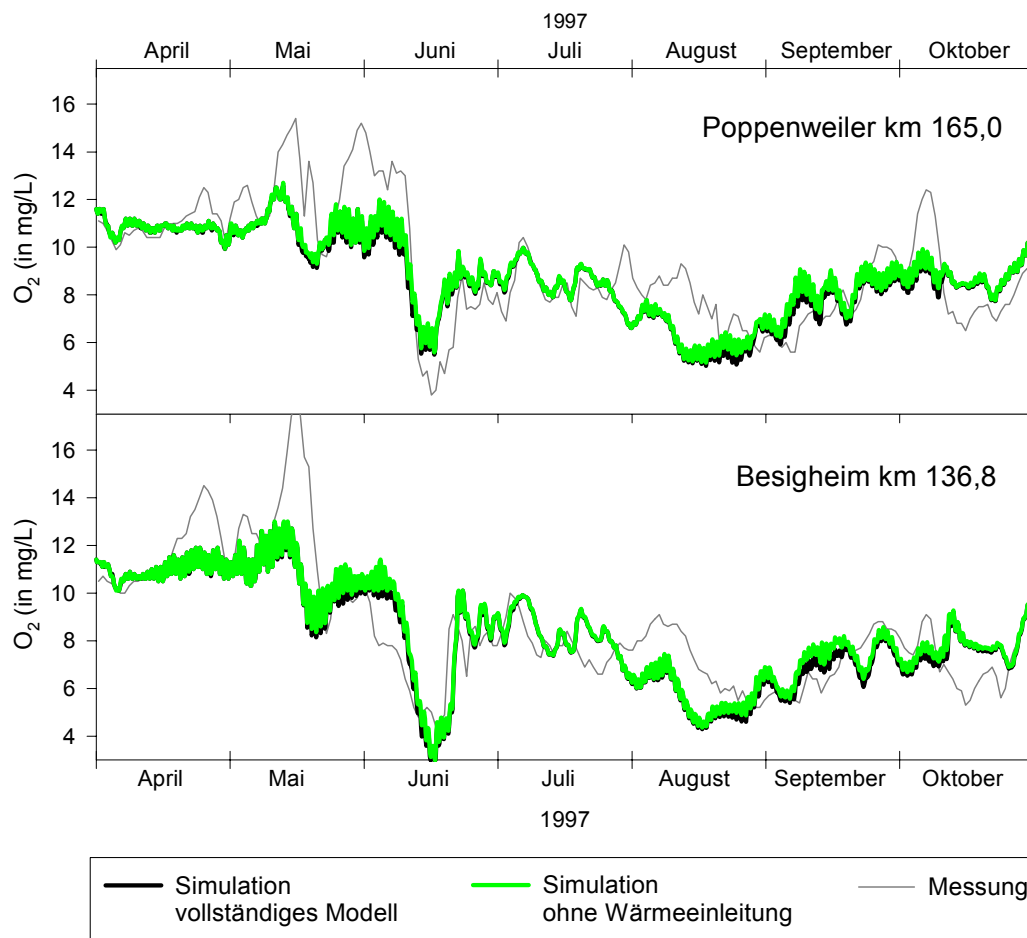


Abb. 9.3: Vergleich der mit dem ATV-FGSM mit und ohne Wärmeeinleitung simulierten Sauerstoffkonzentrationen 1997.

Abbildung 9.3 gewährt einen Vergleich der mit dem ATV-FGSM simulierten Sauerstoffkonzentrationen mit und ohne Wärmeeinleitungen für das Jahr 1997. Hieraus wird deutlich, dass die Abwärmeeinleitungen im simulierten Bereich nur marginale Auswirkungen auf den Sauerstoffgehalt haben. Insgesamt scheinen die Wärmeeinleitungen im Modellgebiet also weder den Wärme- noch den Sauerstoffhaushalt maßgeblich zu beeinflussen. Hierzu ist allerdings anzumerken, dass die großen Wärmeeinleiter, insbesondere die beiden Kernkraftwerke am Neckar, unterstrom des Modellgebiets liegen. In diesen Bereichen ist von wesentlich ausgeprägteren Auswirkungen auf den Wärmehaushalt und in dessen Folge auch auf den Stoffhaushalt auszugehen. Dies trifft umso mehr zu, da infolge des geringen Wärmeaustauschs ein additiver Effekt der Kraftwerke zu erwarten ist.

9.2 Sauerstoffhaushalt und Phytoplankton

9.2.1 Steuergrößen der Sauerstoffkonzentrationen

Sauerstoffbilanz

Für ein verbessertes Systemverständnis ist es elementar, die Bedeutung einzelner Prozesse zu quantifizieren. Hinsichtlich des Sauerstoffhaushalts muss daher ermittelt werden, mit welchen Umsatzraten einzelne Prozesse zur Produktion bzw. dem Verbrauch von Sauerstoff beitragen. Diese Sauerstoffumsatzraten wurden mit dem BWQM simuliert und für jeweils einzelne Tage gemittelt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen des ATV-FGSM ist leider nicht möglich, da das FGSM die Ausgabe von Umsatzraten in der allgemein verfügbaren Version nicht unterstützt. Mit der durch Herrn Kaul zur Verfügung gestellten Erweiterung wird dies jedoch zukünftig möglich sein.

Die Ergebnisse sind in Abbildung 9.4 exemplarisch für das Jahr 1997 dargestellt. Für die Darstellung wurden unterschiedliche Querschnitte ausgewählt, die als repräsentativ für die im Modellabschnitt auftretenden Extreme angesehen werden können: (1) Ein Querschnitt im Unterwasser des Wehrs Hofen (km 176,1), mit vergleichsweise geringer mittlerer Tiefe und hoher Fließgeschwindigkeit. (2) Ein Querschnitt im Oberwasser des Wehrs Poppenweiler (km 165,0), mit vergleichsweise großer Tiefe und geringer Fließgeschwindigkeit.

Um die Ergebnisse besser zu veranschaulichen, sind in Abbildung 9.5 zusätzlich die relativen Beiträge einzelner Prozesse zum lokalen Sauerstoffumsatz an den beiden Querschnitten dargestellt. Für diese Darstellung wurden drei Tage ausgewählt, die repräsentativ für die Zeiten der Algenblüte Ende Mai, der Sauerstoffdepression Mitte Juni und der insgesamt geringen Sauerstoffumsätze Mitte Juli sind (vgl. Abb. 9.4 und 8.8).

Generell tragen die an die Algen gekoppelten Prozesse den größten Anteil am Sauerstoffumsatz. In diesem Zusammenhang ist jedoch nochmals darauf hinzuweisen, dass die „Respiration“ im BWQM neben der echten Algenatmung auch alle anderen Verlustprozesse beinhaltet, die letztlich zur Sauerstoffzehrung führen.

Zwischen den beiden Querschnitten gibt es grundsätzliche Unterschiede: Während im tiefen Oberwasser des Wehrs Poppenweiler die lokale Sauerstoffbilanz nahezu immer negativ ist, kommt es im flacheren Unterwasserbereich während der Algenblüte zu Nettoeinträgen von Sauerstoff (Abb. 9.4). Dies ist vor allem auf das bessere Lichtangebot im flacheren Bereich zurückzuführen. Der Einfluss der Wassertiefe kommt darüber hinaus auch in den unterschiedlichen Beiträgen des Gasaustauschs und der Sauerstoffzehrung des Sediments zur Sauerstoffbilanz deutlich zum Ausdruck. Die höherer Fließgeschwindigkeit und Turbulenz trägt zusätzlich zur vergleichsweise größeren Bedeutung des Gasaustauschs im flacheren Unterwasserbereich mit bei.

Insgesamt wird der relative Anteil der nicht algenbürtigen Beiträge zum Sauerstoffumsatz nicht durch ihre eigene zeitliche Dynamik bestimmt, sondern vor allem von der zeitlichen Dynamik des Phytoplanktons: Diese Prozesse erlangen nur dann etwa gleich große relative Bedeutung wie Primärproduktion und „Respiration“, wenn die Sauerstoffumsätze insgesamt gering sind, d.h. geringe Algendichten vorliegen. Dies wird durch das Beispiel des 13.7.97 verdeutlicht.

Die dargestellten Ergebnisse werden durch die einfache Nachbildung der Algenverlustprozesse als „Respiration“ im BWQM ein wenig verzerrt. Da die zeitliche Verzögerung eines Teils der Sauerstoffzehrung

nicht berücksichtigt wird, wird die Bedeutung der Sekundärbelastung möglicherweise etwas überschätzt. Darauf wird in einem Vergleich mit dem ATV-FGSM im folgenden Abschnitt näher eingegangen. Generell decken sich die Ergebnisse des BWQM aber gut mit experimentellen Befunden aus dem Main (Kopf 1986) und Modellergebnissen für die Elbe (Schroeder 1997).

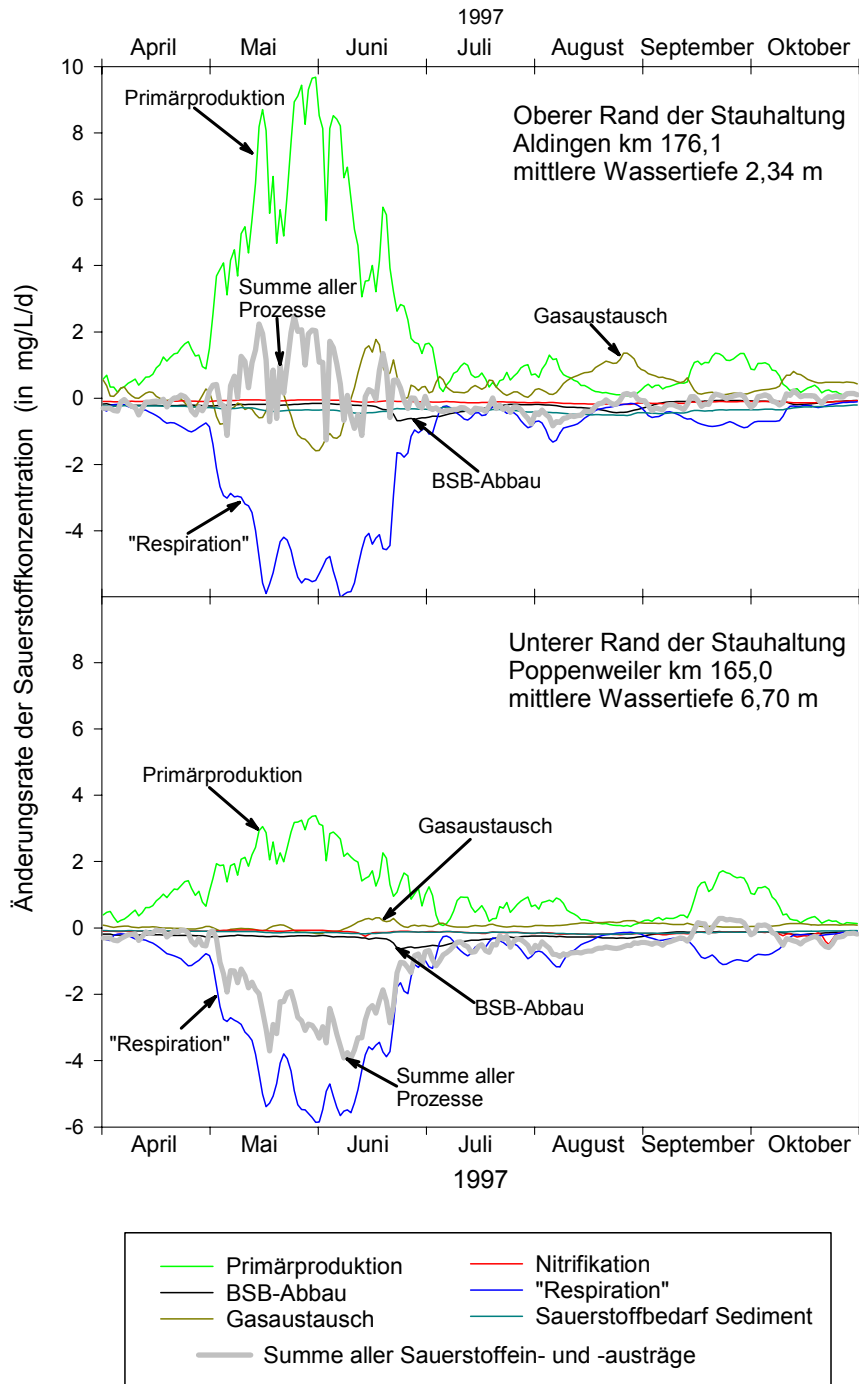


Abb. 9.4: Mit BWQM simulierte Tagesmittelwerte der lokalen Sauerstoffumsatzraten an zwei spezifischen Querschnitten während der Sommermonate 1997.

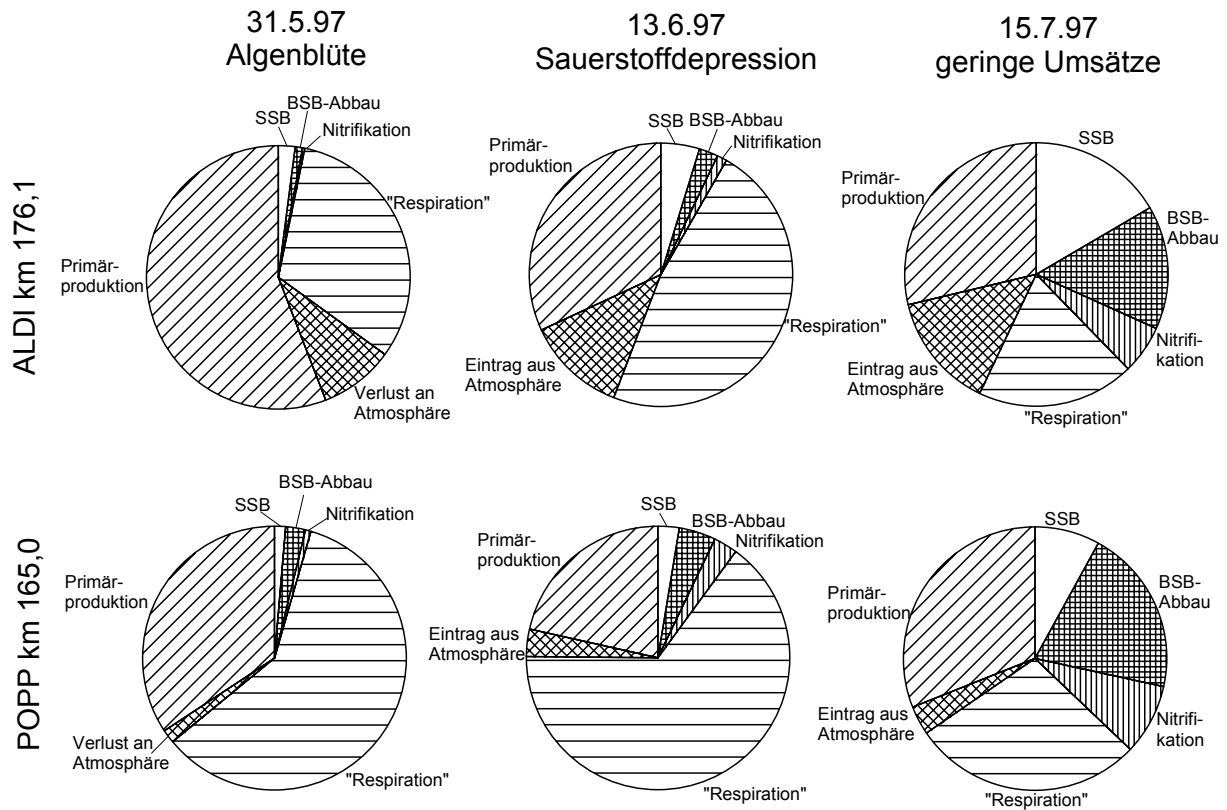


Abb. 9.5: Mit BWQM ermittelte relative Anteile verschiedener Prozesse an den lokalen Sauerstoffumsatzraten an zwei spezifischen Querschnitten zu drei Zeitpunkten.

Bei insgesamt geringen Sauerstoffumsatzraten ist der Sauerstoffhaushalt offenkundig wesentlich stabiler als bei hohen Umsatzraten, wie sie während Algenblüten auftreten. Die Instabilität rührt von der Dominanz weniger Prozesse her, namentlich der Primärproduktion und der Algenverluste. Veränderte Rahmenbedingungen, wie Witterungseinbrüche oder erhöhter Fraßdruck, können zu plötzlichen Ungleichgewichten und zum Zusammenbrechen des Sauerstoffhaushalts führen. Bei geringen Umsatzraten hingegen sind unterschiedliche Prozesse in nahezu gleichen Verhältnissen an der Sauerstoffbilanz beteiligt. Ausgeprägte Änderungen eines Prozesses können durch die regulierende Wirkung der anderen Prozesse ausgeglichen werden.

Bedeutung von Primär- und Sekundärbelastung

Um den Einfluss der Primärbelastung zu quantifizieren, wurden Simulationen durchgeführt, bei denen die Ammonium- und BSB-Frachten von oberstrom, den Nebenflüssen und den Einleitern auf Null gesetzt wurden. Da anorganischer Stickstoff (vor allem als Nitrat) immer im Überschuss vorhanden ist, hat die Konzentrationserniedrigung des Ammoniums kaum Auswirkungen auf das Phytoplankton. Zu Vergleichszwecken wurden Rechenläufe sowohl mit dem BWQM als auch mit dem ATV-FGSM durchgeführt.

Die Abbildungen 9.6 und 9.7 geben die Ergebnisse der Simulationen für 1997 mit und ohne Primärbelastung für den Neckar bei Poppenweiler und bei Besigheim wieder. Darüber hinaus wurden jahresweise deskriptive statistische Kenngrößen der Abweichungen der Sauerstoffgehalte für Simulationsläufe mit und ohne Primärbelastung ermittelt. Der Median und der Mittelwert der Abweichungen sind Maßzahlen für die durchschnittliche Absenkung der Sauerstoffgehalte durch die Primärbelastung in den Sommermonaten der einzelnen Jahre. Die Standardabweichung gibt Aufschluss über die Variabilität des Einflusses der Primärbelastung.

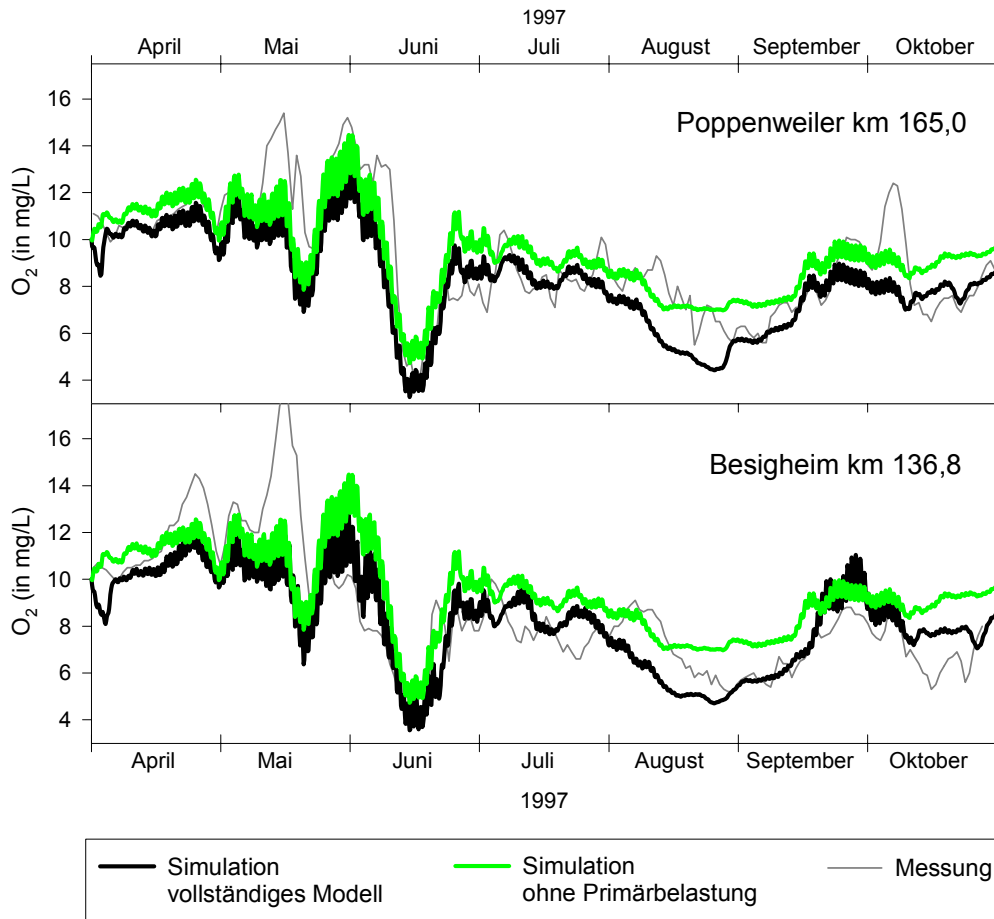


Abb. 9.6: Vergleich der mit dem BWQM simulierten Sauerstoffgehalte für den Sommer 1997, mit und ohne Primärbelastung durch Ammonium und BSB.

Tab. 9.1: Deskriptive Statistik der mit dem BWQM und dem ATV-FGSM ermittelten Veränderung der Sauerstoffkonzentrationen durch die Primärbelastung im Neckar bei Poppenweiler (km 165,0) und bei Besigheim (km 136,7).

Jahr	BWQM						ATV-FGSM					
	Poppenweiler			Besigheim			Poppenweiler			Besigheim		
	Med.	MW.	Stw.	Med.	MW.	Stw.	Med.	MW.	Stw.	Med.	MW.	Stw.
1996:												
mg/L	-1,0	-1,0	0,5	-1,0	-1,1	0,5	-2,3	-2,3	1,6	-2,8	-2,7	1,7
1997:												
mg/L	-1,1	-1,2	0,4	-1,2	-1,3	0,3	-1,4	-1,3	0,5	-1,6	-1,6	0,6
1998:												
mg/L	-1,0	-1,1	0,4	-1,1	-1,1	0,4	-1,5	-1,7	0,9	-1,7	-1,8	0,9

Die Simulationsergebnisse verdeutlichen, dass die Primärbelastung grundsätzlich nicht vernachlässigt werden kann. Vielmehr trägt sie durchschnittlich je nach Jahr, Ort und Simulationsmodell zu einer Erniedrigung der Sauerstoffkonzentration um 1 mg/L bis 2 mg/L bei (Tab. 9.1).

Die Unterschiede zwischen den Simulationsergebnissen mit und ohne Primärbelastung sind beim ATV-FGSM generell etwas höher als beim BWQM, so dass die Bedeutung der Primärbelastung bei Verwendung des ATV-FGSM als etwas höher eingeschätzt wird. Die Unterschiede zwischen den beiden Model-

len beruhen zu kleineren Teilen auf unterschiedlichen Auswirkungen der verminderten Ammoniumgehalte und unterschiedlichen BSB-Abbauraten. Als Hauptursache ist die realitätsnähere Darstellung der sauerstoffzehrenden Algenverlustprozesse im ATV-FGSM anzusehen, bei der die Sauerstoffzehrung zum Großteil erst nach einer zeitlichen Verzögerung auftritt. Insbesondere in den Jahren 1997 und 1998, in denen kritischen Sauerstoffuntersättigungen auftraten, sind die Diskrepanzen zwischen den Modellen aber relativ gering. Dies untermauert die Anwendbarkeit des BWQM auch für systemanalytische Zwecke und bekräftigt die im vorangegangenen Abschnitt dargestellten Betrachtungen zur Sauerstoffbilanz.

Wenngleich die Primärbelastung offenkundig nicht zu vernachlässigen ist, so bestätigen die Ergebnisse dennoch auch, dass die zeitliche Dynamik und die Amplitude des Sauerstoffgehalts durch das Phytoplankton und die gegebenenfalls resultierende Sekundärbelastung gesteuert werden. So ist die Sekundärbelastung der Auslöser für die Sauerstoffdepression im Juni 1997. Die absolute Minimalkonzentration wird allerdings durch die permanent vorhandene Primärbelastung mit gesteuert. Das Selbe gilt für die hier nicht dargestellten Sauerstoffdepressionen im Jahr 1998. Lediglich für den August 1997 deutet sich zumindest beim BWQM eine Mitbeteiligung der Primärbelastung an der beobachteten Amplitude der Sauerstoffdepression an (Abb. 9.6). Diese Ergebnisse stehen im Einklang mit den Befunden aus der empirischen Analyse des Stoffhaushalts (Kapitel 5).

Vereinfacht zusammenfassend lässt sich das System wie folgt charakterisieren: Primärproduktion und Sekundärbelastung bestimmen Zeitpunkt und Amplitude der Sauerstoffkonzentrationsschwankungen. Die Primärbelastung bestimmt auf welchem Niveau diese Schwankungen stattfinden. Dieser generelle Befund sollte aber nicht darüber hinweg täuschen, dass eine hinsichtlich der Zehrstoffe schlechtere Abwasserreinigung und/oder Stoßbelastungen durch Mischwasserentlastungen nach wie vor zu ausgeprägten Sauerstoffdepressionen führen können.

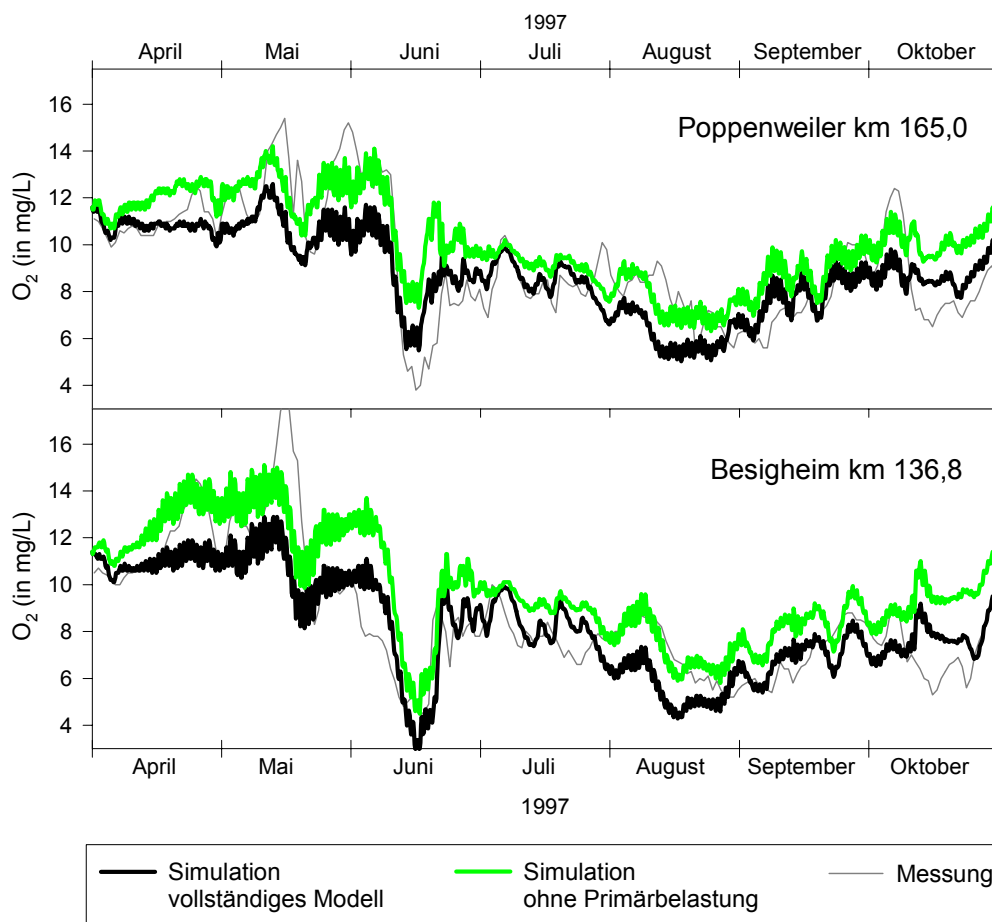


Abb. 9.7: Vergleich der mit dem ATV-FGSM simulierten Sauerstoffgehalte für den Sommer 1997, mit und ohne Primärbelastung durch Ammonium und BSB.

Relevanz der Stoffeinleitungen auf der Fließstrecke

Insbesondere hinsichtlich möglicher Maßnahmen zur Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts ist der Einfluss der Einleitungen auf der simulierten Fließstrecke von wichtiger Bedeutung. Daher wurden sowohl mit dem ATV-FGSM als auch mit dem BWQM Simulationen durchgeführt, bei denen angenommen wurde, dass die Kläranlagen auf der Fließstrecke weder Zehrstoffe noch Stickstoff- und Phosphorverbindungen emittieren. Die Abflüsse der Kläranlagen und die Siliziumfrachten wurden bei den Simulationen jedoch berücksichtigt. Aus der Differenz zwischen den Originalsimulationen konnten die Auswirkungen der Kläranlagenemissionen auf der Fließstrecke auf den Sauerstoffgehalt ermittelt werden. Die mittleren Ergebnisse im Neckar bei Poppenweiler und bei Besigheim für die Sommerhalbjahre 1996 bis 1998 sind in Tabelle 9.2 zusammengestellt.

Tab. 9.2: Deskriptive Statistik der mit dem BWQM und dem ATV-FGSM ermittelten Veränderung der Sauerstoffkonzentrationen durch die Stoffeinleitungen der Kläranlagen auf der Modellstrecke im Neckar bei Poppenweiler (km 165,0) und bei Besigheim (km 136,7).

Jahr	BWQM						ATV-FGSM					
	Poppenweiler			Besigheim			Poppenweiler			Besigheim		
	Med.	MW.	Stw.	Med.	MW.	Stw.	Med.	MW.	Stw.	Med.	MW.	Stw.
1996:												
mg/L	-0,3	-0,3	0,1	-0,1	-0,1	0,0	-0,1	-0,1	0,1	-0,2	-0,3	0,3
1997:												
mg/L	-0,3	-0,3	0,2	-0,3	-0,3	0,2	-0,2	-0,3	0,2	-0,5	-0,6	0,4
1998:												
mg/L	-0,2	-0,2	0,2	-0,1	-0,2	0,2	-0,4	-0,4	0,4	-0,7	-0,8	0,6

Prinzipiell kann die Vermeidung der Emissionen den Sauerstoffhaushalt in zweierlei Hinsicht beeinflussen: Zum einen wird die Primärbelastung reduziert. Andererseits kann eine indirekte Wirkung über die Nährstoffe (nicht über Si, siehe oben) und eine mögliche Limitierung des Algenwachstums erfolgen. Wie Tabelle 9.2 verdeutlicht überwiegt der erste Effekt. Dies ist in erster Linie darauf zurückzuführen, dass sich mit den gewählten Halbsättigungskonstanten durch die Punktemissionen auf der Fließstrecke kaum Unterschiede im Algenwachstum ergeben. Eine ausführlichere Diskussion über eine mögliche Nährstofflimitierung folgt in Kapitel 10.

Die Kläranlagen auf der Fließstrecke beeinflussen den Sauerstoffgehalt folglich vor allem über die Primärbelastung. Die durch die Emissionen bedingte Reduktion der Sauerstoffkonzentration scheint aber eher gering zu sein und liegt im Mittel unter 0,5 mg/L. Vergleicht man die Ergebnisse mit Tabelle 9.1, so wird deutlich, dass die Emissionen auf der Fließstrecke je nach Jahr und Simulationsmodell bei Poppenweiler und bei Besigheim im Mittel etwa 10% bis 40% zu der gesamten durch Primärbelastung bedingten Verringerung des Sauerstoffgehalts beitragen.

9.2.2 Steuergrößen der Phytoplanktodynamik

Umsatzraten der an der Algendynamik beteiligten Prozesse

Um näheren Einblick in das Zusammenspiel der Prozesse zu gewinnen, die im Gewässer für den Zueggewinn und Verlust von Algenbiomasse verantwortlich sind, wurden ähnlich wie für Sauerstoff auch für die Algen Umsatzraten bestimmt. Als Grundlage diente hierbei das EWQM, da es die Algendynamik realitätsnäher und differenzierter wiedergibt als das BWQM. Ein Vergleich mit den Ergebnissen des ATV-FGSM war mit der vorliegenden Modellversion leider noch nicht möglich (siehe oben). Als repräsentative Querschnitte wurden wiederum das Oberwasser des Wehrs Poppenweiler (km 165,0) und das Unterwasser des Wehrs Hofen (km 176,1) ausgewählt. Die Änderungsraten der Chl-a Konzentration infolge der beteiligten Prozesse während des Jahres 1997 sind in Abbildung 9.8 dargestellt.

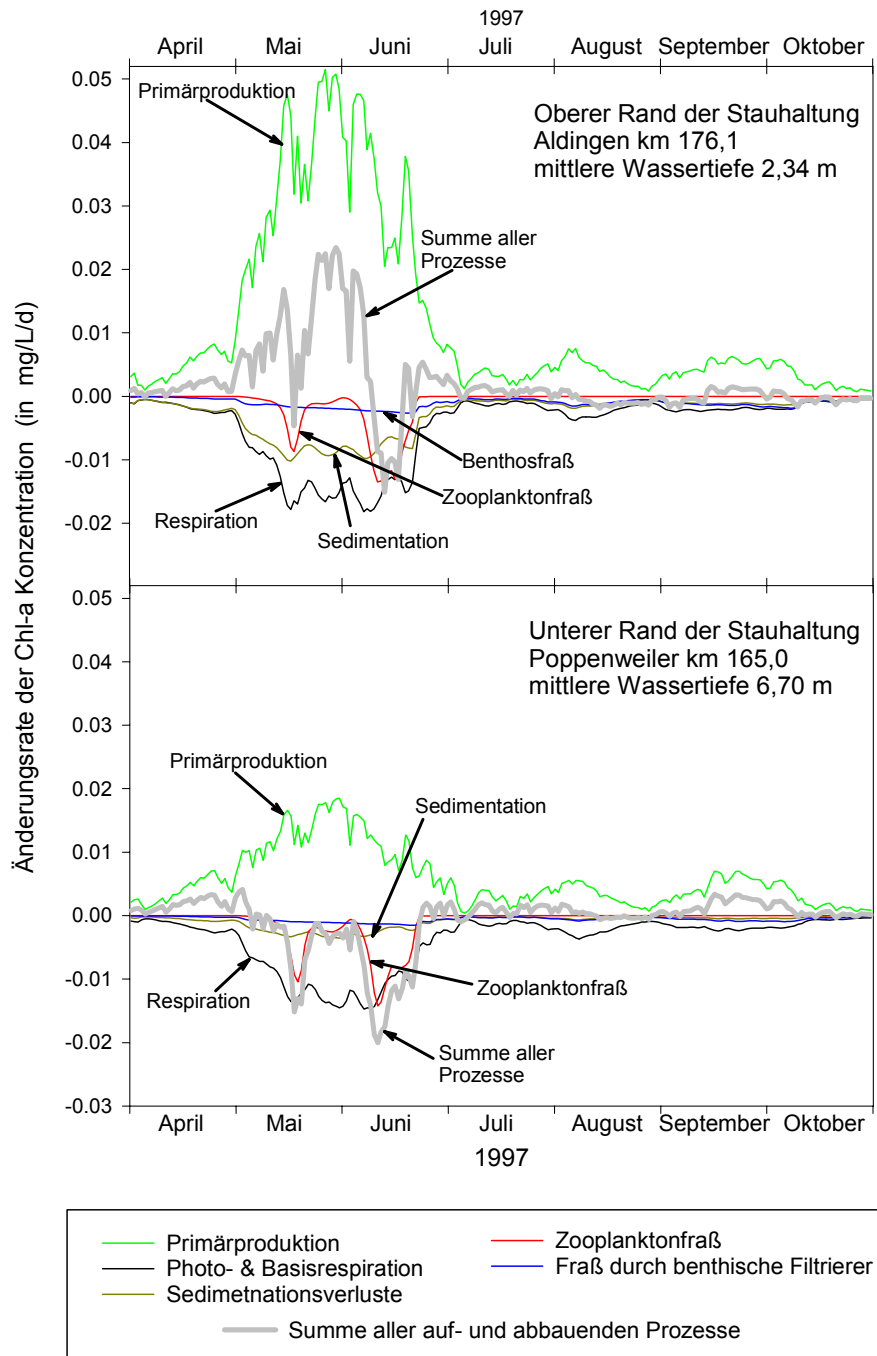


Abb. 9.8: Mit EWQM simulierte Tagesmittelwerte der lokalen Änderungsrate von Chl-a an zwei spezifischen Querschnitten während der Sommermonate 1997.

Um näheren Aufschluss über die relative Bedeutung einzelner Prozesse während typischer Bedingungen zu erlangen, wurden auch die relativen Umsatzraten für die selben drei Tage wie in Abbildung 9.5 ermittelt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 9.9 dargestellt.

Die Primärproduktion ist der einzige Algenbiomasse aufbauende Prozess, dem (im vorliegenden Modell) vier abbauende Prozesse gegenüberstehen. Mit den im EWQM (und BWQM) gewählten Halbsättigungskonstanten (siehe Tab. 8.2), erreichen die Hemmfaktoren von Si und P während Algenblüten minimale Werte von 0,90 respektive 0,96, während der Stickstoffhemmfaktor immer über 0,99 liegt. Dies verdeutlicht, dass die Nährstoffe die Bruttoprimärproduktion in der Simulation kaum beeinflussen. Limitierende Faktoren sind vielmehr die Wassertemperatur und das Lichtangebot. Folglich ist – wie bereits im Zuge

der Sauerstoffbilanzen besprochen – die Primärproduktion im flacheren Unterwasser infolge der günstigeren Lichtverhältnisse höher als im Oberwasser des Wehrs.

Die Respiration ist generell der wichtigste algenabbauende Prozess – wobei in diesem Falle mit Respiration tatsächlich nur die Atmung (Basis- und Photorespiration) der Algen gemeint ist. Die Respiration wird jedoch vor allem von der Algenkonzentration selbst und in geringerem Maße von der Temperatur gesteuert. Sie kann also nicht als externe Steuergröße für die Algenbiomasse angesehen werden.

Im Gegensatz hierzu wird der Fraß, sowohl durch Zooplankton als auch durch benthische Filtrierer (*Dreissena polymorpha*), neben der Verfügbarkeit von Algen auch durch die Biomasse der Konsumenten bestimmt. Beim Zooplankton zeigt sich dies in einer ausgeprägten Dynamik des Anteils des Zooplanktonfraßes an den Algenverlusten (Abb. 9.9). Während der Sauerstoffdepression sind die Fraßverluste ähnlich hoch wie die Verluste infolge der Respiration. Der Vergleich mit Abbildung 9.8 verdeutlicht, dass dies nicht nur ein relativer Effekt ist, sondern mit auf einen Anstieg der Zooplanktonkonzentration und -filtrierleistung zurückzuführen ist. In diesem Zusammenhang ist allerdings darauf zu verweisen, dass die mit dem ATV-FGSM berechneten maximalen Zooplanktonkonzentrationen etwa nur halb so groß sind wie beim EWQM. Daher ist davon auszugehen, dass bei der Simulation mit dem ATV-FGSM der Einfluss des Zooplanktons während der Sauerstoffdepression geringer ist.

Für die betrachteten lokalen Umsatzraten ist der Fraß durch benthische Filtrierer, die durch *Dreissena polymorpha* repräsentiert werden, durchgehend von geringer Bedeutung. Allerdings wächst dessen Anteil im Laufe des Jahres relativ und absolut an. Wie nachfolgend gezeigt wird, kann die Filtrierleistung des Zoobenthos zumindest am unteren Ende der betrachteten Fließstrecke von entscheidender Bedeutung für die Algenkonzentration im Spätsommer sein.

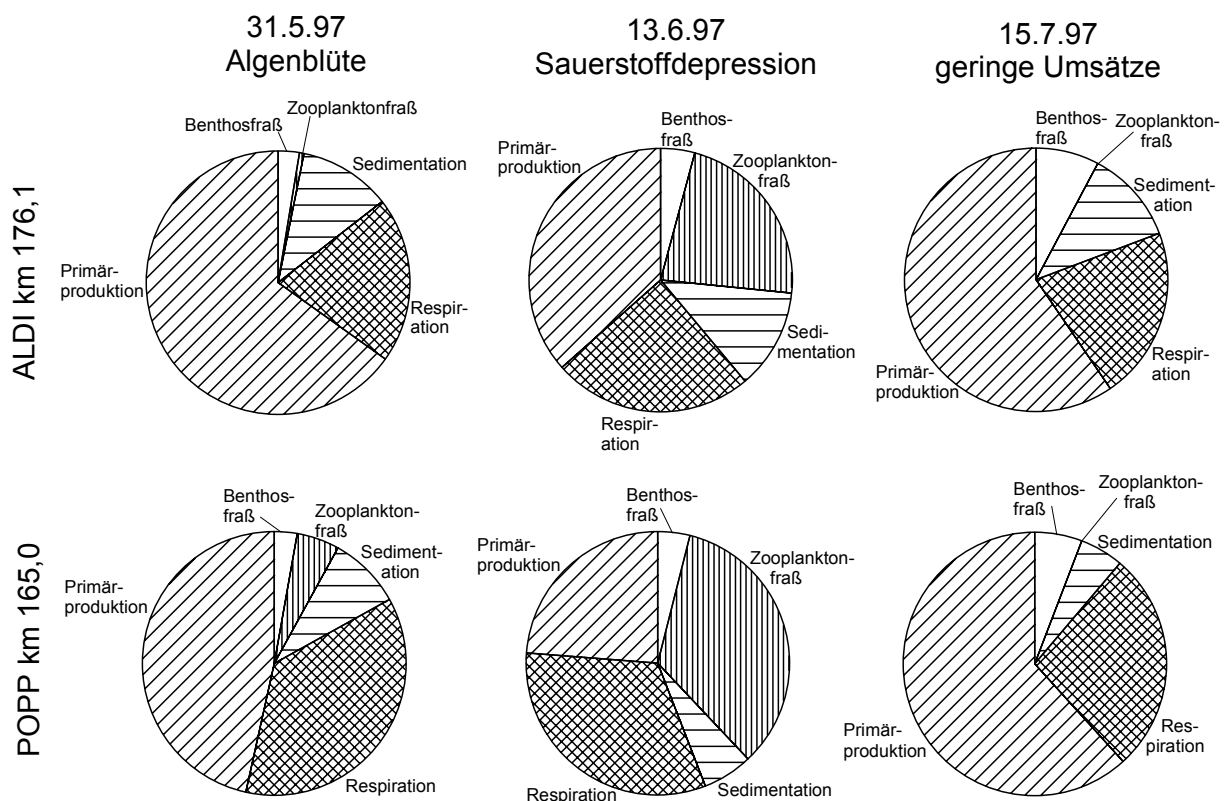


Abb. 9.9: Mit EWQM ermittelte relative Anteile verschiedener Prozesse an den lokalen Umsatzraten von Chl-a an zwei spezifischen Querschnitten zu drei Zeitpunkten.

Bedeutung von herbivorem Zooplankton und benthischen Filtrierern

Sowohl mit dem EWQM als auch mit dem ATV-FGSM wurden Simulationen durchgeführt, bei denen das herbivore Zooplankton bzw. das Zoobenthos nicht berücksichtigt wurden. Dies erlaubt es, den Einfluss der Konsumenten auf die Algendynamik und in dessen Folge auf den Sauerstoffhaushalt zu quantifizieren. Die Auswirkungen beider Gruppen sind dabei am unteren Ende der Simulationsstrecke am ausgeprägtesten, weshalb sie nachfolgend am Beispiel des Neckars bei Besigheim (km 136,8) dargestellt werden.

Zooplankton: Abbildung 9.10 zeigt die mit dem EWQM erzielten Simulationsergebnisse mit und ohne Zooplankton für die Jahre 1997 und 1998, am Querschnitt Besigheim. Zur besseren Einordnung der Ergebnisse sind auch die Messergebnisse mit dargestellt. Mit dem ATV-FGSM ergeben sich sehr ähnliche Ergebnisse, wobei die Auswirkungen des Zooplanktons im FGSM generell etwas weniger ausgeprägt sind (Ergebnisse nicht dargestellt).

Abbildung 9.10 verdeutlicht im Einklang mit Abbildung 9.9, dass das herbivore Zooplankton nur zeitweise merkliche Auswirkungen auf die Algendynamik und den Sauerstoffgehalt hat. Insbesondere im Laufe länger anhaltender Algenblüten kann es jedoch von entscheidender Bedeutung für die Reduktion der Algenbiomasse sein. So wären die Algenkonzentrationen im Mai 1997 und im Mai 1998 ohne den Fraßdruck des Zooplanktons deutlich höher gewesen. Im Juli 1998 konnten die Zooplankter offenbar die Entstehung einer erneuten, ausgeprägten Algenblüte unterbinden. Insbesondere Mitte Juni 1997 und Ende Juni 1998 war das Zooplankton auch maßgeblich am Zusammenbruch der Algenblüten beteiligt, wengleich hier offenbar auch noch andere Faktoren mitwirkten (Wassertemperatur und Licht !). Die geschilderten Einflüsse manifestieren sich auch in den entsprechenden Auswirkungen auf den Sauerstoffgehalt.

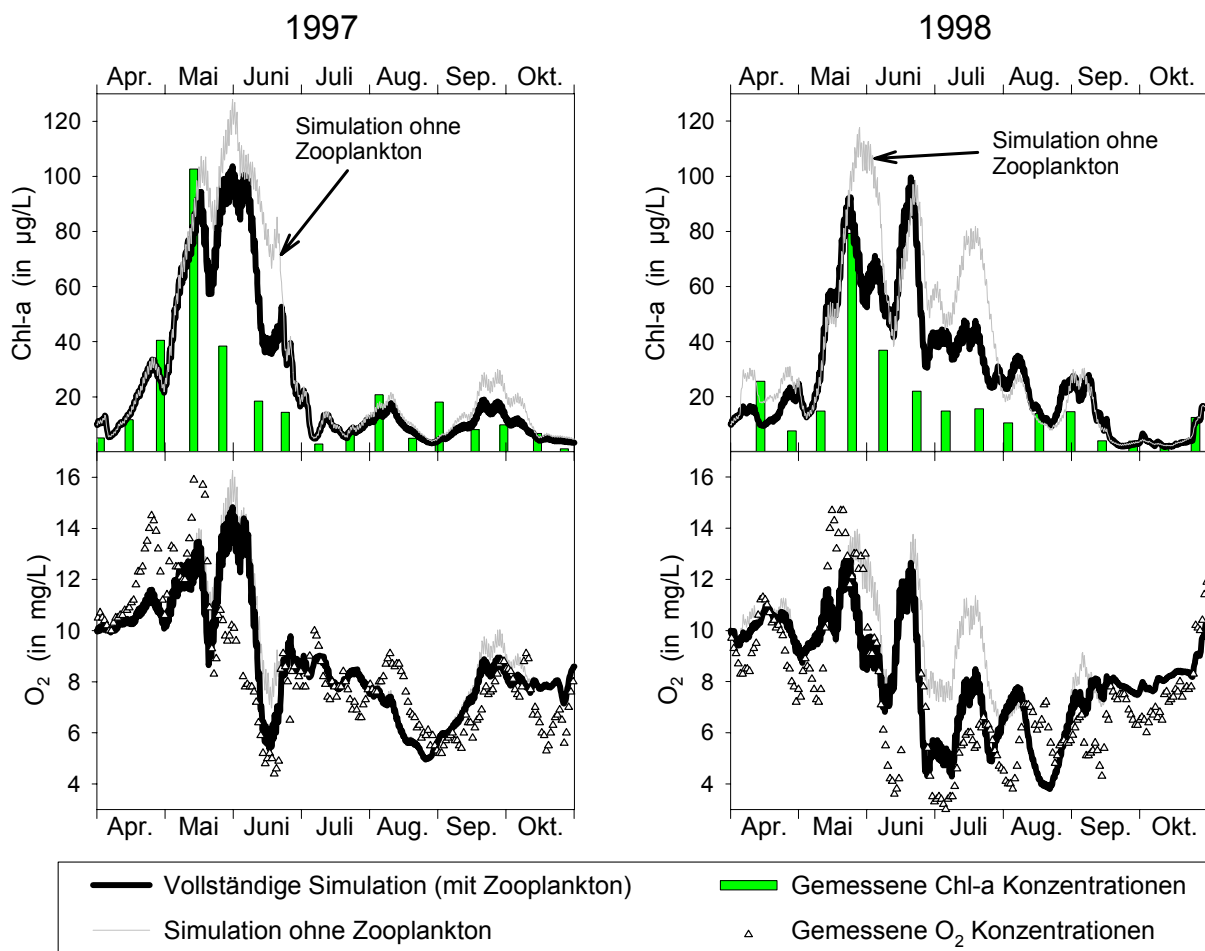


Abb. 9.10: Mit dem EWQM erzielte Simulationsergebnisse im Neckar bei Besigheim (km 136,8), mit und ohne Berücksichtigung von herbivorem Zooplankton.

Generell ergeben sich an den weiter oberstrom gelegenen Querschnitten ähnliche Ergebnisse, wobei das Ausmaß der Auswirkungen des Zooplanktons zum oberen Rand des Modells hin erwartungsgemäß jedoch zunehmend schwächer wird.

Benthische Filtrierer (*Dreissena polymorpha*): Der Einfluss der benthischen Filtrierer auf Algendynamik und Sauerstoffhaushalt wird in Abbildung 9.11 verdeutlicht. Hier sind die mit dem EWQM erzielten Simulationsergebnisse mit und ohne das Zoobenthos für den Querschnitt Besigheim im Vergleich mit den Messergebnissen dargestellt. Da merkliche Unterschiede zwischen den beiden Simulationsvarianten erst in der zweiten Sommerhälfte auftreten, beschränkt sich die Darstellung auf den Zeitraum von Juli bis Oktober. Auch in diesem Fall ergeben sich mit dem ATV-FGSM ähnliche Ergebnisse, weshalb diese hier nicht zusätzlich dargestellt sind.

Aus Abbildung 9.11 wird ersichtlich, dass die Chl-a Konzentrationen im Neckar bei Besigheim wesentlich besser nachvollzogen werden können, wenn benthische Filtrierer mit berücksichtigt werden. Dies stellt die Bedeutung dieses Moduls für die Simulation des Sauerstoffhaushalts heraus. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die Simulation der benthischen Filtrierer das Anwachsen der Biomasse über die Vegetationszeit berücksichtigen muss. Simulationen, die von einer zeitlich konstanten Filterleistung des Zoobenthos ausgehen, könnten entweder die Algenblüten im Frühsommer oder die deutlich reduzierten Phytoplanktonkonzentrationen im Spätsommer nicht nachbilden. Eine dynamische Betrachtung des benthischen Kompartiments ist für längerfristige Simulationen also unabdingbar.

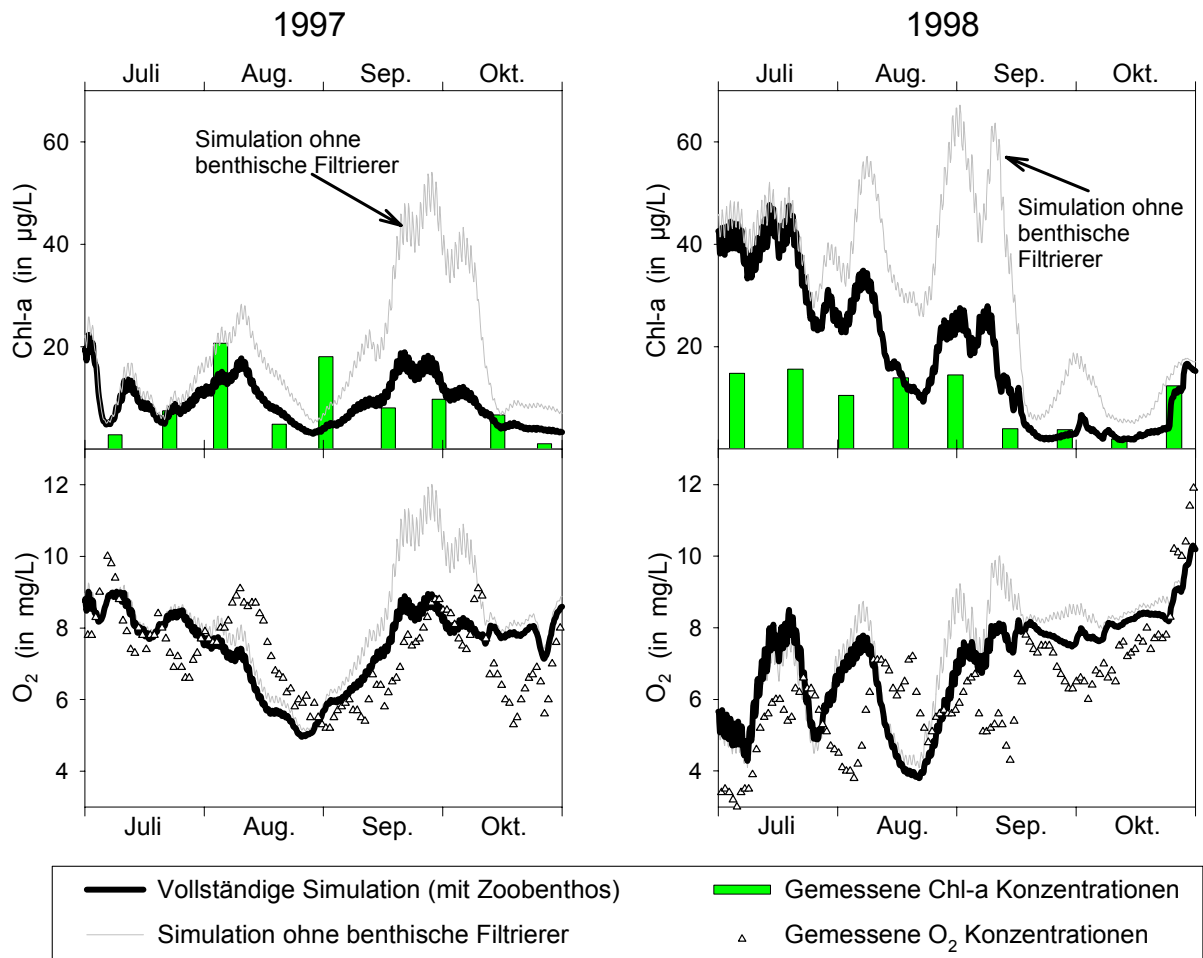


Abb. 9.11: Mit dem EWQM erzielte Simulationsergebnisse im Neckar bei Besigheim (km 136,8), mit und ohne Berücksichtigung der benthischen Filtrierer.

Die Simulationsergebnisse verdeutlichen, dass die benthischen Filtrierer (vor allem *Dreissena polymorpha*) am unteren Rand des Modellgebiets erhebliche Auswirkungen auf den Algengehalt im Spätsommer haben können. Offenbar wird es durch die integrale Wirkung über die Fließstrecke möglich, dass die Filterleistung des Zoobenthos das Ausmaß von Algenblüten bei Besigheim deutlich abschwächt. Dieses Ergebnis steht im Einklang mit modellgestützten Analysen der Mosel (Schöl et al. 1999).

Einerseits belasten die benthischen Filtrierer den Sauerstoffhaushalt durch ihre eigene Atmung. Über ihre Filterleistung können sie aber das Ausmaß von Algenblüten reduzieren und tragen damit dazu bei, dass die Sekundärbelastung beim plötzlichen Zusammenbruch dieser Algenblüten weniger ausgeprägt ist. Damit haben die benthischen Filtrierer im Neckar – insbesondere aufgrund ihrer im Vergleich zum Zooplankton wesentlich langsameren Dynamik – eine ausgleichende Wirkung auf den Sauerstoffhaushalt. Die Besiedlung des Neckars mit *Dreissena Polymorpha*, die erst im Zuge der verbesserten Güteverhältnisse dichter wurde (Alf 1991), ist daher mit Blick auf den Sauerstoffhaushalt positiv zu bewerten.

Bedeutung der Algenkonzentrationen an den Modellrändern

Um die Bedeutung der Algenfracht vom oberstromigen Rand und den Nebenflüssen zu analysieren, wurden mit dem ATV-FGSM und dem BWQM Simulationen durchgeführt, bei denen die Chl-a Konzentrationen an den genannten Modellrändern konstant bei $10 \mu\text{g/L}$ belassen wurde. Der Einfluss der zeitweise erhöhten Chl-a Konzentrationen an den Zuflüssen, kann aus dem Vergleich mit den Originalsimulationen abgeleitet werden. Die deutlichsten Auswirkungen zeigten sich im Mai und Juni 1997, weshalb die Ergebnisse für diesen Zeitraum in den Abbildungen 9.12 und 9.13 dargestellt sind.

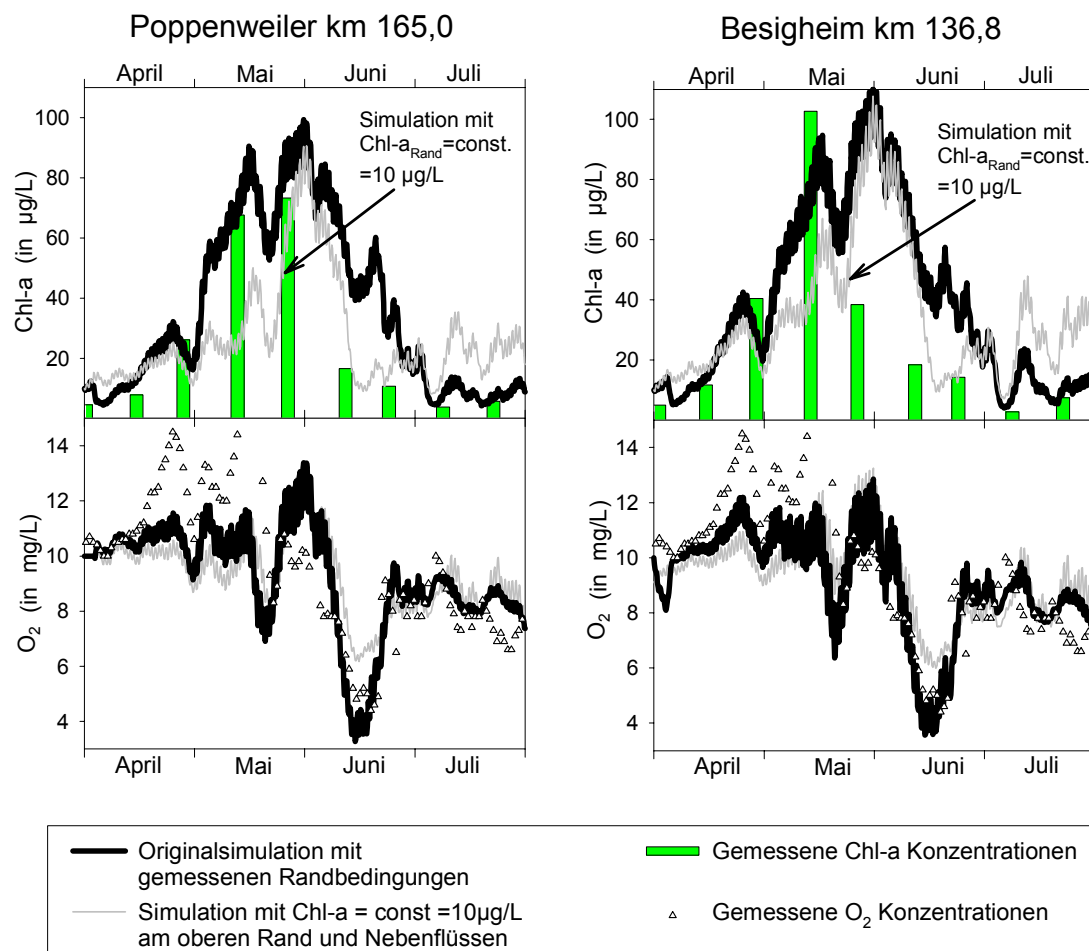


Abb. 9.12: Vergleich der mit dem BWQM für den Frühsommer 1997 erzielten Simulationsergebnisse mit gemessenen bzw. konstant bei $10 \mu\text{g/L}$ belassenen Chl-a Konzentrationen als Randbedingungen am oberen Modellrand und an den Nebenflüssen.

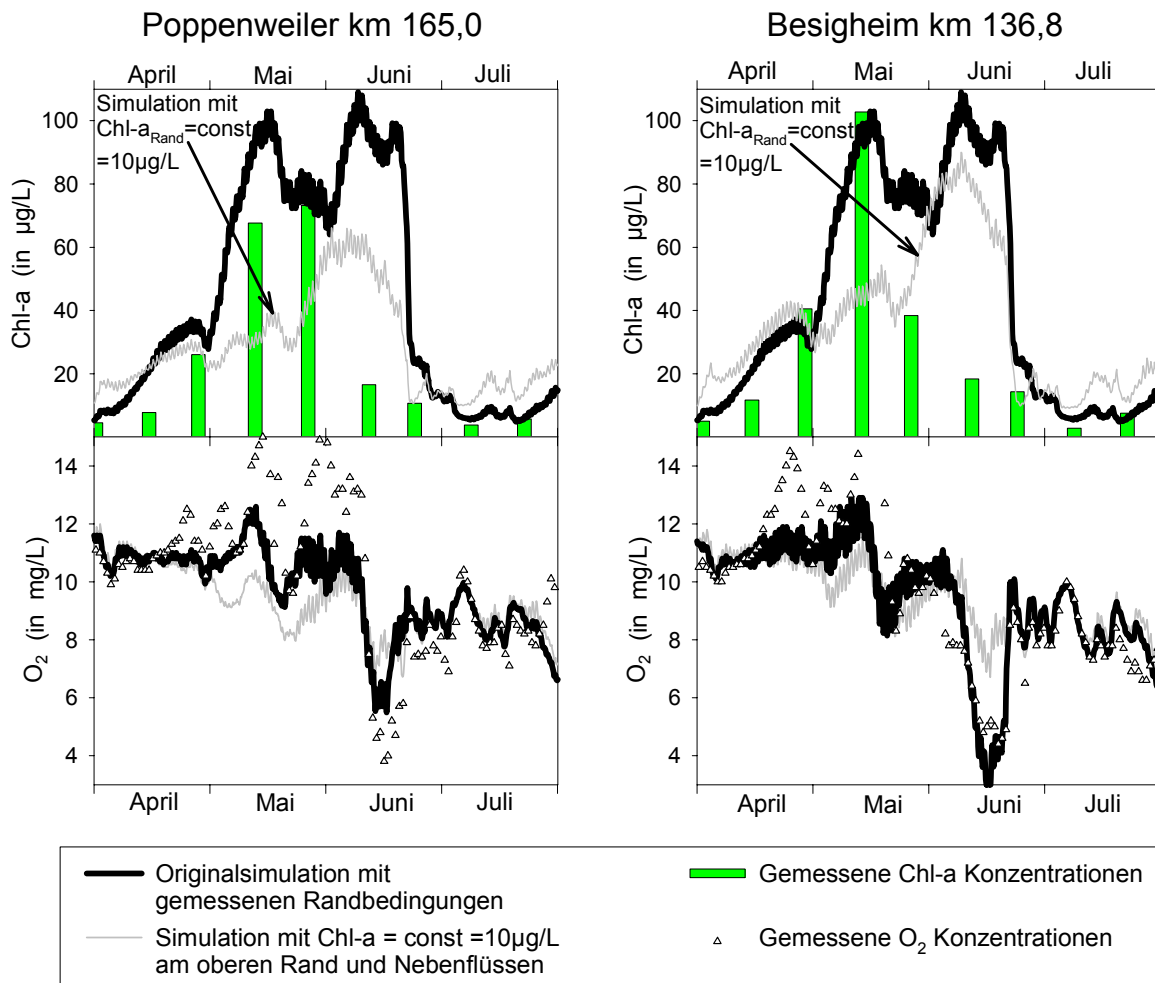


Abb. 9.13: Vergleich der mit dem ATV-FGSM für den Frühsommer 1997 erzielten Simulationsergebnisse mit gemessenen bzw. konstant bei 10 µg/L belassenen Chl-a Konzentrationen als Randbedingungen am oberen Modellrand und an den Nebenflüssen.

Trotz einiger Unterschiede im Detail, die vor allem darauf beruhen, dass die Algenumsatzprozesse im BWQM etwas schneller ablaufen als im ATV-FGSM, können mit beiden Modellen dieselben Grundaussagen abgeleitet werden. Dies verstärkt die Vertrauenswürdigkeit dieser Grundaussagen.

Sowohl bei Poppenweiler als auch bei Besigheim hat die von den Modellrändern zugeführte Algenfracht merkbare Auswirkungen auf die Phytoplanktonkonzentrationen und auf den Sauerstoffhaushalt. Zumindest die maximalen Algenkonzentrationen Mitte Mai wurden durch den erhöhten Algenzustrom von den Rändern her mit beeinflusst. In beiden Modellen zeigen sich auch deutliche Auswirkungen auf die Sauerstoffdepression Mitte Juni. Offensichtlich wären die Sauerstoffgehalte bei geringeren Algenkonzentrationen am Beginn der Bundeswasserstraße (und in den Nebenflüssen) nicht so tief abgefallen. Die für diese Sauerstoffdepression maßgebliche Sekundärbelastung wurde also nicht ausschließlich auf der simulierten Fließstrecke aufgebaut, sondern stammt zumindest teilweise von oberstromigen Gebieten. Dieses Ergebnis verdeutlicht, dass die „Vorbelastung“ mit Algen mitentscheidend für den Sauerstoffhaushalt im gesamten Modellgebiet sein kann. Die Bekämpfung der Eutrophierung muss daher bereits oberhalb der Bundeswasserstraße Neckar und in den Nebenflüssen beginnen.

9.3 Nährstoffretention

9.3.1 Motivation

Der Transport und Verbleib der Nährstoffe Phosphor und Stickstoff im Flusssystem ist insbesondere vor dem Hintergrund der Eutrophierung von Küstengewässern von herausragendem Interesse. Bei Emissions-Immissionsbilanzen liegen die ermittelten Nährstoffeinträge generell über den Frachten in den Flüssen, so dass eine Retentionswirkung für Nährstoffe postuliert wird (Behrendt et al. 1999; Borchardt und Geffers 1999; Petersen et al. 2001). Neben reinen Bilanzbetrachtungen werden zunehmend auch flussgebietsbezogene Modelle verwendet, um die Stoffflüsse zu analysieren. Die Simulation der Retentionswirkung im Einzugsgebiet wird dabei allgemein in pauschaler Form berücksichtigt und basiert zumeist auf statistischen Korrelationen, ist also nicht prozessbasiert (z.B. Behrendt 1993; Behrendt et al. 1999; DeWitt 2000). Bilanzierungsmethoden und großräumige Modelle stoßen also natürlicher Weise an ihre Grenzen, wenn es darum geht Aufschluss über die tatsächlich wirksamen Retentionsprozesse zu erlangen. Demzufolge ist auch nicht geklärt, welcher Anteil der Nährstoffretention auf Prozesse im Gewässer selbst zurückzuführen ist.

Deshalb wird hier das BWQM verwendet, um die Retention von Stickstoff und Phosphor im Neckar zwischen Deizisau und Besigheim näher zu beleuchten. Dabei ist selbstverständlich zu beachten, dass das BWQM nicht speziell auf diesen Zweck ausgerichtet ist: Insbesondere wird die Erosion im Fluss nicht berücksichtigt, so dass der Übergang partikulär gebundener Nährstoffe vom Gewässerbett in das Wasser nicht erfasst wird. Die Sedimentation ist im BWQM nur in sehr einfacher Weise enthalten. Zudem basiert die Simulation des Austausches gelöster Nährstoffe zwischen Wasserkörper und Sediment auf relativ wenigen Feldmessungen (vgl. Kapitel 7). Trotz dieser Einschränkungen erscheint es möglich, mit dem BWQM grundlegende Aussagen zum Transport und Rückhalt von Stickstoff und Phosphor abzuleiten, so lange sich die Simulation auf die sommerliche Niedrigwasserphase ohne nennenswerte Erosion beschränkt.

9.3.2 Ergebnisse und Diskussion

Nährstoffeinträge

In einem ersten Schritt wurden die Nährstoffeinträge in das Modellgebiet während der Monate April bis einschließlich Oktober der Jahre 1996, 1997 und 1998 ermittelt und hinsichtlich ihrer Herkunft aufgeschlüsselt. Dabei ist zu beachten, dass die Beiträge des Neckars oberhalb von Deizisau sowie der Nebenflüsse Rems und Murr Punkt- und diffuse Quellen ihrer jeweiligen Einzugsgebiete integral beinhalten. Die Ergebnisse für die drei Zeitabschnitte sind in Abbildung 9.14 zusammengefasst.

Gesamteinträge: Während der sieben Sommermonate wurden je nach Jahr knapp 5000 t bis 6500 t Stickstoff in das Modellgebiet eingetragen. Die Einzugsgebietsfläche des Neckars beträgt bei Besigheim ca. 5680 km². Auf das Jahr hochgerechnet ergeben sich demzufolge Einträge von etwa 1,5 t/km²/a bis 2,0 t/km²/a. Im Vergleich hierzu gelangen Borchardt und Geffers (1999) für das Jahr 1995 und den gesamten Neckar zu Stickstoffemissionen von ca. 2,7 t/km²/a und Stickstofffrachten von ca. 2,2 t/km²/a.

Für Phosphor werden für die sieben Sommermonate Einträge von knapp 200 t bis 240 t ermittelt, was auf das Jahr hochgerechnet etwa 0,06 t/km²/a bis 0,07 t/km²/a entspricht. Borchardt und Geffers (1999) geben für das Jahr 1995 und den gesamten Neckar Emissionen von etwa 0,12 t/km²/a und für die Fracht im Neckar ca. 0,08 t/km²/a an.

Beim Vergleich zwischen den hier ermittelten Werten und denen von Borchardt und Geffers (1999) ist zu beachten, dass es sich bei den Einträgen aus den Flüssen Neckar, Rems und Murr nicht um Bruttoemissionen handelt, da hier natürlich bereits die Retention in den jeweiligen Einzugsgebieten gewirkt hat. Berücksichtigt man zudem, dass die Frachten in den Wintermonaten infolge des dann erhöhten Abflusses höher sind als im Sommer, so können die hier ermittelten Einträge in das Modellgebiet als konsistent mit den Bilanzergebnissen von Borchardt und Geffers (1999) angesehen werden.

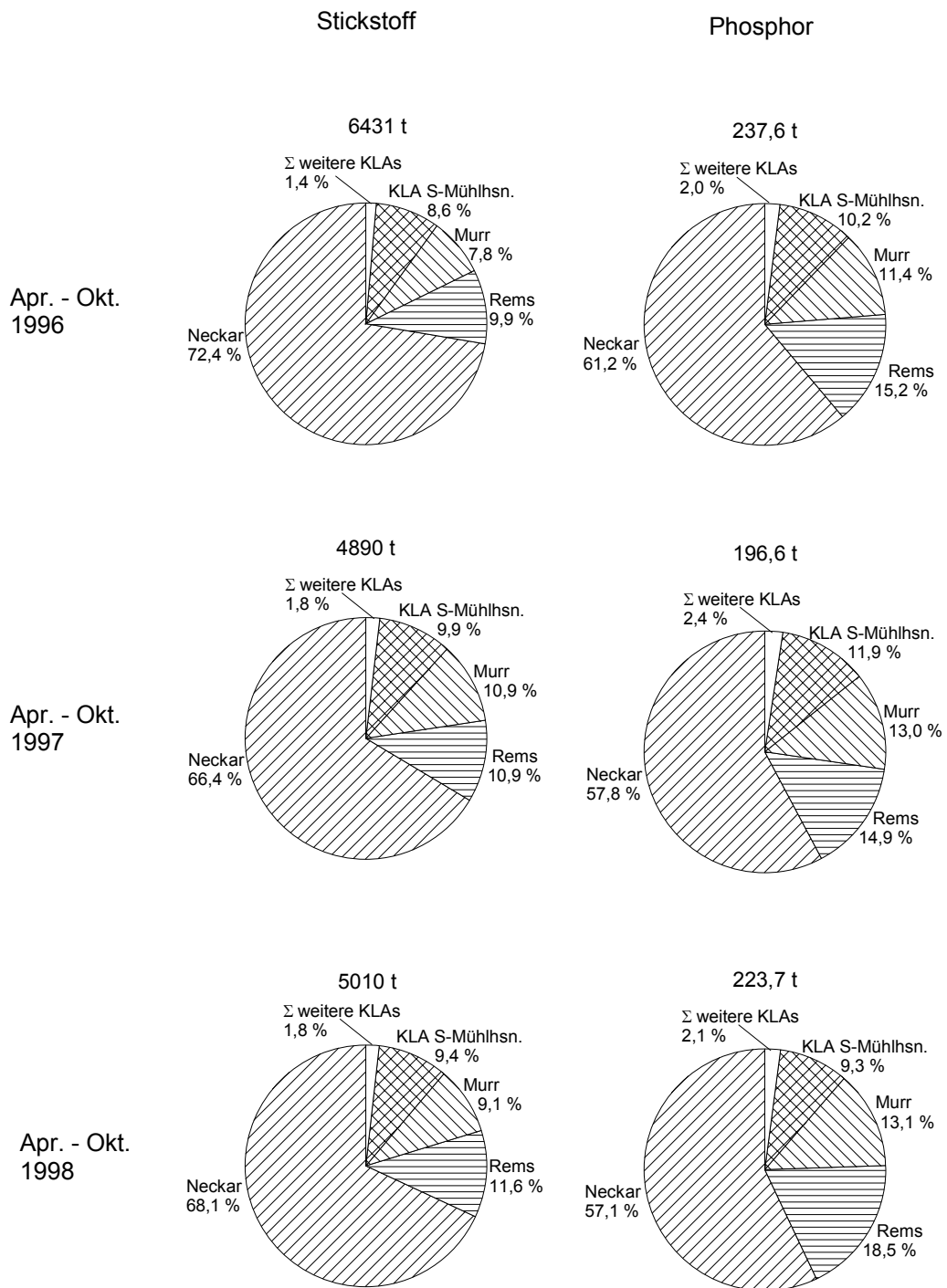


Abb. 9.14: Gesamtmassen der während der Simulationszeiträume in das Modellgebiet eingetragenen Nährstoffe und Aufschlüsselung nach ihrer Herkunft.

Herkunft der Einträge: Abbildung 9.14 verdeutlicht, dass gut zwei Drittel der Stickstoffeinträge auf den Neckar oberhalb von Deizisau zurückgehen, während die Nebenflüsse Rems und Murr sowie die zentrale Kläranlage der Stadt Stuttgart (KLA S-Mühlhshn.) für jeweils etwa 10 % der Einträge verantwortlich sind. Im Vergleich hierzu ist der Beitrag der anderen Kläranlagen, die direkt in die Modellstrecke einleiten, relativ gering. Beim Phosphor liegen die Anteile des Neckars bei etwa 60 %, wohingegen insbesondere die Rems mit einem Anteil von bis zu 18,5 % mehr zum Eintrag in das Modellgebiet beiträgt als im Falle von Stickstoff.

Im Falle von Stickstoff spiegeln die Verhältnisse zwischen Neckar, Rems und Murr in etwa die Größenverhältnisse der Einzugsgebiete wider, die 1:0,14:0,13 betragen. Im Falle des Phosphors trägt die Murr und insbesondere die Rems relativ gesehen mehr zu den Einträgen in das Modellgebiet bei als der Neckar. Dies deutet auf höhere Emissionen in den Einzugsgebieten der Nebenflüsse hin, was an dieser Stelle jedoch nicht näher untersucht werden kann.

Nährstoffrückhalt auf der Fließstrecke

Im zweiten Schritt wurde mit Hilfe des BWQM untersucht, welcher Anteil der in das Modellgebiet eingebrachten Nährstoffe im Neckar zurückgehalten wurde und welche Prozesse hierfür verantwortlich waren.

Stickstoff: Für die Retention von Stickstoff wurden dabei die folgenden Verlustprozesse berücksichtigt: Sedimentation von Algenbiomasse, Sedimentation toter organischer Substanz (inklusive abgestorbener Algen) und Denitrifikation am Gewässerbett. Als interne Stickstoffquelle wurde die Freisetzung von Ammonium aus der Mineralisierung der am Gewässerbett abgelagerten organischen Substanz berücksichtigt. Die Simulationsergebnisse sind in Tabelle 9.3 zusammengefasst.

Tab. 9.3: Mit dem BWQM erzielte Simulationsergebnisse hinsichtlich der Beiträge von Verlustprozessen und internen Quellen zum Stickstofftransport im Modellgebiet.

Prozesse	Apr. bis Okt. 1996		Apr. bis Okt. 1997		Apr. bis Okt. 1998	
	Tonnen	% Einträge	Tonnen	% Einträge	Tonnen	% Einträge
Sedimentation von Algenbiomasse	-36	-0,6	-45	-0,9	-78	-1,6
Sedimentation toter organischer Substanz	-168	-2,6	-182	-3,7	-192	-3,8
Denitrifikation am Gewässerbett	-254	-3,9	-260	-5,3	-330	-6,6
Summe der Verluste	-458	-7,1	-487	-9,9	-600	-12,0
Ammoniumfreisetzung aus dem Sediment	56	0,8	60	1,2	63	1,3
Gesamtretention	-402	-6,3	-427	-8,7	-537	-10,7

Hinsichtlich der Verlustprozesse ist zu beachten, dass lediglich die Denitrifikation zu einem endgültigen Stickstoffverlust aus dem System in Form von N_2 führt. Die Sedimentation bedingt hingegen zunächst eine (Zwischen-) Speicherung des organisch gebundenen Stickstoffs. Dieser wird zum Teil durch die Mineralisierung in Form von NH_4 wieder in das Wasser zurückgeführt oder über Nitrifikation und anschließende Denitrifikation im Sediment aus dem System entzogen. Ein Teil des sedimentierten, organisch gebundenen Stickstoffs kann möglicherweise auch infolge erhöhter Schubspannungen, z.B. bei Hochwasser, resuspendiert und im Wasser weiterverfrachtet werden. Außer Ende Oktober 1998 traten während der Simulationszeiträume jedoch keine signifikant erhöhten Abflüsse auf. Somit erscheint die durchgeführte modellgestützte Bilanzierung zumindest für die betrachteten Sommerzeiträume plausibel.

Generell ist die Denitrifikation am Gewässerbett der quantitativ wichtigste Verlustprozess für Stickstoff. Gemäß den Simulationsergebnissen werden während der 7 Sommermonate auf der Fließstrecke infolge der Denitrifikation 250 t bis 330 t Stickstoff aus dem System entfernt. Dies entspricht etwa 4 % bis 6,5 % der in das Modellgebiet eingetragenen Masse. Die Denitrifikationsverluste sind 1998 aufgrund der lange anhaltenden Niedrigwasserphase und der hieraus resultierenden hohen Aufenthaltszeiten besonders hoch.

Die Sedimentationsprozesse erlangen absolut wie relativ 1997 und insbesondere 1998 größere Bedeutung als 1996. Dies ist zum einen eine Folge der bei Niedrigwasser erhöhten Aufenthaltszeit. Zum anderen lagen 1997 und insbesondere 1998 über längere Zeiträume höhere Algenkonzentrationen vor, was die Sedimentationsverluste lebender und abgestorbener Biomasse erhöhte.

Die Ammoniumfreisetzung aus dem Sediment, die vor allem eine Funktion der Aufenthaltszeit und der Wassertemperatur ist, kann die Stickstoffverluste nur zum kleineren Teil kompensieren. Folglich ist während der Sommermonate in jedem Fall von einem Nettorückhalt von Stickstoff auszugehen. In Bezug auf die Einträge in die Modellstrecke liegt die Gesamtretention zwischen 6 % und 11 %. Im Vergleich hierzu gelangen Borhardt und Geffers (1999) für den gesamten Neckar im Jahr 1995 zu einer Stickstoffretention von ca. 17 %. Berücksichtigt man, dass im vorliegenden Fall nur ein sehr kleiner Abschnitt aus dem gesamten Gewässernetz des Neckareinzugsgebiets betrachtet wird und die Einträge aus den Flüssen bereits einer Retention unterlagen, so wird deutlich, dass der Stickstoffrückhalt im staugeregelten Bereich des Neckars offenkundig von enormer Bedeutung für die Stickstoffretention ist. Inwiefern dies auch auf die Wintermonate zutrifft, kann nur geklärt werden, indem ein Modell verwendet wird das die erosive Freisetzung mit berücksichtigt.

Phosphor: Bezüglich der Phosphorretention auf der Modellstrecke wurden die bereits beim Stickstoff genannten Sedimentationsprozesse sowie die Adsorption von gelöstem Phosphor am Gewässerbett berücksichtigt. Interne Phosphorquellen auf der Fließstrecke werden ausgeschlossen. Die Simulationsergebnisse zum Phosphorrückhalt sind in Tabelle 9.4 zusammengefasst.

Alle drei aufgeführten Verlustprozesse führen lediglich zu einer (Zwischen-) Speicherung von Phosphor am Gewässerbett. Ein echter Entzug aus dem System, wie dies im Falle von Stickstoff durch die Denitrifikation möglich ist, ist bei Phosphor nicht gegeben. Inwieweit das sedimentierte Phosphor langfristig zurückgehalten wird, hängt maßgeblich davon ab, wie stark die Sedimentation gegenüber der Erosion überwiegt, es langfristig also zu einer anhaltenden Verlandung der Stauhaltungen kommt (vgl. Kern 1997). Im Zusammenhang mit der Adsorption am Gewässerbett muss darauf verwiesen werden, dass diese aufgrund von Feldmessungen postuliert und im BWQM implementiert wurde (vgl. Kapitel 7). Im Gegensatz hierzu wird bei den meisten Gewässergütesimulationsmodellen von einer Phosphorfreisetzung infolge der Mineralisierung organischer Substanz ausgegangen. Auch im Falle des nahe der Sedimentoberfläche adsorbierten Phosphors führen Erosionsereignisse zu einer Remobilisierung und Weiterverfrachtung.

Tab. 9.4: Mit dem BWQM erzielte Simulationsergebnisse hinsichtlich der Beiträge von Verlustprozessen zum Phosphortransport im Modellgebiet.

Prozesse	Apr. bis Okt. 1996		Apr. bis Okt. 1997		Apr. bis Okt. 1998	
	Tonnen	% Einträge	Tonnen	% Einträge	Tonnen	% Einträge
Sedimentation von Algenbiomasse	-5,2	-2,2	-6,4	-3,3	-11,2	-5,0
Sedimentation toter organischer Substanz	-6,9	-2,9	-6,8	-3,4	-9,5	-4,3
Adsorption am Gewässerbett	-7,7	-3,3	-8,4	-4,3	-8,8	-3,9
Gesamtretention	-19,9	-8,4	-21,6	-11,0	-29,4	-13,2

Während der betrachteten Sommermonate – in denen davon auszugehen ist, dass die Erosion von untergeordneter Bedeutung war – trugen alle drei Verlustprozesse durchschnittlich in etwa gleich stark zum Phosphorrückhalt bei. Die Sedimentation von Algenbiomasse und toter organischer Substanz war absolut wie relativ 1998 besonders wichtig, was auf die durchschnittlich höheren Aufenthaltszeiten und Algenkonzentrationen zurückgeführt werden kann.

Insgesamt wurden während der betrachteten Sommermonate etwa 8 % bis maximal 13 % der eingetragenen Phosphormasse in der Modellstrecke zurückgehalten. Gemäß Borchardt und Geffers (1999) betrug der Phosphorrückhalt im gesamten Neckareinzugsgebiet 1995 ca. 29 % der Gesamtemissionen. Offenbar ist also die Retention im staugeregelten Neckar relativ zum Gesamtrückhalt für Phosphor weniger wichtig als für Stickstoff. Dies gilt umso mehr, als davon auszugehen ist, dass ein Großteil des im Sediment gespeicherten Phosphors während Hochwasserereignissen kurzfristig remobilisiert und aus dem Gebiet ausgetragen wird.

10 MODELLGESTÜTZTE PROGNOSEN ZUR VERBESSERUNG DES SAUERSTOFFHAUSHALTS

10.1 Einzuhaltende Sauerstoffkriterien

Bevor die Auswirkungen möglicher Gewässerschutzmaßnahmen mit Hilfe von Szenarienrechnungen untersucht werden, müssen zunächst die zugrunde liegenden Gütekriterien klar definiert werden. Primäres Kriterium ist hierbei die einzuhaltende Mindestkonzentration für Sauerstoff. Daher wird hier zunächst dieses Sauerstoffkriterium sowohl fachlich als auch vor dem Hintergrund der vorliegenden Regularien definiert. Da alle bislang vorgestellten Ergebnisse die Bedeutung des Algenwachstums und der daraus resultierenden Sekundärbelastung verdeutlichen, wird auch ein zulässiger Maximalgehalt für Algen bzw. Chlorophyll-a abgeschätzt. Diese Abschätzung erfolgt jedoch erst im Zuge der Szenarienrechnungen für mögliche Nährstofflimitierungen in Kapitel 10.3.

Das Hauptaugenmerk hinsichtlich der für Sauerstoff einzuhaltenden Kriterien liegt auf dem Schutzgut der aquatischen Lebensgemeinschaft. Da die Fische ein integraler und wichtiger Bestandteil der Biozönose sind, werden hiermit implizit auch die Belange der Fischerei berücksichtigt. Prinzipiell können sowohl deutliche Sauerstoffuntersättigungen als auch extreme Übersättigungen zur Schädigung der Lebensgemeinschaft führen (siehe Kapitel 5.2). In Zeiten mit extremer Übersättigung, die von der Produktion der Planktonalgen herrührt, treten im Neckar und anderen staugeregelten Flüssen ausgeprägte vertikale Sauerstoffkonzentrationsgradienten auf (vgl. Löhr 1984). Dies konnte durch eigene Messungen bestätigt werden. Folglich können sich die im Freiwasser lebenden Organismen in sauerstoffärmere, tiefere Bereiche zurückziehen, was vermutlich die Ursache dafür ist, dass im Neckar bislang keine Fischsterben in Verbindung mit extremen Übersättigungen auftraten. Die angesprochenen Vertikalgradienten können mit den hier verwendeten eindimensionalen Simulationsmodellen nicht aufgelöst werden. Vor diesem Hintergrund beschränkt sich die Kriteriendefinition und die nachfolgende Analyse auf Mindestanforderungen hinsichtlich minimaler Sauerstoffgehalte. Wenngleich das in Verbindung mit der Eutrophierung zu sehende Problem der Übersättigung zukünftig nicht vernachlässigt werden sollte.

Für den Schutz der aquatischen Biozönose sollte zweckmäßiger Weise zwischen allgemeinen, im Mittel einzuhaltenden Kriterien und den Mindestanforderungen bei kurzfristigen extremen Situationen unterschieden werden (Frimmel und Gordalla 1996). Der allgemeine Zielwert für Sauerstoff sollte dabei zumindest während des überwiegenden Anteils der Zeit (z.B. 95%) eingehalten und allenfalls kurzzeitig unterschritten werden (Klee 1990). Durch die Einhaltung dieses Kriteriums soll gewährleistet werden, dass sich eine standortgerechte, selbst regulierende und reproduzierende Lebensgemeinschaft im Gewässer entwickeln bzw. erhalten kann. Wird die allgemeine Zielvorgabe kurzzeitig unterschritten, so muss eine Mindestanforderung eingehalten werden, die gewährleistet, dass die Biozönose durch den akuten Sauerstoffmangel nicht nachhaltig geschädigt wird.

Für die überwiegend cyprinide Fischpopulation im staugeregelten Neckar liegt die für die Reproduktion und den Erhalt der Arten optimale Sauerstoffkonzentration etwa zwischen 6 mg/L und 8 mg/L. Für die meisten im Neckar anzutreffenden Fischarten sind Sauerstoffkonzentrationen kleiner 3,5 bis 4 mg/L auch kurzfristig als kritisch einzuschätzen (Pinter 2000; Ulrich 1991). Diese geringen Konzentrationen führen z.B. dazu, dass die Nahrungsaufnahme eingestellt wird und die Fische soweit möglich in sauerstoffreichere Bereiche abwandern. Für Salmoniden, wie die im Neckar vereinzelt anzutreffenden Bach- und Regenbogenforellen (Ministerium für Ländlichen Raum 1989; Wnuck 2000), wirken Sauerstoffgehalte kleiner 3 mg/L bereits akut toxisch (Hütter 1990). Als Zielwert, der auch kurzfristig möglichst im gesamten Flusslauf keinesfalls unterschritten werden darf, sind damit mindestens 3 mg/L Sauerstoff zu fordern.

Im Einklang mit diesen fachlichen Vorgaben fordert die Länderarbeitsgemeinschaft Wasser (LAWA) für die Gewässergüteklasse 2, dass der Sauerstoffgehalt 6 mg/L an 95 % der Messtermine nicht unterschritten wird. Der in der EU-Fischgewässerrichtlinie für Cypriniden-Gewässer angegebene Leitwert liegt bei 5 mg/L. Im Vergleich mit den Befunden aus Kapitel 5.2 wird deutlich, dass die hauptsächliche Problematik hinsichtlich der Sauerstoffgehalte im Neckar nicht in der Einhaltung dieser allgemeinen Kriterien liegt. Vielmehr erscheinen die im Neckar episodisch auftretenden, kurzfristigen extremen Sauerstoffdepressionen von vordringlichem Interesse.

Für diese kurzzeitig auftretenden Sauerstoffminima wird derzeit ein neues „Sauerstoffreglement für den Neckar“ erarbeitet, das den oben ausgeführten ökologischen Erfordernissen Rechnung trägt (Pinter 2000). Die wichtigsten Eckpfeiler dieses Reglements sind: (1) Eine intensivierete Überwachung des Sauerstoffgehalts bei Unterschreiten des „Warnwertes“ von 4,5 mg/L, (2) vorbeugende Belüftungsmaßnahmen an den Flusskraftwerken Hofen und Poppenweiler bei Konzentrationen kleiner 4 mg/L und (3) die generelle Einleitung von Belüftungsmaßnahmen bei Unterschreiten des „Auslösewertes“ von 3,5 mg/L. Damit soll sichergestellt werden, dass es auch infolge extremer Sauerstoffdepressionen nicht zur nachhaltigen Schädigung der Biozönose kommt.

10.2 Grundlegende Szenarien

Primäres Ziel der Prognoserechnungen ist es, die Potenziale für eine weitere Verbesserung des Sauerstoffhaushalts aufzuzeigen. Auf Grundlage der bislang vorgestellten Ergebnisse, müssen hierbei die kurzzeitigen Sauerstoffdepressionen im Mittelpunkt stehen, die bei sommerlichem Niedrigwasser auftreten können. Wie die empirischen und modellgestützten Analysen verdeutlichen, treten diese Sauerstoffdepressionen in erster Linie beim Zusammenbruch von Algenblüten auf. Daher wurden die Szenarien so gewählt, dass sie den Zusammenbruch von Algenblüten bei sommerlichen Niedrigwasserverhältnissen repräsentieren. Hierzu wurden zwei grundlegende Szenarien formuliert, deren Rahmenbedingungen in Tabelle 10.1 zusammengestellt sind. Hieraus wird deutlich, dass sich die beiden Szenarien lediglich in den Abflüssen, den Chl-a Konzentrationen an den Rändern und im zeitlichen Verlauf sowie in den Beträgen der Wassertemperatur unterscheiden.

Hervorzuheben ist zudem, dass die konstante Beschickung mit Algen bzw. Chl-a eine unrealistische Vereinfachung darstellt, die allerdings in Kauf genommen wurde, um die Szenarien möglichst einfach und durchschaubar zu halten. In der Realität, ist mit einer Verringerung der zuströmenden Konzentration im Zuge der sich verschlechternden Wachstumsbedingungen zu rechnen. Dies muss bei der Interpretation der Ergebnisse insbesondere für die im oberen Bereich der Modellstrecke gelegenen Stauhaltungen berücksichtigt werden.

Die beiden Grundszenarien dienen zur modellgestützten Quantifizierung der Auswirkungen von gewässergütewirtschaftlichen Maßnahmen. Die prognostischen Simulationen wurden mit dem BWQM und soweit möglich mit dem ATV-FGSM durchgeführt. Zum jetzigen Zeitpunkt arbeiten die Module Wehr- und Turbinenbelüftung im ATV-FGSM leider noch nicht fehlerfrei, weshalb dieses Modell nicht zur Simulation von Belüftungsvarianten verwendet werden konnte. Bei der Präsentation der Ergebnisse für alle Szenarienrechnungen liegt daher der Schwerpunkt auf dem BWQM. Diese Ergebnisse decken sich zumindest weitgehend mit denen des ATV-FGSM, weshalb diese nicht zusätzlich aufgeführt werden.

Um die Rahmenbedingungen und deren grundsätzliche Wirkungen in den Szenarien zu veranschaulichen, werden in Abbildung 1.1 die zeitlichen Verläufe von Strahlung, Wassertemperatur, Chl-a und Sauerstoff an der Station Poppenweiler gegenübergestellt. Hieraus wird deutlich, dass beide Szenarien im Grundsatz die selben Konzentrationsverläufe zeigen: Zunächst kommt es zu einem Anstieg der Chl-a und Sauerstoffkonzentrationen, solange die Algenkonzentration ausgehend von der Anfangsbedingung auf den jeweiligen Gleichgewichtswert ansteigt. Kurz vor Erreichen der Gleichgewichtskonzentration für Chl-a liegen bei hohen Primärproduktionsraten und gleichzeitig hohen Algenkonzentrationen die maximalen Sauerstoffgehalte vor. Nach Erreichen des Plateauwertes von Chl-a sinken die Sauerstoffgehalte wieder etwas ab, da sich Photosynthese und Respiration nun die Waage halten. Mit dem Temperaturanstieg und dem nachfolgenden Lichteinbruch kommt es zum Abfall der Chl-a und Sauerstoffgehalte. Nachdem die Temperatur- und Lichtverhältnisse wieder auf ihre Ausgangswerte zurückgehen, erholen sich auch die Chl-a und Sauerstoffgehalte rasch.

Tab. 10.1: Rahmenbedingungen für die beiden untersuchten Szenarien.

<i>Gemeinsame Bedingungen beider Szenarien:</i>	
Simulationszeitraum	1.Mai – 30.Juni, 1464 Stunden
Abflussverhältnisse	stationär, szenarienspezifisch
Sauerstoffkonzentrationen der Zuflüsse Neckar, Rems und Murr	Temperaturabhängig, 80 % Sättigung
Nähr- und Zehrstoffkonzentrationen der Zuflüsse Neckar, Rems und Murr	Konstant, bei mittleren sommerlichen Werten (aus Messdaten abgeleitet)
Chl-a Konzentrationen der Zuflüsse Neckar, Rems und Murr	Konstant, szenarienspezifisch
Abflüsse, Nähr- und Zehrstoffkonzentrationen der Kläranlagenabläufe	Konstant, bei mittleren Werten gemäß ATV-Landesgruppe Baden-Württemberg (1996)
Sauerstoffkonzentrationen der Kläranlagenabläufe	Konstant, bei 5 mg/L
Bewölkungsgrad	
0 – 600 Stunden, 1.5. – 25.5.	Konstant, bei 0/8
600 – 700 Stunden, 25.5. – 29.5.	Linearer Anstieg von 0/8 auf 8/8
700 – 800 Stunden, 29.5. – 2.6.	Konstant, bei 8/8
800 – 900 Stunden, 2.6. – 6.6.	Lineare Abnahme von 8/8 auf 0/8
900 – 1464 Stunden, 6.6 – 30.6.	Konstant bei 0/8
Wassertemperatur	Variabel, szenarienspezifisch
<i>Szenario 1 (realitätsnah):</i>	
Zuflüsse	aus
Neckar	Konstant, bei 15 m ³ /s
Rems	Konstant, bei 3 m ³ /s
Murr	Konstant, bei 3 m ³ /s
Chl-a Konzentration in den Zuflüssen Neckar, Rems und Murr	Konstant, bei 20 µg/L
Wassertemperatur	
0 – 400 Stunden, 1.5. – 17.5.	Konstant, bei 19°C
400 – 600 Stunden, 17.5. – 25.5.	Linearer Anstieg von 19°C auf 22°C
600 – 800 Stunden, 25.5. – 2.6.	Konstant, bei 22°C
800 – 900 Stunden, 2.6. – 6.6.	Linearer Abfall von 22°C auf 19°C
900 – 1464 Stunden, 6.6. – 30.6.	Konstant, bei 19°C
<i>Szenario 2 (Extremszenario):</i>	
Zuflüsse	aus
Neckar	Konstant, bei MNQ = 10,6 m ³ /s
Rems	Konstant, bei MNQ = 2,1 m ³ /s
Murr	Konstant, bei MNQ = 2,2 m ³ /s
Chl-a Konzentration in den Zuflüssen Neckar, Rems und Murr	Konstant, bei 30 µg/L
Wassertemperatur	
0 – 500 Stunden, 1.5. – 21.5.	Konstant, bei 18°C
500 – 600 Stunden, 21.5. – 25.5.	Linearer Anstieg von 18°C auf 23°C
600 – 700 Stunden, 25.5. – 29.5.	Konstant, bei 23°C
700 – 800 Stunden, 29.5. – 2.6.	Linearer Abfall von 23°C auf 18°C
800 – 1464 Stunden, 2.6. – 30.6.	Konstant, bei 18°C

Die alleine aus den unterschiedlichen Temperaturen, Chl-a Randbedingungen und Abflüssen resultierenden Hauptunterschiede zwischen den beiden Szenarien liegen in der Gleichgewichtskonzentration für Chl-a und im Ausmaß der Sauerstoffdepression. In Ergänzung zu den bislang dargestellten Ergebnissen unterstreicht dies nochmals die Bedeutung dieser drei Einflussfaktoren für mögliche sommerliche Sauerstoffdepressionen.

In den nachfolgenden Kapiteln wird auf diese beiden Grundszenerien in Verbindung mit unterschiedlichen Varianten weiter eingegangen.

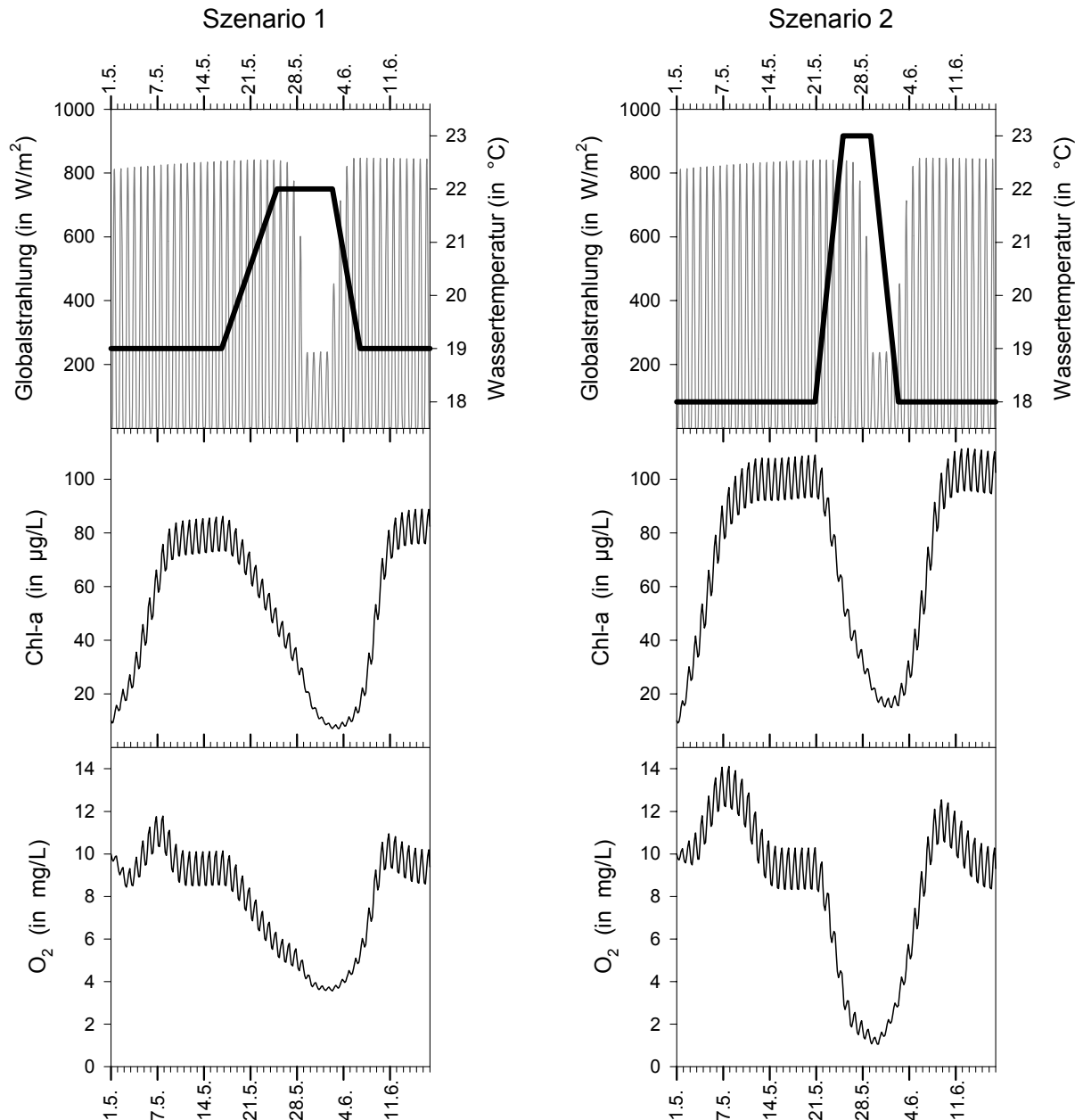


Abb. 10.1: Zeitliche Verläufe der Globalstrahlung und Wassertemperatur sowie die daraus resultierenden Chl-a und Sauerstoffkonzentrationen im Neckar bei Poppenweiler für die beiden zugrunde gelegten Szenarien.

10.3 Nährstofflimitierung

Sowohl die empirische als auch die modellgestützte Systemanalyse stellte die herausragende Rolle des Algenwachstums und der Sekundärbelastung für den Sauerstoffhaushalt und Sauerstoffdepressionen heraus. Diese wichtige Rolle spiegelt sich auch in den Konfigurationen der beiden Grundscenarien wider. Um das übermäßige Algenwachstum und die negativen Folgen zu reduzieren, bietet sich eine „bottom up“ Kontrolle über die Nährstoffe an.

Eine solche Nährstoffkontrolle kann prinzipiell über die Reduktion anthropogener Stickstoff- und/oder Phosphoremissionen erfolgen. Die bisherigen Analysen haben gezeigt, dass Stickstoff offenkundig sehr weit davon entfernt ist das Algenwachstum zu limitieren. Die im Neckarwasser vorgefundenen Konzentrationen an anorganischem Stickstoff liegen so hoch, dass selbst bei der Annahme sehr großer Halbsättigungskonstanten mit einer Stickstofflimitierung bestenfalls bei einer Reduktion der Stickstoffkonzentration auf 20% des aktuellen Wertes zu rechnen wäre (vgl. Tab. 2.3 und Abb. 5.3). Die Phosphorkonzentrationen kommen einer möglichen Limitierung des Algenwachstums wesentlich näher. Deshalb liegt der Schwerpunkt dieses Kapitels auf einer möglichen Kontrolle der Sekundärbelastung über die Reduktion der Phosphatkonzentration im Neckar.

Aus Tabelle 2.3 wird allerdings deutlich, dass die Angaben zu Halbsättigungskonstanten selbst für die selbe Algenart zum Teil stark variieren. Darüber hinaus sind einige Algenarten zur Phosphorvorratshaltung befähigt (siehe Kapitel 2.4.3). Bei einer merklichen Nährstofflimitierung wird der Nährstoffmangel zudem zum maßgeblichen Konkurrenzfaktor zwischen verschiedenen Algenarten, wodurch es zu einer Veränderung der Algengesellschaft hin zu Arten mit geringerem Phosphorbedarf kommen kann. Solche Konkurrenzeffekte sind weder mit den selbst entwickelten Modellen noch mit dem ATV-FGSM zu simulieren. Diese Ausführungen verdeutlichen, dass selbst bei exakter Kenntnis der Algengesellschaft die Auswirkungen einer möglichen Phosphorlimitierung nur schwer vorherzusagen sind. Daher ist auch mit Simulationsmodellen nur eine Abschätzung der Effekte verminderter Nährstoffkonzentrationen möglich.

Nachfolgend wird eine solche Abschätzung anhand des Verhältnisses zwischen einer vorgegebenen Halbsättigungskonstante und den PO_4 -Konzentrationen an den Modellrändern vorgenommen. Die anhand des Verhältnis getroffenen Aussagen lassen sich auf andere Halbsättigungskonstanten übertragen.

10.3.1 Simulationsergebnisse

Simulationsvarianten

Zu beiden grundlegenden Szenarien wurden Simulationsläufe zur Phosphorlimitierung in je 4 Varianten durchgeführt. In allen vier Varianten wurde die Halbsättigungskonstante für $\text{PO}_4\text{-P}$ (K_{PO_4}) in Abweichung vom ursprünglichen BWQM auf 0,02 mg/L gesetzt:

- P-Limit 1a: Die Anfangsbedingung für $\text{PO}_4\text{-P}$ sowie die Konzentrationen der randlichen Zuflüsse Neckar, KLA Stuttgart-Mühlhausen, Rems und Murr wurden auf 0,1 mg/L (entspricht $5 \cdot K_{\text{PO}_4}$) festgelegt.
- P-Limit 1b: Wie P-Limit 1a. Zusätzlich wurden die Folgen einer Nährstofflimitierung in den oberstromigen Bereichen des Neckars, der Rems und der Murr berücksichtigt. Auf Grundlage des Chl-a Verhältnisses zwischen Nullvariante und P-Limit 1a im Neckar bei Besigheim, wurde die Chl-a Konzentration an den Flusszuflüssen auf 69% der Nullvariante reduziert.
- P-Limit 2a: Die Anfangsbedingung für $\text{PO}_4\text{-P}$ sowie die Konzentrationen der randlichen Zuflüsse Neckar, KLA Stuttgart-Mühlhausen, Rems und Murr wurden auf 0,06 mg/L (entspricht $3 \cdot K_{\text{PO}_4}$) festgelegt.
- P-Limit 2b: Wie P-Limit 1a. Zusätzlich wurden die Folgen einer Nährstofflimitierung in den oberstromigen Bereichen des Neckars, der Rems und der Murr berücksichtigt. Auf Grundlage des Chl-a Verhältnisses zwischen Nullvariante und P-Limit 2a im Neckar bei Besigheim, wurde die Chl-a Konzentration an den Flusszuflüssen auf 58% der Nullvariante reduziert.

Szenario 1

Chlorophyll und Phosphor: Die Abbildungen 10.2 und 10.3 geben die Längsprofile von Chl-a und Orthophosphat zu Zeiten maximaler Algengehalte vor der Sauerstoffdepression bzw. Zeiten minimaler Algengehalte während der Sauerstoffdepression für unterschiedliche Varianten des Szenarios 1 wieder.

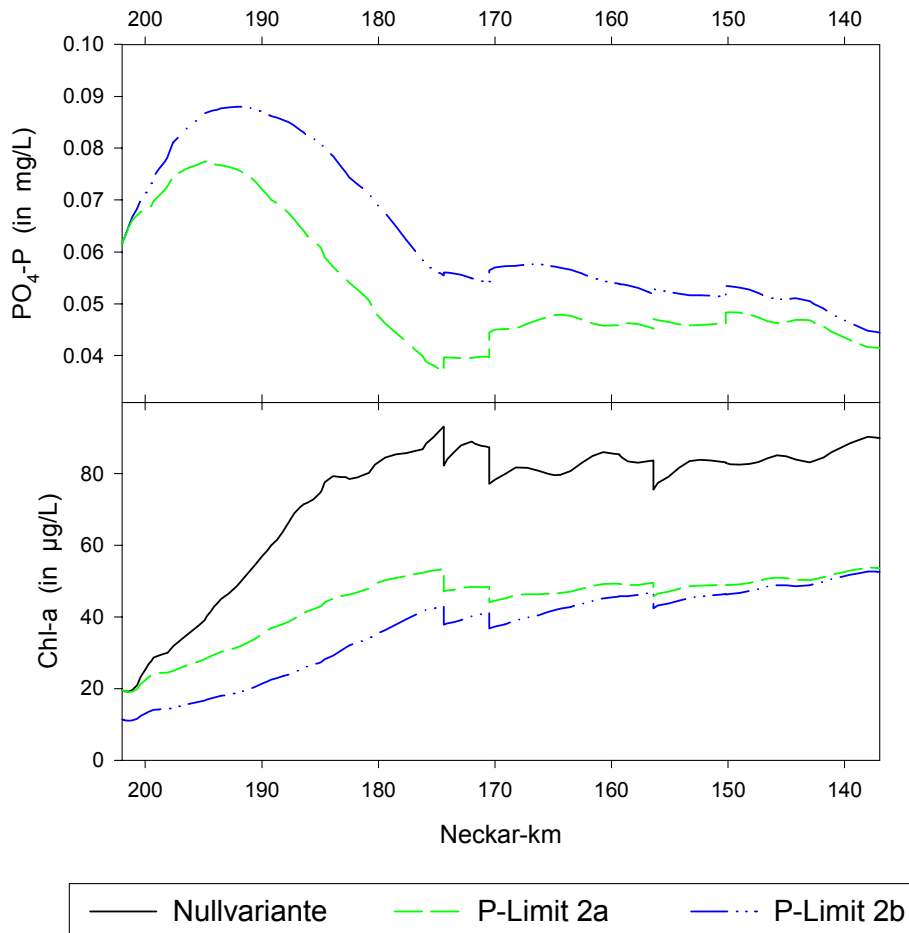


Abb. 10.2: Längsverlauf der PO₄-P und Chl-a Gehalte für verschiedene Varianten des Szenarios 1 während der Zeit maximaler Algengehalte vor der Sauerstoffdepression.

Abbildung 10.2 verdeutlicht, dass die Nährstofflimitierung in den Varianten P-Limit 2a und 2b deutlich zur Reduktion des Algenwachstums auf der Modellstrecke beiträgt. In allen Varianten scheint ungefähr in der Mitte der Modellstrecke bei km 170 ein Gleichgewicht zwischen Aufbauenden und Abbauenden Prozessen erreicht zu sein, dessen Niveau vom Grad der P-Limitierung abhängt. Die durch die Chl-a Randbedingungen erzeugten Unterschiede zwischen den beiden Phosphorlimitierungsvarianten gleichen sich auf der Fließstrecke nahezu aus. Am unteren Rand bei Besigheim beträgt für beide Varianten die Chl-a Konzentration knapp 60% der Chl-a Konzentration in der Nullvariante, bei der Phosphorlimitierung keine Rolle spielt.

Die Phosphatgehalte steigen zunächst entlang der Fließstrecke an, was auf die Mineralisierung organisch gebundenen Phosphors zurückzuführen ist, dessen Konzentration an den Rändern 0,05 mg/L beträgt. Diese Freisetzung wird jedoch bald vom Phosphorverbrauch infolge des Algenwachstums übertroffen, was zur Abnahme der PO₄-P Konzentration in Fließrichtung führt. Zum unteren Modellrand hin pendelt sich die PO₄-P Konzentration bei etwa 0,05 mg/L ein. Unter Berücksichtigung der Halbsättigungskonstante käme dies einem Hemmfaktor für Phosphormangel von etwa 0,7 gleich.

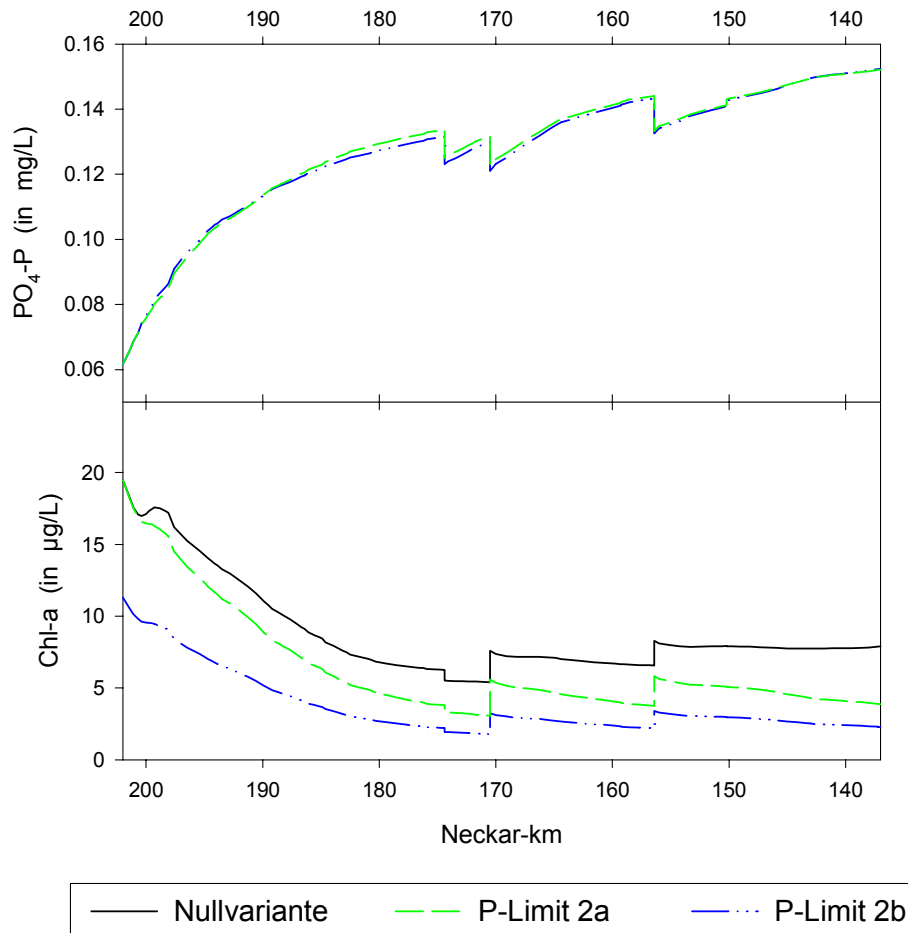


Abb. 10.3: Längsverlauf der $\text{PO}_4\text{-P}$ und Chl-a Gehalte für verschiedene Varianten des Szenarios 1 während der Zeit minimaler Algengehalte in der Sauerstoffdepression.

Während der Sauerstoffdepression drehen sich die Verhältnisse um. Infolge der pessimalen Algenwachstumsbedingungen sinkt die Chl-a Konzentration in allen drei Varianten auf der Fließstrecke ab. Das bedeutet, dass die an den Rändern vorgegebenen Algenkonzentrationen infolge der schlechten Wachstumsbedingungen auf der Fließstrecke nicht aufrechterhalten werden können.

Durch das Absterben der von Oberstrom eingetragenen Algen kommt es in jedem Fall zu einer Sauerstoffzehrung insbesondere auf den ersten 25 km der Modellstrecke. Dies unterstreicht die Bedeutung, die von oberstrom eingetragene Algen für den Sauerstoffhaushalt auf der Modellstrecke haben können (vgl. Abb. 9.12 und 9.13).

Das Absterben der Algen hat die Freisetzung von Phosphat zur Folge, so dass die $\text{PO}_4\text{-P}$ Konzentration auf der Modellstrecke in den beiden Phosphorlimitierungsvarianten auf Konzentrationen bis maximal ca. 0,15 mg/L ansteigen. Damit befinden sich die Konzentrationen in einem Bereich, in dem sie den Algenaufbau noch immer beeinflussen, der Hemmfaktor für Phosphorlimitierung beträgt bei 0,15 mg/L etwa 0,88. Die gegenüber der Nullvariante deutliche zusätzliche Hemmung des Algenwachstums kommt auch darin zum Ausdruck, dass die Chlorophyllkonzentration in der Variante P-Limit 2a tiefer absinkt als in der Nullvariante.

Sauerstoff: In der Abbildungen 10.4 werden Längsprofile des Sauerstoffgehalts unterschiedlicher Phosphorlimitierungsvarianten für den Zeitpunkt der Sauerstoffdepression miteinander verglichen. Tabelle 10.2 gibt die absoluten Minima der einzelnen Varianten für die Stauhaltungen innerhalb der Modellstrecke wieder.

Hieraus werden merkbare Unterschiede mit und ohne reduzierte Chlorophyllkonzentrationen an den randlichen Zuflüssen deutlich. Bei den Varianten, bei denen der Chl-a Zustrom gleich groß wie bei der Nullvariante ist (P-Limit 1a und 2a), treten im oberen Modellbereich sogar kleinere Sauerstoffminima als in der Nullvariante auf. Erst im unteren Bereich macht sich eine allerdings nicht sehr ausgeprägte Verbesserung bemerkbar. Trotz der in Abbildung 10.2 dargestellten Verringerung der maximalen Chl-a Konzentration auf der Fließstrecke, kann es also bei gleichen Chl-a Randbedingungen lokal sogar zur Verschärfung von Sauerstoffdepressionen kommen. Dies verdeutlicht in Verbindung mit Abbildung 10.3 nochmals eindrucksvoll die Bedeutung des Algeintrags in die Modellstrecke.

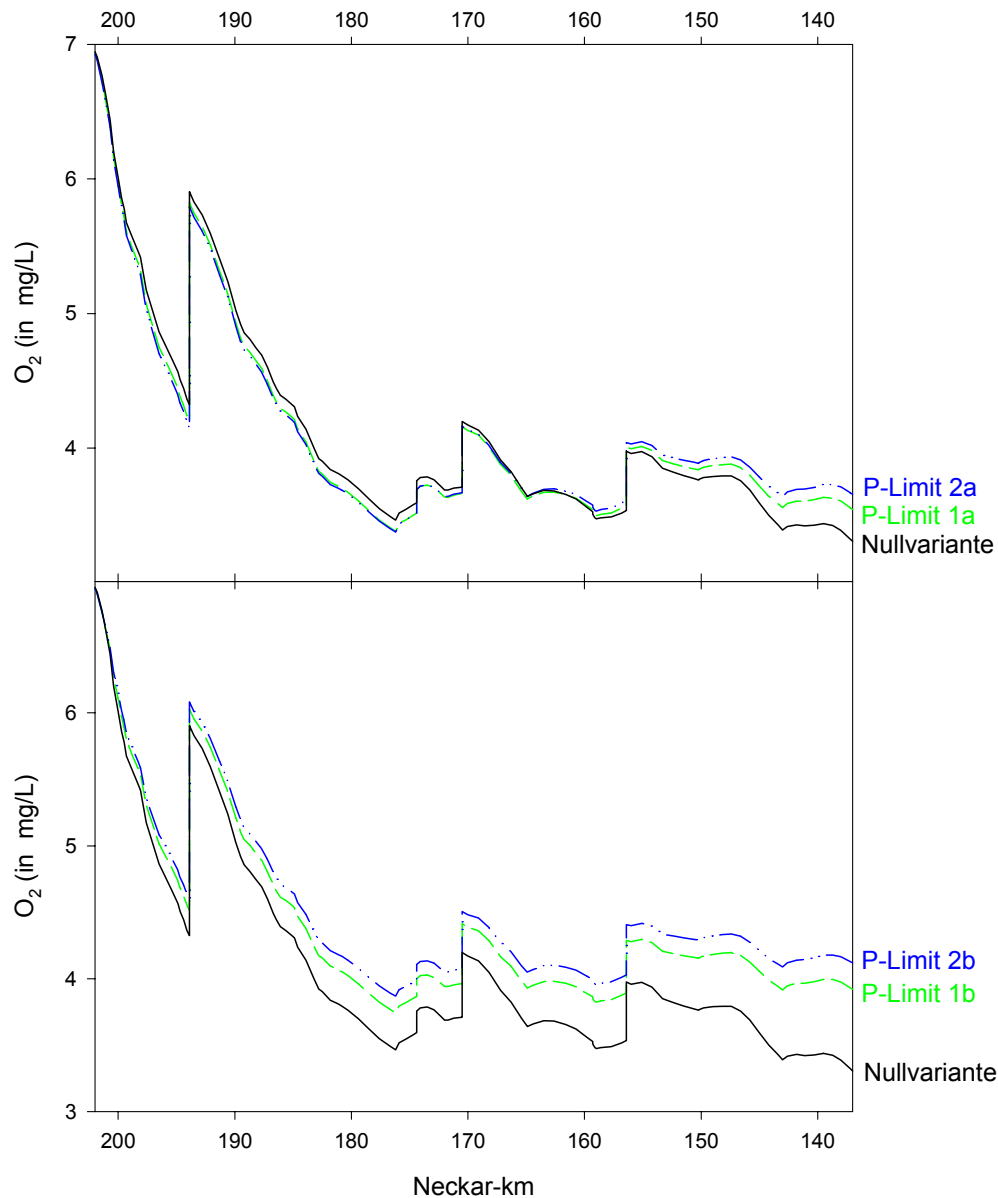


Abb. 10.4: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration zur Zeit der Sauerstoffdepression für verschiedene Phosphorlimitierungsvarianten von Szenario 1.

Tab. 10.2: Minimale Sauerstoffkonzentrationen in mg/L in den einzelnen Stauhaltungen bei unterschiedlichen Phosphorlimitierungsvarianten der beiden Szenarien.

Stauhaltung	Varianten	Szenario 1				Szenario 2					
		Nullvariante	P-Limit 1a	P-Limit 1b	P-Limit 2a	P-Limit 2b	Nullvariante	P-Limit 1a	P-Limit 1b	P-Limit 2a	P-Limit 2b
Deizisau		5,7	5,7	5,9	5,6	5,9	4,8	4,7	5,0	4,6	5,1
Oberesslingen		4,5	4,4	4,7	4,4	4,8	3,0	2,8	3,4	2,7	3,5
Esslingen		4,3	4,2	4,5	4,1	4,6	2,7	2,5	3,1	2,4	3,2
Obertürkheim		4,9	4,8	5,1	4,8	5,2	2,8	2,6	3,2	2,6	3,4
Untertürkheim		4,4	4,3	4,6	4,3	4,7	2,3	2,2	2,8	2,2	3,0
Cannstatt		3,8	3,8	4,1	3,8	4,3	1,8	1,8	2,4	1,8	2,7
Hofen		3,3	3,3	3,7	3,3	3,8	0,9	1,0	1,7	1,2	2,1
Aldingen		3,6	3,6	3,9	3,6	4,0	1,4	1,6	2,1	1,8	2,6
Poppenweiler		3,6	3,6	3,9	3,6	4,0	1,1	1,4	1,9	1,7	2,3
Marbach		3,4	3,5	3,8	3,5	3,9	0,8	1,3	1,7	1,6	2,1
Pleidelsheim		3,7	3,8	4,1	3,9	4,3	1,3	1,9	2,2	2,2	2,6
Hessigheim		3,3	3,5	3,9	3,6	4,1	0,8	1,5	1,9	1,9	2,3
Besigheim		3,2	3,5	3,9	3,6	4,1	0,8	1,6	1,9	2,0	2,4

Berücksichtigt man hingegen zusätzlich die Folgen der Nährstofflimitierung in den Flussbereichen oberhalb der Modellstrecke in Form reduzierter Chl-a Einträge (P-Limit 1b und 2b), so zeigen sich erwartungsgemäß auf der gesamten simulierten Strecke positive Auswirkungen hinsichtlich des Ausmaßes der Sauerstoffdepression. Diese werden zum unteren Rand des Modellbereichs hin größer. Beträgt die Konzentration des pflanzenverfügbaren Phosphors in den relevanten Einleitungen, wie in den vorliegenden Varianten, das 3- bzw. 5-fache der Halbsättigungskonzentration, ergeben sich bei Besigheim Sauerstoffminima, die etwa um 0,7 bzw. 0,9 mg/L über denen der Nullvariante liegen. Eine Reduktion des Phosphoreintrags auf das 3- bis 5-fache der Halbsättigungskonzentration würde bei entsprechend reduzierter Vorbelastung mit Algen folglich ausreichen, um die Sauerstoffgehalte in dem vorliegenden realitätsnahen Szenario weitgehend in einem Konzentrationsbereich zu halten, der für die aquatische Lebensgemeinschaft unkritisch ist.

Szenario 2

Bei dem extremen Szenario 2 ergeben sich grundsätzlich qualitativ die selben Ergebnisse wie bei Szenario 1. Wie Tabelle 10.2 und Abbildung 10.5 verdeutlichen, sind die positiven Effekte der Nährstofflimitierung beim Szenario 2 jedoch wesentlich ausgeprägter. Zudem setzt die Umkehr von negativen zu positiven Folgen im Falle der Varianten P-Limit 1a und 2a infolge der längeren Fließzeiten bereits weiter oberhalb im Modellbereich ein.

Geht man davon aus, dass der Algeneintrag infolge der oberstromigen Nährstofflimitierung reduziert ist, wird für dieses extreme Szenario eine Reduktion der Phosphatkonzentrationen der relevanten Zuflüsse

auf das 3-fache der Halbsättigungskonstante erforderlich, um die Sauerstoffgehalte durchgängig über 2 mg/L zu halten.

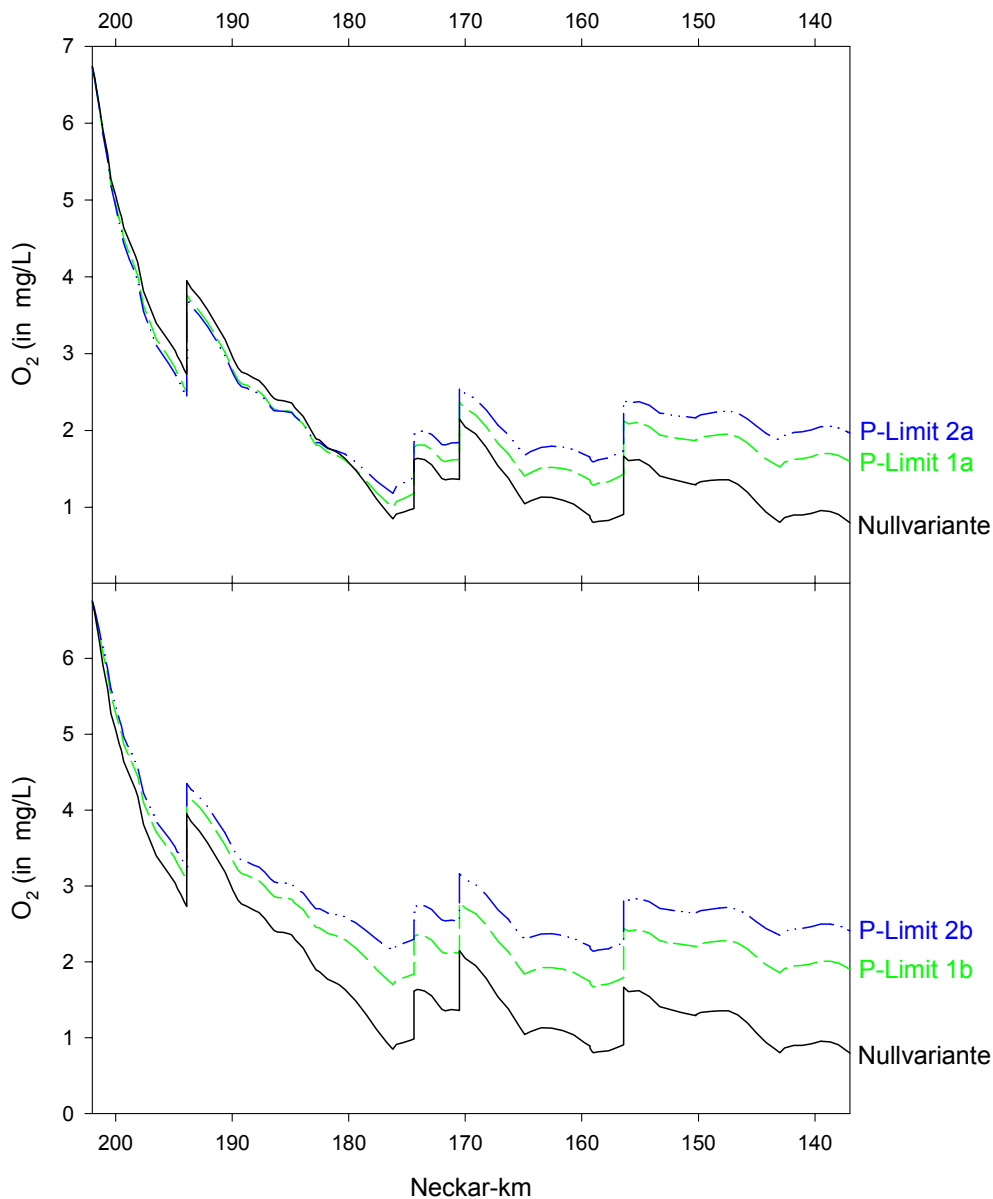


Abb. 10.5: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration zur Zeit der Sauerstoffdepression für verschiedene Phosphorlimitierungsvarianten von Szenario 2.

10.3.2 Diskussion

Bei den vorliegenden Phosphorlimitierungsvarianten wurde von einer Halbsättigungskonstante von 0,02 mg/L ausgegangen, was als optimistische Schätzung angesehen werden kann (vgl. Tab. 2.3). Die Phosphorkonzentrationen aller relevanten Zuflüsse wurden auf das 3- bzw. 5-fache dieses Wertes gesetzt. Zusätzlich muss der organisch gebundene Phosphor berücksichtigt werden, dessen Konzentration in den Flüssen auf 0,05 mg/L und bei der KLA Stuttgart-Mühlhausen auf 0,1 mg/L belassen wurde.

Mit den vorgegebenen Konstellationen ist eine deutliche Reduktion der maximalen Chlorophyllkonzentrationen zu erreichen. Aus der Zusammenschau der Abbildungen 10.2 und 10.4 wird deutlich, dass bei

den gegebenen Randbedingungen ab Chl-a Gehalten von ca. 50 µg/L unter realistischen Bedingungen beim Zusammenbruch von Algenpopulationen O₂ Depressionen unter 4 mg/L kaum mehr möglich erscheinen. Verallgemeinert man diesen Befund, so lässt sich hieraus eine maximal zulässige Chl-a Konzentration von ca. 50 µg/L ableiten, was einer Algenbiomasse von etwa 5 mg/L entspricht. Übersteigen die Algengehalte diesen Wert, ist beim Zusammentreffen ungünstiger Bedingungen das Absinken des Sauerstoffgehalts in fischkritische Bereiche möglich.

Die Szenarienrechnungen verdeutlichen zudem die Bedeutung des Algenzustroms von den Modellrändern. Hierbei ist allerdings darauf zu verweisen, dass ein zeitlich konstanter Algenzuström, wie er in den Szenarien vorgegeben ist, eine extrem pessimale Randbedingung darstellt. In der Natur wird bei verschlechterten Wachstumsbedingungen auch die Algenkonzentration im Zuström abnehmen. Dennoch wird aus den Szenarien ersichtlich, dass eine Nährstofflimitierung nur dann durchgreifend positive Auswirkungen hat, wenn sie über den gesamten Flusslauf oder besser das gesamte Flussnetz wirkt.

Wie die Simulationen zeigen, kann eine Nährstofflimitierung in den vorgegebenen Verhältnissen zwischen Nährstoffeintrag und Halbsättigungskonstante zu einer nachhaltigen Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts beitragen. Welcher anzustrebende Zielwert für pflanzenverfügbares Phosphor (oder Stickstoff) sich hieraus ergibt, hängt jedoch von der angesetzten Halbsättigungskonstante ab. Die simulierten Varianten stellen hierbei sicherlich den günstigsten Fall dar: Mit einer Halbsättigungskonstanten von 0,02 mg/L, ist mit deutlich positiven Auswirkungen auf den Sauerstoffhaushalt zu rechnen, wenn die Phosphatkonzentrationen während „Algenblüten“ auf Werte von 0,05 bis 0,08 mg/L absinken (vgl. Abb. 10.2 und 10.4). Geht man hingegen von einer extrem niedrigen Halbsättigungskonstanten aus (vgl. Tab. 2.3), so müssen die Phosphatgehalte um eine Größenordnung tiefer liegen, um merklich positive Effekte zu erzielen.

Aufgrund der in Kapitel 2.4.3 geschilderten Komplikationen hinsichtlich der Definition einer korrekten Halbsättigungskonstante, ist eine exakte Prognose ab welcher Phosphorkonzentration mit einer merklichen Wachstumslimitierung zu rechnen ist, derzeit nicht möglich. In der Natur liegt die tatsächliche Reaktion aber vermutlich zwischen den oben ausgeführten Extremen. Erste merkliche Effekte können vermutlich bei Gesamtposphatkonzentrationen von etwa 0,05 mg/L erwartet werden. Diese werden aber wahrscheinlich nicht so ausgeprägt sein, wie dies die Simulationen zeigen. Vielmehr ist anzunehmen, dass ein Teil der positiven Effekte dadurch kompensiert wird, dass sich die Algengesellschaft infolge des Phosphormangels verändert.

Wenngleich die Erfolgsaussichten einer weiteren Reduktion der Nährstoffemissionen mit Blick auf die Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts im Neckar nicht exakt quantifiziert werden können, erscheint die weitere Verminderung der Phosphor- und Stickstoffemissionen in Hinblick auf die Eutrophierung von Küstengewässern in jedem Fall wünschenswert.

10.4 Zehrstoffemissionen auf der Modellstrecke

In Kapitel 4 konnte gezeigt werden, dass die bislang erreichte weitgehende Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts vor allem der Reduktion von Zehrstoffemissionen zu verdanken ist. Ein Großteil dieser Reduktion geht auf die mit 1,2 Millionen Einwohnergleichwerten größte Kläranlage am Neckar, das bei km 174,4 in der Modellstrecke gelegene Hauptklärwerk Stuttgart-Mühlhausen zurück. Damit wird die herausragende Bedeutung der auf der Modellstrecke selbst getätigten Emissionen für die gesamten Abwasserleitungen deutlich.

Hauptziel des nachfolgenden Abschnitts ist es daher, abzuschätzen ob durch eine weitere Reduktion der Zehrstoffemissionen auf der Fließstrecke weitere nachhaltige Verbesserungen bei extremen Sauerstoffdepressionen zu erwarten sind. Darüber hinaus soll aufgezeigt werden, welchen Einfluss schlechtere Reinigungsleistungen auf solche Extremsituationen hätten. Aufgrund seines hohen Abflusses von ca. 2 m³/s ist das Hauptklärwerk Stuttgart-Mühlhausen hierbei von wesentlich größerer Bedeutung als die acht weiteren Kläranlagen im Modellbereich.

Simulationsvarianten

Beide Grundscenarien wurden mit je zwei Emissionsvarianten simuliert:

0-Emission: Dieser Variante liegt die hypothetische Annahme zugrunde, dass alle Kläranlagen auf der Modellstrecke kein Ammonium und keinen BSB emittieren.

Max-Emission: Dieser Variante liegt die Annahme zugrunde, dass die Ammonium und BSB Konzentrationen im Ablauf des Klärwerks Stuttgart-Mühlhausen dem 95-Perzentil aller Messungen aus den Jahren 1997 bis 1999 entsprechen. Für die acht anderen Kläranlagen wurden die Konzentrationen der beiden Zehrstoffe um den Faktor 2 gegenüber den mittleren Werten der Nullvariante erhöht.

Ergebnisse und Diskussion

In Tabelle 10.3 werden die in den einzelnen Stauhaltungen ermittelten minimalen Sauerstoffkonzentrationen der Varianten verglichen. In den Abbildungen 10.6 und 10.7 sind die Längsprofile des Sauerstoffgehalts für den Zeitpunkt minimaler Konzentrationen dargestellt.

Tab. 10.3: Minimale Sauerstoffkonzentrationen in mg/L in den einzelnen Stauhaltungen bei unterschiedlichen Emissionsvarianten der beiden Szenarien.

Stauhaltung	Varianten	Szenario 1			Szenario 2		
		Nullvariante	0-Emission	Max-Emission	Nullvariante	0-Emission	Max-Emission
Deizisau		5,7	5,7	5,7	4,8	4,8	4,8
Oberesslingen		4,5	4,5	4,5	3,0	3,0	2,9
Esslingen		4,3	4,3	4,3	2,7	2,7	2,6
Obertürkheim		4,9	4,9	4,8	2,8	2,8	2,7
Untertürkheim		4,4	4,4	4,3	2,3	2,4	2,3
Cannstatt		3,8	3,9	3,8	1,8	1,9	1,8
Hofen		3,3	3,4	3,3	0,9	0,9	0,8
Aldingen		3,6	3,7	2,9	1,4	1,5	0,6
Poppenweiler		3,6	3,8	1,9	1,1	1,4	0,0
Marbach		3,4	3,7	1,5	0,8	1,2	0,0
Pleidelsheim		3,7	4,0	1,9	1,3	1,7	0,1
Hessigheim		3,3	3,7	1,5	0,8	1,3	0,0
Besigheim		3,2	3,6	1,6	0,8	1,3	0,0

Die Ergebnisse zu beiden Varianten verdeutlichen, dass die weitere Reduktion von Zehrstoffemissionen auf der Modellstrecke offenbar nur mäßige Potenziale zur Abminderung von Sauerstoffdepressionen birgt. Selbst wenn die Kläranlagenabläufe auf der Modellstrecke keine Zehrstoffe enthielten, könnten die minimalen Sauerstoffkonzentrationen im Modellbereich bestenfalls um 0,5 mg/L angehoben werden. Emissionsreduktionen oberhalb der Modellstrecke könnten in ihrer additiven Wirkung sicherlich zusätz-

lich zu einer Anhebung der Sauerstoffgehalte beitragen. Nichtsdestotrotz ist der mögliche Beitrag weiter reduzierter Zehrstoffemissionen zur Aufhörung von Sauerstoffdepressionen auf Grundlage der Szenarien als gering bis mäßig einzuschätzen. Dieser Befund steht auch im Einklang mit den Ergebnissen aus der modellgestützten Systemanalyse (siehe Kapitel 9.2.1).

Diese Folgerungen beziehen sich aber ausdrücklich nicht auf die Reduktion von Mischwassereinleitungen sondern lediglich auf die Kläranlagenemissionen. Durch das Zusammentreffen von Mischwasserentlastungen mit dem Zusammenbrechen von Algenblüten können Sauerstoffdepressionen zweifellos verschärft werden. Dies verdeutlicht die Bedeutung von Regenüberlaufbecken bzw. der Mischwasserbehandlung, die hier allerdings nicht weiter vertieft werden kann (Gujer 1999).

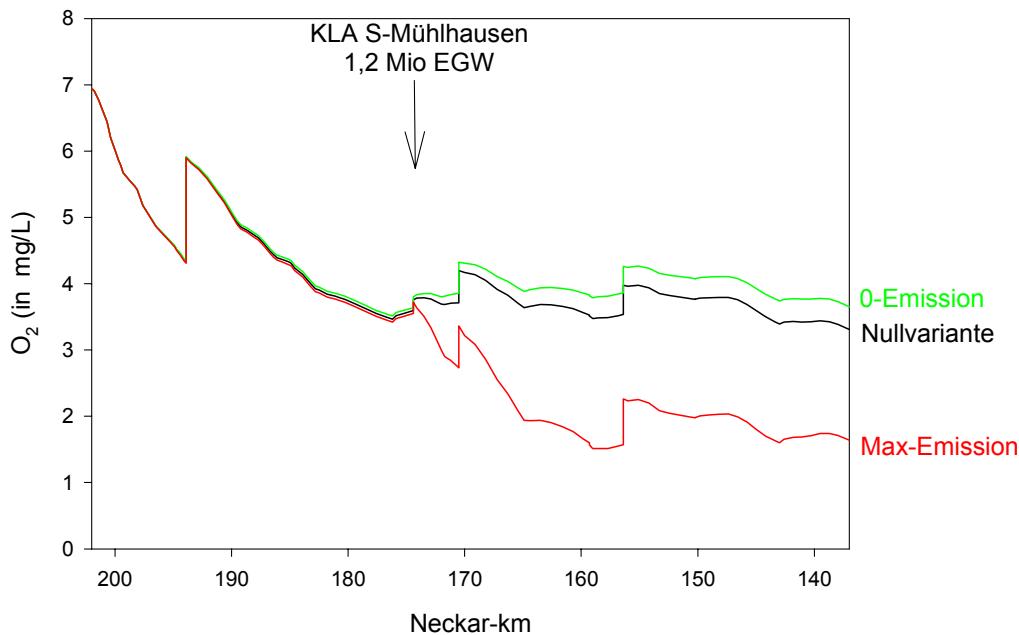


Abb. 10.6: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Emissionsvarianten von Szenario 1.

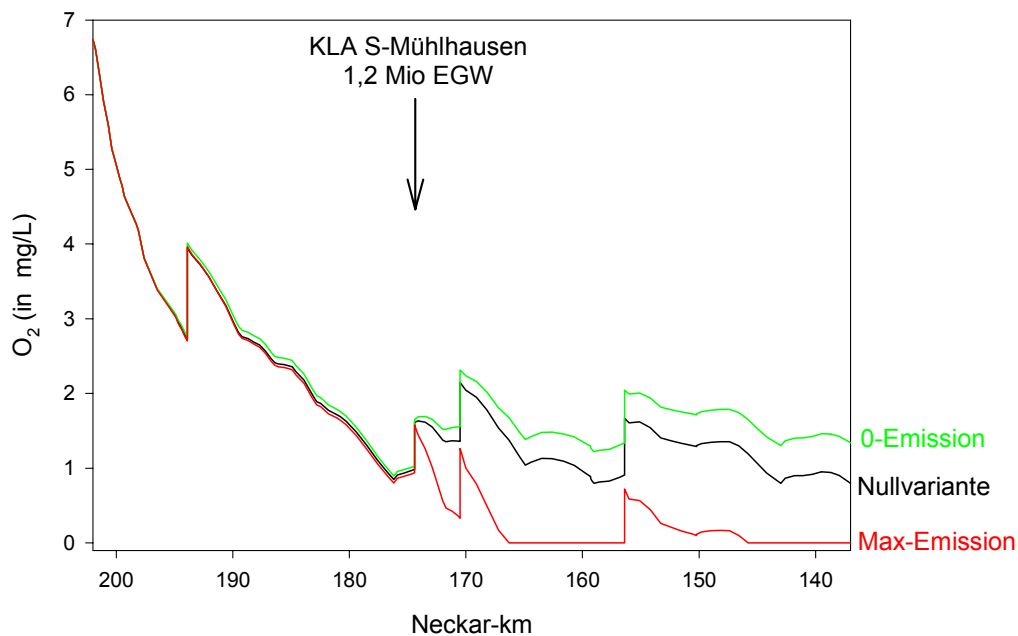


Abb. 10.7: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Emissionsvarianten von Szenario 2.

Auf der anderen Seite bedingen die erhöhten Emissionen der Variante Max-Emission wesentlich kleinere Sauerstoffminima. Bei dem realitätsnahen und in diesem Ausmaß durchaus wahrscheinlichen Szenario 1 käme es infolge erhöhter Emissionen unterhalb von Stuttgart-Mühlhausen zu Sauerstoffminima unter 2 mg/L, die für die aquatische Lebensgemeinschaft noch wesentlich kritischer wären als die Minima der Nullvariante. Bei dem extremen Szenario 2 hätten die erhöhten Zehrstoffemissionen der Variante Max-Emission sogar völlige Sauerstofffreiheit zur Folge.

Dies verdeutlicht die herausragende Bedeutung der sehr guten Reinigungsleistungen der Kläranlagen und insbesondere des Hauptklärwerks Stuttgart-Mühlhausen. Bei schlechteren Reinigungsleistungen, wie sie durch die extremen 95-Perzentilwerte repräsentiert werden, wären auch heute noch Sauerstoffdepressionen im Bereich unter 2 mg/L während sommerlichem Niedrigwasser wahrscheinlich (Ergebnisse Szenario 1). Damit wird deutlich, dass die guten Reinigungsleistungen zum Schutz und zu der in den letzten Jahrzehnten verzeichneten Verbesserung der Biozönose im Neckar einen wesentlichen Beitrag geleistet haben und weiter leisten.

10.5 Veränderung der Stauziele

Wie in Kapitel 2.5 veranschaulicht wurde, sind die Probleme mit dem Sauerstoffhaushalt im mittleren Neckar ursächlich mit der Stauregulierung verknüpft. Der maßgebliche Faktor ist hierbei die mittlere Wassertiefe, die über die vorgegebenen Stauziele an den Wehren reguliert wird. Eine Verringerung der Stauhöhen steht den Interessen der Schifffahrt entgegen, für die innerhalb der Fahrrinne eine Mindestwassertiefe eingehalten werden muss. Eine Erhöhung der Stauziele erfolgt insbesondere dann, wenn die Schiffbarkeit für Wasserfahrzeuge mit größerem Tiefgang ermöglicht werden soll. Eine solche Erhöhung bewegt sich zumeist im Bereich von 10 cm bis 20 cm und wird für gewöhnlich nur an einzelnen Stauhaltungen durchgeführt, so dass Auswirkungen auf den Sauerstoffhaushalt quantitativ kaum nachzuweisen sind.

Im nachfolgenden Abschnitt soll verdeutlicht werden, wie sich eine mäßige Erhöhung bzw. Erniedrigung der Stauziele aller Wehranlagen im Modellbereich auf extreme Sauerstoffdepressionen auswirken können.

Simulationsvarianten

Beide Grundscenarien wurden mit je zwei Varianten mit veränderten Stauzielen simuliert:

Stauerhöhung: Bei dieser Variante wurden die Stauziele an allen Wehren auf der Modellstrecke um 20 cm erhöht.

Stauerniedrigung: Bei dieser Variante wurden die Stauziele an allen Wehren auf der Modellstrecke um 20 cm gesenkt.

Ergebnisse und Diskussion

In Tabelle 10.4 werden die in den einzelnen Stauhaltungen ermittelten minimalen Sauerstoffkonzentrationen der Varianten verglichen. In den Abbildungen 10.8 und 10.9 sind die Längsprofile des Sauerstoffgehalts für den Zeitpunkt minimaler Konzentrationen dargestellt.

Die Simulationsergebnisse verdeutlichen, dass eine moderate Änderung der Stauziele um 20 cm nur relativ geringe Auswirkungen auf die minimalen Sauerstoffgehalte bis maximal 0,5 mg/L hätte. Trotz dieser geringen Auswirkungen ist im Verzicht auf weitere Erhöhungen der Stauziele eine Möglichkeit gegeben, der Verschärfung von Sauerstoffdepressionen entgegenzuwirken.

Tab. 10.4: Minimale Sauerstoffkonzentrationen in mg/L in den einzelnen Stauhaltungen bei unterschiedlichen Stauhöhenvarianten der beiden Szenarien.

Stauhaltung	Varianten	Szenario 1			Szenario 2		
		Nullvariante	Stauerhöhung	Stauerniedrigung	Nullvariante	Stauerhöhung	Stauerniedrigung
Deizasau		5,7	5,7	5,8	4,8	4,7	4,9
Oberesslingen		4,5	4,4	4,6	3,0	2,8	3,1
Esslingen		4,3	4,1	4,4	2,7	2,5	2,8
Obertürkheim		4,9	4,7	5,0	2,8	2,6	3,0
Untertürkheim		4,4	4,2	4,5	2,3	2,1	2,5
Cannstatt		3,8	3,7	4,0	1,8	1,6	2,1
Hofen		3,3	3,1	3,5	0,9	0,5	1,2
Aldingen		3,6	3,4	3,8	1,4	1,1	1,7
Poppenweiler		3,6	3,3	3,8	1,1	0,7	1,3
Marbach		3,4	3,2	3,6	0,8	0,5	1,1
Pleidelsheim		3,7	3,4	3,9	1,3	1,1	1,5
Hessigheim		3,3	3,0	3,6	0,8	0,5	1,0
Besigheim		3,2	2,9	3,5	0,8	0,5	1,0

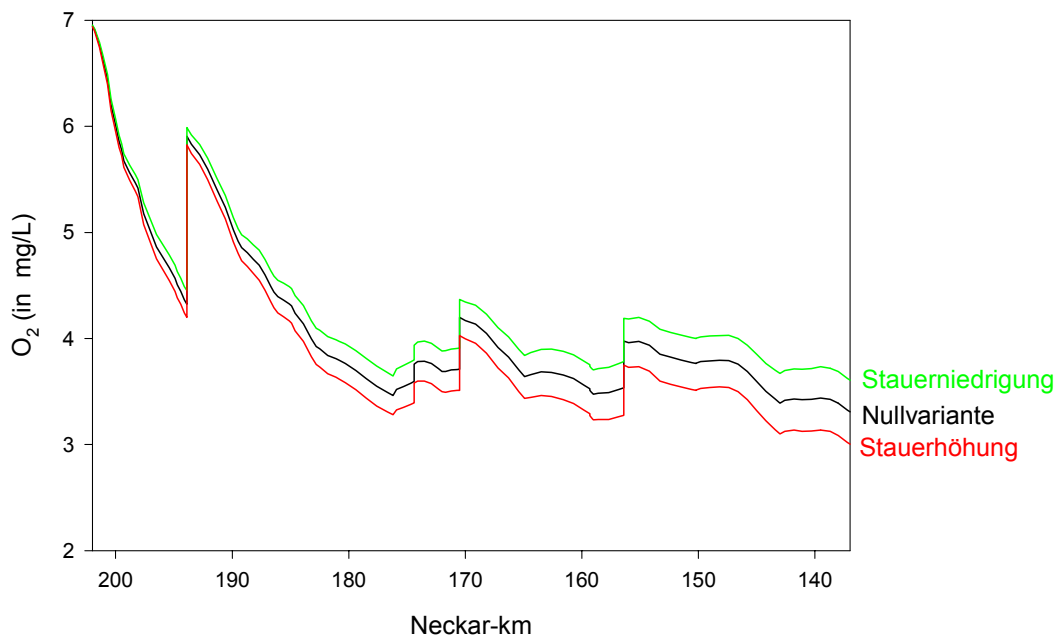


Abb. 10.8: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Stauhöhenvarianten von Szenario 1.

Dabei ist insbesondere zu beachten, dass die Auswirkungen nach Unterstrom stärker werden, da sich die Effekte der einzelnen Anlagen aufsummieren. Dies verdeutlicht auch, dass Untersuchungen zur Auswirkung der Stauerhöhung an einzelnen Wehren nur minimale Effekte erbringen können. Ist die sukzessive Anhebung der Stauziele mehrerer Anlagen innerhalb weniger Jahre zu erwarten, sollte sich die Untersuchung daher auf die zu erwartende Erhöhung der Stauziele an allen Anlagen beziehen. Nur hierdurch können die zu erwartenden ökologischen Folgen der Gesamtmaßnahme vernünftig und realitätsnah abgeschätzt werden.

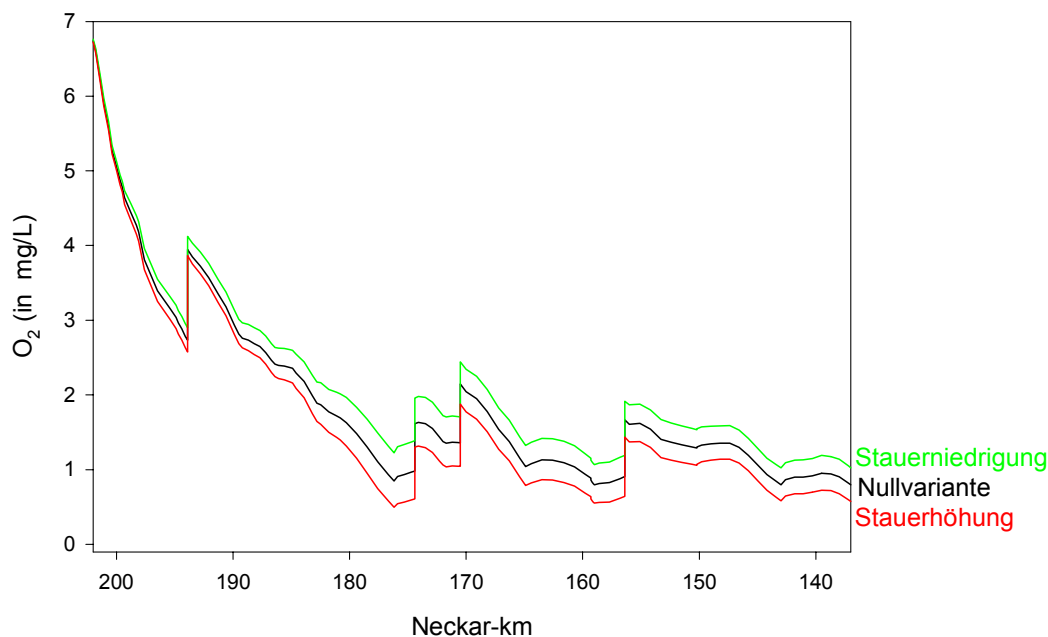


Abb. 10.9: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Stauhöhenvarianten von Szenario 2.

10.6 Belüftungsmaßnahmen und deren Optimierung

Nachdem gezeigt wurde, dass keine der nachhaltigen Sanierungsmaßnahmen zur Verbesserung des Sauerstoffhaushalts kurzfristig Aussicht auf Erfolg hat, bzw. die Erfolgsaussichten als unsicher zu bewerten sind, sollen hier auch kurzzeitige Stützungsmaßnahmen für den Sauerstoffgehalt untersucht werden. Zu den möglichen Belüftungsmaßnahmen zählen die Wehr- und Turbinenbelüftung an den Wasserkraftanlagen im Fluss, die Belüftung von eingeleitetem Kühl- und Abwasser, die Kühlturmbelüftung ohne Kraftwerksbetrieb sowie zusätzlich mögliche lokale Belüftungsmaßnahmen. Die Wehr- und Turbinenbelüftung sind hinsichtlich des Sauerstoffeintrags zweifellos als am effizientesten anzusehen, weshalb diese beiden Maßnahmen hier auch hinsichtlich ihrer Wirtschaftlichkeit näher untersucht werden sollen. Zunächst werden die grundsätzlichen Potenziale der beiden Belüftungsmaßnahmen aufgezeigt, worauf ein Wirtschaftlichkeitsvergleich folgt. Abschließend werden in Anlehnung an das neue Sauerstoffreglement Belüftungsstrategien ökologisch und ökonomisch verglichen.

10.6.1 Sauerstoffeintragspotenziale durch Turbinen- und Wehrbelüftung

Wehrbelüftung

Die von Avery und Novak (1978) vorgeschlagene Formel (AV) hat sich (zumindest im Untersättigungsfall) als am besten geeignet erwiesen, um den Sauerstoffeintrag an freien Überfällen vorherzusagen (siehe Kapitel 6.4.2). Darum wird sie auch in diesem Kapitel zur quantitativen Vorhersage der Wehrbelüftung verwendet (Formel für die Austauscheffizienz in Tabelle 6.4). Hierbei ist zu beachten, dass AV streng genommen nur Gültigkeit besitzt, solange der Strahl nicht zerstäubt ist (Gleichung 6. 20). In Kapitel 6.4.2 konnte allerdings gezeigt werden, dass die Formel nach Avery und Novak recht robust ist und mit ihr

zufriedenstellende Vorhersagen auch dann möglich sind, wenn die kritische Überfallhöhe für das Zerstäuben um den Faktor 2 überschritten wird. Deshalb wird diese Formel hier auch in den Bereichen geringen Abflusses verwendet, in denen sie streng genommen nicht mehr an allen Wehren gültig ist.

Maximaler Sauerstoffeintrag: Der maximale Sauerstoffeintrag wird selbstverständlich dann erreicht, wenn der gesamte Abfluss über das Wehr geleitet wird. Das maximale Sauerstoffaufstockungspotenzial – also die Differenz zwischen den Konzentrationen im Unter- und Oberwasser – wird in Abbildung 10.10 am Beispiel des Wehrs Poppenweiler veranschaulicht. Die dargestellten Ergebnisse gelten für eine Wassertemperatur von 20°C und die in Poppenweiler gegebene Überfallhöhe von 7 m, unter der Annahme, dass der gesamte Abfluss über ein Wehrfeld (Breite 20 m) abgeführt wird.

Aus dieser Abbildung wird deutlich, dass die Sauerstoffaufstockung durch die Wehrbelüftung in erster Linie vom Sättigungsdefizit im Oberwasser abhängt, während der Abfluss bei gegebener Überfallhöhe und –breite von geringerer Bedeutung ist. Die Wehrbelüftung ermöglicht offenkundig eine deutliche Aufstockung der Sauerstoffkonzentration. In dem hinsichtlich des Schutzes der aquatischen Lebensgemeinschaft relevanten Bereich mit Oberwasserkonzentrationen von etwa 3 mg/L kann die Sauerstoffkonzentration am Wehr Poppenweiler um maximal ca. 5 mg/L aufgestockt werden. Selbst bei recht hohen Ausgangskonzentrationen von 5 mg/L kann noch eine Aufstockung um 3,5 mg/L erreicht werden.

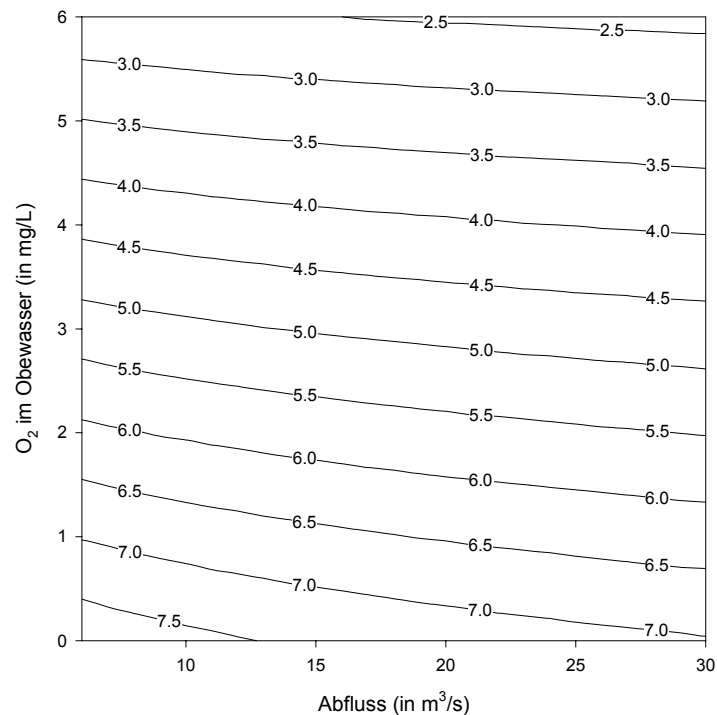


Abb. 10.10: Isolinien der maximal möglichen Sauerstoffaufstockung in mg/L, die am Wehr Poppenweiler durch Wehrüberfall erzielt werden kann.

Die maximal mögliche Sauerstoffaufstockung ist neben der Ausgangskonzentration und dem Abfluss natürlich auch von der Wehrbreite und vor allem von der Fallhöhe abhängig. Daher ergeben sich für die einzelnen Wehre im Modellabschnitt zum Teil deutliche Unterschiede. In Abbildung 10.11 sind die durch Wehrbelüftung maximal erreichbaren Sauerstoffkonzentrationen im Unterwasser der Wehranlagen bei einem Abfluss von 12 m³/s in Abhängigkeit von der Konzentration im Oberwasser dargestellt. Hierbei wurde wiederum davon ausgegangen, dass der gesamte Abfluss über ein Wehrfeld abgeführt wird und die Wassertemperatur 20°C beträgt.

Die Abbildung verdeutlicht, dass bei dem vorgegebenen Niedrigwasserabfluss selbst an den Wehren Untertürkheim und Aldingen mit Fallhöhen von nur 3,6 m, bei einem Ausgangswert von 3 mg/L die Sauerstoffkonzentration deutlich mehr als verdoppelt werden kann. Dies unterstreicht das enorme Sauerstoffeintragungspotenzial, das durch den Wehrüberfall im Neckar prinzipiell gegeben ist.

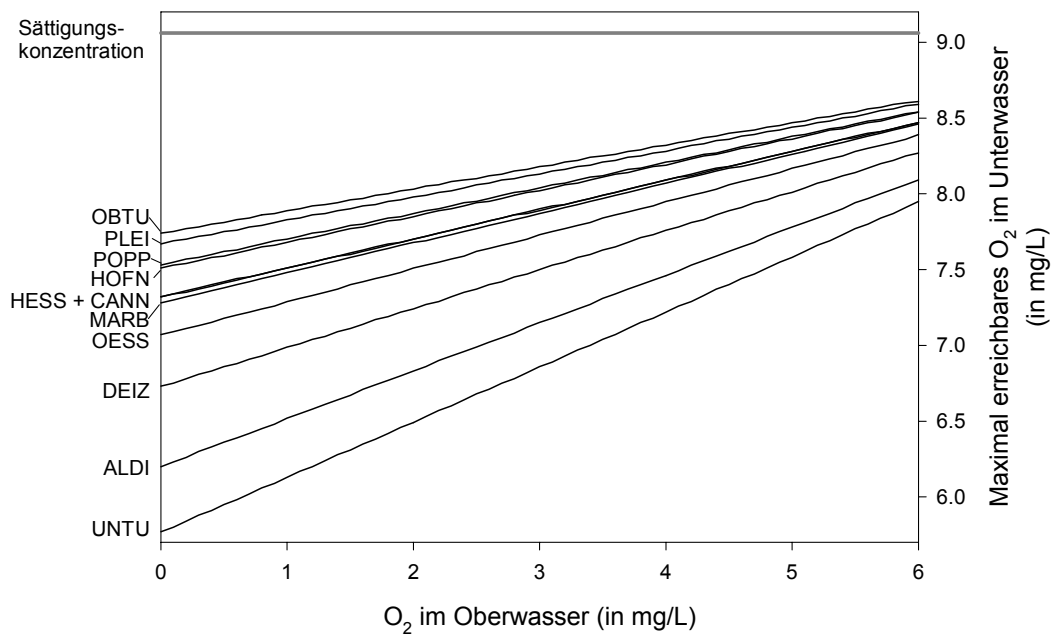


Abb. 10.11: Bei einem Abfluss von $12 \text{ m}^3/\text{s}$ durch Wehrbelüftung maximal erreichbare Sauerstoffkonzentrationen im Unterwasser der Wehranlagen.

Turbinenbelüftung

Auf der Modellstrecke besteht an den Wasserkraftanlagen bei Cannstatt, Hofen und Poppenweiler alternativ zur Wehrbelüftung auch die Möglichkeit zur Turbinenbelüftung. An diesen drei Anlagen besteht an je einer der beiden Kaplan-Turbinen die Möglichkeit zur Turbinenbelüftung gemäß dem Verfahren nach Wagner-Voith. Hierbei handelt es sich um ein Unterdruckverfahren, bei dem Luft über ein Leitungssystem in den Strömungsquerschnitt unterhalb des Turbinenlaufrades eingesaugt wird. Die Menge der eingesaugten Luft kann dabei über ein Ventil geregelt werden (Wagner 1958). Mit dem Lufteintrag und der Belüftung ist allerdings ein Leistungsverlust der Turbine verbunden. Wagner (1958) legte detaillierte Befunde zum Sauerstoffeintrag an der Anlage in Poppenweiler vor, die von Pinter (1979) bestätigt wurden. Neben diesen Ergebnissen liegen neuere quantitativ verwertbare Befunde zur Belüftungsleistung nur an Francis-Turbinen vor (Rösch 2000; Rösch und Tönsmann 1997; Thompson und Gulliver 1997), deren Übertragbarkeit auf Kaplan-Turbinen nicht zweifelsfrei geklärt ist.

Daher werden in der vorliegenden Arbeit die von Wagner (1958) vorgelegten Ergebnisse zur quantitativen Vorhersage des Sauerstoffeintrags bei der Turbinenbelüftung verwendet. Die insgesamt 38 Versuchsläufe wurden bei Wassertemperaturen zwischen $14,8^\circ\text{C}$ und $17,7^\circ\text{C}$, Abflüssen zwischen $12 \text{ m}^3/\text{s}$ und $33 \text{ m}^3/\text{s}$ und Oberwassersättigung zwischen 7% und 59% durchgeführt. Zur quantitativen Auswertung der Versuche wurde die resultierende Austauscheffizienz mit Hilfe von Gleichung 6.27 auf 20°C normiert. Die Ergebnisse zeigen, dass die prozentuale Leistungsminderung linear proportional zum Verhältnis zwischen Lufteintrag und Wasserdurchfluss zunimmt, die relative Leistungsminderung also als direktes Maß für den prozentualen Lufteintrag verwendet werden kann. Wie Abbildung 10.12 verdeutlicht, ergibt sich hieraus wiederum ein linearer Zusammenhang zwischen dem prozentualen Leistungsverlust und dem Defizitquotienten. Aus einer linearen Regression mit $R^2=0,84$ ergibt sich für den Defizitquotienten von Sauerstoff bei 20°C folgende Beziehung:

$$r = 0,04 \cdot \Delta P\% + 1 \quad (10.1)$$

Wobei $\Delta P\%$ die prozentuale Leistungsminderung der Turbine gegenüber der Verhältnisse ohne Belüftung ist. Dieser Zusammenhang der für Leistungsverluste bis ca. 50% belegt ist, wurde zur quantitativen Vorhersage des Sauerstoffeintrags bei der Turbinenbelüftung verwendet, wobei eine Übertragbarkeit auf die ähnlichen Anlagen in Hofen und Cannstatt unterstellt wurde. Für die Berechnung des Sauerstoffeintrags

wurde weiterhin an allen 3 Anlagen von einem Turbinenwirkungsgrad von 85% ausgegangen. Temperaturkorrekturen erfolgten mit Gleichung 6.27.

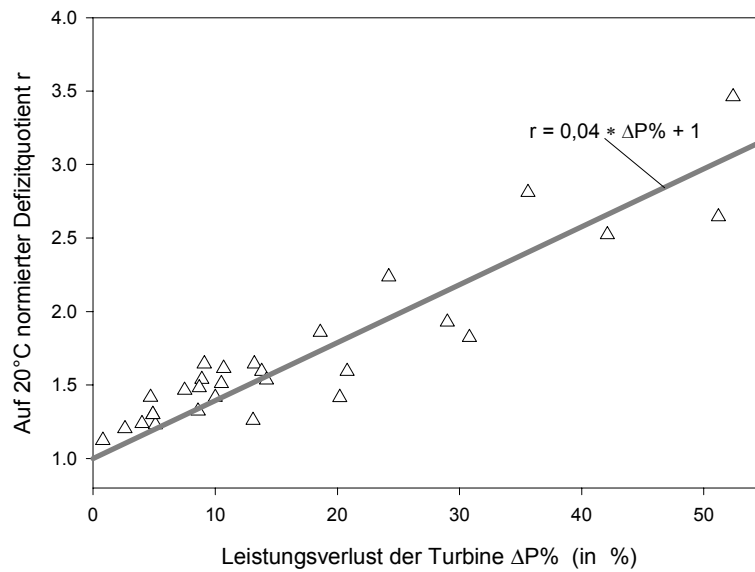


Abb. 10.12: Beziehung zwischen dem auf 20°C normierten Defizitquotienten und dem prozentualen Leistungsverlust bei der Turbinenbelüftung in Poppenweiler. Daten nach Wagner (1958).

Die Sauerstoffaufstockung ist demnach solange unabhängig vom Abfluss, wie der gesamte Abfluss durch die belüftbare Turbine abgeführt wird. Wie Abbildung 10.13 für 20°C verdeutlicht, ist die Konzentrationserhöhung vielmehr eine Funktion des Sättigungsdefizits im Oberwasser und des Leistungsverlustes respektive Lufteintrags.

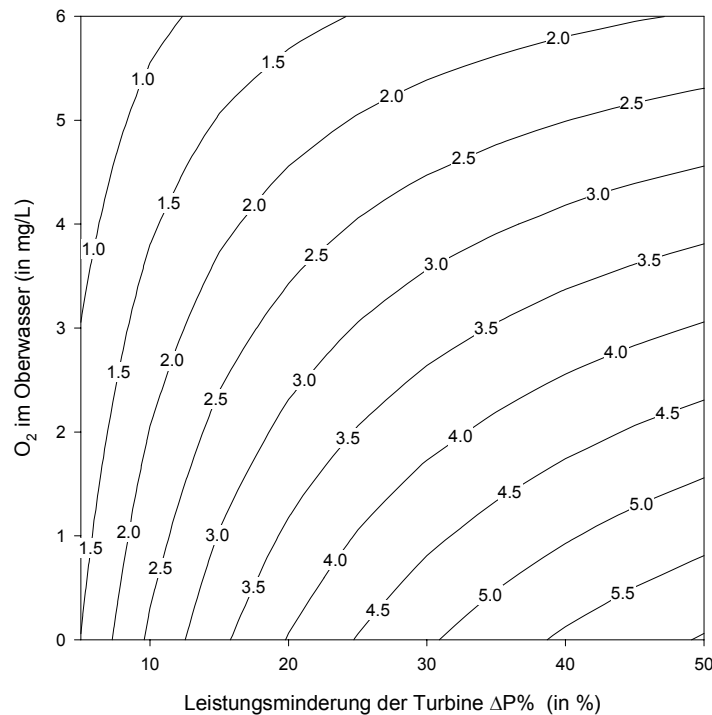


Abb. 10.13: Isolinien der Sauerstoffaufstockung in mg/L, die durch Turbinenbelüftung in Abhängigkeit von der Oberwasserkonzentration und dem Leistungsverlust bei 20°C erzielt wird.

Der maximal mögliche Lufteintrag und der resultierende Leistungsverlust werden durch den Unterdruck im Bereich unterhalb des Laufrades und die Ausgestaltung des Luftzuleitungssystems limitiert. Bei den Messungen von Wagner (1958) wurden maximale Leistungsverluste von 52,5% ermittelt. Daher wird in Anlehnung an Müller (2001a) davon ausgegangen, dass die maximal mögliche Sauerstoffaufstockung durch eine maximal mögliche Leistungsminderung von 50% begrenzt wird. Aus Abbildung 10.13 wird deutlich, dass bei 50 % Leistungsverlust bei einem Oberwasserdefizit von 100% die Sauerstoffkonzentration um ca. 6 mg/L aufgestockt werden kann. Bei einer Ausgangskonzentration von 5 mg/L kann im Unterwasser noch eine Konzentration von 7,5 mg/L erzielt werden. Folglich birgt auch die Turbinenbelüftung prinzipiell ein enormes Sauerstoffeintragungspotenzial. Wenngleich die maximal erzielbare Sauerstoffaufstockung etwas geringer ist als beim Wehrüberfall.

Wirkung der Belüftung auf der Fließstrecke

Nachdem das Sauerstoffaufstockungspotenzial von Wehr- und Turbinenbelüftung aufgezeigt wurde, gilt es im zweiten Schritt zu überprüfen, ob dieses Potenzial ausreicht, um bei extremen Zehrungsverhältnissen auf der gesamten Fließstrecke eine ausreichende Sauerstoffkonzentration zu erhalten. Um dies zu klären, wurde das extreme Szenario 2 herangezogen und mit drei unterschiedlichen Dauerbelüftungsvarianten simuliert:

Dauerbelüftung A: Der gesamte Abfluss wird an allen Wehranlagen über je ein Wehrfeld abgeführt.

Dauerbelüftung B: Nur an den Wasserkraftanlagen Cannstatt, Hofen und Poppenweiler wird Turbinenbelüftung mit einem Leistungsverlust von 50% betrieben.

Dauerbelüftung C: In Cannstatt, Hofen und Poppenweiler wird Turbinenbelüftung wie in B betrieben, an den anderen Stauanlagen der gesamte Abfluss über ein Wehrfeld abgeführt.

In Abbildung 10.14 werden Längsprofile der minimalen Sauerstoffkonzentration der Nullvariante des Szenarios 2 mit denen der drei Belüftungsvarianten verglichen. Die Belüftungsmaßnahmen wurden hierbei jeweils über die gesamte Dauer des Szenarios beibehalten, also auch bereits vor der Sauerstoffdepression durchgeführt.

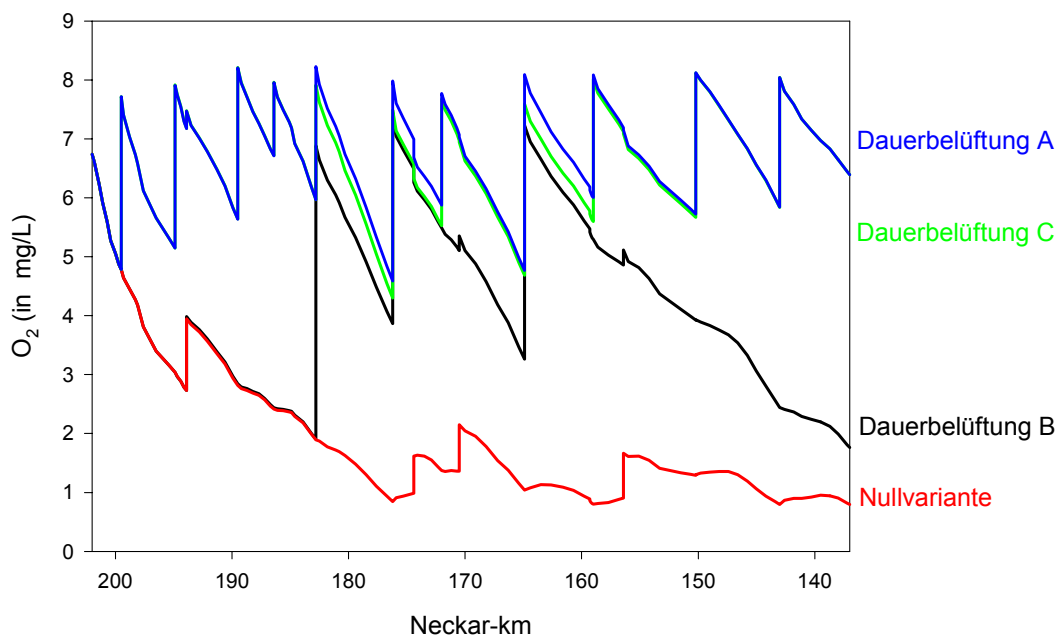


Abb. 10.14: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration bei Szenario 2 für verschiedene Dauerbelüftungsvarianten.

Aus Abbildung 10.14 wird deutlich, dass sowohl bei maximaler Wehrbelüftung (Dauerbelüftung A) als auch bei der Kombination maximaler Wehrbelüftung mit der Turbinenbelüftung (Dauerbelüftung C), selbst bei den gewählten Extrembedingungen die Sauerstoffkonzentration nahezu im gesamten Modellbereich über 5 mg/L gehalten werden kann. Lediglich im Oberwasser der Wehranlagen Cannstatt, Hofen, Poppenweiler und Hessigheim können die Sauerstoffkonzentrationen unter 5 mg/L abfallen, wobei das Minimum am Wehr Hofen erreicht wird (siehe auch Tabelle 10.5). Wird hingegen nur die maximal mögliche Turbinenbelüftung an den drei hierfür ausgerüsteten Anlagen eingesetzt (Dauerbelüftung B), besteht im vorliegenden Szenario die Gefahr, dass die Sauerstoffgehalte im unterstromigen Bereich des Modellgebiets deutlich unter 3 mg/L absinken. Dennoch kann selbst in dieser Variante eine erhebliche Anhebung der minimalen Sauerstoffkonzentrationen verzeichnet werden.

Die Modellrechnungen veranschaulichen, dass selbst unter den hier vorgegebenen extremen Randbedingungen die Sauerstoffkonzentration mit Hilfe von Wehr- und Turbinenbelüftung prinzipiell auf einem für die aquatische Lebensgemeinschaft zumindest kurzfristig unkritischen Niveau gehalten werden kann.

10.6.2 Ökologisch-ökonomische Optimierung von Turbinen- und Wehrbelüftung

Wirtschaftlichkeitsvergleich

Zur vergleichenden ökonomischen Bewertung der beiden alternativen Belüftungsmaßnahmen kann der Energiebedarf je eingetragenen kg Sauerstoff herangezogen werden. Um eine Vergleichbarkeit zu ermöglichen muss jedoch zusätzlich eine zu erreichende Zielkonzentration für Sauerstoff im Unterwasser definiert werden.

Ausgehend vom aktuellen Abfluss und dem Sättigungsdefizit im Oberwasser muss im Falle der Wehrbelüftung ein Teil des Abflusses über das Wehr abgeführt werden, so dass sich aus der Mischung dieses belüfteten Anteils mit dem unbelüfteten, durch die Turbine abgeführten Anteils die vorgegebene Zielkonzentration ergibt. Der über das Wehr abzuführende Abflussanteil kann iterativ ermittelt werden. Im Anhang befinden sich Nomogramme, die verdeutlichen, welche Wassermenge in Abhängigkeit von der Oberwasserkonzentration und dem Abfluss bei 20°C und einer Zielkonzentration von 6 mg/L über die Wehre abgeführt werden müssen. Der über das Wehr abgeführte Abfluss kann selbstverständlich nicht zur Energieerzeugung genutzt werden, so dass sich ein resultierender Leistungsbedarf ermitteln lässt.

Bei der Turbinenbelüftung muss der eingesaugte Luftstrom so reguliert werden, dass die Belüftungsleistung ausreicht, um im Unterwasser die Zielkonzentration zu erreichen. Mit der Zudosierung von Luft ist ein Leistungsverlust der Turbine verbunden. Die erforderliche Belüftung kann gemäß Gleichung 10.1 direkt über den ermittelten Leistungsverlust reguliert werden.

In Abbildung 10.15 wird verglichen, welcher Aufwand für das Erreichen von 6 mg/L im Unterwasser der Stauanlage Poppenweiler mit Wehr- bzw. Turbinenbelüftung notwendig ist. Für die Berechnungen wurde ein konstanter Turbinenwirkungsgrad von 85 % und eine Wassertemperatur von 20°C angesetzt. Bei der Turbinenbelüftung ist der Aufwand gemäß Gleichung 10.1 unabhängig vom Abfluss und der Oberwasserkonzentration, er ist lediglich eine Funktion des zu erreichenden Zielwertes. Bei der Wehrbelüftung stellt der erforderliche Aufwand hingegen sowohl eine Funktion des Abflusses als auch vor allem der Konzentration im Oberwasser dar. Die Abbildung verdeutlicht, dass im vorliegenden Fall die Turbinenbelüftung immer die wirtschaftlichere Alternative darstellt. Das selbe gilt für die beiden anderen Anlagen in Cannstatt und Hofen, sowie für andere Zielwerte. Unter rein ökonomischen Gesichtspunkten, ist an den drei Standorten die Turbinenbelüftung der Wehrbelüftung immer vorzuziehen.

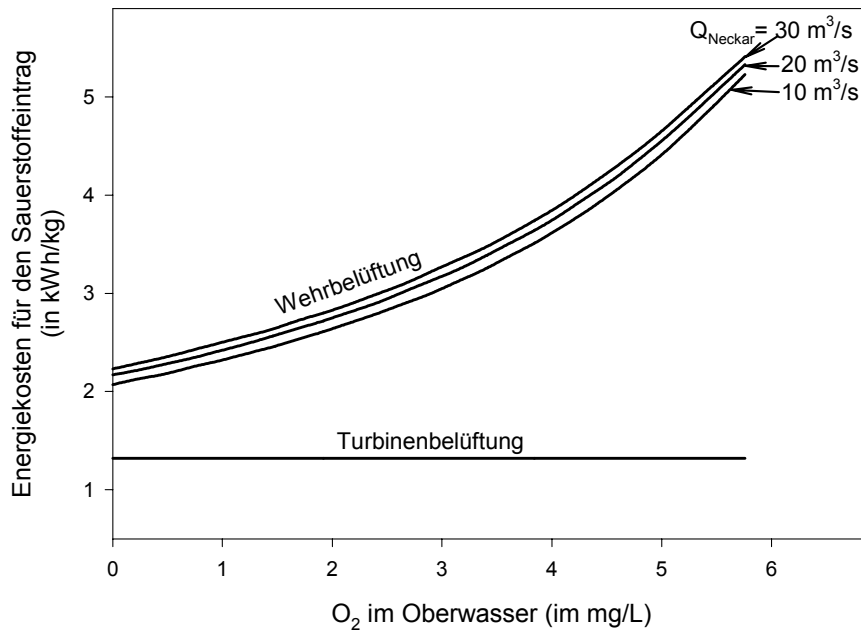


Abb. 10.15: Leistungsbedarf je eingetragenem kg Sauerstoff am Wehr Poppenweiler, bei 20°C und einem Zielwert von 6 mg/L für das Unterwasser.

Kombinierte ökonomisch-ökologische Zielfindung

Das Fließschema in Abbildung 10.16 verdeutlicht, wie die Wahl des Belüftungsverfahrens unter ökologischen und ökonomischen Gesichtspunkten optimiert werden kann. Als Auslöser für das Regelschema dienen die ökologischen Kriterien der prinzipiellen Notwendigkeit für Belüftung und des erforderlichen Zielwertes für das Unterwasser. Im Regelschema werden dann diese ökologischen Kriterien prioritär erfüllt. Eine ökonomische Optimierung wird nur zugelassen, wenn der als erforderlich erachtete Zielwert der Sauerstoffkonzentration mit beiden Verfahren erreicht werden kann.

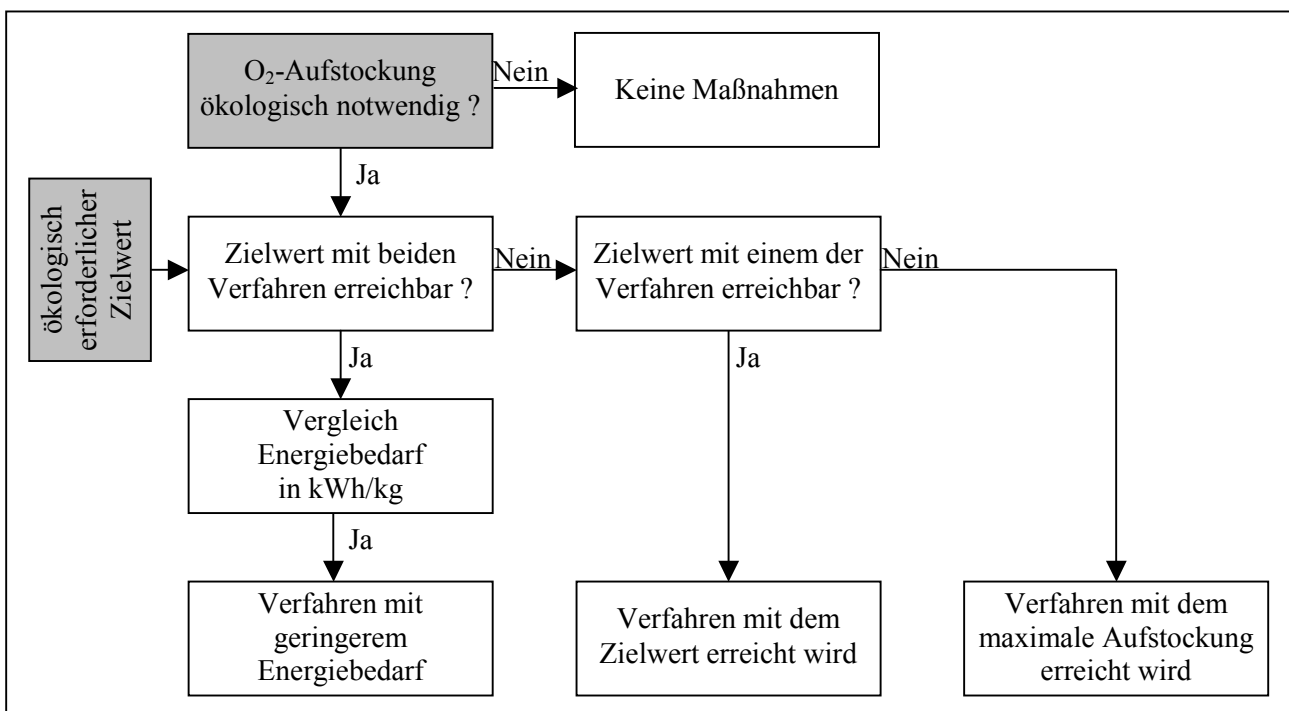


Abb. 10.16: Regelschema zur Wahl des Belüftungsverfahrens.

Legt man das einfache Regelschema von Abbildung 10.16 zugrunde und geht weiter davon aus, dass der maximal mögliche Leistungsverlust bei der Turbinenbelüftung 50% beträgt, gelangt man für die drei Anlagen am mittleren Neckar zu einfachen Empfehlung. In Abbildung 10.17 ist aufgezeigt, welches der beiden Belüftungsverfahren in Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration im Oberwasser und der Zielkonzentration für das Unterwasser empfohlen wird.

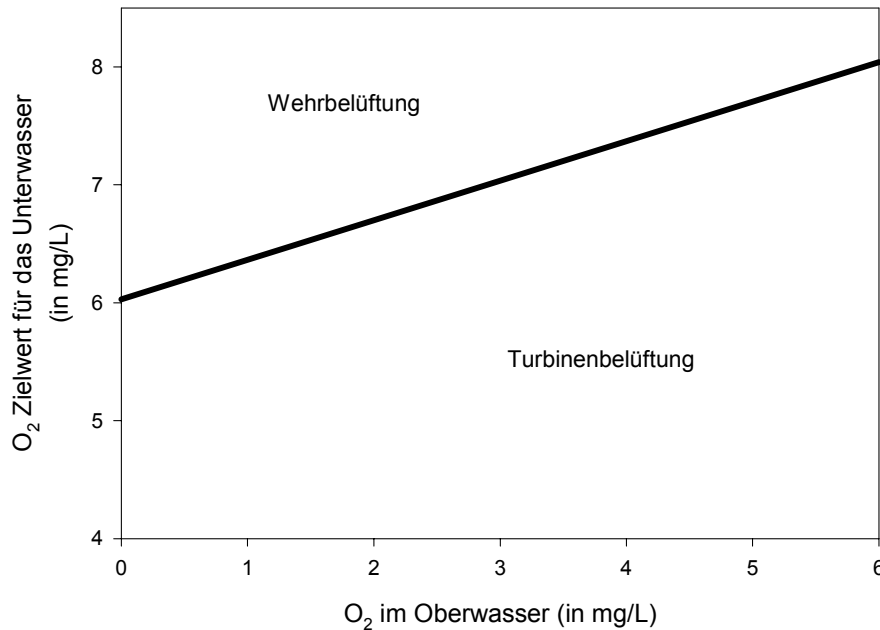


Abb. 10.17: Für die Wasserkraftanlagen Cannstatt, Hofen und Poppenweiler bei 20°C empfohlenes Belüftungsverfahren in Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration im Oberwasser und der zu erreichenden Zielkonzentration im Unterwasser.

Da an allen drei Anlagen die Turbinenbelüftung ökonomisch immer die bessere Variante ist, wird der Wehrüberfall nur dann empfohlen, wenn die Zielkonzentration mit der Turbinenbelüftung nicht erreicht werden kann. Daher ist die Wahl des Verfahrens unabhängig vom aktuellen Abfluss. Zielwerte von 6 mg/L können bei 20°C offenbar immer mit der Turbinenbelüftung erzielt werden. Für die Praxis bedeutet dies, dass der Turbinenbelüftung generell der Vorzug zu geben ist, sofern nicht aus dringenden Gründen die maximal mögliche Sauerstoffaufstockung erzielt werden muss.

10.6.3 Bewertung von Belüftungsstrategien anhand von Simulationsszenarien

Um die Wirkung unterschiedlicher Belüftungsvarianten zu verdeutlichen, werden hier unterschiedliche Varianten beider Grundszenerien untersucht.

Szenario 1

Belüftungsvarianten: Für Szenario 1 wurde zum einen die Nullvariante leicht abgeändert und zum anderen eine Belüftungsvariante in Anlehnung an das neue Sauerstoffreglement simuliert:

Nullvariante B: Wie Nullvariante, jedoch ohne Ausleitung am Wehr Esslingen.

Variante 1: Zu dem Zeitpunkt, an dem die Sauerstoffkonzentration im Abschnitt Hofen bis Besigheim 4 mg/L unterschritt, wurde mit der Turbinenbelüftung an den Anlagen Hofen und Poppenweiler begonnen. Als Auslöser wirkte das Unterschreiten von 4 mg/L in der Stauhaltung Besigheim. Für die Turbinenbelüftung wurde ein relativ hoher Leistungsverlust von 25 % vorausgesetzt.

Ökologische Wirksamkeit: In Tabelle 10.5 werden die minimalen Sauerstoffkonzentrationen in den einzelnen Stauhaltungen ohne und mit Belüftung gemäß Variante 1 verglichen. Abbildung 10.18 zeigt die resultierenden zeitlichen Verläufe der Sauerstoffkonzentrationen im Oberwasser der Stauanlagen Poppenweiler und Besigheim. Zur weiteren Veranschaulichung werden in Abbildung 10.19 die Sauerstoffkonzentrationen im Längsprofil verglichen. Hierbei wurde der Zeitpunkt gewählt, bei dem in der Nullvariante durchschnittlich die minimalen Konzentrationen auf der Modellstrecke auftreten.

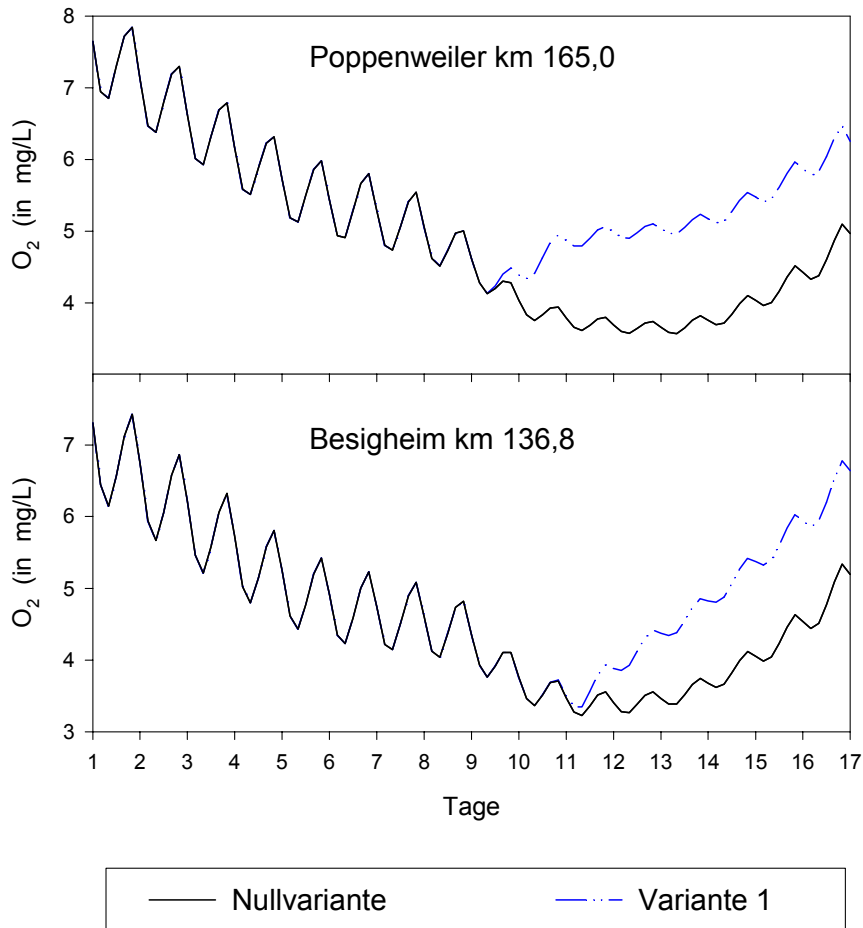


Abb. 10.18: Zeitlicher Verlauf der Sauerstoffkonzentration im Oberwasser der Stauanlagen Poppenweiler und Besigheim für zwei Variante von Szenario 1.

Tabelle 10.5 veranschaulicht, dass im Abschnitt unterhalb von Hofen die minimale Sauerstoffkonzentration in allen Stauhaltungen infolge der Turbinenbelüftung aufgestockt werden konnte. Hinsichtlich der beobachteten Minimalkonzentrationen werden in den Stauen Hessigheim und Besigheim jedoch nur geringe Auswirkungen ermittelt. Aus Abbildung 10.18 wird deutlich, dass dies nicht auf die mangelnde Wirksamkeit bzw. Reichweite der Belüftungsmaßnahmen zurückgeführt werden kann. Vielmehr sind die im Falle von geringen Abflüssen recht langen Fließzeiten hierfür verantwortlich. Am unteren Rand des Modellgebiets, im Oberwasser der Stauanlage Besigheim, wirkt die Belüftungsmaßnahme in Poppenweiler im vorliegenden Szenarion erst etwa 3 Tage nach Beginn der Sauerstoffaufstockung. Bis zu diesem Zeitpunkt hält der vorliegende Abwärtstrend in der Sauerstoffkonzentration noch an. Zu jenem Zeitpunkt, an dem in der Nullvariante die minimale Konzentration auftrat, beginnt die Belüftungsmaßnahme in Besigheim gerade erst zu wirken, so dass nur eine Aufstockung um 0,1mg/L erfolgt. Da die Fließzeiten von Hofen nach Poppenweiler wesentlich geringer sind, setzt die Wirkung der Belüftung in Poppenweiler früher ein. Hier, wie in nahezu allen anderen Stauhaltungen, wird das Sauerstoffkonzentrationsminimum durch die Belüftung klar aufgefangen (vgl. Abb. 10.19 und Tab. 10.5).

Die Längsprofile in Abbildung 10.19 verdeutlichen die durchgreifende Wirkung der Turbinenbelüftung im Abschnitt Hofen bis Besigheim. Hierbei ist wiederum zu beachten, dass die geringe Aufstockung im unteren Bereich lediglich, darauf zurückzuführen ist, dass die Belüftung zum Zeitpunkt der Längsprofile hier noch nicht vollständig angekommen ist. Selbst am unteren Rand in Besigheim, wird letztlich eine Sauerstoffaufstockung um ca. 1 mg/L erzielt (vgl. Abb. 10.18). Durch die moderaten Belüftungsmaßnahmen kann die Sauerstoffkonzentration im vorliegenden Szenario unterhalb von Hofen also durchgehend über 4 mg/L gehalten werden.

Im Flussabschnitt bis Hofen bleibt der Sauerstoffgehalt auch ohne Belüftungsmaßnahmen weitgehend über 4 mg/L, was auf die hohe Sauerstoffsättigung am oberen Modellrand (80% Sättigung) und den Wehrüberfall in Esslingen zurückzuführen ist. Im untersten Bereich der Stauhaltung Cannstatt und in der Stauhaltung Hofen werden 4 mg/l jedoch kurzfristig unterschritten (Abb. 10.19, Tab. 10.5). Hierbei sind zwei Aspekte zu beachten: Zum einen ist die konstante Zufuhr von Chl-a am oberen Rand, wie das in den Szenarien vorgegeben wird, unrealistisch. In der Natur wird der Algengehalt am oberen Rand im Zuge der verschlechterten Wachstumsbedingungen ebenfalls zurückgehen. Hierdurch wären die Sauerstoffminima im Bereich oberhalb Hofen etwas höher. Zum anderen wird im vorliegenden Szenario davon ausgegangen, dass im Oberwasser des Wehrs Esslingen 8 m³/s über das Kanalsystem der Stadt Esslingen abgeführt wird. Dieser Abflussanteil wird folglich nicht belüftet. Wird weniger Wasser in die Esslinger Kanäle umgeleitet, kann am Wehr Esslingen eine wesentlich höhere Sauerstoffaufstockung erzielt werden. Wie die Ergebnisse der Nullvariante B veranschaulichen, wäre ohne die Ausleitung im vorliegenden Szenario eine Sauerstoffkonzentration von nahezu 4 mg/L bis zum Wehr Hofen gewährleistet (Abb. 10.19, Tab. 10.5).

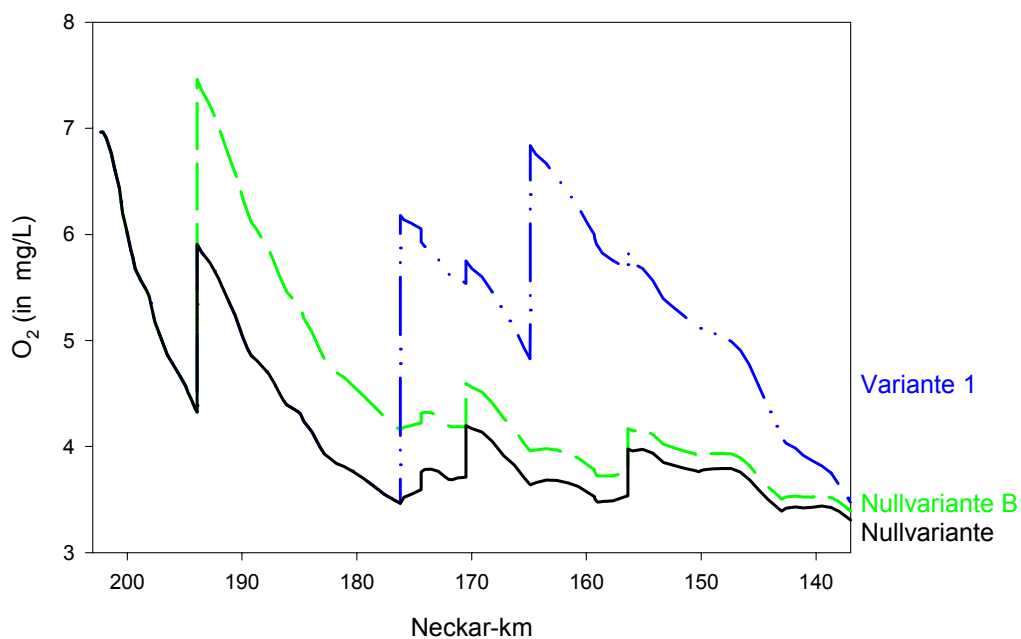


Abb. 10.19: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Belüftungsvarianten von Szenario 1.

Insgesamt erscheint die Regelung, wonach beim Unterschreiten einer Sauerstoffkonzentration von 4 mg/L im Abschnitt Hofen – Besigheim die Turbinenbelüftung in Hofen und Poppenweiler aktiviert wird äußerst wirksam. Bei dem untersuchten realitätsnahen Szenario gewährleistet diese Regelung, dass die Sauerstoffgehalte zwischen Hofen und der Enzmündung über 4 mg/L gehalten werden können. Kurzfristige Unterschreitungen dieses Werts sind lediglich durch die verzögerte Wirkung der Maßnahmen infolge großer Fließzeiten bedingt. Kleinräumige Unterschreitungen oberhalb vom Wehr Hofen könnten dadurch unterbunden werden, dass weniger Wasser in das Kanalsystem der Stadt Esslingen abgeführt wird.

Tab. 10.5: Minimale Sauerstoffkonzentrationen in mg/L in den einzelnen Stauhaltungen bei unterschiedlichen Belüftungsvarianten der beiden Szenarien.

Stauhaltung	Varianten	Szenario 1			Szenario 2 (worst case)						
		Nullvariante	Nullvariante B	Variante I	Nullvariante	Variante I	Variante 2a	Variante 2b	Dauerbelüftung A	Dauerbelüftung B	Dauerbelüftung C
Deizisau		5,7	5,7	5,7	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8	4,8
Oberesslingen		4,5	4,5	4,5	3,0	3,0	3,0	3,2	5,1	3,0	5,1
Esslingen		4,3	4,3	4,3	2,7	2,7	2,7	4,8	7,1	2,7	7,1
Obertürkheim		4,9	6,2	4,9	2,8	2,8	2,8	4,2	5,4	2,8	5,4
Untertürkheim		4,4	5,5	4,4	2,3	2,3	2,5	3,8	5,9	2,3	5,9
Cannstatt		3,8	4,8	3,8	1,8	1,8	2,2	3,2	4,4	1,8	4,4
Hofen		3,3	3,9	3,3	0,9	0,9	1,4	2,3	2,7	2,8	2,6
Aldingen		3,6	4,1	4,5	1,4	3,3	3,0	3,1	5,3	5,0	4,9
Poppenweiler		3,6	3,9	4,1	1,1	2,0	1,6	1,9	3,6	2,5	3,6
Marbach		3,4	3,7	4,4	0,8	3,2	2,4	2,4	5,2	4,7	4,8
Pleidelsheim		3,7	3,9	4,2	1,3	2,3	2,6	2,7	5,0	3,3	5,0
Hessigheim		3,3	3,4	3,5	0,8	1,2	1,8	2,2	4,4	1,8	4,4
Besigheim		3,2	3,3	3,3	0,8	1,0	2,2	2,2	5,4	1,4	5,4

Szenario 2

Belüftungsvarianten: Für Szenario 2 wurden bereits im Abschnitt 10.5.1 die Auswirkungen anhaltender Belüftung untersucht. Die Ergebnisse dieser Varianten (Dauerbelüftung A, B, C) sind zu Vergleichszwecken in Tabelle 10.5 mit aufgeführt. Wie für Szenario 1 gezeigt werden konnte, können die Ergebnisse der Dauerbelüftung nicht als realitätsnah betrachtet werden, da neben dem Ausmaß der Belüftung vor allem der Zeitpunkt des Beginns der Belüftungsmaßnahmen entscheidend ist. Daher wurden weitere Varianten untersucht, bei denen die Belüftungsmaßnahmen auf Grundlage der aktuellen Sauerstoffkonzentrationen gesteuert wurden:

- Variante 1: Zu dem Zeitpunkt, an dem die Sauerstoffkonzentration im Abschnitt Hofen bis Besigheim 4 mg/L unterschritt, wurde mit der Turbinenbelüftung an den Anlagen Hofen und Poppenweiler begonnen. Als Auslöser wirkte das Unterschreiten von 4 mg/L in der Stauhaltung Besigheim. Für die Turbinenbelüftung wurde ein Leistungsverlust von 25 % angesetzt.
- Variante 2a: Wie Variante 1. Zusätzlich wurde auf der gesamten Modellstrecke die Wehr- bzw. Turbinenbelüftung eingesetzt, wenn die Sauerstoffkonzentration im Oberwasser der jeweiligen Anlage unter 3 mg/L fiel. Der Wehrüberfall bzw. die Turbinenbelüftung wurden dann so gesteuert, dass im Unterwasser 6 mg/L erzielt wurden.
- Variante 2b: Wie Variante 2a. Allerdings war für den Beginn der zusätzlichen Belüftungsmaßnahmen entscheidend, ob 3 mg/L an einer Stelle des Modellbereichs unterschritten wurden und gleichzeitig im Oberwasser Konzentrationen kleiner 5 mg/L vorlagen.

Ökologische Wirksamkeit: In Tabelle 10.5 werden die minimalen Sauerstoffkonzentrationen in den einzelnen Stauhaltungen ohne und mit den einzelnen Belüftungsmaßnahmen verglichen. Abbildung 10.20 zeigt die zeitlichen Verläufe der Sauerstoffkonzentrationen im Oberwasser der Stauanlagen Hofen, Poppenweiler und Besigheim für die Nullvariante, Variante 1 und Variante 2b. Zur weiteren Veranschaulichung werden in Abbildung 10.21 die Sauerstoffkonzentrationen dieser drei Varianten im Längsprofil verglichen. Hierbei wurde der Zeitpunkt gewählt, bei dem in der Nullvariante durchschnittlich die minimalen Konzentrationen auf der Modellstrecke auftraten.

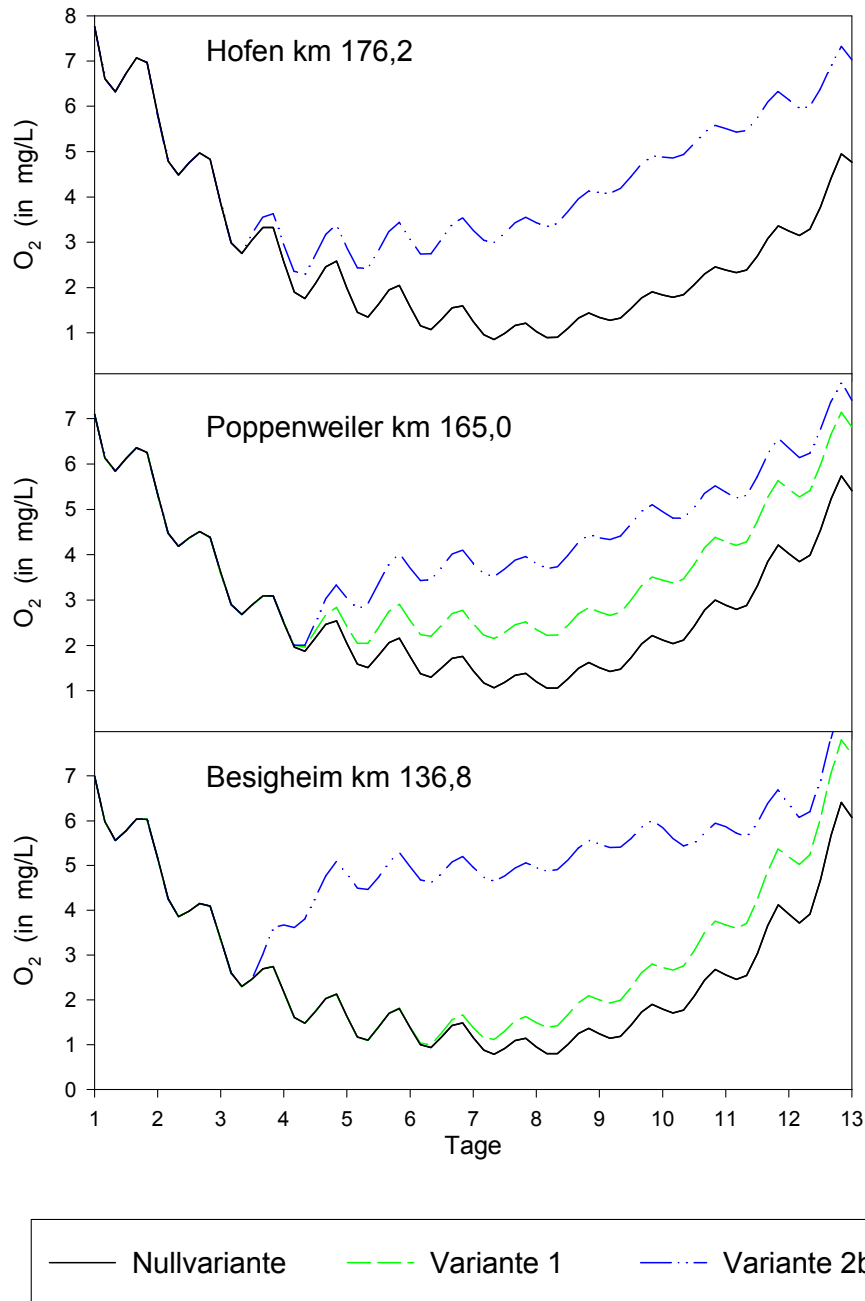


Abb. 10.20: Zeitlicher Verlauf der Sauerstoffkonzentration im Oberwasser der Stauanlagen Hofen, Poppenweiler und Besigheim für drei Variante von Szenario 2.

Alleine durch die Turbinenbelüftung in Hofen und Poppenweiler gemäß Variante 1 können die absoluten Minima unterhalb von Hofen abgefangen und zumindest auf der Strecke Hofen - Pleidelsheim katastrophale Sauerstoffdepressionen vermieden werden (Abb. 10.21, Tab. 10.5). Vor allem in Besigheim tritt die

Reaktion auf diese Maßnahmen jedoch erst sehr spät zu Tage, was auf die langen Fließzeiten zurückzuführen ist, die im vorliegenden Niedrigwasserszenario von Poppenweiler nach Besigheim über 5 Tage betragen. Zudem sind die Wirkungen, die alleine durch die mäßige Turbinenbelüftung erzielt werden können nicht für die gesamte Modelstrecke ausreichend. So können in Besigheim selbst nach Berücksichtigung der Verzögerung die Sauerstoffgehalte alleine durch die stützende Turbinenbelüftung nicht über 2 mg/L gehalten werden. Zudem treten bei dem vorliegenden Extremszenario auch oberhalb von Hofen Sauerstoffkonzentrationen unter 2 mg/L auf. Die absoluten Sauerstoffminima können durch die Turbinenbelüftung zwar aufgefangen werden, trotzdem wäre bei diesem Extremszenario bei alleiniger Turbinenbelüftung eine tiefgreifende Schädigung der aquatischen Lebensgemeinschaft auf weiten Bereichen der Fließstrecke nicht zu verhindern. Zum Schutz der Biozönose erscheinen im vorliegenden Fall daher zusätzliche Belüftungsmaßnahmen notwendig.

Im Sauerstoffreglement Neckar ist bei Unterschreiten von 3 mg/L vorgesehen, dass je etwa 1 m³/s des Abflusses über die Wehre abgeführt wird. Hierdurch können zumindest kleinräumig sauerstoffreiche Nischen für Fische geschaffen werden, die deren Überleben sicherstellen. Großräumig haben diese kleinen Überfallmengen jedoch nur geringe Auswirkungen. Zudem ist der Sauerstoffeintrag der dann zerstäubten Strahlen schwer zu quantifizieren. Daher wird hier als alternative, hypothetische Variante untersucht wie sich der Sauerstoffgehalt großräumig ändert, wenn bei Unterschreiten von 3 mg/L neben der Turbinenbelüftung auch Wehrbelüftung mit größeren Wassermengen betrieben wird. Hierbei wurden der Wehrüberfall und die Leistungsminderung bei der Turbinenbelüftung so dosiert, dass im Unterwasser jeweils 6 mg/L Sauerstoff erreicht wurden. Es wurde also nicht der gesamte Abfluss über die Wehre geführt, so dass zumindest noch ein Teil zur Energieerzeugung zur Verfügung stand.

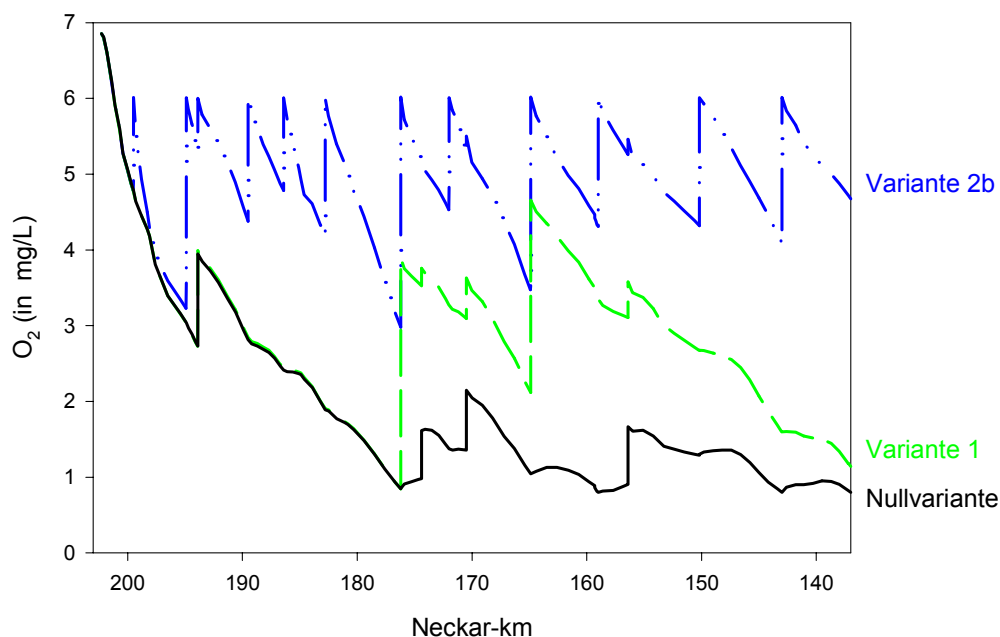


Abb. 10.21: Längsprofile der Sauerstoffkonzentration verschiedener Belüftungsvarianten von Szenario 2.

Durch die zusätzlichen Belüftungsmaßnahmen kann eine deutliche Aufstockung der Sauerstoffgehalte auf der gesamten Fließstrecke erreicht werden. Zu beachten ist, dass in Aldingen und Marbach mit der Variante 1 höhere Minima erzielt werden als mit den Varianten 2a und 2b. Dies ist dadurch bedingt, dass bei den Varianten 2a und 2b an den Wasserkraftanlagen Hofen und Poppenweiler nur Aufstockungen auf 6 mg/L vorgenommen wurden, was durch Leistungsverluste von weniger als 25% erreicht werden konnte. Bei Variante 2a treten insbesondere in Hofen, Poppenweiler und Hessigheim nach wie vor als sehr kritisch einzuschätzende Sauerstoffgehalte auf. Dies ist wiederum auf die Reaktionszeiten auf Belüftungsmaßnahmen an den oberstromigen Stauanlagen zurückzuführen. Setzt die Belüftung erst dann ein, wenn

im Oberwasser 3 mg/L unterschritten werden, können an der nachfolgenden Stauanlage bereits sehr starke Sauerstoffdepressionen auftreten, bevor die infolge der Fließzeit verzögerten Belüftungsmaßnahmen dort zum Tragen kommen. Dieses Problem kann in Variante 2b weitgehend beseitigt werden, indem die Belüftungsmaßnahmen beginnen, sobald 3 mg/L irgendwo auf der Strecke unterschritten werden. Dies stellt nochmals die Bedeutung des Timings für die Belüftung heraus und verdeutlicht, dass wesentliche Verbesserungen erzielt werden können, wenn sich die Belüftung an den minimalen Sauerstoffgehalten im Abschnitt orientiert und nicht nur an jenen im Oberwasser der jeweiligen Stauanlage.

Durch die Aufstockung auf 6 mg/L können die Sauerstoffminima abgefangen werden und bei voller Wirksamkeit der Belüftungsmaßnahmen nahezu im gesamten Modellbereich Konzentrationen über 4 mg/L gewährleistet werden. Kurzzeitige extremere Minima sind auf die zeitliche Verzögerung bei der Wirkung der Belüftungsmaßnahmen zurückzuführen. Lediglich in den unteren Bereichen der Stauhaltungen Oberesslingen, Hofen und Poppenweiler können infolge der langen Fließwege von der nächstgelegenen oberstromigen Anlage auch dauerhaft Konzentrationen kleiner 4 mg/L auftreten.

Offenkundig würde eine Aufhöhung der Sauerstoffgehalte auf 6 mg/L an den Wehranlagen selbst unter den sehr extremen Bedingungen des Szenarios 2 ausreichen, um im Neckarabschnitt oberhalb der Enzmündung eine nachhaltige Schädigung der aquatischen Biozönose abzuwenden. Zur weiteren Optimierung der Belüftungsmaßnahmen könnte der zu erreichende Zielwert im Unterwasser in Abhängigkeit von der jeweiligen Fließstrecke gewählt werden. Im Bereich zwischen Oberesslingen und Cannstatt wäre beispielsweise eine Aufstockung auf 5 mg/L ausreichend, während an den Wehren Deizisau, Cannstatt und Aldingen aufgrund der langen unterstromigen Stauhaltungen eventuell Zielwerte über 6 mg/L sinnvoll wären.

10.6.4 Diskussion der Belüftungsmaßnahmen

Prinzipiell bergen Turbinen- und Wehrbelüftung zusammen genügend Belüftungspotenzial, um selbst unter extremsten Bedingungen ausreichende Sauerstoffgehalte auf der gesamten Fließstrecke zwischen Deizisau und Besigheim zu gewährleisten. Die Belüftungsmaßnahmen bedingen allerdings Kosten infolge der Leistungsminderung bei den Wasserkraftanlagen. Die Kosten hängen in hohem Maße von den zu erreichenden Zielkonzentrationen im Unterwasser ab. An den drei Anlagen, an denen alternativ Turbinen- oder Wehrbelüftung betrieben werden kann, stellt die Turbinenbelüftung die wirtschaftlichere Variante dar. Da die Potenziale der Turbinenbelüftung unter realistischen Bedingungen für fachlich sinnvolle Zielwerte ausreichen, sollte der Turbinenbelüftung soweit möglich der Vorzug vor der Wehrbelüftung gegeben werden.

Bei einem realitätsnahen Szenario, wie es in ähnlicher Weise in den Jahren 1997 und 1998 auftrat, ist die mäßige Turbinenbelüftung in Hofen und Poppenweiler notwendig und ausreichend, um die ökologisch als notwendig erachteten Sauerstoffgehalte zu gewährleisten. Dies bestätigt die Sinnhaftigkeit der im Sauerstoffreglement für 4 mg/L im Abschnitt Hofen – Besigheim vorgesehenen Stützungsmaßnahmen.

Bei einem Extremszenario, das so bislang nicht beobachtet wurde, wären darüber hinaus zusätzliche Belüftungsmaßnahmen an anderen Stauanlagen erforderlich, um die Biozönose zu schützen. Relativ kleine sauerstoffreichere Bereiche wären durch die im Sauerstoffreglement geforderte Wehrüberfallmenge von 1 m³/s gewährleistet. Durch einen Zielwert von 6 mg/L im Unterwasser der Stauanlagen könnten auf der gesamten Fließstrecke ausreichende Sauerstoffgehalte sichergestellt werden. Hierzu wären jedoch größere Überfallmengen erforderlich, wenngleich bei weitem nicht der gesamte Abfluss über die Wehre geleitet werden müsste (siehe Anhang E).

Neben dem Ausmaß der Belüftung ist vor allem das richtige Timing bei der Initiierung der Maßnahmen wichtig, um extreme Sauerstoffminima zu vermeiden. Ist die Sauerstoffdepression auf Stoßbelastungen, wie Mischwasserentlastungen zurückzuführen, wird das Sauerstoffminimum mit dem Belastungsstoß transportiert. In diesem Fall kann man sich bei der Entscheidung über Belüftungsmaßnahmen an der aktuellen Sauerstoffkonzentration am Belüftungspunkt orientieren. Extreme Minima treten aber zumeist in Kombination oder nahezu ausschließlich infolge des Zusammenbruchs von Algenblüten auf, wie dies auch in den vorliegenden Szenarien untersucht wurde. In diesem Fall sollte sich die Steuerung der Belüftungsmaßnahmen am Sauerstoffminimum im betrachteten Gewässerabschnitt orientieren und nicht ausschließlich an der aktuellen Konzentration am potenziellen Belüftungspunkt. Daher ist die intensiviertere

Überwachung des Gewässers, wie sie das Sauerstoffreglement ab Konzentrationen von 4,5 mg/L vorsieht, von besonderer Wichtigkeit.

10.7 Folgerungen und Ausblick

Bei den gegebenen morphologischen Verhältnissen kommen als nachhaltige Maßnahmen zur weiteren Verbesserung bzw. Stabilisierung des Sauerstoffhaushalts prinzipiell die Begrenzung des Algenwachstums und die weitere Verringerung der Primärbelastung in Betracht.

Die weitere Reduktion der Primärbelastung birgt bestenfalls mäßige Potenziale zur Stabilisierung des Sauerstoffgehalts während kritischer Situationen. Maßnahmen zur Senkung der Zehrstoffemissionen aus den Kläranlagen sind alleine sicherlich nicht ausreichend, um extreme Sauerstoffdepressionen zukünftig gänzlich zu unterbinden.

Die meisten der denkbaren Vorgehensweisen zur Begrenzung des Algenwachstums bergen nur kleine Potenziale, deren Auswirkungen kaum im nachweisbaren Bereich sein dürften. Hierzu zählen die „top down“ Kontrolle über das Nahrungsnetz oder die Beschattung des Neckars und insbesondere seiner Nebengewässer durch Ufergehölze (vgl. Kapitel 5.4). Eine Limitierung des Algenwachstums über die Verfügbarkeit des Nährstoffs Phosphor scheint aber zumindest langfristig im Bereich des Möglichen. Hierbei ist auch zu berücksichtigen, dass diffuse Phosphoreinträge während der als kritisch zu betrachtenden Niedrigwasserzeiten von untergeordneter Bedeutung sind, so dass eine Minderung der punktuellen Einleitungen den entsprechenden Erfolg zeigen könnte. Allerdings sind exakte Prognosen zu den erforderlichen Phosphatkonzentrationen aufgrund der Problematik in Bezug auf die Halbsättigungskonstanten nicht möglich.

Für eine längerfristige nachhaltige Lösung der Sauerstoffprobleme im schiffbaren Neckar, sollten daher sowohl die Nährstoff- als auch die Zehrstoffemissionen im finanziell vertretbaren Rahmen weiter gesenkt werden. Alternativen für nachhaltig wirksame Maßnahmen sind bei den gegenwärtigen morphologischen und hydrologischen Verhältnissen nicht gegeben.

Die episodisch und kurzzeitig auftretenden Sauerstoffdepressionen können wirkungsvoll mit Hilfe von Turbinen- und oder Wehrbelüftungsmaßnahmen abgeschwächt werden. So lange eine nachhaltige Stabilisierung der Sauerstoffverhältnisse nicht gewährleistet werden kann, stellen diese Belüftungsmaßnahmen eine effektive Symptombekämpfung dar. Das neue Sauerstoffreglement, das ab Sauerstoffgehalten unter 4 mg/L auf der Strecke Hofen - Besigheim Turbinenbelüftungsmaßnahmen vorsieht, scheint ein geeignetes und kosteneffizientes Instrument, um unter realistischen Voraussetzungen die ökologischen Mindestanforderungen an den Sauerstoffgehalt zu gewährleisten.

Verbesserungspotenziale bestehen vor allem hinsichtlich der zeitlichen Optimierung beim Einsatz der Belüftungsmaßnahmen. Eine zeitlich wie mengenmäßig optimierte Steuerung der Belüftungsmaßnahmen würde ein operationelles Echtzeit Vorhersagemodell erfordern. Prinzipiell müsste dieses auf Messdaten für Chl-a, die Wassertemperatur, Sauerstoff, Nährstoffe und Abfluss am oberen Modellrand sowie auf Prognosen hinsichtlich der meteorologischen Bedingungen basieren. Von herausragender Bedeutung sind hierbei zeitlich hoch auflösende Chlorophyll Werte und zuverlässige Prognosen für den Bewölkungsgrad bzw. die zu erwartende Strahlung. Quasi kontinuierliche Chlorophyll Werte könnten beispielsweise durch Fluoreszenzmessungen gewonnen werden. Als Modellrand könnte Hofen gewählt werden, da der Neckarabschnitt Hofen - Besigheim besonders gefährdet ist. Auf Grundlage der flussbezogenen Messdaten und der meteorologischen Vorhersagen könnten mit dem BWQM bei Niedrigwasser schon jetzt die zu erwartenden Sauerstoffgehalte mehrere Tage im voraus prognostiziert werden. Ein operationeller Einsatz auf dessen Basis Belüftungsmaßnahmen eingeleitet werden, würde jedoch eine höhere als die aktuell verfügbare Vorhersagegenauigkeit erfordern. Allerdings wäre ein Einsatz in Ergänzung zu den Online Messungen denkbar, um prognostische Warnungen für mögliche Zielwertunterschreitungen zu geben und gegebenenfalls Maßnahmen zu einer intensivierten Überwachung rechtzeitig einzuleiten.

LITERATURVERZEICHNIS

- Alf, A., 1991. Die biologisch-ökologische Zustandsentwicklung des Neckars seit 1970. In: G. Müller (Hrsg.), 3. Neckar-Umweltsymposium. Heidelberger Geowissenschaftliche Abhandlungen Band 48, Heidelberg, pp. 74 - 84.
- Aller, R.C., 2001. Transport and Reactions in the Bioirrigated Zone. In: B.P. Boudreau und B.B. Jorgensen (Hrsg.), *The Benthic Boundary Layer - Transport Processes and Biogeochemistry*. Oxford University Press, Oxford, pp. 269-301.
- Al-Saffar, A.M., 1964. Eddy Diffusion and Mass Transfer in Open-Channel Flow. Ph.D. Thesis, University of California, at Berkley, Berkley.
- Ambrose, R.B., Barnwell, T.O., McCutcheon, S.C. und Williams, J.R., 1996. Computer models for water quality analysis. In: L.W. Mays (Hrsg.), *Water resources Handbook*. McGraw-Hill, New-York, Chapter 14.
- Ambrose, R.B., Wool, T.A., Connolly, J.P. und Schanz, R.W., 1988. WASP4, A Hydrodynamic and Water Quality Model - Model Theory, User's Manual and Programmer's Guide. EPA/600/3-87/039, US Environmental Protection Agency, Athens.
- Anonymos, 1997. Human- und ökotoxikologische Bewertung von Markierungsmitteln in Gewässern. *Grundwasser*, **2/97**: 61 - 64.
- Appelo, C.A.J. und Postma, D., 1993. *Geochemistry, groundwater and pollution*. A. A. Balkema, Rotterdam, 536 pp.
- Archer, D. und Devol, A., 1992. Benthic oxygen fluxes in the Washington shelf and slope: a comparison of in situ microelectrode and chamber flux measurements. *Limnology and Oceanography*, **37**: 614-629.
- Arya, S.P., 1988. *Introduction to Micrometeorology*. International Geophysics Series, 42. Academic Press, San Diego.
- ATV, 1998. *ATV Gewässergütemodell - Handbuch*, Abwassertechnische Vereinigung, Hennef.
- ATV-Landesgruppe Baden-Württemberg, 1996. *Kläranlagen Nachbarschaften Baden-Württemberg 1996 - Mit 22. Leistungsvergleich kommunaler Kläranlagen*. Kohlhammer, Stuttgart, 427 pp.
- Auer, M.T. und Effler, S.W., 1990. Calculation of Daily Average Photosynthesis. *Journal of Environmental Engineering*, **116**(2): 412-417.
- Avery, S.T. und Novak, P., 1978. Oxygen Transfer at Hydraulic Structures. *Journal of the Hydraulics Division*, **104**(11): 1521-1540.
- Bachman, V., Usseglio-Polaterra, P. und Moreteau, J.C., 1997. Oxygen budget and biological processes in the regulated rivers Moselle and Saar: contribution of the benthic compartment, CREUM, Metz.
- Backhaus, D. und Matthias, U., 1997a. *Biologische Freiwasseruntersuchungen Rhein - Neckar - Donau - Berichtsjahr 1994*, Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe.
- Backhaus, D. und Matthias, U., 1997b. *Biologische Freiwasseruntersuchungen Rhein - Neckar - Donau. Berichtsjahre 1995 - 1996*. Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe.
- Backhaus, D., 1980. *Phytoplanktonuntersuchungen im Freiwasser des Neckars*. In: LfU Baden-Württemberg (Hrsg.), *Untersuchungen über den Gewässergütezustand des Neckars*, Karlsruhe, pp. 170 - 229.
- Baden-Württemberg, 1998. *Statistik von Baden-Württemberg; Daten zur Umwelt*, Statistisches Landesamt Baden-Württemberg, Stuttgart.
- Bannister, T.T., 1974. Prediction equations in terms of chlorophyll concentration, quantum yield, and upper limit of production. *Limnology and Oceanography*, **19**(1): 1-12.
- Barczewski, B., Käß, W., Schmid, G. und Werner, A., 1996. Neue Möglichkeiten und Anwendungen der Grundwassermarkierungstechnik. *Wasserwirtschaft*, **86**(1): 20-24.

- Baumert, H., 1996. On the Theory of Photosynthesis and Growth in Phytoplankton. Part I: Light Limitation and Constant Temperature. *Internationale Revue der gesamten Hydrobiologie*, **81**(1): 309-339.
- Beck, M.B., 1987. Water Quality Modeling: A Review of the Analysis of Uncertainty. *Water Resources Research*, **23**(8): 1393-1442.
- Behrendt, H., 1993. Point and Diffuse Loads of Selected Pollutants in the River Rhine and its Main Tributaries. RR 93-1, International Institute of Applied System Analysis, Laxenburg.
- Behrendt, H., Huber, P., Ley, M., Opitz, D., Schmoll, O., Scholz, G. und Uebe, R., 1999. Nährstoffbilanzierung der Flussgebiete Deutschlands. 296 25 515, Umweltbundesamt, Berlin.
- Beiche, O., 1968. Die Fertigstellung der Neckarkanalisation. *Wasserwirtschaft*, **58**(8): 234 - 239.
- Belsley, D.A., 1991. Conditioning diagnostics: Collinearity and weak data in regression. John Wiley, New York.
- Benndorf, J., 1995. Possibilities and limits for controlling eutrophication by biomanipulation. *Internationale Revue der gesamten Hydrobiologie*, **80**: 519-534.
- Bergemann, M., Blöcker, G., Harms, H., Kerner, M., Meyer-Nehls, R., Petersen, W. und Schroeder, F., 1996. Der Sauerstoffhaushalt der Tideelbe. *Die Küste*, **58**: 199 - 261.
- Berner, R.A., 1980. Early Diagenesis - A Theoretical Approach. Princeton Series in Geochemistry. Princeton University Press, Princeton, 241 pp.
- Beyl, R., 1991. Abwasserbehandlung im Neckareinzugsgebiet. In: G. Müller (Hrsg.), 3. Neckar-Umweltsymposium. Heidelberger geowissenschaftliche Abhandlungen Band 48, Heidelberg, pp. 30 - 38.
- Bin, A.K., 1988. Minimum air entrainment velocity of vertical plunging liquid jets. *Chemical Engineering Science*, **43**: 379-389.
- Bin, A.K., 1993. Gas Entrainment by Plunging Liquid Jets. *Chemical Engineering Science*, **48**(21): 3585-3630.
- Biswas, H., 1997. Technical Guidance Manual For Developing Total Maximum Daily Loads. Book 2: Streams and Rivers. Part 1: Biochemical Oxygen Demand / Oxygen And Nutrients / Eutrophication. 16.823B97002, U.S. Environmental Protection Agency, Washington.
- Blackburn, T.H. und Blackburn, N.D., 1993. Rates of microbial processes in sediments. *Philosophical Transactions of the Royal Society London - A*, **344**: 49-58.
- Blackburn, T.H., Blackburn, N.D., Jensen, K. und Risgaard-Petersen, N., 1994. Simulation Model of the Coupling between Nitrification and Denitrification in a Freshwater Sediment. *Applied and Environmental Microbiology*, **60**(9): 3089-3095.
- BMU, 1998. Stand und Einsatz mathematisch-numerischer Modelle in der Wasserwirtschaft, Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Bonn.
- Boes, M., 1975. Ein biozönotisches Modell zur Simulation des Sauerstoffhaushalts von Fließgewässern. *gwf - Wasser / Abwasser*, **116**(9): 399-407.
- Boes, M., Springer, U., Stark, J. und Traub, R., 1977. Biozönotisches Modell. Prognostisches Modell Neckar, Bericht 17, Dornier Systems, Friedrichshafen.
- Borchardt, D. und Geffers, K., 1999. Nähr und Zehrstoffbilanz für Neckar und Lahn. In: S. Fuchs und H.H. Hahn (Hrsg.), Schadstoffe im Regenabfluß IV Abschlußpräsentation des BMBF-Verbundprojektes Niederschlag. Oldenbourg, München, pp. 108-127.
- Borchardt, D. und Reichert, P., 2001. River Water Quality Model No. 1 (RWQM1): Case Study I. Compartmentalisation Approach applied to Oxygen Balances in the River Lahn (Germany). *Water Science and Technology*, **43**(5): 41-49.
- Borchardt, D., 1999. Gewässergütemodellierung - Stand und Perspektiven, Mathematische Modelle in der Gewässerkunde. BfG Mitteilungen, Koblenz, pp. 95-104.
- Boudreau, B.P., 1997. Diagenetic Models and Their Implementation - Modelling Transport and Reactions in Aquatic Sediments. Springer-Verlag, Berlin.

- Boudreau, B.P., 2001. Solute Transport Above the Sediment-Water Interface. In: B.P. Boudreau und B.B. Jorgensen (Hrsg.), *The Benthic Boundary Layer - Transport Processes and Biogeochemistry*. Oxford University Press, Oxford, pp. 104-126.
- Bouldin, D., 1968. Models for describing the diffusion of oxygen and other mobile constituents across the mud-water interface. *Journal of Ecology*, **56**: 77-87.
- Bowman, G.T. und Delfino, J.J., 1980. Sediment oxygen demand techniques: a review and comparison of laboratory and in situ systems. *Water Research*, **14**: 491 - 499.
- Brehm, J. und Meijering, M.P.D., 1990. *Fließgewässerkunde*. Biologische Arbeitsbücher, 36. Quelle & Meyer Verlag, Heidelberg, 295 pp.
- Brenan, K.E., Campbell, S.L. und Petzold, L.R., 1989. Numerical solution of initial-value problems in differential algebraic equations. North-Holland, New-York.
- Brown, L.C. und Barnwell, T.O., 1987. The Enhanced Stream Water Quality Model QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and User Model. EPA/600/3-87/007, U.S. Environmental Protection Agency, Athens.
- Brumley, B., 1984. Turbulence measurements near the free surface in stirred grid experiments. In: W. Brutsaert und G.H. Jirka (Hrsg.), *Gas transfer at the water surface*. Reidel, Boston, pp. 83-92.
- Brun, R., Reichert, P. und Künsch, H.R., 2001. Practical identifiability analysis of large environmental models. *Water Resources Research*, **37**(4): 1015 - 1030.
- Burns, N.M. und Rosa, F., 1980. In situ measurement of the settling velocity of organic carbon particles and 10 species of phytoplankton. *Limnology and Oceanography*, **25**: 855-864.
- Butts, T.A. und Evans, R.L., 1983. Effects of channel dams on dissolved oxygen concentrations in north-western Illinois streams. Circular 132, State of Illinois, Water Survey, Urbana.
- Cai, W.J., Reimers, C.C. und Shaw, T., 1995. Microelectrode studies of organic carbon degradation and calcite dissolution at California continental rise site. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **59**: 497-511.
- Campolongo, F. und Saltelli, A., 1997. Sensitivity analysis of an environmental model: An application of different analysis methods. *Reliability Engineering and System Safety*, **57**: 49-69.
- Canale, R.P. und Vogel, A.H., 1974. Effects of Temperature on Phytoplankton Growth. *Journal of the Environmental Engineering Division*, **100**: 231-241.
- Canale, R.P., Owens, E.M., Auer, M.T. und Effler, S.W., 1995. Validation of Water-Quality Model for Seneca River, N.Y. *Journal of Water Resources Planning and Management*, **121**(3): 241-250.
- Caracao, N.E., Cole, J.J., Raymond, P.A., Strayer, D.L., Pace, M.L., Findlay, S.E. und Fischer, D.T., 1997. Zebra mussel invasion in a large turbid river: Phytoplankton response to increased grazing. *Ecology*, **78**(2): 588 - 602.
- Chanson, H. und Cummings, P.D., 1994. An Experimental Study on Air carryunder Due to a Plunging Liquid Jet. *International Journal of Multiphase Flow*, **20**(3): 667-670.
- Chanson, H., 1994. *Hydraulic Design of Stepped Cascades, Channels, Weirs and Spillways*. Pergamon, Oxford, 261 pp.
- Chapra, S.C., 1997. *Surface Water-Quality Modeling*. McGraw-Hill, New York, 844 pp.
- Chatterje, S. und Price, B., 1995. *Praxis der Regressionsanalyse*. Lehr- und Handbücher der Statistik. Oldenbourg, München.
- Chaudry, M.H., 1993. *Open-channel flow*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs.
- Chiaro, P.S. und Burke, D.A., 1980. Sediment Oxygen Demand and Nutrient Release. *ASCE Journal of the Environmental Engineering Division*, **EE1**: 177-195.
- Chow, V.T., 1959. *Open-channel hydraulics*. McGraw-Hill, New York.
- Christoffels, E., 2001. Ein Instrument zur Unterstützung wasserwirtschaftlicher Planungsaufgaben am Beispiel der Erft. *KA - Wasserwirtschaft, Abwasser, Abfall*, **48**(7).
- Chrost, R.J., 1988. Phosphorous and microplankton development in an eutrophic lake. *Acta Mikrobiologica Polnica*, **37**: 205-225.

- Churchill, M.A., Elmore, H.L. und Buckingham, R.A., 1962. The Prediction of Stream Reaeration Rates. *Journal of the Sanitary Engineering Divison*, **88**: 1-46.
- Cirpka, O., 1992. Experimentelle Bestimmung und mathematische Beschreibung des Sauerstoffaustausches über die Fließwasser Oberfläche am Beispiel der Glatt. Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH), Karlsruhe, 159 pp.
- Cirpka, O., Reichert, P., Wanner, O., Müller, S.R. und Schwarzenbach, R.P., 1993. Gas exchange at river cascades: Field experiments and model calculations. *Environmental Science and Technology*, **27**(10): 2086-2097.
- Clanet, C. und Laheras, J.C., 1997. Depth of penetration of bubbles entrained by a plunging water jet. *Physics of Fluids*, **9**(7): 1864-1866.
- Clasen, J., Harres, H.-P., Müller, D., Schreiner, H. und Seuffert, O., 1997. Wasserwirtschaftliche Bedeutung von Festlegung und Freisetzung von Nährstoffen durch Sedimente in Fließgewässern. DVWK-Schriften, 115, Bonn, 90 pp.
- Cleveland, W.S., 1979. Robust locally weighted regression and smoothing scatterplots. *Journal of the American Statistical Association*, **74**: 829-836.
- Coveney, M.F. und Wetzel, R.G., 1995. Biomass, production, and specific growth rate of bacterioplankton and coupling to phytoplankton in an oligotrophic lake. *Limnology and Oceanography*, **40**(7): 1187-1194.
- Cummings, P.D. und Chanson, H., 1997a. Air Entrainment in the Developing Flow Region of Plunging Jets-Part 1: Theoretical Development. *Journal of Fluids Engineering*, **119**: 597-602.
- Cummings, P.D. und Chanson, H., 1997b. Air Entrainment in the Developing Flow Region of Plunging Jets-Part 2: Experimental. *Journal of Fluids Engineering*, **119**: 603-608.
- Cummings, P.D. und Chanson, H., 1999. An Experimental Study of Individual Air Bubble Entrainment at a Planar Plunging Jet. *Institution of Chemical Engineers*, **77**(A): 159-164.
- Cunge, J.A., Holly, F.M. und Verwey, A., 1980. Practical Aspects of Computational River Hydraulics. Putman Publishing Limited, London.
- Danckwerts, P.V., 1951. Significance of Liquid-Film Coefficients in Gas Absorption. *Industrial Engineering Chemistry*, **43**(6): 1460-1467.
- Danish Hydraulic Institute, 1992. Mike11 User Manual, Danish Hydraulic Institute, Lyngby, Denmark.
- Deacon, E.L., 1977. Gas Transfer To and Across an Air-Water Interface. *Tellus*, **29**: 363-374.
- DeWitt, M.J.M. und Pebesma, E.J., 2001. Nutrient fluxes at the river basin scale. II: the balance between data availability and model complexity. *Hydrological Processes*, **15**: 761-775.
- DeWitt, M.J.M., 2000. Modelling nutrient fluxes from source to river load: a macroscopic analysis applied to the Rhine and Elbe basins. *Hydrobiologia*, **410**: 123-130.
- DiToro, D.M., 1978. Optics Of Turbid Estuarine Waters: Approximations And Applications. *Water Research*, **12**: 1059-1068.
- DiToro, D.M., Paquin, P.R., Subburamu, K. und Gruber, D.A., 1990. Sediment Oxygen Demand Model: Methane and Ammonia Oxidation. *Journal of Environmental Engineering*, **116**(5): 945-987.
- DiToro, M., 2001. Sediment Flux Modeling. John Wiley & Sons, New York, 624 pp.
- Dixon, W. und Chiswell, B., 1996. Review of aquatic monitoring program design. *Water Research*, **30**: 1935-1948.
- Dobbins, W.E., 1964. BOD and Oxygen Relationships in Streams. *Journal of the Sanitary Engineering Divison*, **90**: 53-79.
- Dracos, T., 1990. Hydraulik. Verlag der Fachvereine, Zürich.
- Droppo, I.G., 2000a. Characteristics of suspended and bottom sediments in natural and engineered freshwater systems. #00-028, Environment Canada, National Water Research Institute, Burlington.
- Droppo, I.G., 2000b. The influence of floc size, density and porosity on sediment and contaminant transport. *IAHS Publications*, **263**: 141-147.
- Droppo, I.G., 2001. Rethinking what constitutes suspended sediment. *Hydrological Processes*, **15**: 1551-1564.

- Durbin, J. und Watson, G.S., 1951a. Testing for serial correlation in least squares regression I. *Biometrika*, **37**: 409 - 428.
- Durbin, J. und Watson, G.S., 1951b. Testing for serial correlation in least squares regression II. *Biometrika*, **38**: 159 - 178.
- DVWK, 1981. Beiträge zur Gewässerbeschaffenheit. DVWK Schriften, 45. Paul Parey, Hamburg, 186 pp.
- DVWK, 1990. Beurteilung der Aussagekraft des Biochemischen Sauerstoffbedarfs. DVWK Merkblätter, 218/1990. Paul Parey, Hamburg, 4 pp.
- DVWK, 1993. Aussagekraft von Gewässergüteparametern in Fließgewässern. DVWK Merkblätter, 227/1993. Paul Parey, Hamburg, 53 pp.
- Dyck, S. und Peschke, G., 1989. Grundlagen der Hydrologie. VEB Verlag für Bauwesen, Berlin, 408 pp.
- Dzombak, D.A. und Morel, F.M.M., 1990. Surface Complexation Modeling. Wiley, New York.
- Eck, B., 1966. Technische Strömungslehre. Springer-Verlag, Berlin, 466 pp.
- Emerson, S., 1975. Gas Exchange in Small Canadian Shield Lakes. *Limnology and Oceanography*, **20**: 754.
- Ervine, D.A. und Elsayy, E.M., 1975. The Effect of a Falling Nappe on River Aeration, XVIth Congress of the International Association for Hydraulic Research, Sao Paulo, Brazil, pp. 390-397.
- Ervine, D.A., McKeogh, E.J. und Elsayy, E.M., 1980. Effect of turbulence intensity on the rate of air entrainment by plunging water jets. Proceedings of the Institution of Civil Engineers, Part 2: 425-455.
- Esterby, S.R., 1996. Review of Methods for the Detection and Estimation of Trends with Emphasis on Water Quality Applications. *Hydrological Processes*, **10**: 127-149.
- Evans, G.M., Jameson, G.J. und Atkinson, B.W., 1992. Prediction of bubble size generated by a plunging liquid jet bubble column. *Chemical Engineering Science*, **47**: 3265-3272.
- Fickeisen, D.G. und Schneider, M.J. (Hrsg.), 1976. Gas bubble disease. Technical Information Center, U.S. ERDA, Oak Ridge.
- Fischer, H.B., 1967. The mechanics of dispersion in natural streams. *ASCE Journal of the Hydraulic Division*, **93**(6): 187 - 216.
- Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J. und Brooks, N.H., 1979. Mixing in Inland and Coastal Waters. Academic Press, New York, 483 pp.
- Förstner, U. und Müller, G., 1974. Schwermetalle in Flüssen und Seen als Ausdruck der Umweltverschmutzung. Springer Verlag, Berlin.
- Foster, N.W., Nicolson, J.A. und Hazlett, P.W., 1989. Temporal variation in nitrate and nutrient cations in drainage waters from a deciduous forest. *Journal of Environmental Quality*, **18**: 238-244.
- Friedl, G. und Wüest, A., 2002. Disrupting biogeochemical cycles - Consequences of damming. *Aquatic Sciences*, **64**: 55-65.
- Frimmel, F.H. und Gordalla, B.C. (Hrsg.), 1996. Gewässergütekriterien. Mitteilungen der Senatskommission für Wasserforschung, 13. VCH, Weinheim, 179 pp.
- Fry, V.A., Istok, J.D., Semprini, L., O'Reilly, K.T. und Buscheck, T.E., 1995. Retardation of Dissolved Oxygen Due to a Trapped Gas Phase in Porous Media. *Ground Water*, **33**(3): 391-398.
- Gaudy, A.F. und Gaudy, E.T., 1980. Microbiology for Environmental Scientists and Engineers. McGraw-Hill, New-York.
- Gelda, R.K., Effler, S.W. und Owens, E.M., 2001. River dissolved Oxygen Model with Zebra Mussel Oxygen Demand (ZOD). *Journal of Environmental Engineering*, **127**(9): 790-801.
- Goloway, F. und Bender, M., 1982. Diagenetic models of interstitial nitrate profiles in deep sea suboxic sediments. *Limnology and Oceanography*, **27**(4): 624-638.
- Gosselain, V., Descy, J.-P., Viroux, L., Joaquim-Justo, C., Hammer, A., Metens, A. und Schweitzer, S., 1998. Grazing by large river zooplankton: a key to summer potamoplankton decline ? The case of the Meuse and the Moselle rivers in 1994 & 1995. *Hydrobiologia*, **369/370**: 199-216.
- Graf, W.H., 1971. Hydraulics of sediment transport. McGraw-Hill, New York.

- Greiser, N., Ernst, A. und Spott, D., 1996. Biogener Einfluß auf den partikulären Schadstofftransport unter besonderer Berücksichtigung der Elbe. Teil 1. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, **40**(4): 154-163.
- Grimm-Strele, J., 1983. Diffusion und Dispersion in Flüssen. *Wasserwirtschaft*, **73**(11): 380 - 385.
- Guhr, H., Desortova, B., Spott, D., Bormki, G., Karrasch, B. und Baborowski, M., 1998. Nährstoffangebot und Chlorophyllentwicklung in der Elbe. *Vom Wasser*, **91**: 195 - 205.
- Gujer, W., 1999. Siedlungswasserwirtschaft. Springer-Verlag, Berlin, 410 pp.
- Gujer, W., Henze, M., Takashi, M. und vanLoosdrecht, M., 1999. Activated Sludge Model No. 3. *Water Science and Technology*, **39**(1): 183 - 193.
- Gulliver, J.S. und Rindels, A.J., 1993. Measurements of Air-Water Oxygen Transfer at Hydraulic Structures. *Journal of Hydraulic Engineering*, **119**(3): 327-349.
- Gulliver, J.S., Hibbs, D.E. und McDonald, J.P., 1997. Measurement of Effective Saturation Concentration for Gas Transfer. *Journal of Hydraulic Engineering*, **123**(2): 86-97.
- Gulliver, J.S., Thene, J.R. und Rindels, A.J., 1990. Indexing Gas Transfer in Self-Aerated Flows. *Journal of Environmental Engineering*, **116**(3): 503-523.
- Gulliver, J.S., Wilhelms, S.C. und Parkhill, K.L., 1998. Predictive Capabilities in Oxygen Transfer at Hydraulic Structures. *Journal of Hydraulic Engineering*, **124**(7): 664 - 671.
- Güss, S., 1998. Oxygen Uptake at the Sediment-water Interface Simultaneously Measured Using a Flux Chamber Method and Microelectrodes: Must a Diffusive Boundary Layer Exist? *Estuarine and Coastal Shelf Science*, **46**: 143-156.
- Güttlinger, H., 1980. Die Anwendung einer Fourier-Transformation zum Ausgleich von Saisonschwankungen bei der physikalisch-chemischen Charakterisierung von Fließgewässern. *Schweizer Zeitschrift für Hydrologie*, **42**(2): 309-321.
- Haag, I. und Westrich, B., 2002. Processes governing river water quality identified by principal component analysis. *Hydrological Processes*, (im Druck).
- Haag, I., Kern, U. und Westrich, B., 1999a. Kombinierte Bewertung kontaminierter Gewässersedimente: Tiefenabhängige Messung von Erosionsrisiko und Sedimentqualität. *Wasser & Boden*, **51**(5): 42-47.
- Haag, I., Kern, U. und Westrich, B., 1999b. Mobilität von Schadstoffen in den Sedimenten staugeregelter Flüsse - Dynamik und Bilanzierung von Schwebstoffen in einer Stauhaltungskette. 99/11 (VA 21), Universität Stuttgart, Institut für Wasserbau, Stuttgart.
- Haag, I., Kern, U. und Westrich, B., 2000a. Erosive Freisetzung von partikulären Stoffen aus Gewässersedimenten - Quantifizierung mit Hilfe der Quellkomponenten-Mischungsanalyse. *Hydrologie und Wasserbewirtschaftung*, **44**(5): 235-244.
- Haag, I., Kern, U. und Westrich, B., 2000b. Modellgestützte Optimierung des Einsatzes finanzieller Mittel bei der Gewässergütebewirtschaftung des Neckars. In: F. Horsch (Hrsg.), Statuskolloquium BWPLUS - Diskussionskreis Wasser und Boden, Karlsruhe.
- Haag, I., Kern, U. und Westrich, B., 2001a. Erosion investigation and sediment quality measurements for a comprehensive risk assessment of contaminated aquatic sediments. *Science of the Total Environment*, **266**: 249-257.
- Haag, I., Moritz, K., Bittersohl, J. und Lischeid, G., 2001b. Factors controlling total concentration and aqueous speciation of aluminium in an acidic headwater stream of the Bavarian Forest National Park: a modelling approach. *Acta hydrochimica et hydrobiologica*, **29**(4): 206-218.
- Haag, I., Moritz, K., Bittersohl, J. und Müller, H.E., 1999c. Dynamik des Säure-Base-Zustandes im Markungsgraben, Nationalpark Bayerischer Wald. *Wasser & Boden*, **51**(3): 50 - 53.
- Habermann, W.L. und Morton, R.K., 1954. An Experimental Study of Bubbles Moving in Liquids. *Proceedings of the American Society of Civil Engineering*, **80**: 379-427.
- Hall, P.O.J., Anderson, L.G., Rutgers van der Loeff, M.M., Sundby, B. und Westerlund, S.F.G., 1989. Oxygen uptake kinetics in the benthic boundary layer. *Limnology and Oceanography*, **34**(4): 734 - 746.

- Hanisch, H., 1979. Naturmessungen über den Sauerstoffeintrag an verschiedenen Wehrformen. In: H. Hanisch und H. Kobus (Hrsg.), Natur- und Modellmessungen zum künstlichen Sauerstoffeintrag in Flüsse. DVWK, Darmstadt, pp. 91-104.
- Harris, G.P. und Piccinin, B.B., 1977. Photosynthesis by Natural Phytoplankton Populations. *Archiv für Hydrobiologie*, **80**(4): 405-457.
- Harris, G.P., 1978. Photosynthesis, productivity and growth: The physiological ecology of phytoplankton. *Archiv für Hydrobiologie - Beiheft Ergebnisse der Limnologie*, 10. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 171 pp.
- Helsel, D.R. und Hirsch, R.M., 1992. *Statistical Methods in Water Resources*. Studies in Environmental Science. Elsevier, Amsterdam, 522 pp.
- Henderson, F.M., 1966. *Open channel flow*. Macmillan, New York.
- Hertel, R. und Lehmann, M., 2000. Beschaffenheit der Fließgewässer Baden-Württemberg - Jahresdaten-katalog 1998. Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe.
- Herzfeld, M., Hamilton, D.P. und Douglas, D.P., 2001. Comparison of a mechanistic sediment model and a water column model for hindcasting oxygen decay in benthic chambers. *Ecological Modelling*, **136**: 255 - 267.
- Hibbs, D.E., Parkhill, K.L. und Gulliver, J.S., 1998. Sulfur Hexafluoride Gas Tracer Studies In Streams. *Journal of Environmental Engineering*, **124**(8): 752-760.
- Higbie, R., 1935. The Rate of Absorption of a Pure Gas into a Still Liquid During Short Periods of Exposure. *Transactions of the American Institute of Chemical Engineering*, **31**: 365-389.
- Hirsch, R.M., Alexander, R.B. und Smith, R.A., 1991. Selection of Methods for the Detection and Estimation of Trends in Water Quality. *Water Resources Research*, **27**(5): 803-813.
- Hoffmann, M., 1980. Biologischer Sauerstoffumsatz im Neckar. In: LfU Baden-Württemberg (Hrsg.), Untersuchungen über den Sauerstoffhaushalt des Neckars. Studien zum Gewässerschutz, Karlsruhe, pp. 4-195.
- Hoffmann, M., Pinter, I. und Schmitz, W., 1980. Untersuchungen über den Sauerstoffhaushalt des Neckars. Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe, 276 pp.
- Hoffmann, W.M., 1977. Biologischer Sauerstoffumsatz im Neckar. Prognostisches Modell Neckar, Bericht 20a, Dornier Systems, Friedrichshafen.
- Hondzo, M., 1998. Dissolved oxygen transfer at the sediment-water interface in a turbulent flow. *Water Resources Research*, **34**(12): 3525-3533.
- Hooper, R.P., Christophersen, N. und Peters, N.E., 1990. Modelling Streamwater Chemistry as a Mixture of Soilwater End-Members – an Application to the Panola Mountain Catchment, Georgia, U.S.A. *Journal of Hydrology*, **116**: 321-343.
- Hoppe, A., 1992. Jahreszeitliche Entwicklung des Zooplanktons im Neckar. Diplomarbeit, Universität Heidelberg, Heidelberg, 131 pp.
- Horeni, P., 1956. Disintegration of a free jet of water in air. *Vyzkumny Ustav Vodohospodarsky Prace a Studie*, 93.
- Humborg, C., Conley, D.J., Rahm, L., Wulff, A., Cociasu, A. und Ittekkot, V., 2000. Silicon retention in river basins: far reaching effects on biogeochemistry and aquatic food webs in coastal marine environments. *Ambio*, **29**: 44-49.
- Humborg, C., Ittekkot, V., Cociasu, A. und von Bodungen, B., 1997. Effect of Danube River dam on Black Sea biogeochemistry and ecosystem structure. *Nature*, **386**: 385-388.
- Hunt, J.C.R., 1984. Turbulence Structure and Turbulent Diffusion near Gas-Liquid Interfaces. In: W. Brutsaert und G.H. Jirka (Hrsg.), *Gas Transfer at Water Surfaces*. Reidel, Dordrecht, pp. 67-82.
- Hutarew, A., 1977. Beitrag zur Beeinflussbarkeit des Sauerstoffgehaltes in Fließgewässern an Abstürzen und Wehren. *Mitteilungen des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart*, 41. Eigenverlag, Stuttgart, 124 pp.
- Hütter, L.A., 1990. *Wasser und Wasseruntersuchung*. Laborbücher. Salle + Sauerländer, Frankfurt am Main, 511 pp.

- Hynes, H.B.H., 1975. The stream and its valley. *Verhandlungen der Internationalen Vereinigung für Limnologie*, **19**: 1-15.
- Ivanov, P., Masliev, I., DeMarchi, C. und Somlyody, L., 1996. DESERT - Decision Support System for Evaluating River Basin Strategies. User's Manual, International Institute for Applied System Analysis, Laxenburg.
- Jähne, B. und Haußecker, H., 1998. Air-Water Gas Exchange. *Annual Review of Fluid Mechanics*, **30**: 443-468.
- Jahnke, R.A., R., E.S. und Murray, J.W., 1982. A model of oxygen reduction, denitrification, and organic matter mineralization in marine sediments. *Limnology and Oceanography*, **27**(4): 610-623.
- Jakeman, A.J. und Hornberger, G.M., 1993. How much complexity is warranted in a rainfall-runoff model? *Water Resources Research*, **29**(8): 2637-2649.
- Jantz, B. und Schöll, F., 1998. Größenzusammensetzung und Altersstruktur lokaler Bestände einer Zebrauschel-Flußpopulation - Untersuchungen am Rhein zwischen Basel und Emmerich (rh-km 168 - 861). *Limnologica*, **28**(4): 395-413.
- Jewson, D.H. und Wood, R.B., 1975. Some effects on integral photosynthesis of artificial circulation of phytoplankton through light gradients. *Verhandlungen der Internationalen Vereinigung für Limnologie*, **19**: 1037-1044.
- Jirka, G.H., 1994. Gasaustauschvorgänge an der Grenzfläche zwischen Luft and Wasser. *Österreichische Ingenieur- und Architekten- Zeitschrift*, **139**: 407-417.
- Jolliffe, I.T., 1986. Principal Component Analysis. Springer Series in Statistics. Springer-Verlag, New York, 271 pp.
- Jorgensen, S.E. (Hrsg.), 1979. Handbook of environmental data and ecological parameters. International Society for Ecological Modelling, Copenhagen.
- Josef, R., 2001. Extraktion von schlecht wasserlöslichen Schadstoffen mit hydraulischen Sanierungsverfahren, Mitteilungen, Heft 107. Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, Stuttgart.
- Josiam, R.M. und Stefan, H.G., 1999. Effect of flow velocity on sediment oxygen demand: comparison of theory and experiments. *Journal of the American Water Resources Association*, **35**(2): 433-439.
- Jubb, S., Guymer, I., Licht, G. und Prochnow, J., 2001. Relating oxygen demand to flow: development of an in situ sediment oxygen demand measurement device. *Water Science and Technology*, **43**(5): 203 - 210.
- Jury, W.A., Gardner, W.R. und Gardner, W.H., 1991. Soil Physics. John Wiley & Sons, New York, 328 pp.
- Karnahl, J., 1998. Kalibrierung und Anwendung eines numerischen Strömungsmodells für den Schiffbaren Neckar zwischen Plochingen und Mannheim. Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 98 pp.
- Käss, W., 1992. Geohydrologische Markierungstechnik. Lehrbuch der Hydrogeologie, 9. Gebrüder Bornträger, Berlin, 489 pp.
- Kasten, F., Dehne, K., Behr, H.D. und Bergholter, U., 1984. Die räumliche und zeitliche Verteilung der diffusen und direkten Sonnenstrahlung in der Bundesrepublik Deutschland. BMFT, München, 128 pp.
- Keller, R.G., 1979. Hydrologischer Atlas der Bundesrepublik Deutschland. Band 1 (Textband). DFG, Freiburg, 365 pp.
- Kendall, M.G., 1970. Rank correlation methods. Griffin, London, 202 pp.
- Kern, U. und Westrich, B. (Hrsg.), 1999. Methoden zur Erkundung, Untersuchung und Bewertung von Sedimentablagerungen und Schwebstoffen in Gewässern. Schriften, 128. DVWK, Bonn, 418 pp.
- Kern, U. und Westrich, B., 1995. Sediment contamination by heavy metals in a lock-regulated section of the River Neckar. *Marine and Freshwater Research*, **46**: 101-106.
- Kern, U., 1997. Transport von Schweb- und Schadstoffen in staugeregelten Fließgewässern am Beispiel des Neckars. Mitteilungen 93, Institut für Wasserbau, Stuttgart.
- Kern, U., Haag, I., Holzwarth, M., Schürlein, V. und Westrich, B., 1999. Ein Strömungskanal zur Ermittlung der tiefenabhängigen Erosionsstabilität von Gewässersedimenten: das SETEG-System. *Wasserwirtschaft*, **89**(2): 72-77.

- Kern, U., Haag, I., Westrich, B. und Kobus, H., 1999. Untersuchungen zur Beurteilung der Erosionsgefährdung der Sedimentablagerungen in der Stauhaltung Rheinau am Rhein. TB 99/01 (VA 19), Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart.
- Kern, U., Westrich, B. und Giesecke, J., 1996. Implementierung der Gewässerstrukturdaten des Neckars in das Modell AQUASIM. TB 96/21 (VA 8), Institut für Wasserbau der Universität Stuttgart, Stuttgart.
- Kerner, M. und Edelkraut, F., 1995. Decomposition of organic matter in aggregated seston from the Elbe estuary: redox dependency of reactivities and production of low molecular weight DOC compounds. *Marine Ecology Progress Series*, **123**: 281-293.
- Kerner, M. und Gramm, H., 1995. Changes in oxygen consumption at the sediment-water interface formed by settling seston from the Elbe estuary. *Limnology and Oceanography*, **40**(3): 544-555.
- Kirchesch, V. und Schöl, A., 1999. Das Gewässergütemodell QSIM – Ein Instrument zur Simulation und Prognose des Stoffhaushalts und der Planktondynamik von Fließgewässern. *Hydrologie und Wasserbewirtschaftung*, **43**(6): 302-312.
- Kirchesch, V., Eidner, R. und Müller, D., 1999. Gewässergütemodellierung in der Bundesanstalt für Gewässerkunde. In: BFG (Hrsg.), *Mathematische Modelle in der Gewässerkunde*, Koblenz, pp. 105-114.
- Klee, O., 1990. *Wasser untersuchen*. Quelle & Meyer, Heidelberg, 230 pp.
- Kobus, H., 1985. An Introduction to Air-Water Flows in Hydraulics. *Mitteilungen des Instituts für Wasserbau, Universität Stuttgart*, 61, Stuttgart, 73 pp.
- Kohl, J.G. und Niklisch, A., 1988. *Ökophysiologie der Algen*. Akademie-Verlag, Berlin.
- Kopf, W., 1983. Some aspects of the underwater light climate of a regulated river. *Zeitschrift für Wasser und Abwasserforschung*, **16**: 168-172.
- Kopf, W., 1986. Immissionsbezogene Begrenzung der Eutrophierung und nutzungsorientierter Ökosystemschutz. *Münchener Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flussbiologie*, **40**: 347-364.
- Kopf, W., 1995. Ökologisch kritische Situationen in gestauten, planktondominierten Fließgewässern im Vergleich zur Salzach. *Münchener Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flussbiologie, München*, **48**: 54-67.
- Koppe, P., Nusch, E.A. und Kornatzki, K.H., 1985. Einfluß der Stauhaltung eines Flusses auf seine Wasserbeschaffenheit - Beispiel Baldeneysee. *gwf-wasser/abwasser*, **126**(8): 412-422.
- Kryger, J. und Riisgard, H.U., 1988. Filtration rate capacities in 6 species of European freshwater bivalves. *Oecologia*, **77**: 34-38.
- Kummert, R. und Stumm, W., 1989. *Gewässer als Ökosysteme*. Verlag der Fachvereine, Zürich, 331 pp.
- Kuntzmann, B., 1989. *Aktivitätsuntersuchungen bei der einheimischen Wandermuschel Dreissena polymorpha PALLAS anhand von Filtration und Schalenbewegung*. Diplomarbeit, Universität Köln, Köln, 61 pp.
- Lakso, E., 1988. *Aeration at overflow weirs*. Publications of the Water Environment Research Institute, 1.
- Lamont, J.C. und Scott, D.S., 1970. An eddy cell model of mass transfer into the surface of a turbulent liquid. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, **16**(4): 513-519.
- Lampert, W. und Sommer, U., 1993. *Limnoökologie*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 440 pp.
- Lau, Y.L., 1972. Prediction Equation for Reaeration in Open-Channel Flow. *Journal of Sanitary Engineering*, **98**: 1063-1068.
- LAWA, 1991. *Grundlagen für die Beurteilung von Kühlwassereinleitungen in Gewässer*. Erich Schmidt Verlag, Berlin, 109 pp.
- Ledwell, J.J., 1984. The variation of the Gas Transfer Coefficient with Molecular Diffusivity. In: W. Brutsaert und G.H. Jirka (Hrsg.), *Gas Transfer at water Surfaces*. D. Reidel Publishing Company, pp. 293-302.
- Lenhart, B. und Steinberg, C., 1983. Messung der Sekundärbelastung in Fließgewässern. *gwf-wasser/abwasser*, **124**(11): 532-535.
- Lenhart, B., 1989. Zum Einfluss physikalischer und chemischer Faktoren auf die Produktion in Fließgewässern. *Münchener Beiträge zur Abwasser-, Fischerei und Flußbiologie*, **43**: 172-189.

- Lewis, W.K. und Whitman, W.G., 1924. Principles of Gas Absorption. *Industrial Engineering Chemistry*, **16**(12): 1215-1220.
- LfU, 1997. Entwicklung der Fließgewässerbeschaffenheit: chemisch-physikalisch-biologisch. Handbuch Wasser, 2. Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe.
- LfU, 2000. Deutsches Gewässerkundliches Jahrbuch - Rheingebiet Teil 1, 1998, Karlsruhe, 162 pp.
- Li, Y., 2002. Heat budget simulations for the River Neckar. Independent Study, Universität Stuttgart, 32 pp.
- Lide, D.R., 1999. CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC, Boca Raton.
- Likens, G.E., 1985. Primary production of inland aquatic ecosystems. In: H. Lieth und R.H. Whittaker (Hrsg.), Primary productivity of the biosphere. Springer-Verlag, New-York, pp. 185-202.
- Liljequist, G.H. und Cihak, K., 1984. Allgemeine Meteorologie. Vieweg, Braunschweig, 396 pp.
- Liss, S.N., Droppo, I.G., Flannigan, D.T. und Leppard, G.G., 1996. Floc architecture in wastewater and natural riverine systems. *Environmental Science and Technology*, **30**(2): 680-686.
- Löhr, J., 1984. Einfluß der Tiefendurchmischung auf die Entwicklung von Phytoplankton - dargestellt am Beispiel des Mains. Schriftenreihe des Instituts für Siedlungswasserwirtschaft der Universität Karlsruhe, 37, Karlsruhe.
- Londong, D., 1973. Über den Sauerstoffeintrag an freien Überfällen. Gewässerschutz - Wasser - Abwasser, Band 12, Aachen.
- Lorenzen, J., Larsen, L.H., Kjaer, T. und Revsbech, N.-P., 1998. Biosensor Determination of the Microscale Distribution of Nitrate, Nitrate assimilation, Nitrification, and Denitrification in a Diatom-Inhabited Freshwater Sediment. *Applied and Environmental Microbiology*, **64**(9): 3264-3269.
- Lyons, T.G. und Bach, J., 1978. Gewässergütesimulationsmodell RMA 12, Dokumentation Band 1, Modellbeschreibung, Resources management Association Deutschland GmbH, Osnabrück.
- Mackenthun, A.A. und Stefan, H.G., 1998. Effect of Flow Velocity on Sediment Oxygen Demand: Experiments. *Journal of Environmental Engineering*, **124**(3): 222-230.
- Maiß, M.H., 1992. Schwefelhexafluorid (SF₆) als Tracer für Mischungsprozesse im westlichen Bodensee, Ruprecht-Karls-Universität, Heidelberg, 201 pp.
- Markofsky, M. und Kobus, H., 1978. Unified Presentation of Weir-Aeration Data. *Journal of the Hydraulics Division*, **104**(HY4): 562-568.
- Markofsky, M., 1980. Strömungsmechanische Aspekte der Wasserqualität. Schriftenreihe Wasser - Abwasser, 18. Oldenbourg Verlag, München, 401 pp.
- Matthias, U., 1993. Biologische Freiwasseruntersuchungen Rhein - Neckar - Donau 1984 - 1992, Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe.
- Maxworthy, T., Gnann, C., Kurten, M. und Durst, F., 1996. Experiments on the rise of air bubbles in clean viscous liquids. *Journal of Fluid Mechanics*, **321**: 421-436.
- Mayer, H.-J., 1988. Sedimentuntersuchungen im mittleren Neckar. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, **32**(1/2): 27-34.
- McCutcheon, S.C., 1989. Water Quality modeling Vol. I Transport and Surface Exchange in Rivers. CRC, Boca Raton.
- McQueen, D.J., Johannes, M.R.S., Post, J.R., Stewart, T.J. und Lean, D.R.S., 1989. Bottom-up and top-down impacts on freshwater pelagic community structure. *Ecological Monographs*, **59**: 289-309.
- Melching, C.S. und Yoon, C.G., 1996. Key Sources of Uncertainty in QUAL2E Model of Passaic River. *Journal of Water Resources Planning and Management*, **122**(2): 105-113.
- Ministerium für Ländlichen Raum, Ernährung, Landwirtschaft und Forsten, Baden-Württemberg, 1989. Fische in Baden-Württemberg. Eigenverlag, Stuttgart, 158 pp.
- Möding, J., 2001. The Biocenotic Water Quality Model for the River Neckar Revisited. Independent Study, Universität Stuttgart, 74 pp.

- Möhle, K., 1991. Gewässerüberwachung in Baden-Württemberg am Beispiel des Neckars. In: G. Müller (Hrsg.), 3. Neckar-Umweltsymposium. Heidelberger Geowissenschaftliche Abhandlungen Band 48, Heidelberg, pp. 16 - 29.
- Moog, D.B. und Jirka, G.H., 1998. Analysis of reaeration equations using mean multiplicative error. *Journal of Environmental Engineering*, **124**(2): 104-1101.
- Moog, D.B. und Jirka, G.H., 1999. Air-Water Gas Transfer in Uniform Channel Flow. *Journal of Hydraulic Engineering*, **125**(1): 3-10.
- Motarjemi, M. und Jameson, G.J., 1978. Mass Transfer from Very Small Bubbles -- The Optimum Bubble Size For Aeration. *Chemical Engineering Science*, **33**: 1415-1423.
- Müller, D. und Kirchesch, V., 1980. Der Einfluß von Primärproduktion und Nitrifikation auf den Sauerstoffhaushalt des staugergelten Flusses. *Münchner Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flußbiologie*, **32**: 279-298.
- Müller, D., 1993. Besondere Anforderungen an die Abwasserreinigung bei gestauten Flüssen. *Münchner Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flußbiologie*, **47**: 173-184.
- Müller, D., Pfitzner, S. und Wunderlich, M., 1998. Auswirkungen von Baggergutumlagerungen auf den Sauerstoff- und Nährstoffhaushalt von Fießgewässern. *Wasser und Boden*, **50**(10): 26-32.
- Müller, G. und Förstner, U., 1973. Cadmium-Anreicherung in Neckar-Fischen. *Naturwissenschaften*, **60**: 258-259.
- Müller, G., 1975. Zum Einfluß der Aufwärmung auf mikrobiologische Stoffumsetzungen in Gewässern. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, **19**(3): 44 – 51.
- Müller, S., 2001a. ATV-Gwässergütemodell - Modellbeschreibung, ATV-DVWK, Hennef.
- Müller, S., 2001b. Einsatz der Gewässergütesimulation im Flussgebietsmanagement. *KA Wasserwirtschaft, Abwasser, Abfall*, **48**(2): 214-219.
- Munz, C. und Roberts, P.V., 1984. The Ratio of Gas-Phase to Liquid-Phase Mass Transfer Coefficients in Gas-Liquid Contacting Process. In: W. Brutsaert und G.H. Jirka (Hrsg.), Gas Transfer at water Surfaces. D. Reidel Publishing Company, pp. 35-45.
- Munz, C. und Roberts, P.V., 1989. Gas and Liquid -Phase Mass Transfer Resistances Of Organic Compounds During Mechanical Surface Aeration. *Water Research*, **23**(5): 589-601.
- Nakamura, Y. und Stefan, H.G., 1994. Effect of Flow Velocity on Sediment Oxygen Demand: Theory. *Journal of Environmental Engineering*, **120**(5): 996-1017.
- Neckar-AG und WSD Südwest, 1985. Großschiffahrtsstraße Neckar, Eigenverlag, Stuttgart/Mainz.
- Nezu, I. und Nakagawa, H., 1993. Turbulence in open-channel flows. Balkema, Rotterdam.
- Nilsson, N., Lövgren, L. und Sjöberg, S., 1992. Phosphate complexation at the surface of goethite. *Chemical Speciation and Bioavailability*, **4**(4): 121-130.
- Nöthlich, I. und Reuter, W., 1982. Zur Bestimmung der Sauerstoffzehrung von Gewässersedimenten. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, **26**: 162-167.
- Nöthlich, I. und Reuter, W., 1987. Kartierung und Risikobetrachtung der Sauerstoffzehrung von Sedimenten der Unterelbe. *Deutsche Gewässerkundliche Mitteilungen*, **31**: 81-88.
- Novak, P. und Gabriel, P., 1997. Oxygen Uptake at Barrages of the Elbe Cascade, IAHR-Proceedings 97, pp. 489-494.
- Novak, P., 1999. Discussion on Predictive Capabilities in Oxygen Transfer at Hydraulic Structures. *Journal of Environmental Engineering*, **125**(9): 989.
- Nusch, E.A., 1989. Verminderung der Eutrophierung gestauter Fließgewässer unter besonderer Berücksichtigung der Verhältnisse an der Ruhr. *Münchner Beiträge zur Abwasser- Fischerei- und Flussbiologie*, **43**: 219-240.
- O'Connor, D.J. und Dobbins, W.E., 1958. Mechanism of Reaeration in Natural Streams. *ASCE Transactions*, Paper No. 2934: 641-666.
- O'Connor, D.J., 1958. The Measurement and Calculation of Stream Reaeration Ratio. No. W-58-2, Taft Sanitary Engineering Center.

- Odum, E.P., 1991. Prinzipien der Ökologie. Spektrum der Wissenschaft Verlagsgesellschaft, Heidelberg, 305 pp.
- Omlin, M., Brun, R. und Reichert, P., 2001. Biogeochemical Model of Lake Zürich: Sensitivity, Identifiability and Uncertainty Analysis. *Ecological Modelling*, **141**(1-3): 105 - 123.
- Oreskes, N., Shrader-Frechette, K. und Belitz, K., 1994. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the earth sciences. *Science*, **263**: 641-646.
- Owens, M., Edwards, R.W. und Gibbs, J.W., 1964. Some Reaeration Studies in Streams. *International Journal of Air and Water Pollution*, **8**: 469-486.
- Pahl-Wostl, C. und Imboden, D.M., 1990. DYPHORA-a dynamic model for the rate of photosynthesis of algae. *Journal of Plankton Research*, **12**(6): 1207-1221.
- Pahl-Wostl, C., 1992. Dynamic versus static models for photosynthesis. *Hydrobiologia*, **238**: 189-196.
- Park, S.S. und Jaffe, P.R., 1996. Development of sediment redox potential model for the assessment of postdepositional metal mobility. *Ecological Modelling*, **91**: 169-181.
- Parkhill, K.L. und Gulliver, J.S., 1997. Comment on "Comparison of Two Sediment Oxygen Demand Measurement Techniques". *Journal of Environmental Engineering*, **123**(2): 97-98.
- Pastres, R., Franco, D., Pecenic, G., Solidoro, C. und Dejak, C., 1997. Local sensitivity analysis of a distributed parameters water quality model. *Reliability Engineering and System Safety*, **57**: 21-30.
- Pauer, J.J. und Auer, M.T., 2000. Nitrification In The Water Column and Sediment of a Hypereutrophic Lake and Adjoining River System. *Water Research*, **34**(4): 1247-1254.
- Petersen, W., Mertino, L., Callies, U. und Zorita, E., 2001. Process identification by principal component analysis of river water-quality data. *Ecological Modelling*, **138**: 193-213.
- Petzold, L., 1983. A Description of DASSL: A Differential/Algebraic System Solver. In: R. Stepleman, et al. (Hrsg.), Scientific Computing, IMACS. North-Holland, New-York, pp. 65 - 68.
- Pinter, I., 1979. Naturmessungen zum Sauerstoffeintrag durch verschiedene Belüftungsverfahren. In DVWK Schriften, Heft 49. pp.119-125.
- Pinter, I., 1991. Aktueller Gütezustand des Neckars - Perspektiven. In: G. Müller (Hrsg.), 3. Neckar-Umweltsymposium. Heidelberger Geowissenschaftliche Abhandlungen Band 48, Heidelberg, pp. 62 - 73.
- Pinter, I., 2000. Hilfe für die Fische - Ein Sauerstoffreglement für den Neckar. In: Institut für Wasserbau Versuchsanstalt, Fachgespräch.
- Pöhlmann, W., 1989. Zur Eutrophierung von Fließgewässern. Teil 2: Einfluß von Licht, Turbulenz, Gewässertiefe und Primärbelastung des Vorfluters auf das Wachstum von Phytoplankton (In situ-Messungen). *Zeitschrift für Wasser und Abwasserforschung*, **22**: 196 - 202.
- Pöhlmann, W., Kaul, U. und Kopf, W., 1989. Zur Eutrophierung von Fließgewässern. Teil 1: Einfluß von Temperatur, Phosphor, Silikat, Kohlenstoffdioxid, Ammonium, Nitrat und Komplexbildnern auf das Wachstum von Phytoplankton (Laborversuche). *Zeitschrift für Wasser und Abwasserforschung*, **22**: 187 - 195.
- Pusch, M., Köhler, J., Wanner, S., Ockenfeld, K., Hoffmann, A., Brunke, M., Grünert, U. und Kozerski, H.-P., 2001. Ökologisch begründetes Bewirtschaftungskonzept für die Spree unter dem Aspekt bergbaubedingter Durchflußreduktion. Berichte des IGB, 11/2001. Eigenverlag, Berlin, 244 pp.
- Quraishi, N.A., 2001. Sediment Oxygen Demand (SOD): Experimental determination and theoretical approaches. Master Thesis, Universität Stuttgart, Stuttgart, 65 pp.
- Rathbun, R.E. und Tai, D.Y., 1981. Volatilization of organic compounds from streams. *Journal of the Environmental Engineering Division*, **108**: 973-989.
- Rathbun, R.E. und Tai, D.Y., 1984. Volatilization of chlorinated hydrocarbons from water. In: W. Brutsaert und G.H. Jirka (Hrsg.), Gas Transfer at water Surfaces. Reidel, Boston, pp. 27-34.
- Rathbun, R.E., 1990. Prediction Of Stream Volatilization Coefficients. *Journal of Environmental Engineering*, **116**(3): 615-631.
- Rauch, W., Henze, M., Koncsos, L., Reichert, P., Shanahan, P., Somlyódy, L. und Vanrolleghem, P., 1998. River Water Quality Modelling: 1. State of the Art. *Water Science and Technology*, **38**(11): 237-244.

- Redfield, A.C., 1956. The biological control of chemical factors in the environment. *Science*, **46**: 206-226.
- Reible, D.D., Popov, V., Valsaraj, K.T., Thibodeaux, L.J., Lin, F., Dikshit, M., Todaro, M.A. und Fleeger, J.W., 1996. Contaminant fluxes from sediment due to tubificid oligochaete bioturbation. *Water Research*, **30**(3): 704-714.
- Reichardt, H., 1951. Grundlagen des turbulenten Wärmeübergangs. *Archiv für die gesamte Wärmetechnik*, **6/7**: 129-143.
- Reichert, P. und Vanrolleghem, P., 2001. Identifiability and uncertainty analysis of the River Water Quality Model No. 1 (RWQM1). *Water Science and Technology*, **43**(7): 329-338.
- Reichert, P. und Wanner, O., 1991. Enhanced One-Dimensional Modeling of Transport in Rivers. *Journal of Hydraulic Engineering*, **117**(9): 1165-1183.
- Reichert, P., 1994a. AQUASIM - A tool for simulation and data analysis of aquatic systems. *Water Science and Technology*, **30**(2): 21-30.
- Reichert, P., 1994b. Concepts underlying a Computer Program for the Identification and Simulation of Aquatic Systems. Schriftenreihe der EAWAG, 7. Swiss Federal Institute for Environmental Sciences and Technology, Dübendorf, 386 pp.
- Reichert, P., 1998a. Aquasim 2.0 - Tutorial. Swiss Federal Institute for Environmental Sciences and Technology, Dübendorf, 213 pp.
- Reichert, P., 1998b. Aquasim 2.0 - User Manual. Swiss Federal Institute for Environmental Sciences and Technology, Dübendorf, 213 pp.
- Reichert, P., 2001. River Water Quality Model No. 1: Case Study II. Oxygen and Nitrogen Conversion Processes in the River Glatt. *Water Science and Technology*, **43**(5): 51-60.
- Reichert, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Shanahan, P., Somolyody, L. und Vanrolleghem, P., 2001a. River Water Quality Model No. 1. IWA Scientific and Technical Report, 12. International Water Association, London, 144 pp.
- Reichert, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Shanahan, P., Somolyody, L. und Vanrolleghem, P., 2001b. River Water Quality Model No. 1: II Biochemical Process Equations. *Water Science and Technology*, **43**(5): 11-30.
- Reid, R.C., Prausnitz, J.M. und Poling, B.E., 1988. The Properties of Gases and Liquids. McGraw-Hill, Boston, 741 pp.
- Reimann, K., 1978. Sauerstoffproduktion des Phytoplanktons in Abhängigkeit von der Temperatur des Wassers. *Zeitschrift für Wasser- und Abwasserforschung*, **11**(5): 151-154.
- Reimann, K., 1986. Sauerstoff und BSB als Bewertungsgrößen bei verschiedenen Gewässernutzungen. *Münchener Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flußbiologie*, **40**: 325-346.
- Reimers, C.E., Jahnke, R.A. und Thomsen, L., 2001. In situ sampling in the benthic boundary layer. In: B.P. Boudreau und B.B. Jorgensen (Hrsg.), *The Benthic Boundary Layer - Transport Processes and Biogeochemistry*. Oxford University Press, Oxford, pp. 245 - 268.
- Reyment, R. und Jöreskog, K.G., 1993. Applied Factor Analysis in Natural Sciences. University Press, Cambridge, 371 pp.
- Reynolds, C.S., 1984. The ecology of freshwater phytoplankton. Cambridge University Press, Cambridge.
- Rimsha, V. und Donschenko, A., 1958. Untersuchungen des Wärmeverlusts offener Wasserflächen im Winter. *Trudy GGJ*, 65.
- Roberts, P.V. und Dändliker, P.G., 1983. Mass Transfer of volatile organic contaminants from aqueous solution to the atmosphere during surface aeration. *Environmental Science and Technology*, **17**(8): 484-489.
- Roberts, P.V., 1984. Dependence of Oxygen Transfer Rate on Energy Dissipation During Surface Aeration in Stream Flow. In: W. Brutsaert und G.H. Jirka (Hrsg.), *Gas Transfer at Water Surfaces*. Reidel, Dordrecht.
- Rösch, T., 2000. Modell zur Regulierung des Sauerstoffhaushaltes in Fließgewässern durch Wasserkraftanlagen. Mitteilungen des Fachgebiets Wasserbau und Wasserwirtschaft der Gesamthochschule Kassel, Band 10. Herkules Verlag, Kassel.

- Rösch, T. und Tönsmann, F., 1997. Sauerstoffanreicherung in Wasserkraftanlagen unter ökologischen und ökonomischen Gesichtspunkten Verfahrensweisen und Empfehlungen. 6/1997, Fachgebiet Wasserbau und Wasserwirtschaft, Universität Gh Kassel, Kassel.
- Rutherford, J.C., 1994. River Mixing. John Willey & Sons, Chichester, 347 pp.
- Sachs, L., 1992. Angewandte Statistik. Springer, Berlin.
- Schachtschabel, P., Blume, H.P., Brümmer, G., Hartge, K.-H. und Schwertmann, U., 1992. Lehrbuch der Bodenkunde. Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart, 491 pp.
- Schindler, D.W., 1977. Evolution of phosphorous limitation in lakes. *Science*, **195**: 260-262.
- Schindler, D.W., 1990. Experimental perturbations of whole lakes as tests of hypotheses concerning ecosystem structure and function. *Oikos*, **57**: 25-41.
- Schladow, S.G. und Hamilton, D.P., 1997. Prediction of water quality in lakes and reservoirs: Part II - Model calibration, sensitivity analysis and application. *Ecological Modelling*, **96**: 111-123.
- Schlichting, H., 1951. Grenzschicht-Theorie. Verlag G. Braun, Karlsruhe, 483 pp.
- Schneider, D.W., 1992. A bioenergetic model of Zebra Mussel, *Dreissena polymorpha*, growth in the Great Lakes. *Canadian Journal of Fishery and Aquatic Sciences*, **49**: 1406-1416.
- Schöl, A., Kirchesch, V., Bergfeld, T. und Müller, D., 1999. Model-based analysis of oxygen budget and biological processes in the regulated rivers Moselle and Saar: modelling the influence of benthic filter feeders on phytoplankton. *Hydrobiologia*, **410**: 167 - 176.
- Schöl, A., Kirchesch, V., Bergfeld, T., Schöll, F., Borcherding, J. und Müller, D., 2002. Modelling the chlorophyll a content of the River Rhine - Interrelation between riverine algal production and population biomass of grazers, rotifers and the zebra mussel, *Dreissena polymorpha*. *International Review of Hydrobiology*, **87**(2-3): 295-317.
- Schreckenbach, K. und Spangenberg, R., 1978. pH-Wert abhängige Ammoniakvergiftung bei Fischen und Möglichkeiten ihrer Beeinflussung. *Zeitschrift für Binnenfischerei der DDR*, **25**: 299-314.
- Schreiner, H., 1977. Simulationsmodell - II. Prognostisches Modell Neckar, Bericht 15, Dornier Systems, Friedrichshafen.
- Schroeder, F., 1997. Water quality in the Elbe estuary: Significance of different processes for the oxygen deficit at Hamburg. *Environmental Modeling and Assessment*, **2**: 73-82.
- Schwörbel, J., 1993. Einführung in die Limnologie. Gustav Fischer, Stuttgart, 387 pp.
- Sene, K.J., 1988. Air entrainment by plunging jets. *Chemical Engineering Science*, **43**: 2615-2623.
- Sevik, M. und Park, S.H., 1973. The splitting of drops and bubbles by turbulent fluid flow. *Journal of Fluids Engineering*, **261**: 53-62.
- Shanahan, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Reichert, P., Somlyody, L. und Vanrolleghem, P., 2001. River Water Quality Model No. 1: I. Modelling Approach. *Water Science and Technology*, **43**(5): 1-9.
- Shanahan, P., Henze, M., Koncsos, L., Rauch, W., Reichert, P., Somlyody, L. und Vanrolleghem, P., 1998. River Water Quality Modelling: 2. Problems of the Art. *Water Science and Technology*, **38**(11): 245-252.
- Shaw, D.A. und Hanratty, T.J., 1977. Turbulent mass transfer rates to a wall for large Schmidt numbers. *American Institute of Chemical Engineering Journal*, **23**: 28-37.
- Siegmund, A., 2001. Praktikumsbericht über das 2. Praxissemester im SS 2001, Landesanstalt für Umweltschutz Baden-Württemberg, Karlsruhe.
- Smayda, T.J., 1970. The suspension and sinking of phytoplankton in the sea. *Oceanographic and Marine Biology Annual Review*, **8**: 353-414.
- Smith, J.H., Bomberger, D.C. und Haynes, D.L., 1980. Prediction of the volatilization rates of highvolatility chemicals from natural water bodies. *Environmental Science and Technology*, **14**(11): 1332-1337.
- Smith, S.L. und Jaffe, P.R., 1998. Modeling the transport and reaction of trace metals in water saturated soils and sediments. *Water Resources Research*, **34**(11): 3135-3147.

- Soeder, C.J., Müller, H., Payer, H.D. und Schulle, H., 1971. Mineral nutrition of planktonic algae: Some considerations, some experiments. *Mitteilungen der Internationalen Vereinigung für Limnologie*, **19**: 39-58.
- Somlyódy, L., Henze, M., Koncsos, L., Rauch, W., Reichert, P., Shanahan, P. und P., V., 1998. River Water Quality Modelling: 3. Future of the Art. *Water Science and Technology*, **38**(11): 253-260.
- Sommer, U., 1984. Sedimentation of principal phytoplankton species of Lake Constance. *Journal of Plankton Research*, **6**: 1-14.
- Song, Y. und Müller, G., 1995. Biogeochemical Cycling of Nutrients and Trace Metals in Anoxic Freshwater Sediments of the Neckar River, Germany. *Marine and Freshwater Research*, **46**: 237 - 243.
- Song, Y. und Müller, G., 1999. Sediment-Water Interactions in Anoxic Freshwater Sediments: Mobility of Heavy Metals and Nutrients. Springer, Berlin, 111 pp.
- Stanczykowska, A., Lawacz, W., Mattice, J. und Lewandowski, K., 1976. Bivalves as a factor effecting circulation of matter in Lake Mikolajskie (Poland). *Limnologica*, **10**: 347-352.
- Statzner, B., 1986. Fließwasserökologische Aspekte bei der naturnahen Umgestaltung heimischer Bäche. In: P. Larsen (Hrsg.), *Mitteilungen*, Heft 174/1986, Karlsruhe, pp. 56-95.
- Steele, J.H., 1962. Environmental control of photosynthesis in the sea. *Limnology and Oceanography*, **7**: 137-150.
- Steinberg, C., 1989. Bioverfügbarkeit und Rolle des Phosphors im Gewässer. *Münchener Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flußbiologie*, **43**: 190-218.
- Steinberg, C., Heindel, B., Tille-Backhaus, R. und Klee, R., 1987. Phytoplanktonstudien an langsam fließenden Gewässern: Donau und Vils. *Archiv für Hydrobiologie Supplement Band*, **68**: 437-456.
- Steinberger, N. und Hondzo, M., 1999. Diffusional Mass Transfer at Sediment-Water Interface. *Journal of Environmental Engineering*, **125**(2): 192-200.
- Straskraba, M. und Gnauck, A., 1983. Aquatische Ökosysteme. Modellierung und Simulation. Gustav Fischer Verlag, Stuttgart, 279 pp.
- Strayer, D. und Likens, G.E., 1986. An energy budget for the zoobenthos of Mirror Lake, New Hampshire. *Ecology*, **67**(2): 303-313.
- Streeter, W.H. und Phelps, E.B., 1925. A study of the pollution and natural purification of the Ohio River. *Public Health Bulletin*, 146.
- Stumm, W. (Hrsg.), 1992. Chemistry of the Solid-Water Interface; Processes at the Mineral-Water and Particle-Water Interface. Wiley-Interscience, New York.
- Stumm, W. und Morgan, J.J., 1995. Aquatic Chemistry. Environmental Science and Technology. Wiley-Interscience, New York, 1022 pp.
- Suciu, D.G. und Smigelschi, O., 1976. Size of the submerged biphasic region in plunging jet systems. *Chemical Engineering Science*, **31**: 1217-1220.
- Sweerts, J.R.A., Bar-Gillissen, M.J., Cornelese, A.A. und Cappenberg, T.E., 1991. Oxygen-consuming processes at the profundal and littoral sediment-water interface of a small mesoeutrophic lake (Lake Vechten, the Netherlands). *Limnology and Oceanography*, **36**(6): 1124-1133.
- Thackston, E.L. und Dawson, J.W., 2001. Recalibration of a Reaeration Equation. *Journal of Environmental Engineering*, **127**(4): 317-321.
- Thackston, E.L. und Krenkel, P.A., 1969. Reaeration prediction in natural streams. *Journal of the Sanitary Engineering Division*, **95**(SA1): 65-94.
- Thibodeaux, L.J., 1996. Environmental Chemodynamics-Movement of Chemicals in Air, Water and Soil. John Wiley & Sons, Inc., New York, 593 pp.
- Thomann, R.V. und Mueller, J.A., 1987. Principles of Surface Water Quality Modeling and Control. Harper Collins, New York, 644 pp.
- Thompson, E.J. und Gulliver, J.S., 1997. Oxygen Transfer Similitude For Vented Hydroturbine. *Journal of Hydraulic Engineering*, **123**(6): 529-538.
- Tilman, D., 1976. Ecological competition between algae. Experimental confirmation of resource based competition theory. *Science*, **192**: 343-345.

- Truax, D.D., Shindala, A. und Sartain, H., 1995. Comparison of Two Sediment Oxygen Demand Measurement Techniques. *Journal of Environmental Engineering*, **121**(9): 619-624.
- Tsivoglou, E.C. und Wallace, J.R., 1972. Characterization of stream reaeration capacity. EPA-R3-72-012, U.S. EPA, Washington.
- Tsivoglou, E.C., 1967. Tracer measurement of Stream Reaeration, 1-86 pp.
- TWDB, 1971. Simulation of Water Quality in Streams and Canals, Theory and Description of Qual-1, Texas Water Development Board, Austin.
- Uchirin, C.G. und Ahlert, W.K., 1985. In situ sediment oxygen demand determinations in the Passaic River (NJ) during the late summer/early fall 1983. *Water Research*, **19**(9): 1141 - 1144.
- Uhlmann, D. und Horn, W., 2001. Hydrobiologie der Binnengewässer, Verlag Eugen Ulmer, Stuttgart, 528 pp.
- Ulrich, A., 1991. Die fischereiliche Nutzung des Neckars. In: G. Müller (Hrsg.), 3. Neckar-Umweltsymposium. Heidelberger geowissenschaftliche Abhandlungen Band 48, Heidelberg, pp. 101 - 109.
- van den Hoek, C., Jahns, H.M. und Mann, D.G., 1993. Algen. Thieme, Stuttgart, 411 pp.
- van der Perk, M. und Bierkens, M.F.P., 1997. The identifiability of parameters in a water quality model of the Biebrza River, Poland. *Journal of Hydrology*, **200**: 307-322.
- van der Perk, M., 1996. Muddy Waters - Uncertainty issues in modelling the influence of bed sediments on water composition. Netherlands Geographical Studies, 200. 182 pp.
- van der Perk, M., 1998. Calibration and identifiability analysis of a water quality model to evaluate the contribution of different processes to the short-term dynamics of suspended sediment and dissolved nutrients in the surface water of a rural catchment. *Hydrological Processes*, **12**: 683-699.
- Van Rees, K.C.J., Reddy, K.R. und Rao, P.S.C., 1996. Influence of benthic organisms on solute transport in lake sediments. *Hydrobiologia*, **317**: 31-40.
- Vanrolleghem, P., Borchardt, D., Henze, M., Rauch, W., Reichert, P., Shanahan, P. und Somolyody, L., 2001. River Water Quality Model No. 1: III Biochemical Submodel Selection. *Water Science and Technology*, **43**(5): 31-40.
- Vogellehner, D., 1981. Baupläne der Pflanzen. Herder, Freiburg, 128 pp.
- Vollenweider, R., 1968. Die wissenschaftlichen Grundlagen der Seen- und Fließgewässereutrophierung, unter besonderer Berücksichtigung des Phosphors und des Stickstoffs. Report DAS/CSI/68.27, OECD, Paris.
- Wallingford Software, 1994. SalmonQ - User Documentation Version 1.01, Wallingford Software, Wallingford, UK.
- Walz, N., 1978. The energy balance of the freshwater mussel *Dreissena polymorpha* PALLAS in laboratory experiments and in Lake Constance. *Archiv für Hydrobiologie Supplement*, **55**: 83-105.
- Wanninkhof, R., Mulholland, P.J. und Elwood, J.W., 1990. Gas Exchange Rates for a First-Order Stream Determined With Deliberate and Natural Tracers. *Water Resources Research*, **26**(7): 1621-1630.
- Weilguni, H. und Humpesch, U.H., 1999. Long-term trends of physical, chemical and biological variables in the River Danube 1957-1995: A statistical approach. *Aquatic Sciences*, **61**: 234-259.
- Weischet, W., 1988. Einführung in die allgemeine Klimatologie. B. G. Teubner, Stuttgart, 264 pp.
- Welker, M. und Walz, N., 1998. Can mussels control the plankton in rivers ? - a planktological approach applying a Lagrangian sampling strategy. *Limnology and Oceanography*, **43**(5): 753-762.
- Westall, J., 1986. MICROQL - I. a chemical equilibrium program in BASIC. Report 86-02, Department of Chemistry, Oregon State University, Corvallis, Oregon.
- Westrich, B., 1981. Verlandung von Flußstauhaltungen. *Wasserwirtschaft*, **71**(10): 277-282.
- Westrich, B., 1988. Fluvialer Feststofftransport - Auswirkungen auf die Morphologie und Bedeutung für die Gewässergüte. Schriftenreihe GWF Wasser, Abwasser, 22. Oldenbourg Verlag, München.
- Whitman, W.G., 1923. The Two-Film Theory of Gas-Absorption. *Chemical and Metallurgical Engineering*, **29**(4): 146-148.

- Wilhelms, S.C. und Schneider, M.L., 1997. Total Dissolved Gas in the Near-Field Tailwater of the Ice Harbor Dam. In: J.S. Gulliver (Hrsg.), The 27th. Congress of the International Association for Hydraulic Research, San Francisco, California, pp. 513-517.
- Wnuck, H., 2000. Wandel der Fischartengemeinschaft im mittleren Neckar - ein Beispiel für anthropogen bedingte Veränderungen der Ichthyozönose in unseren Flüssen im 19. und 20. Jahrhundert. *Wasserkalender 2000*: 45 - 71.
- Wolf, P., 1974. Simulation des Sauerstoffhaushaltes in Fließgewässern. Stuttgarter Berichte zur Siedlungswasserwirtschaft, 53, Stuttgart, 150 pp.
- Wolf, P., Boes, M. und Buck, H., 1986. Auswirkungen von Flußstauhaltungen auf die Gewässerbeschaffenheit. *Wasserwirtschaft*, 76(7/8): 314-319.
- WSD-Südwest, 1996. Karte der Bundeswasserstraßen 1:10000 - Verkehrskarte Neckar. Eigenverlag, Mainz.
- Wüest, A., Brooks, N.H. und Imboden, D.M., 1992. Bubble Plume Modeling for Lake Restoration. *Water Resources Research*, 28(12): 3235-3250.
- Wunderlich, M., 1982. Stoffwechseldynamische Aspekte der Gewässererwärmung. *Münchner Beiträge zur Abwasser-, Fischerei- und Flußbiologie*, 35: 37-55.
- Yamamoto, S., Alcauskas, J.B. und Crozier, T.E., 1976. Solubility of methane in distilled water and seawater. *Journal of Chemical Engineering Data*, 21(1): 78-80.
- Yaws, C.L., 1999. Chemical Properties Handbook. McGraw-Hill, New York.
- Zanke, U., 1982. Grundlagen der Sedimentbewegung. Springer-Verlag, Berlin, 402 pp.

ANHANG A: SIMULATIONSMODELL FÜR STOFFUMSATZ UND TRANSPORT IM SEDIMENT

Tab. A1: Variablen im Simulationsmodell für Stoffumsatz und Transport im Sediment.

Zielrößen (state variables)		
CH ₄	Methan	mg/L
NH ₄	Ammonium-Stickstoff (NH ₄ -N)	mg/L
NO ₃	Nitrat-Stickstoff (NO ₃ -N)	mg/L
O ₂	Gelöster Sauerstoff	mg/L
Rand- und Anfangsbedingungen		
CH _{4,ini}	Anfangskonzentration von CH ₄ im Freiwasser der benthischen Kammer	mg/L
CH _{4,vert}	Anfängliche vertikale Verteilung von CH ₄ im Porenwasser	mg/L
DOM	Porenwasserkonzentration von abbaubarem organischem Material (konstant im Vertikalprofil und über die Zeit)	mg/L
NH _{4,ini}	Anfangskonzentration von NH ₄ -N im Freiwasser der benthischen Kammer	mg/L
NH _{4,vert}	Anfängliche vertikale Verteilung von NH ₄ -N im Porenwasser	mg/L
NO _{3,ini}	Anfangskonzentration von NO ₃ -N im Freiwasser der benthischen Kammer	mg/L
NO _{3,vert}	Anfängliche vertikale Verteilung von NO ₃ -N im Porenwasser	mg/L
O _{2,ini}	Anfangskonzentration von O ₂ im Freiwasser der benthischen Kammer	mg/L
O _{2,vert}	Anfängliche vertikale Verteilung von O ₂ im Porenwasser	mg/L
Intern berechnete Variablen		
CH _{4,sat}	Sättigungskonzentration für CH ₄	m ² /d
D _{bio}	Effektiver Diffusionskoeffizient infolge Bioturbation	m ² /d
D _{eff,CH4}	Resultierender effektiver Diffusionskoeffizient für CH ₄	m ² /d
D _{eff,NH4}	Resultierender effektiver Diffusionskoeffizient für NH ₄	m ² /d
D _{eff,NO3}	Resultierender effektiver Diffusionskoeffizient für NO ₃	m ² /d
D _{eff,O2}	Resultierender effektiver Diffusionskoeffizient für O ₂	m ² /d
F _{NO3}	Hemmung von Methanfermentation durch NO ₃	-
F _{O2}	Hemmung von Denitrifikation und Methanfermentation durch O ₂	-
μ _{gas,CH4}	Rate mit der sich gasförmiges CH ₄ aus gelöstem CH ₄ bildet	1/d
θ	Tortuosität	-

Tab. A1: Variablen im Simulationsmodell für Stoffumsatz und Transport im Sediment (Fortsetzung).

Parameter		
A_{sed}	Exponierte Sedimentoberfläche	m^2
$D_{\text{bio},0}$	Effektiver Diffusionskoeffizient infolge Bioturbation an der Sedimentoberfläche	m^2/d
$D_{\text{mol},\text{CH}_4}$	Molekularer Diffusionskoeffizient für CH_4	m^2/d
$D_{\text{mol},\text{NH}_4}$	Molekularer Diffusionskoeffizient für NH_4	m^2/d
$D_{\text{mol},\text{NO}_3}$	Molekularer Diffusionskoeffizient für NO_3	m^2/d
$D_{\text{mol},\text{O}_2}$	Molekularer Diffusionskoeffizient für O_2	m^2/d
$K_{\text{Saresp},\text{O}_2}$	Halbsättigungskonstante für O_2 bei der aeroben Mineralisierung von DOM	mg/L
$K_{\text{Sden}_1,\text{NO}_3}$	Halbsättigungskonstante für NO_3 bei der Denitrifikation mit DOM	mg/L
$K_{\text{Sden}_2,\text{NO}_3}$	Halbsättigungskonstante für NO_3 bei der Denitrifikation mit CH_4	mg/L
$K_{\text{Smox},\text{O}_2}$	Halbsättigungskonstante für O_2 bei der aeroben Methanoxidation	mg/L
$K_{\text{Sitr},\text{O}_2}$	Halbsättigungskonstante für O_2 bei der Nitrifikation	mg/L
$\text{SOD}_{\text{macro}}$	Sauerstoffbedarf des Makrozoobenthos an der Sedimentoberfläche	$\text{g}/\text{m}^2/\text{d}$
T_w	Wassertemperatur	$^{\circ}\text{C}$
V_{bk}	Gesamtvolumen des Freiwassers im System	m^3
y	Wassertiefe an der untersuchten Stelle	m
z	Vertikalabstand von der Sedimentoberfläche (im Sediment)	m
z_{bio}	Maximale Sedimenttiefe bis zu der Bioturbation wirkt	m
Θ	Temperaturkorrekturfaktor (gleich für alle Prozesse)	-
μ_{aresp}	Maximale aerobe Mineralisierungsrate von DOM bei 20°C	$1/\text{d}$
μ_{den_1}	Maximale Denitrifikationsrate mit DOM als Reduktionsmittel bei 20°C	$1/\text{d}$
μ_{den_2}	Maximale Denitrifikationsrate mit CH_4 als Reduktionsmittel bei 20°C	$1/\text{d}$
μ_{mferm}	Maximale Rate der Methanfermentation bei 20°C	$1/\text{d}$
μ_{mox}	Maximale Rate aerober Methanoxidation bei 20°C	$1/\text{d}$
μ_{itr}	Maximale Nitrifikationsrate bei 20°C	$1/\text{d}$
Φ	Porenraumanteil im Sediment (Porosität)	-

Tab. A2: Algebraische Gleichungen im Simulationsmodell für Stoffumsatz und Transport im Sediment.

Variable	Gleichung
D_{bio}	$D_{bio}(z) = D_{bio,0} \cdot \exp\left(-3 \cdot \left(\frac{z}{z_{bio}}\right)^4\right)$
$D_{eff,CH4}$	$D_{eff,CH4}(z) = D_{bio}(z) + \Phi \cdot \frac{D_{mol,CH4}}{\theta^2}$
$D_{eff,NH4}$	$D_{eff,NH4}(z) = D_{bio}(z) + \Phi \cdot \frac{D_{m,NH4}}{\theta^2}$
$D_{eff,NO3}$	$D_{eff,NO3}(z) = D_{bio}(z) + \Phi \cdot \frac{D_{m,NO3}}{\theta^2}$
$D_{eff,O2}$	$D_{eff,O2}(z) = D_{bio}(z) + \Phi \cdot \frac{D_{m,O2}}{\theta^2}$
F_{NO3}	$F_{NO3} = \begin{cases} 0 & NO_3 > 1 \\ (1 - NO_3) \cdot \frac{10}{7} & 0,3 \leq NO_3 \leq 1 \\ 1 & NO_3 < 0,3 \end{cases}$
F_{O2}	$F_{O2} = \begin{cases} 0 & O_2 > 3 \\ (3 - O_2) \cdot \frac{10}{27} & 0,3 \leq O_2 \leq 3 \\ 1 & O_2 < 0,3 \end{cases}$
θ	$\theta = \sqrt{1 - \ln(\Phi^2)}$
$CH_{4,sat}$	$CH_{4,sat} = 100 \cdot \left(1 + \frac{y}{10}\right) \cdot 1,024^{T_w - 20}$
$\mu_{gas,CH4}$	$\mu_{gas,CH4} = \begin{cases} 0 & CH_4 < CH_{4,sat} \\ 10^5 & CH_4 \geq CH_{4,sat} \end{cases}$

Tab. A3: Differentialgleichungen zur Beschreibung der Stoffumsätze in Sediment und Wasser.

Zielgröße	Differentialgleichung
A) Im Porenwasser des Sedimentkörpers	
O_2	$\frac{dO_2}{dt} = -32 \cdot \mu_{aresp} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_{S_{aresp,O_2}}} \cdot DOM \cdot \Theta^{T_w-20}$ $- 64 \cdot \mu_{nitr} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_{S_{nitr,O_2}}} \cdot NH_4 \cdot \Theta^{T_w-20}$ $- 64 \cdot \mu_{mox} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_{S_{mox,O_2}}} \cdot CH_4 \cdot \Theta^{T_w-20}$
NO_3	$\frac{dNO_3}{dt} = 14 \cdot \mu_{nitr} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_{S_{nitr,O_2}}} \cdot NH_4 \cdot \Theta^{T_w-20}$ $- 11,2 \cdot F_{O_2} \cdot \mu_{den_1} \cdot \frac{NO_3}{NO_3 + K_{S_{den_1,NO_3}}} \cdot DOM \cdot \Theta^{T_w-20}$ $- 14 \cdot F_{O_2} \cdot \mu_{den_2} \cdot \frac{NO_3}{NO_3 + K_{S_{den_2,NO_3}}} \cdot CH_4 \cdot \Theta^{T_w-20}$
NH_4	$\frac{dNH_4}{dt} = 2,11 \cdot \mu_{aresp} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_{S_{aresp,O_2}}} \cdot DOM \cdot \Theta^{T_w-20}$ $- 14 \cdot \mu_{nitr} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_{S_{nitr,O_2}}} \cdot NH_4 \cdot \Theta^{T_w-20}$ $+ 2,11 \cdot F_{O_2} \cdot \mu_{den_1} \cdot \frac{NO_3}{NO_3 + K_{S_{den_1,NO_3}}} \cdot DOM \cdot \Theta^{T_w-20}$ $+ 2,11 \cdot F_{O_2} \cdot F_{NO_3} \cdot \mu_{mferm} \cdot DOM \cdot \Theta^{T_w-20}$
CH_4	$\frac{dCH_4}{dt} = 8 \cdot F_{O_2} \cdot F_{NO_3} \cdot \mu_{mferm} \cdot DOM \cdot \Theta^{T_w-20}$ $- 16 \cdot \mu_{mox} \cdot \frac{O_2}{O_2 + K_{S_{mox,O_2}}} \cdot CH_4 \cdot \Theta^{T_w-20}$ $- 11,25 \cdot F_{O_2} \cdot \mu_{den_2} \cdot \frac{NO_3}{NO_3 + K_{S_{den_2,NO_3}}} \cdot CH_4 \cdot \Theta^{T_w-20}$ $- \mu_{gas,CH_4} \cdot CH_4$
B) Im Freiwasser der benthischen Kammer	
O_2	$\frac{dO_2}{dt} = - \frac{A_{sed}}{V_{bk}} \cdot SOD_{macro} \cdot \Theta^{T_w-20}$
NH_4	$\frac{dNH_4}{dt} = 0,066 \cdot \frac{A_{sed}}{V_{bk}} \cdot SOD_{macro} \cdot \Theta^{T_w-20}$

Tab. A4: Parameterwerte im Simulationsmodell für Stoffumsatz und Transport im Sediment.

Parameter	Einheit	Wert
A_{sed}	m^2	0,05
$\text{CH}_{4,\text{ini}}$	mg/L	0
DOM	mg/L	100
$\text{NH}_{4,\text{ini}}$	mg/L	0,15
$\text{NO}_{3,\text{ini}}$	mg/L	5,6
$\text{O}_{2,\text{ini}}$	mg/L	6
$D_{\text{bio},0}$	m^2/d	0,0025
$D_{\text{mol},\text{CH}_4}$	m^2/d	$1,59 \cdot 10^{-4}$
$D_{\text{mol},\text{NH}_4}$	m^2/d	$1,71 \cdot 10^{-4}$
$D_{\text{mol},\text{NO}_3}$	m^2/d	$1,64 \cdot 10^{-4}$
$D_{\text{mol},\text{O}_2}$	m^2/d	$2,03 \cdot 10^{-4}$
$K_{\text{Saresp},\text{O}_2}$	mg/L	0,65
$K_{\text{Sden}_1,\text{NO}_3}$	mg/L	0,3
$K_{\text{Sden}_2,\text{NO}_3}$	mg/L	0,15
$K_{\text{Smox},\text{O}_2}$	mg/L	0,33
$K_{\text{Snitr},\text{O}_2}$	mg/L	0,33
$\text{SOD}_{\text{macro}}$	$\text{g}/\text{m}^2/\text{d}$	0,5
V_{bk}	m^3	0,0069/0,00875
Z_{bio}	m	0,08
Θ	-	1,065
μ_{aresp}	1/d	0,01
μ_{den_1}	1/d	0,01
μ_{den_2}	1/d	0,05
μ_{mferm}	1/d	0,002
μ_{mox}	1/d	0,05
μ_{nitr}	1/d	0,005
Φ	-	0,8

ANHANG B: BASIC WATER QUALITY MODEL (BWQM)

Tab. B1: Variablen im BWQM.

Zielrößen (state variables)		
BSB	Biochemischer Sauerstoffbedarf allochtoner abbaubarer organischer Substanz	mg/L
Chl	Phytoplankton ausgedrückt in Chlorophyll-a	mg/L
NH ₄	Ammonium-Stickstoff (N-NH ₄)	mg/L
NO ₃	Nitrat-Stickstoff (N-NO ₃)	mg/L
N _{org}	Organisch (aber nicht an lebendes Phytoplankton) gebundener Stickstoff	mg/L
O ₂	Sauerstoff	mg/L
PO ₄	Algenverfügbarer Phosphor (Gesamt-Orthophosphat)	mg/L
P _{org}	Organisch (aber nicht an lebendes Phytoplankton) gebundener Phosphor	mg/L
Si	Gelöstes algenverfügbares Silizium	mg/L
Randbedingungen für alle Zuflüsse und Einleitungen (Messwerte)		
BSB _{in}	Biochemischer Sauerstoffbedarf allochtoner abbaubarer organischer Substanz	mg/L
Chl _{in}	Phytoplankton ausgedrückt in Chlorophyll-a	mg/L
NH ₄ _{in}	Ammonium-Stickstoff (N-NH ₄)	mg/L
NO ₃ _{in}	Nitrat-Stickstoff (N-NO ₃)	mg/L
N _{org, in}	Organisch (aber nicht an lebendes Phytoplankton) gebundener Stickstoff	mg/L
O _{2, in}	Sauerstoff	mg/L
PO _{4, in}	Algenverfügbarer Phosphor (Gesamt-Orthophosphat)	mg/L
P _{org, in}	Organisch (aber nicht an lebendes Phytoplankton) gebundener Phosphor	mg/L
Q _{in}	Abfluss	m ³ /s
Intern berechnete Variablen		
E _{turbine}	Austauscheffizienz bei Turbinenbelüftung für Sauerstoff bei 20°C	-
E _{wehr}	Austauscheffizienz bei Wehrbelüftung für Sauerstoff bei 20°C	-
f _E	Temperaturkorrekturterm für Weh- und Turbinenbelüftung	-
F _{NH4}	Anteil des Ammonium am gesamten von Algen aufgenommenen Stickstoff	-
F _{nutr}	Faktor zur Minderung des Algenwachstums infolge Nährstoffmangel	-
F _{PAR}	Faktor zur Minderung des Algenwachstums infolge Lichtmangel	-
F _{tot}	Summarischer Faktor für die Minderung des Algenwachstums	-
F _{Tw}	Faktor zur Minderung des Algenwachstums infolge nicht optimaler Temperaturen	-
j _{O2, wehr}	Lokaler Massenstrom von Sauerstoff infolge Wehrbelüftung	g/h
j _{O2, turbine}	Lokaler Massenstrom von Sauerstoff infolge Turbinenbelüftung	g/h
O _{2, corrB1}	Hemmfaktor für die Nitrifikation infolge Sauerstoffmangel	-
O _{2, sat}	Sättigungskonzentration des Sauerstoffs	mg/L
SPM	Schwebstoffkonzentration (ohne Phytoplankton)	mg/L
TR	Lichtextinktionsfaktor infolge Phytoplankton und Schwebstoffen	m ⁻¹
v _x	Mittlere longitudinale Fließgeschwindigkeit	m/s
y	Mittlere Wassertiefe	m
y _{euph}	Euphotische Tiefe, bei der 1% von PAR ₀ ankommt	m

Tab. B1: Variablen im BWQM (Fortsetzung)

Forcing variables		
I_{glob}	Globalstrahlung	W/m^2
b_{wehr}	Breite des Wehrs bei Wehrbelüftung	m
h_{wehr}	Überfallhöhe des Wehrs bei Wehrbelüftung	m
Q_{wehr}	Abfluss über Wehr bei Wehrbelüftung	m^3/s
T_w	Wassertemperatur	m^3/s
$\Delta P\%$	Prozentuale Leistungsreduktion bei der Turbinenbelüftung	$^{\circ}\text{C}$
Parameter		
a_3	Umrechnung von bei der Photosynthese produziertem Chl-a in Sauerstoff	-
a_4	Umrechnung von bei der Respiration abgebautem Chl-a in verbrauchten Sauerstoff	-
a_N	Umrechnung von Chl-a in phytoplanktongebundenen Stickstoff	-
a_P	Umrechnung von Chl-a in phytoplanktongebundenen Phosphor	-
a_{Si}	Umrechnung von Chl-a in phytoplanktongebundenes Silizium	-
B_1	Nitrifikationsrate bei 20 °C	d^{-1}
B_3	Stickstoffhydrolyserate bei 20 °C	d^{-1}
B_4	Phosphorhydrolyserate bei 20 °C	d^{-1}
Den_{sod}	Verhältnis des Denitrifikationsverlusts von NO_3 im Sediment zum SSB	-
K_1	Abbauraten für allochtone organische Substanz	d^{-1}
K_{Ninorg}	Halbsättigungskonzentration für Stickstoff	mg/L
k_{OD}	Vorfaktor bei der Wiederbelüftungsrate nach O'Connor und Dobbins	m
K_{PAR}	Halbsättigungsintensität für photosynthetisch aktive Strahlung	$\mu\text{E}/\text{m}^2/\text{s}$
K_{PO_4}	Halbsättigungskonzentration für Phosphor	mg/L
K_{Si}	Halbsättigungskonzentration für Silizium	mg/L
M_{max}	Maximale Algenwachstumsrate	d^{-1}
N_{sod}	Verhältnis zwischen Ammoniumfreisetzung und Sauerstoffbedarf des Sediments	-
P_{NH_4}	Algenpräferenzfaktor von Ammonium gegenüber Nitrat	-
P_{sod}	Verhältnis zwischen Phosphorfestlegung und Sauerstoffbedarf des Sediments	-
R	„Respirationsrate“ des Phytoplanktons bei 20 °C	d^{-1}
S_1	Sinkgeschwindigkeit des Phytoplanktons	m/h
$S_{\text{i_sod}}$	Verhältnis zwischen Siliziumfreisetzung und Sauerstoffbedarf des Sediments	-
S_{org}	Sinkgeschwindigkeit der toten organischen Substanz (N_{org} , P_{org} , BOD)	m/h
spm_0	Achsenabschnitt der empirischen Beziehung zwischen Q und SPM	-
spm_1	Steigung der empirischen Beziehung zwischen Q und SPM	-
spm_2	Exponent der empirischen Beziehung zwischen Q und SPM	-
SSB	Sauerstoffbedarf des Sediments bei 20 °C	$\text{g}/\text{m}^2/\text{d}$
Θ_{B1}	Temperaturkorrekturfaktor der Nitrifikationsrate B_1	-
Θ_{B3}	Temperaturkorrekturfaktor der Stickstoffhydrolyserate B_3	-
Θ_{B4}	Temperaturkorrekturfaktor der Phosphorhydrolyserate B_4	-
Θ_{K1}	Temperaturkorrekturfaktor der BOD-Abbauraten K_1	-
Θ_{k2}	Temperaturkorrekturfaktor der Wiederbelüftungsrate	-
Θ_R	Temperaturkorrekturfaktor der Algenrespirationsrate R	-
Θ_{SOD}	Temperaturkorrekturfaktor für den Sauerstoffbedarf der Sedimente SOD	-

Tab. B2: Algebraische Gleichungen im BWQM.

Variable	Gleichung
$O_{2,sat}$ (Hua 1990)	$O_{2,sat} = \frac{980}{1013} \cdot \exp\left(-17,015355 + 0,0226297 \cdot (Tw + 273,15) + \frac{3689,38}{Tw + 273,15}\right)$
F_{tot}	$F_{tot} = F_{nutr} \cdot F_{PAR} \cdot F_{Tw}$
F_{Tw} (Nach Daten von Pöhlmann 1989)	$F_{Tw} = \begin{cases} 0,056 \cdot Tw & Tw < 18^\circ C \\ 1 - (Tw - 18) \cdot 0,09 & Tw \geq 18^\circ C \end{cases}$
F_{PAR} (Nach Daten von Pöhlmann 1989)	$F_{PAR} = MIN \left\{ \begin{array}{l} \frac{PAR0}{K_{PAR} + PAR0} \\ \frac{y_{euph} \cdot PAR0}{y \cdot (K_{PAR} + PAR0)} \end{array} \right\}$
PAR0 (Hoffmann 1977)	$PAR0 = \begin{cases} 0,9 \cdot (63,89 + 1,83 \cdot I_{glob}) & I_{glob} \geq 20 \\ 0 & I_{glob} < 20 \end{cases}$
y_{euph} (1% der Strahlung direkt unter der Wasseroberfläche)	$y_{euph} = -\frac{\ln(0,01)}{TR}$
TR (DiTorro 1978; Chapra 1997)	$TR = 0,0642 \cdot SPM + 8,8 \cdot Chl + 5,4 \cdot Chl^{2/3}$
SPM (eigene Messungen)	$SPM = spm0 + spm1 \cdot Q^{spm2}$
F_{nutr} (Liebig'scher Minimumfaktor)	$F_{nutr} = MIN \left\{ \begin{array}{l} \frac{PO_4}{K_{PO4} + PO_4} \\ \frac{(NO_3 + NH_4)}{K_{Ninorg} + (NO_3 + NH_4)} \\ \frac{Si}{K_{Si} + Si} \end{array} \right\}$
F_{NH4}	$F_{NH4} = \frac{P_{NH4} \cdot NH_4}{P_{NH4} \cdot NH_4 + NO_3 \cdot (1 - P_{NH4})}$
$O_{2,corrB1}$	$O_{2,corrB1} = 1 - \exp(-0,7 \cdot O_2)$

Tab. B2: Algebraische Gleichungen im BWQM (Fortsetzung)

$E_{turbine}$ (Nach Messungen von Wagner 1958)	$E_{turbine} = \left(\frac{0,04 \cdot \Delta P\%}{0,04 \cdot \Delta P\% + 1} \right)^{1 / (1 + 0,02103 \cdot (T_w - 20) + 8,261 \cdot 10^{-5} \cdot (T_w - 20)^2)}$
E_{wehr} (Avery und Novak 1978)	$E_{wehr} = 1 - \left(1 + 2,4 \cdot 10^{-5} \cdot \left(\frac{78,48 \cdot h_{wehr}^3}{(Q_{wehr} / b_{wehr})^2} \right)^{0,445} \cdot \left(\frac{Q_{wehr}}{b_{wehr}} \cdot 10^6 \right)^{0,53} \right)^{-1,115}$
f_E (Gulliver et al. 1990)	$f_E = \left(1 + 0,02103 \cdot (20 - T_w) + 8,261 \cdot 10^{-5} \cdot (20 - T_w)^2 \right)^{-1}$
$j_{O_2,turbine}$	$j_{O_2,turbine} = \left(1 - (1 - E_{turbine})^{f_E} \right) \cdot Q \cdot (O_{2,sat} - O_2)$
$j_{O_2,wehr}$	$j_{O_2,wehr} = \left(1 - (1 - E_{wehr})^{f_E} \right) \cdot Q_{wehr} \cdot (O_{2,sat} - O_2)$

Tab. B3: Differentialgleichungen zur Beschreibung der gewässerinternen Prozesse im BWQM.

Größe	Differentialgleichung
Sauerstoff	$\frac{dO_2}{dt} = -K_1 \cdot \Theta_{K1}^{(T_w-20)} \cdot BSB - 4,3 \cdot B_1 \cdot O_{2,corrB1} \cdot \Theta_{B1}^{(T_w-20)} \cdot NH_4 - \frac{SSB}{y} \cdot \Theta_{SOD}^{(T_w-20)}$ $+ k_{OD} \cdot \frac{\sqrt{y_x}}{y^{3/2}} \cdot \Theta_{k2}^{(T_w-20)} \cdot (O_{2,sat} - O_2) + a_3 \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - a_4 \cdot R \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} \cdot Chl$
Chlorophyll-a	$\frac{dChl}{dt} = M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - R \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} \cdot Chl - \frac{S_{Chl}}{y} \cdot Chl$
Biochemischer Sauerstoffbedarf	$\frac{dBSB}{dt} = -K_1 \cdot \Theta_{K1}^{(T_w-20)} \cdot BSB - \frac{S_{BSB}}{y} \cdot BSB$
Algenverfügbarer Phosphor	$\frac{dPO_4}{dt} = B_4 \cdot \Theta_{B4}^{(T_w-20)} \cdot P_{org} - a_P \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - P_{sod} \cdot \frac{SSB}{y} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)}$
Organisch gebundener Phosphor	$\frac{dP_{org}}{dt} = a_P \cdot R \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} \cdot Chl - B_4 \cdot \Theta_{B4}^{(T_w-20)} \cdot P_{org} - \frac{S_{Porg}}{y} \cdot P_{org}$
Nitrat-Stickstoff	$\frac{dNO_3}{dt} = DO_{corrB1} \cdot B_1 \cdot \Theta_{B1}^{(T_w-20)} \cdot NH_4 - a_N \cdot (1 - F_{NH4}) \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl$ $- Den_{sod} \cdot \frac{SOD}{y} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)}$
Ammonium-Stickstoff	$\frac{dNH_4}{dt} = B_3 \cdot \Theta_{B3}^{(T_w-20)} \cdot N_{org} - DO_{corrB1} \cdot B_1 \cdot \Theta_{B1}^{(T_w-20)} \cdot NH_4$ $- a_N \cdot F_{NH4} \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl + N_{sod} \cdot \frac{SSB}{y} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)}$
organisch gebundener Stickstoff	$\frac{dN_{org}}{dt} = a_N \cdot R \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} \cdot Chl - B_3 \cdot \Theta_{B3}^{(T_w-20)} \cdot N_{org} - \frac{S_{Norg}}{y} \cdot N_{org}$
Gelöstes Silizium	$\frac{dSi}{dt} = a_{Si} \cdot R \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} \cdot Chl - a_{Si} \cdot M_{max} \cdot F_{tot} \cdot Chl + Si_{sod} \cdot \frac{SSB}{y} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)}$

Tab. B4: Für die Sensitivitäts- und Identifizierbarkeitsanalyse verwendete Parameterwerte und deren angenommene Unsicherheit im BWQM.

Parameter	Einheit	Wert	intern verwendete Einheit	Wert	Prozentuale Unsicherheit	Absolute Unsicherheit
a ₃	-	130			20	26
a ₄	-	160			20	32
a _N	-	7			20	1,4
a _p	-	1			20	0,2
a _{Si}	-	13			20	2,6
B ₁	d ⁻¹	0,24	h ⁻¹	0,01	50	0,005
B ₃	d ⁻¹	0,03	h ⁻¹	0,00125	50	0,000625
B ₄	d ⁻¹	0,72	h ⁻¹	0,03	50	0,015
Den _{sod}	-	0,2			50	0,1
K ₁	d ⁻¹	0,12	h ⁻¹	0,005	50	0,0025
k ₂	m	0,164			20	0,0328
K _{Ninorg}	mg/l	0,015			50	0,0075
K _{PAR}	μE/m ² /s	250			20	50
K _{PO4}	mg/L	0,003			50	0,0015
K _{Si}	mg/L	0,05			50	0,025
M _{max}	d ⁻¹	2	h ⁻¹	0,0833	20	0,0167
N _{sod}	-	0,066			50	0,033
P _{NH4}	-	0,9			20	0,18
P _{sod}	-	0,0092			50	0,0046
R	d ⁻¹	0,336	h ⁻¹	0,014	20	0,0028
S ₁	m/h	0,01			50	0,005
S _{i_sod}	-	0,066			50	0,033
SOD	g/m ² /d	0,96	g/m ² /h	0,04	20	0,008
S _{org}	m/h	0,01			50	0,005
spm ₀	-	8			60	4,8
spm ₁	-	0,00778			55	0,0043
spm ₂	-	1,732			5	0,087
Θ _{B1}	-	1,083				
Θ _{B3}	-	1,047				
Θ _{B4}	-	1,047				
Θ _{K1}	-	1,047				
Θ _{k2}	-	1,024				
Θ _R	-	1,08				
Θ _{SOD}	-	1,06				

Tab. B5: Kalibrierter Parameterwerte im BWQM.

Parameter	Einheit	Wert	intern verwendete Einheit	Wert
M_{\max}	d^{-1}	2.2	h^{-1}	0,092
R	d^{-1}	0,5	h^{-1}	0,0208
a_3	-	125		
a_4	-	145		
spm_0	-	0		

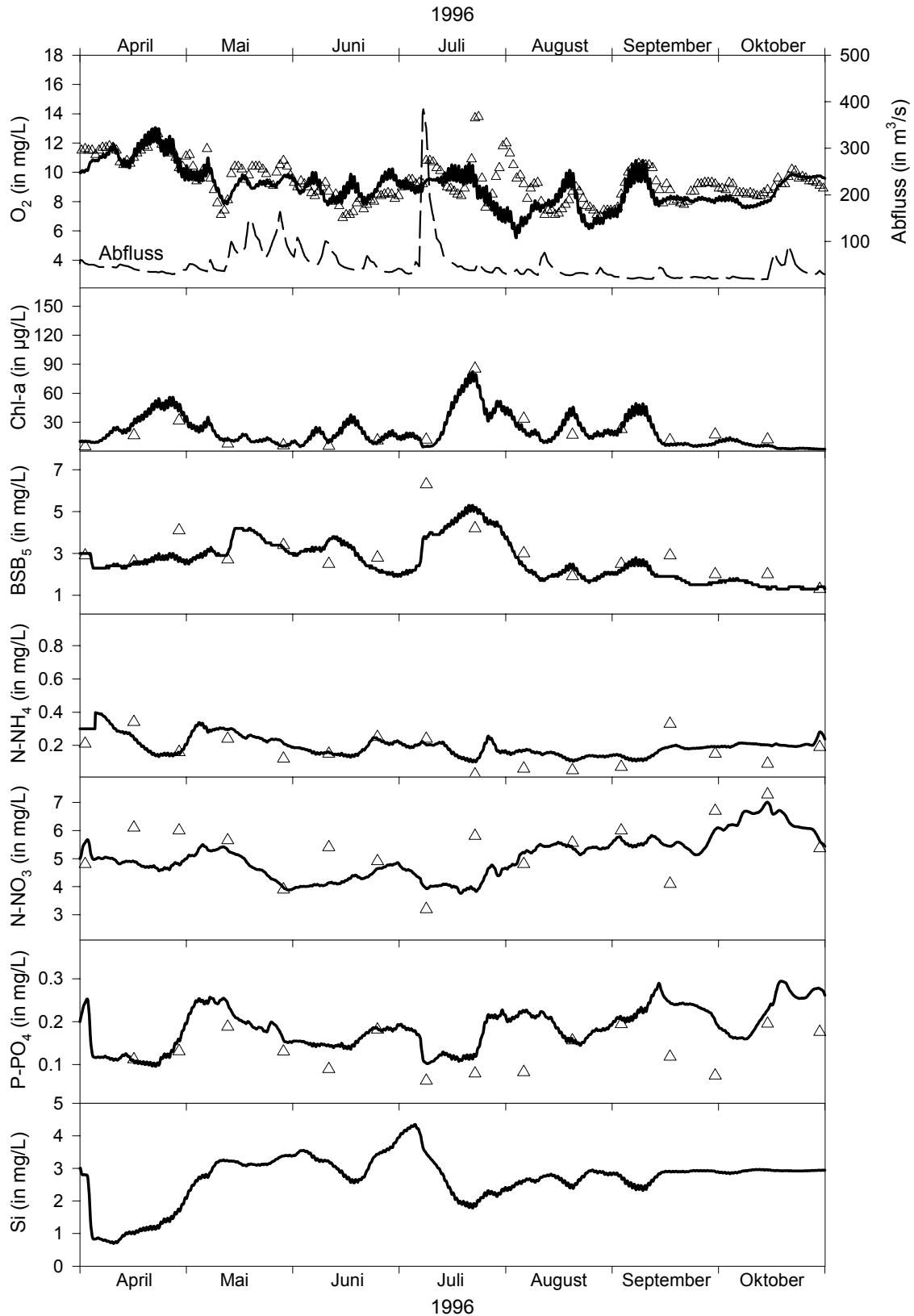


Abb. B1: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1996.

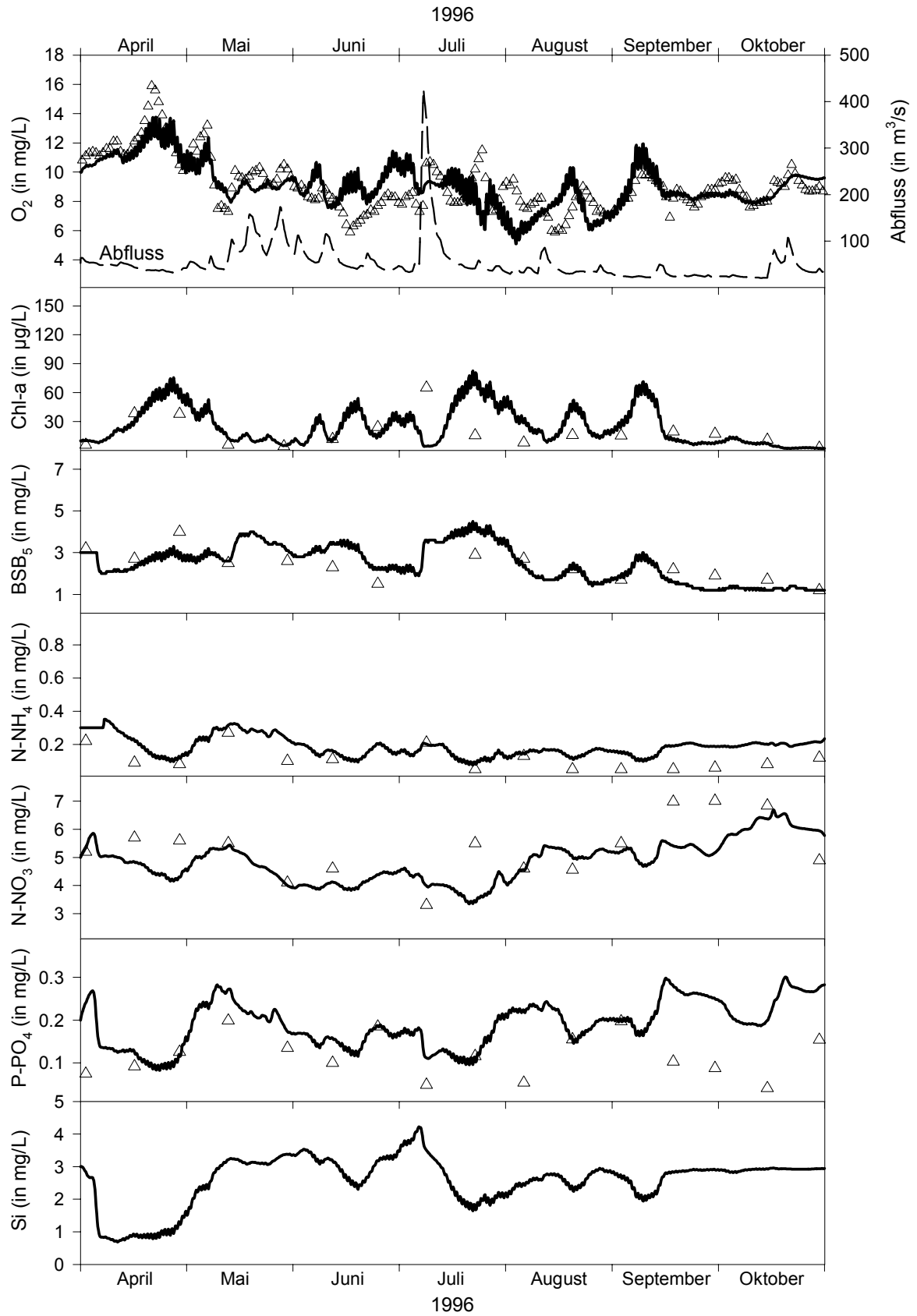


Abb. B2: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1996.

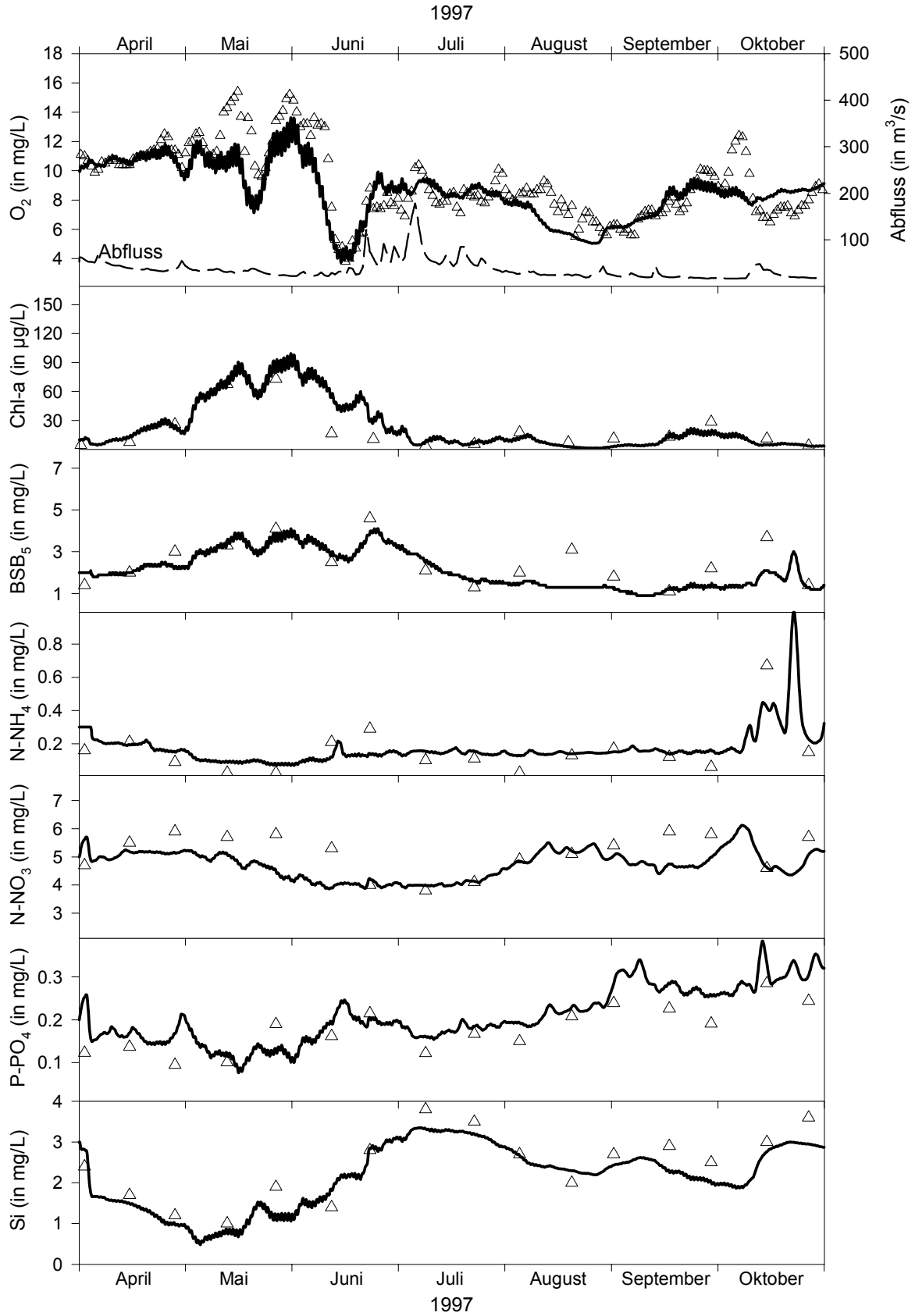


Abb. B3: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1997.

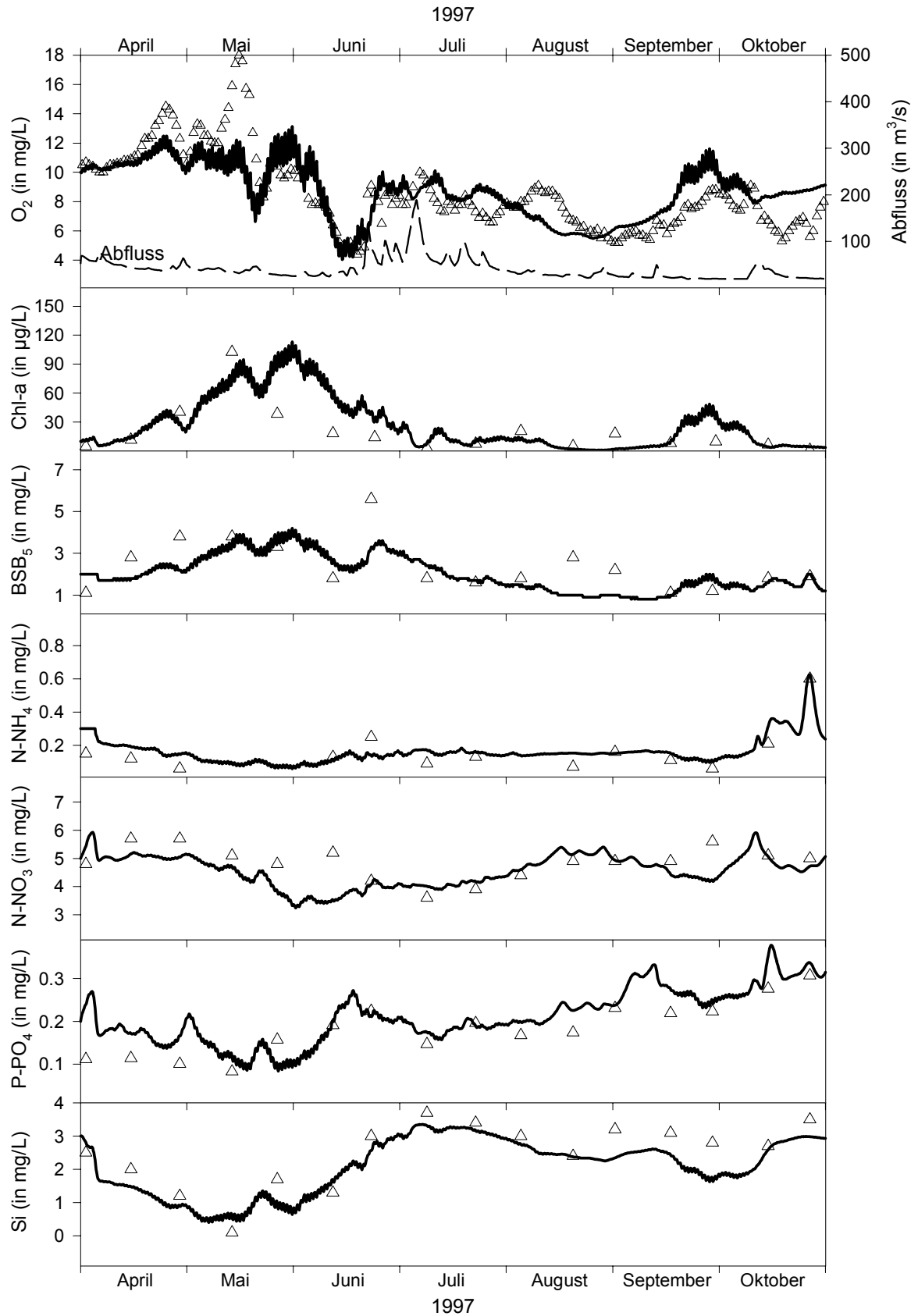


Abb. B4: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1997.

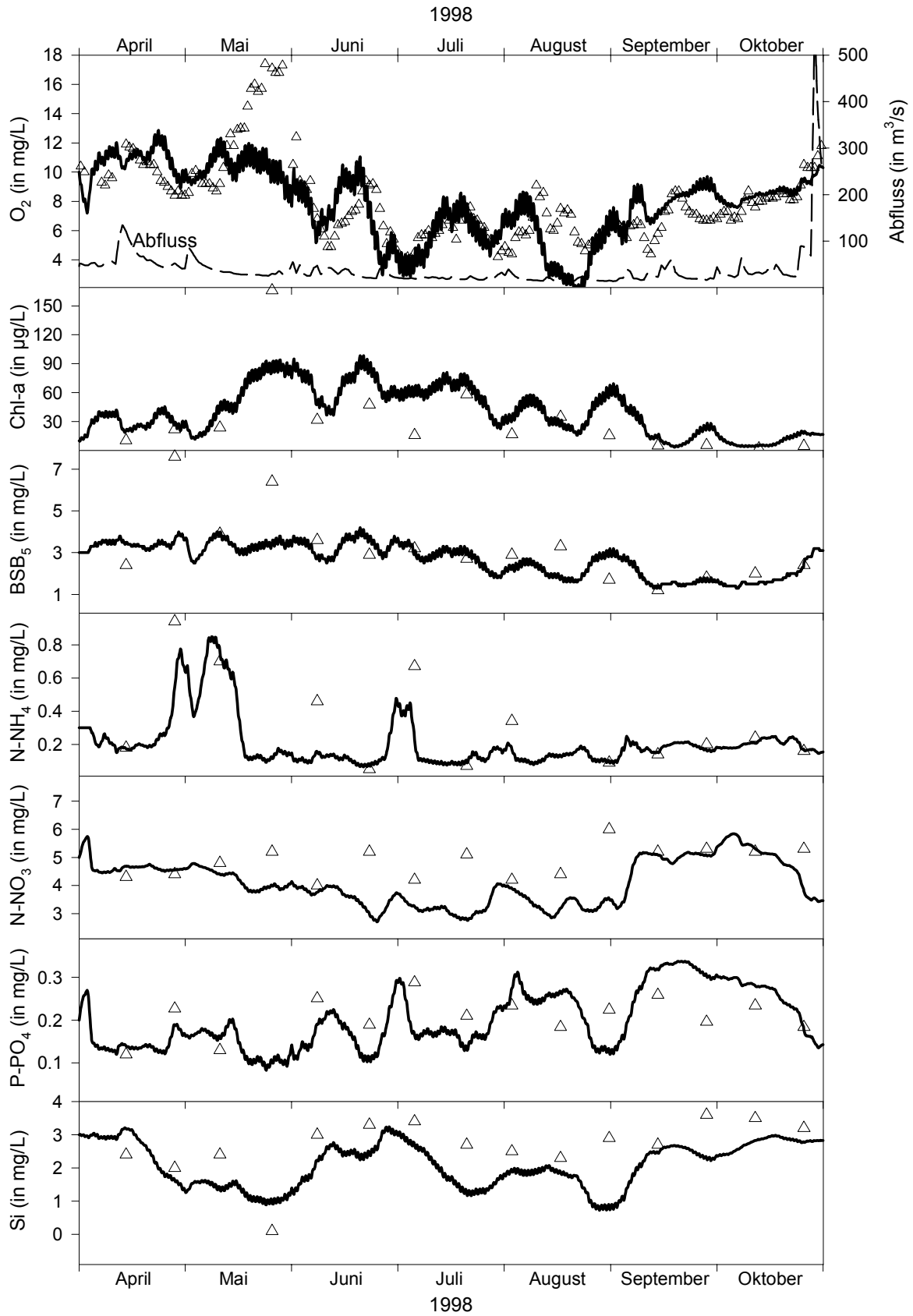


Abb. B5: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1998.

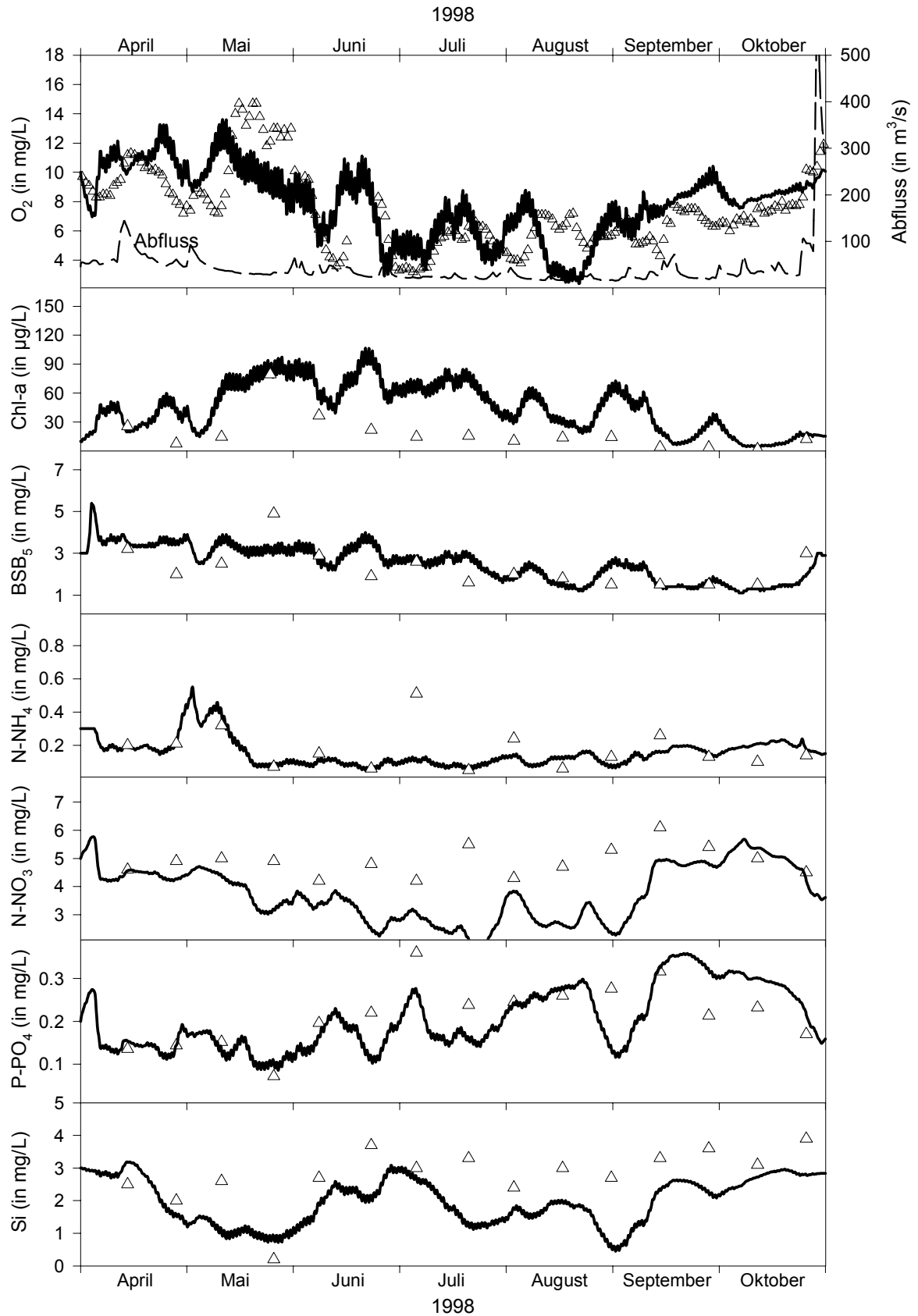


Abb. B6: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem BWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1998.

ANHANG C: EXTENDED WATER QUALITY MODEL (EWQM)

Tab. C1: Zusätzliche Variablen des EWQM, die nicht im BWQM enthalten sind.

Zielrößen (state variables)		
Ben	Benthische Filtrierer (<i>Dreissena Polymorpha</i>)	g/m ²
Zoo	Herbivores Zooplankton (Rotatorien und Cladoceren)	mg/L
Randbedingungen für alle Zuflüsse und Einleitungen (Mess- / Schätzwerte)		
ZOO _{in}	Herbivores Zooplankton	mg/L
Anfangsbedingung für Besiedlung der Flusssohle zum 1.4. des Jahres		
Ben _{ini}	Benthische Filtrierer	g/m ²
Intern berechnete Variablen		
A	Durchflossener Querschnitt	m ²
F _{Chl}	Wachstumshemmung von herb. Zooplankton durch Mangel an Phytoplankton	-
F _{food,Ben}	Wachstumshemmung von benthischen Filtrierern durch Mangel an Phytoplankton	-
F _{tot,Ben}	Gesamthemmung für das Wachstums von benthischen Filtrierern	-
F _{Tw}	Temperaturhemmung für das Wachstums von benthischen Filtrierern	-
P	Benetzter Umfang	m
ε _{Ben}	Relativer Teil der von benth. Filtrierern ingestierten Nahrung, die assimiliert wird	-
Parameter		
a _{Chl}	Umrechnung von Chl-a in Phytoplanktonbiomasse	-
Filt _{Ben}	Filtrierrate der benthischen Filtrierer	L/mg/d
Filt _{Zoo}	Filtrierrate des Zooplanktons	L/mg/d
Food _{Opt,Ben}	Optimale Chl-a Konzentration für das Wachstum benthischer Filtrierer	mg/L
K _{Chl}	Halbsättigungskonzentration von Chl-a für den Zoopnaktonfraß	mg/L
R _{base,Ben}	Basisverlustrate (Grundrespiration + Mortalität) der benthischen Filtrierer	1/d
R _{base,Chl}	Basisverlustrate (Grundrespiration + Mortalität) des Phytoplanktons	1/d
R _{base,Zoo}	Basisverlustrate (Grundrespiration + Mortalität) des herbivoren Zooplanktons	1/d
r _{photo}	Relativer Teil der Photorespiration am aktuellen Wachstum des Phytoplanktons	-
r _{R,Ben}	Relativer Teil der von benth. Filt. assimilierten Biomasse, der direkt veratmet wird	-
r _{R,Zoo}	Relativer Teil der vom Zoopl. assimilierten Biomasse, der direkt veratmet wird	-
Tw _{Opt,Ben}	Optimaltemperatur für das Wachstum benthischer Filtrierer	°C
ε _{max,Ben}	Maximaler Teil der von benth. Filt. ingestierten Biomasse, die assimiliert wird	-
ε _{min,Ben}	Minimaler Teil der von benth. Filt. ingestierten Biomasse, die assimiliert wird	-
ε _{Zoo}	Relativer Anteil der vom Zooplankton ingestierten Biomasse, die assimiliert wird	-
Θ _R	Temperaturkorrekturfaktor aller Basisrespirations- bzw. -verlustsraten (R _{base,...})	-
Θ _{Zoo}	Temperaturkorrekturfaktor für Wachstumsprozess des herbivoren Zooplankton	-

Tab. C2: Zusätzliche algebraische Gleichungen des EWQM, die nicht im BWQM enthalten sind.

Parameter	Gleichung
F_{Chl}	$F_{Chl} = \frac{Chl}{K_{Chl} + Chl}$
$F_{tot,Ben}$	$F_{tot,Ben} = F_{Tw,Ben} \cdot F_{food,Ben}$
$F_{Tw,Ben}$ (Kuntzmann 1989)	$F_{Tw,Ben} = \exp\left(-0.00605 \cdot (Tw_{Opt,Ben} - Tw)^2\right)$
$F_{food,Ben}$ (Walz 1978)	$F_{food,Ben} = MIN \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ \frac{Food_{Opt,Ben}}{Chl} \end{array} \right\}$
ε_{Ben}	$\varepsilon_{Ben} = MAX \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{min,Ben} \\ \varepsilon_{max,Ben} - 10 \cdot Chl \end{array} \right\}$

Tab. C3: Zusätzliche bzw. gegenüber dem BWQM veränderte Differentialgleichungen im EWQM.

Größe	Differentialgleichung
Sauerstoff	$\begin{aligned} \frac{dO_2}{dt} = & -K_1 \cdot \Theta_{K1}^{(T_w-20)} \cdot BSB + k_{OD} \cdot \frac{\sqrt{v_x}}{y^{3/2}} \cdot \Theta_{k2}^{(T_w-20)} \cdot (O_{2,sat} - O_2) - \frac{SSB}{y} \cdot \Theta_{SSB}^{(T_w-20)} \\ & + a_3 \cdot M_{\max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - a_4 \cdot (R_{base,Chl} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{photo} \cdot M_{\max} \cdot F_{tot}) \cdot Chl \\ & - a_4 \cdot (1 - \varepsilon_{Zoo}) \cdot Filt_{Zoo} \cdot F_{Chl} \cdot Zoo \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Chl \\ & - \frac{a_4}{a_{Chl}} \cdot (R_{base,Zoo} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Zoo} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Zoo} \cdot \varepsilon_{Zoo} \cdot Chl \cdot F_{Chl} \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)}) \cdot Zoo \\ & - \frac{P}{A} \cdot a_4 \cdot (1 - \varepsilon_{Ben}) \cdot Filt_{Ben} \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben \cdot Chl \\ & - \frac{P}{A} \cdot \frac{a_4}{a_{Chl}} \cdot (R_{base,Ben} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Ben} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Ben} \cdot \varepsilon_{Ben} \cdot Chl \cdot F_{tot,Ben}) \cdot Ben \end{aligned}$
Chlorophyll-a	$\begin{aligned} \frac{dChl}{dt} = & M_{\max} \cdot F_{tot} \cdot Chl - (R_{base,Chl} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{photo} \cdot M_{\max} \cdot F_{tot}) \cdot Chl - \frac{S_{Chl}}{y} \cdot Chl \\ & - Filt_{Zoo} \cdot F_{Chl} \cdot Zoo \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Chl - \frac{P}{A} \cdot Filt_{Ben} \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben \cdot Chl \end{aligned}$
Organisch gebundener Phosphor	$\begin{aligned} \frac{dP_{org}}{dt} = & a_P \cdot (R_{base,Chl} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{photo} \cdot M_{\max} \cdot F_{tot}) \cdot Chl - B_4 \cdot \Theta_{B4}^{(T_w-20)} \cdot P_{org} - \frac{S_{Porg}}{y} \cdot P_{org} \\ & + a_P \cdot (1 - \varepsilon_{Zoo}) \cdot Filt_{Zoo} \cdot F_{Chl} \cdot Zoo \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Chl \\ & + \frac{a_P}{a_{Chl}} \cdot (R_{base,Zoo} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Zoo} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Zoo} \cdot \varepsilon_{Zoo} \cdot Chl \cdot F_{Chl} \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)}) \cdot Zoo \\ & + \frac{P}{A} \cdot a_P \cdot (1 - \varepsilon_{Ben}) \cdot Filt_{Ben} \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben \cdot Chl \\ & + \frac{P}{A} \cdot \frac{a_P}{a_{Chl}} \cdot (R_{base,Ben} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Ben} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Ben} \cdot \varepsilon_{Ben} \cdot Chl \cdot F_{tot,Ben}) \cdot Ben \end{aligned}$
organisch gebundener Stickstoff	$\begin{aligned} \frac{dN_{org}}{dt} = & a_N \cdot (R_{base,Chl} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{photo} \cdot M_{\max} \cdot F_{tot}) \cdot Chl - B_3 \cdot \Theta_{B3}^{(T_w-20)} \cdot N_{org} - \frac{S_{Norg}}{y} \cdot N_{org} \\ & + a_N \cdot (1 - \varepsilon_{Zoo}) \cdot Filt_{Zoo} \cdot F_{Chl} \cdot Zoo \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Chl \\ & + \frac{a_N}{a_{Chl}} \cdot (R_{base,Zoo} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Zoo} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Zoo} \cdot \varepsilon_{Zoo} \cdot Chl \cdot F_{Chl} \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)}) \cdot Zoo \\ & + \frac{P}{A} \cdot a_N \cdot (1 - \varepsilon_{Ben}) \cdot Filt_{Ben} \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben \cdot Chl \\ & + \frac{P}{A} \cdot \frac{a_N}{a_{Chl}} \cdot (R_{base,Ben} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Ben} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Ben} \cdot \varepsilon_{Ben} \cdot Chl \cdot F_{tot,Ben}) \cdot Ben \end{aligned}$
Gelöstes Silizium	$\begin{aligned} \frac{dSi}{dt} = & a_{Si} \cdot (R_{base,Chl} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{photo} \cdot M_{\max} \cdot F_{tot}) \cdot Chl - a_{Si} \cdot M_{\max} \cdot F_{tot} \cdot Chl + Si_{sod} \cdot \frac{SSB}{y} \cdot \Theta_{SOD}^{(T_w-20)} \\ & + a_{Si} \cdot Filt_{Zoo} \cdot F_{Chl} \cdot Zoo \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Chl + \frac{P}{A} \cdot a_{Si} \cdot Filt_{Ben} \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben \cdot Chl \end{aligned}$

Tab. C3: Zusätzliche bzw. gegenüber dem BWQM veränderte Differentialgleichungen im EWQM (Fortsetzung)

herbivores Zooplankton	$\frac{dZoo}{dt} = a_{Chl} \cdot Filt_{Zoo} \cdot \varepsilon_{Zoo} \cdot Chl \cdot F_{Chl} \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \cdot Zoo$ $- \left(R_{base,Zoo} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Zoo} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Zoo} \cdot \varepsilon_{Zoo} \cdot Chl \cdot F_{Chl} \cdot \Theta_{Zoo}^{(T_w-20)} \right) \cdot Zoo$
---------------------------	---

Benthische Filtrierer (oberflächen- gebunden)	$\frac{dBen}{dt} = a_{Chl} \cdot Filt_{Ben} \cdot \varepsilon_{Ben} \cdot Chl \cdot F_{tot,Ben} \cdot Ben$ $- \left(R_{base,Ben} \cdot \Theta_R^{(T_w-20)} + r_{R,Ben} \cdot a_{Chl} \cdot Filt_{Ben} \cdot \varepsilon_{Ben} \cdot Chl \cdot F_{tot,Ben} \right) \cdot Ben$
--	---

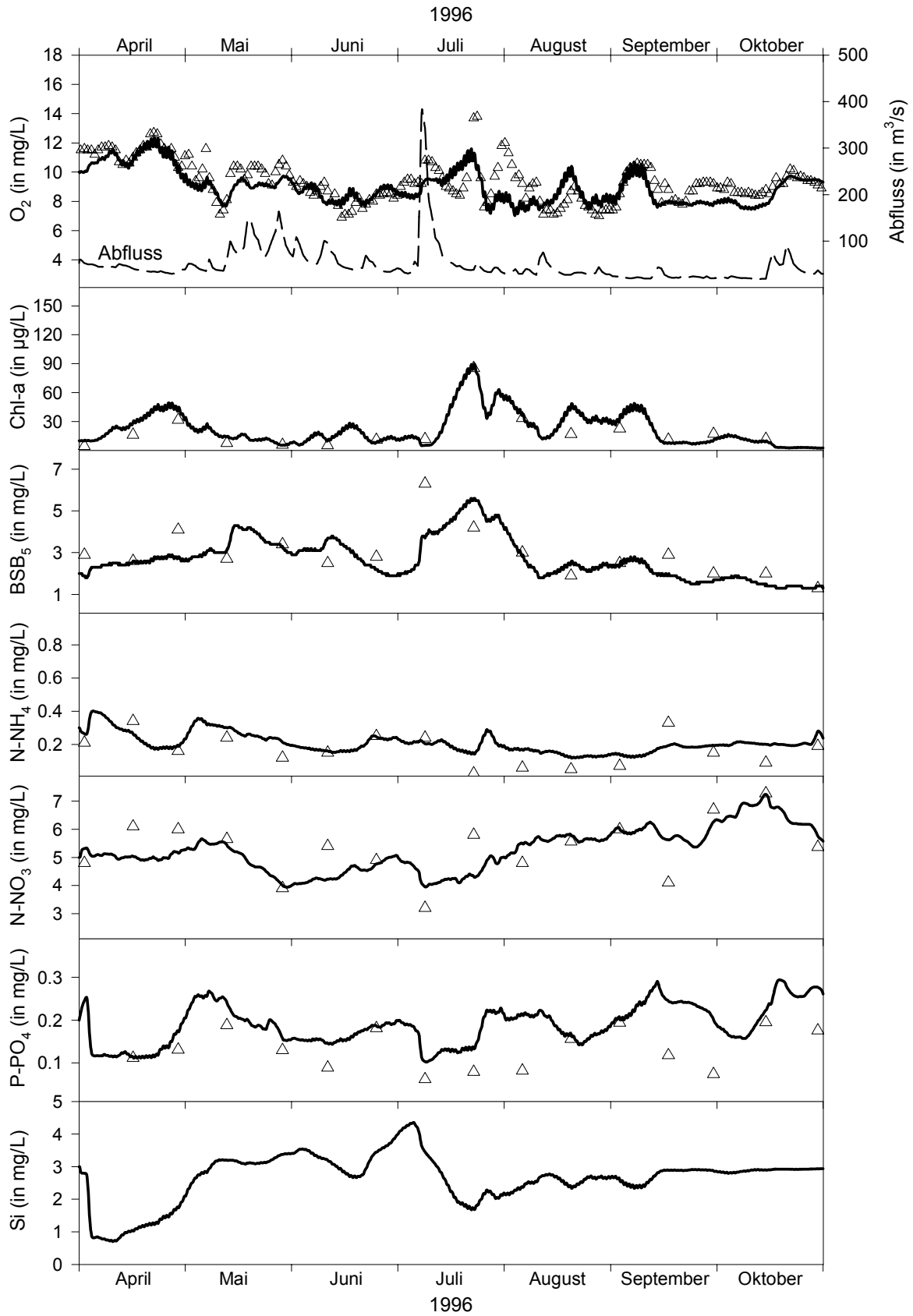


Abb. C1: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1996.

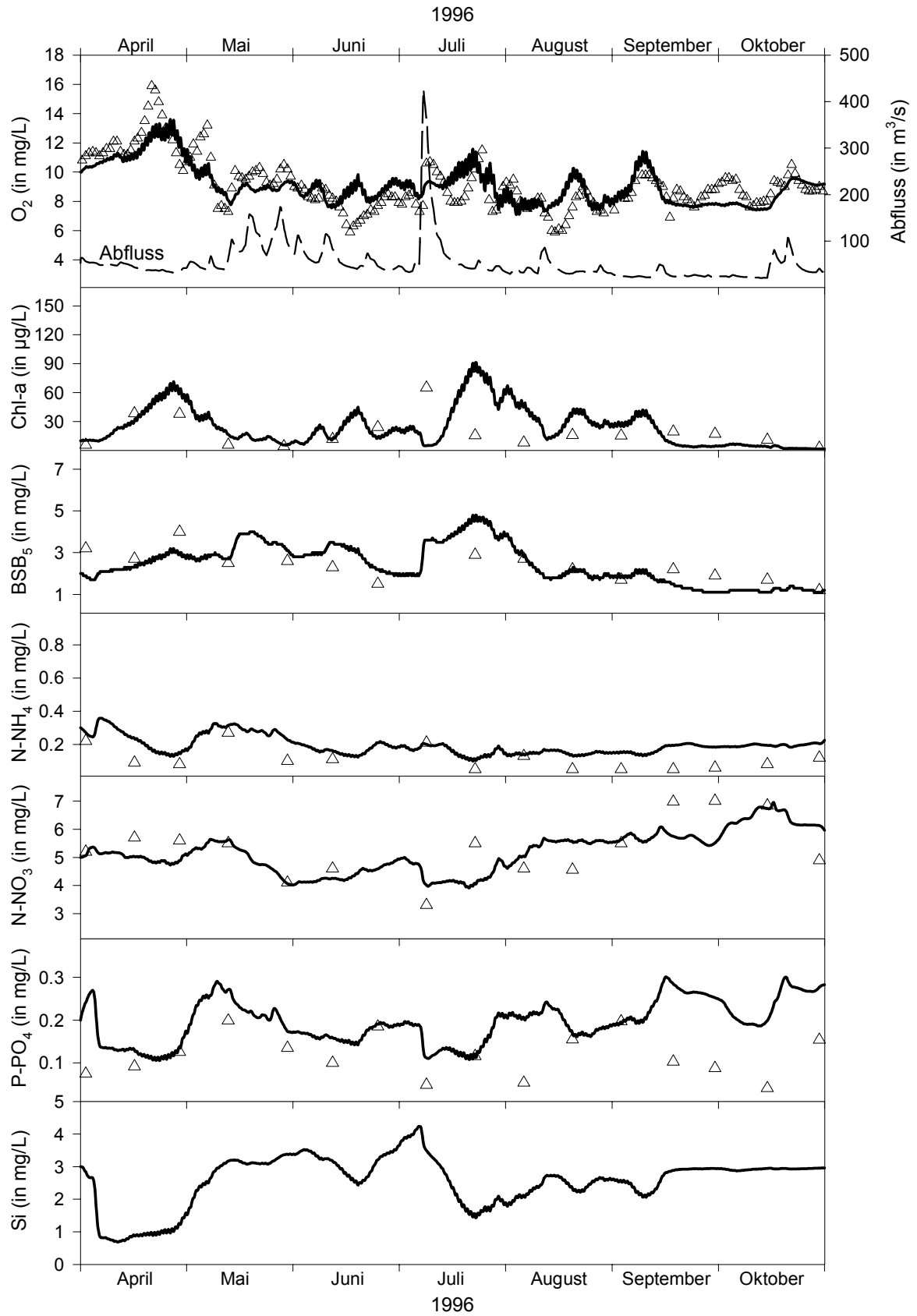


Abb. C2: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1996.

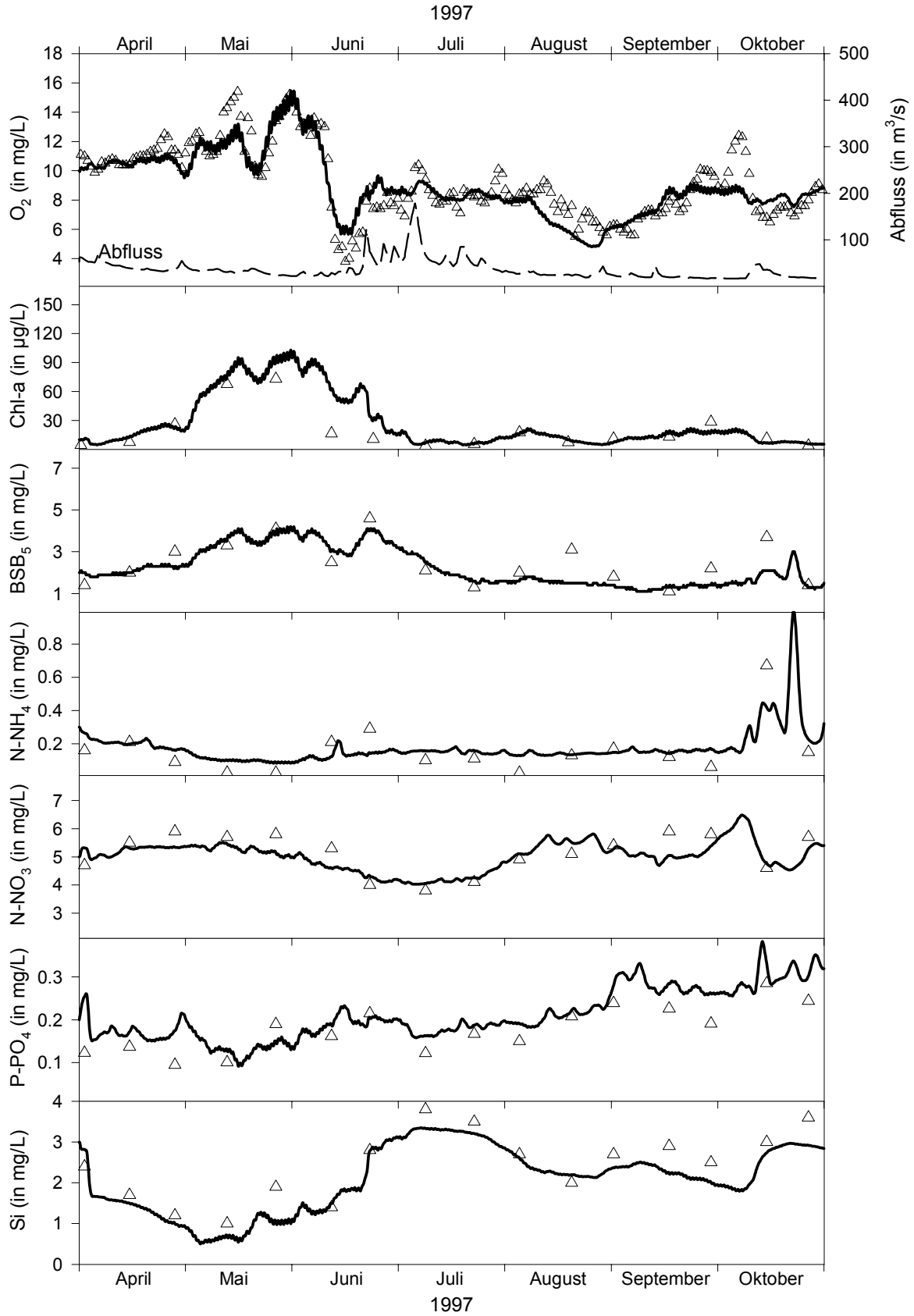


Abb. C3: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1997.

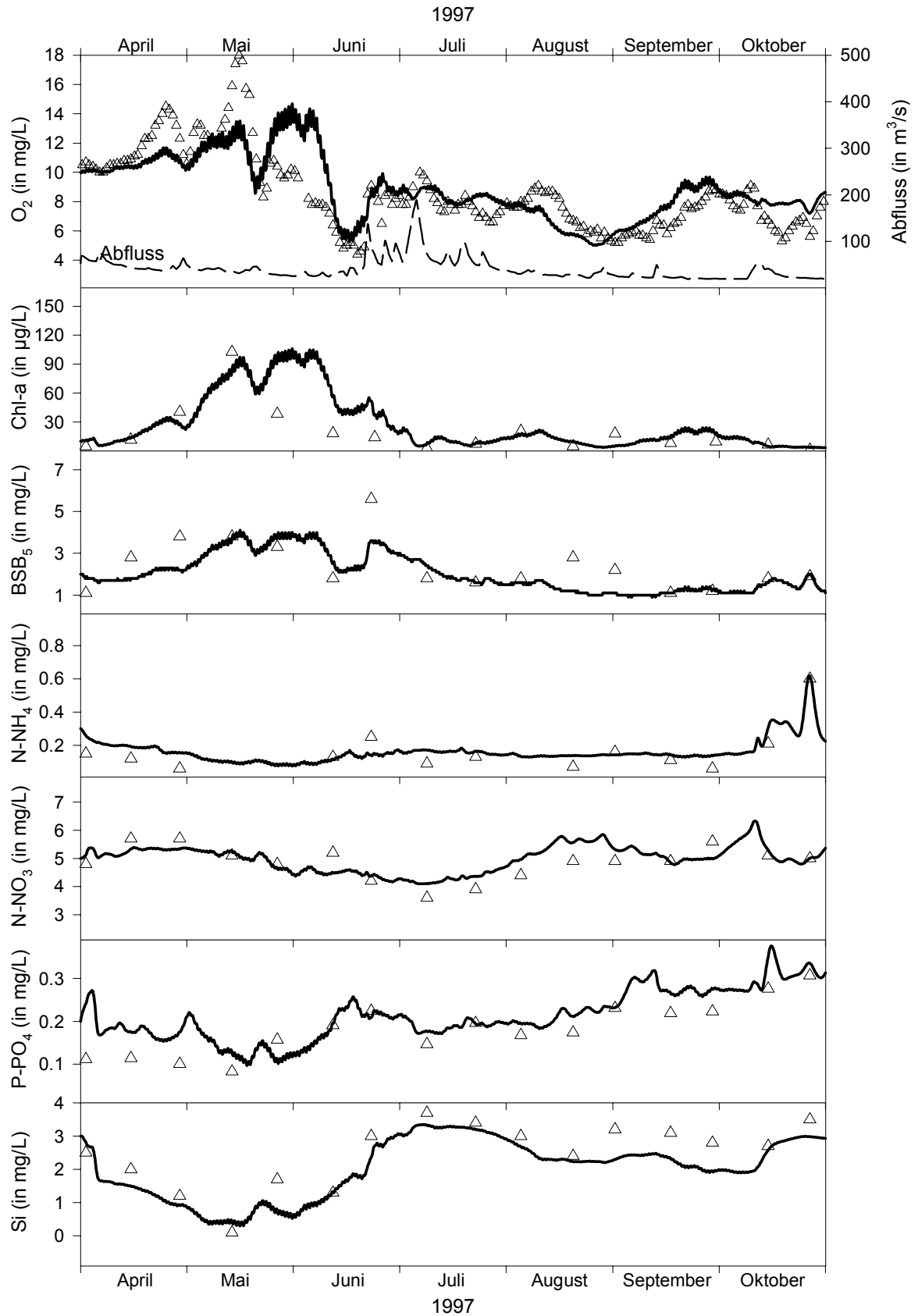


Abb. C4: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1997.

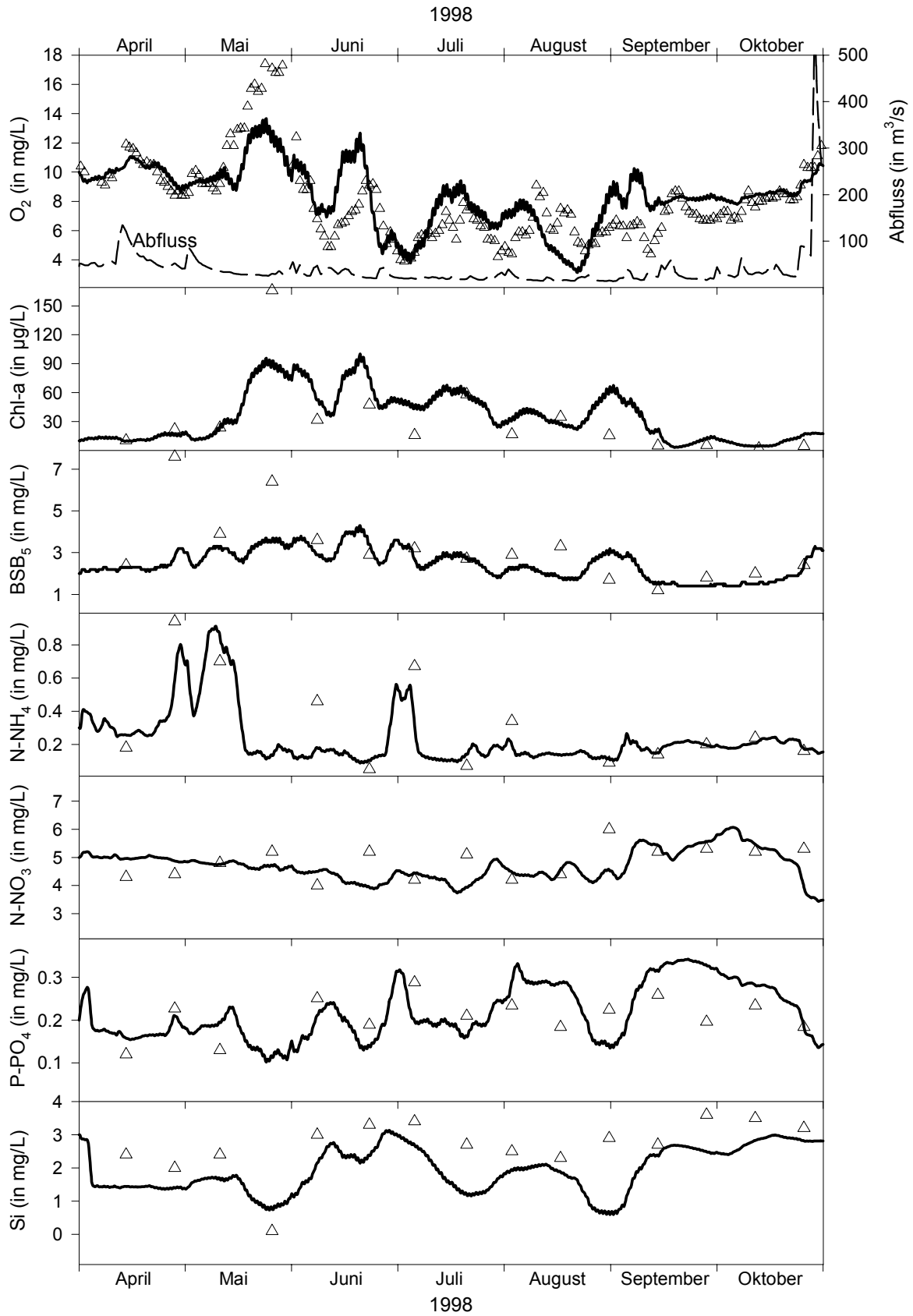


Abb. C5: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1998.

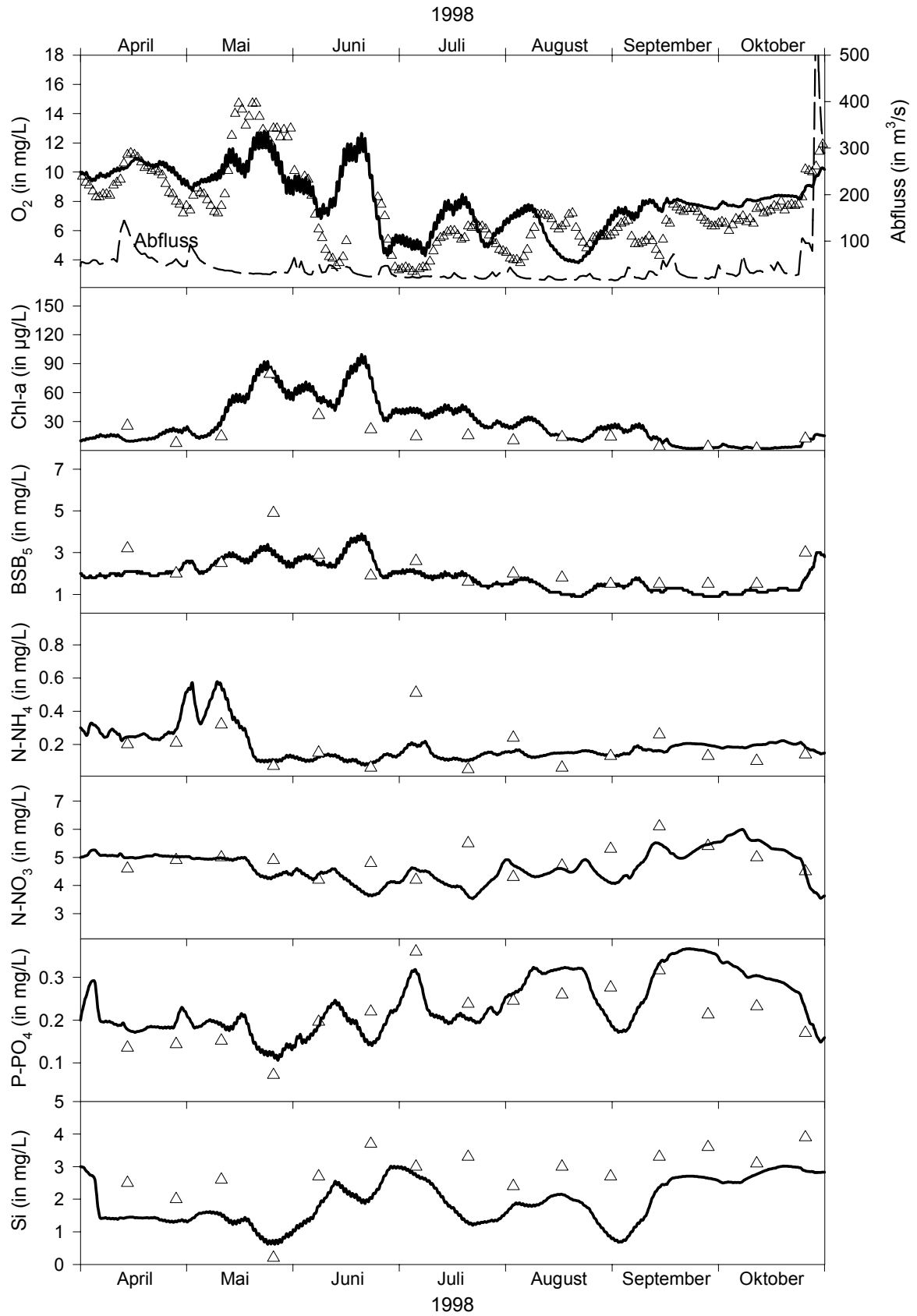


Abb. C6: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem EWQM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1998.

ANHANG D: GEWÄSSERGÜTESIMULATIONSMODELL DES ATV-DVWK (ATV-FGSM)

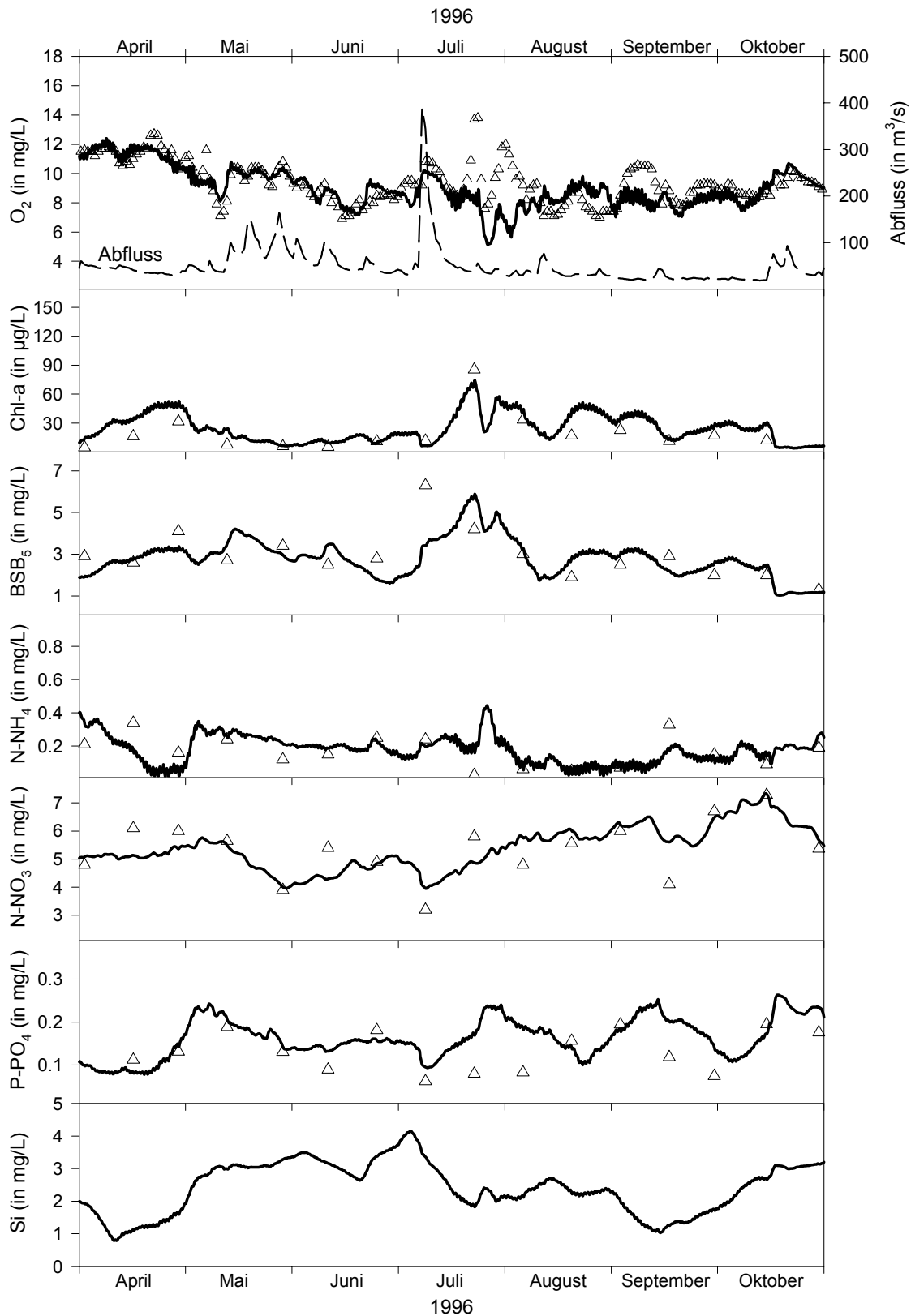


Abb. D1: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1996.

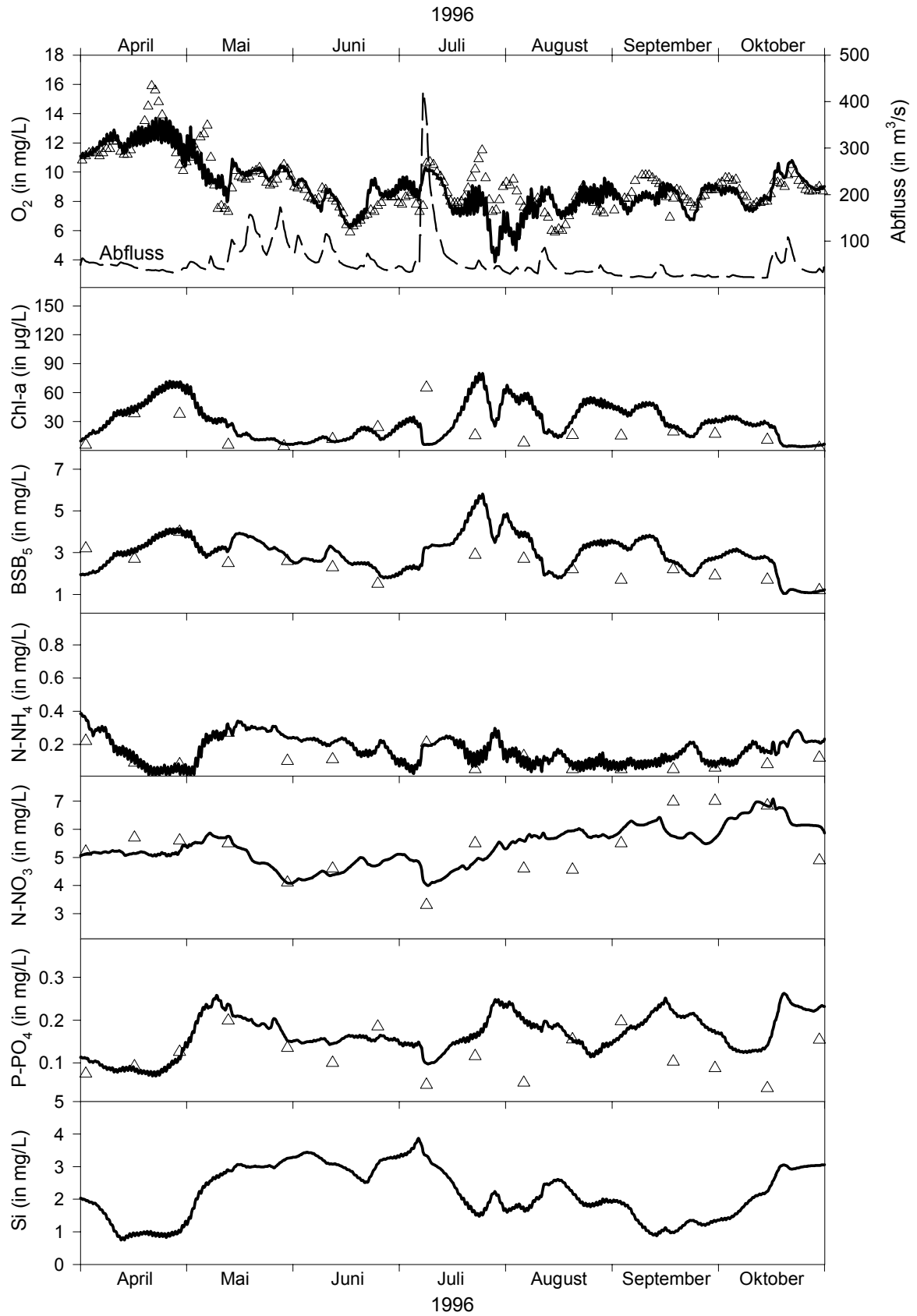


Abb. D2: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1996.

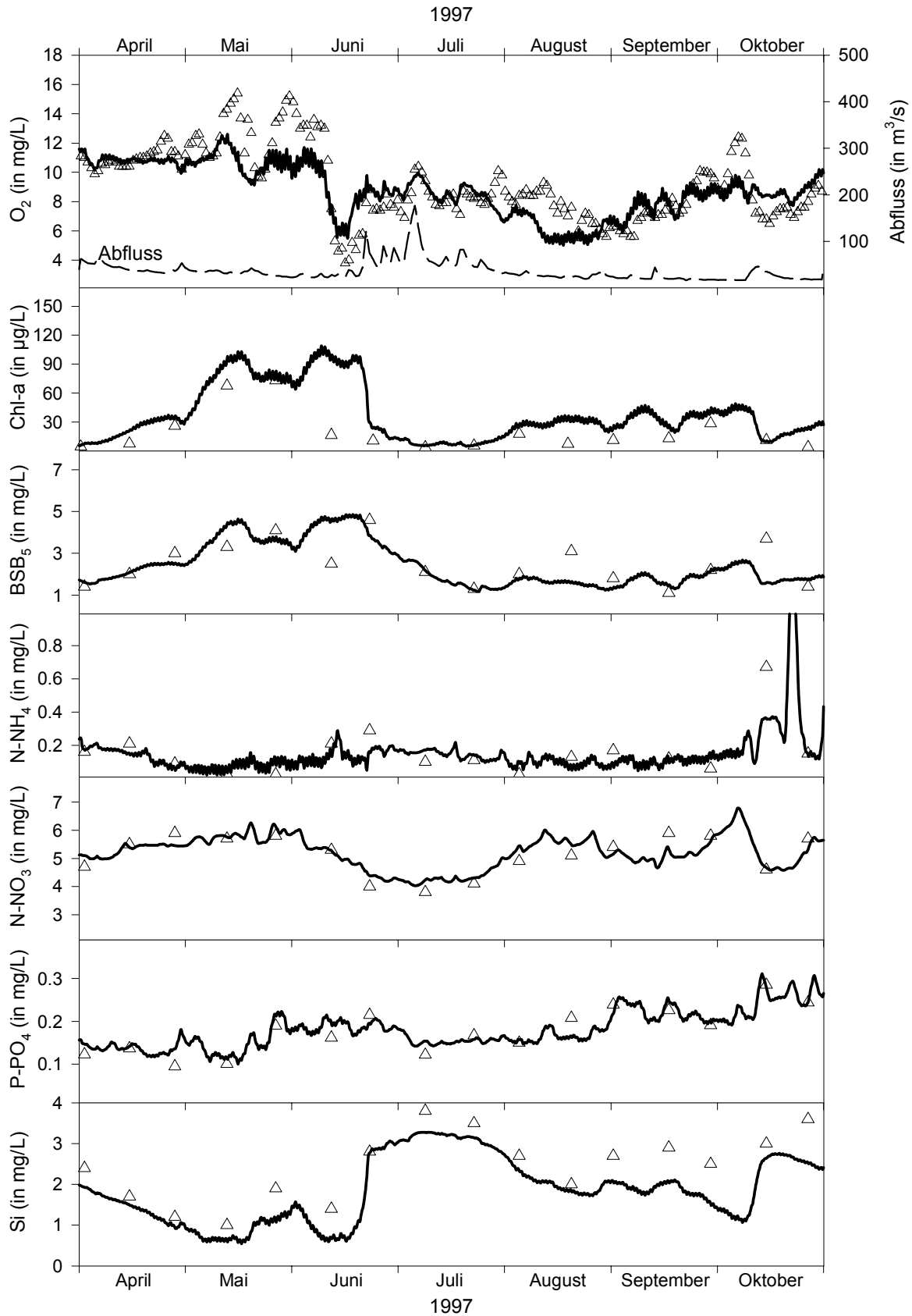


Abb. D3: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1997.

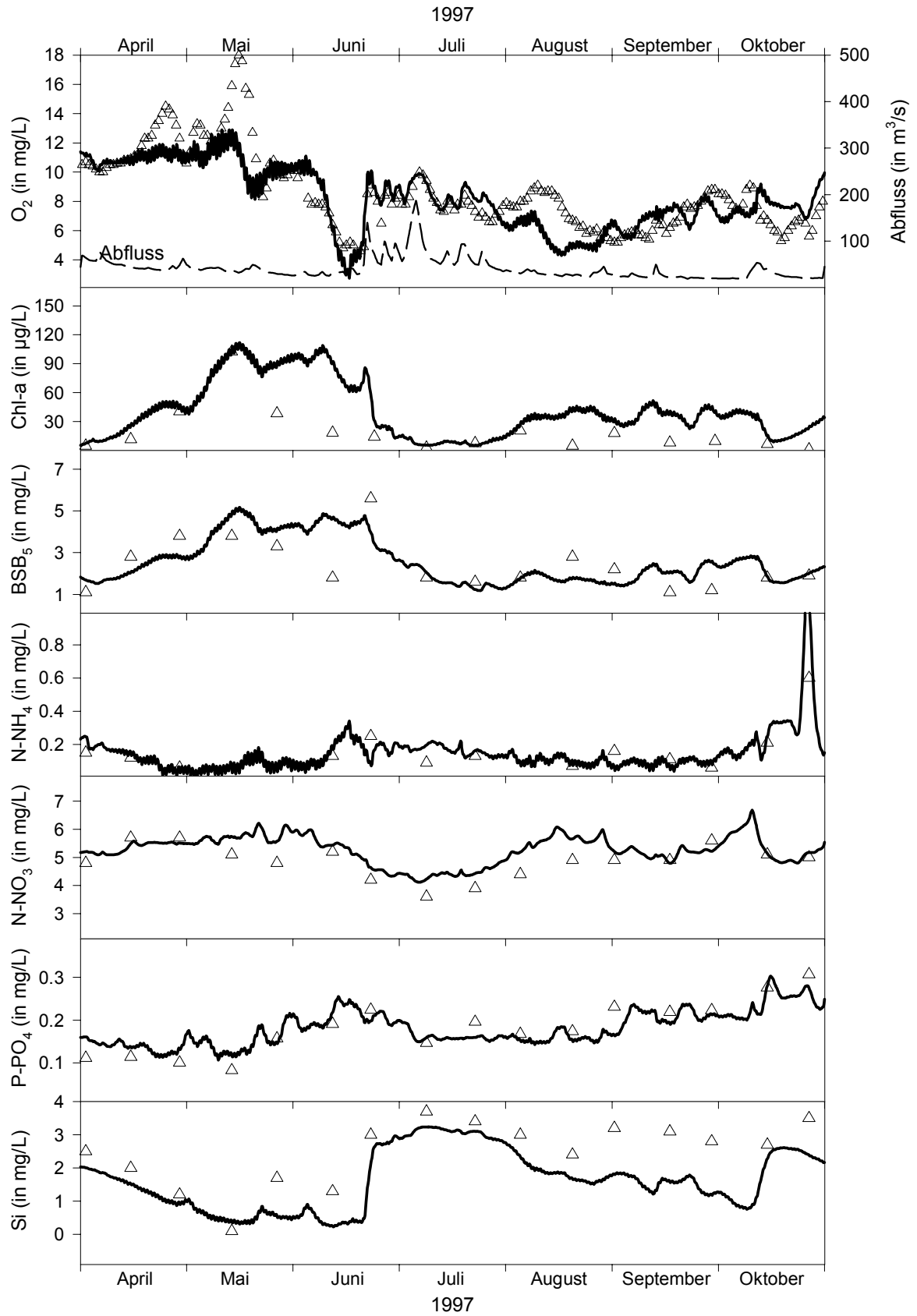


Abb. D4: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1997.

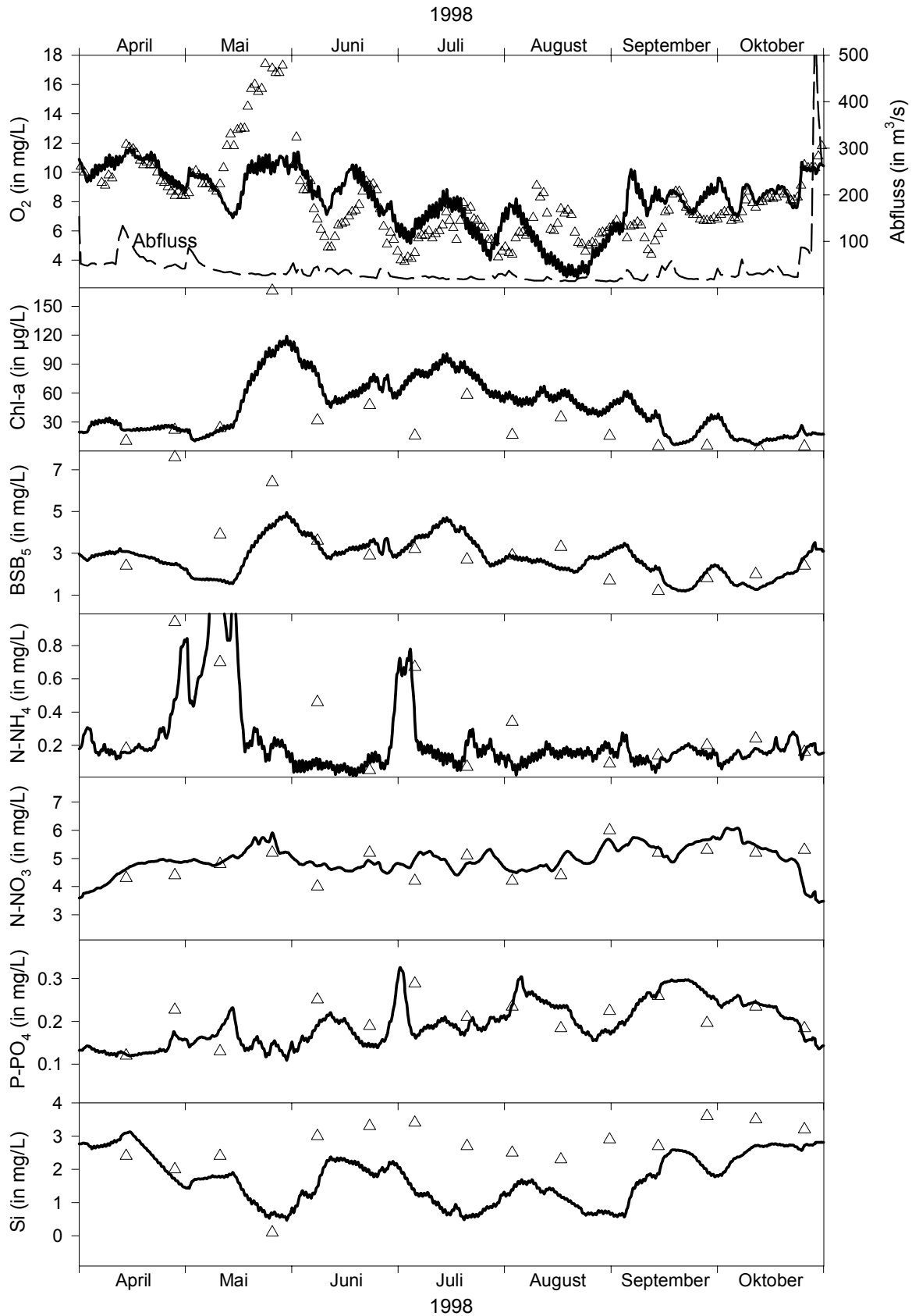


Abb. D5: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Poppenweiler während des Sommerhalbjahres 1998.

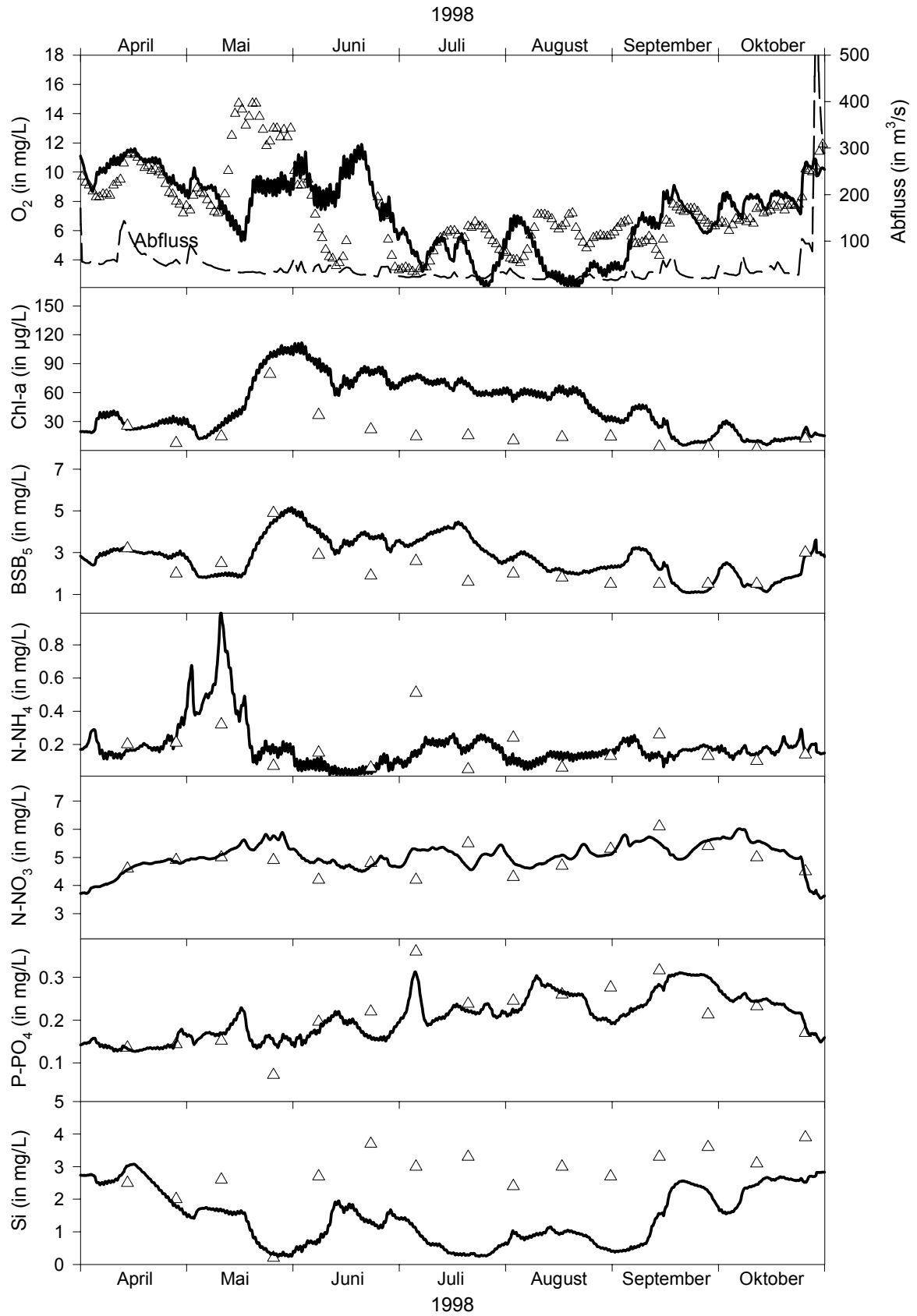


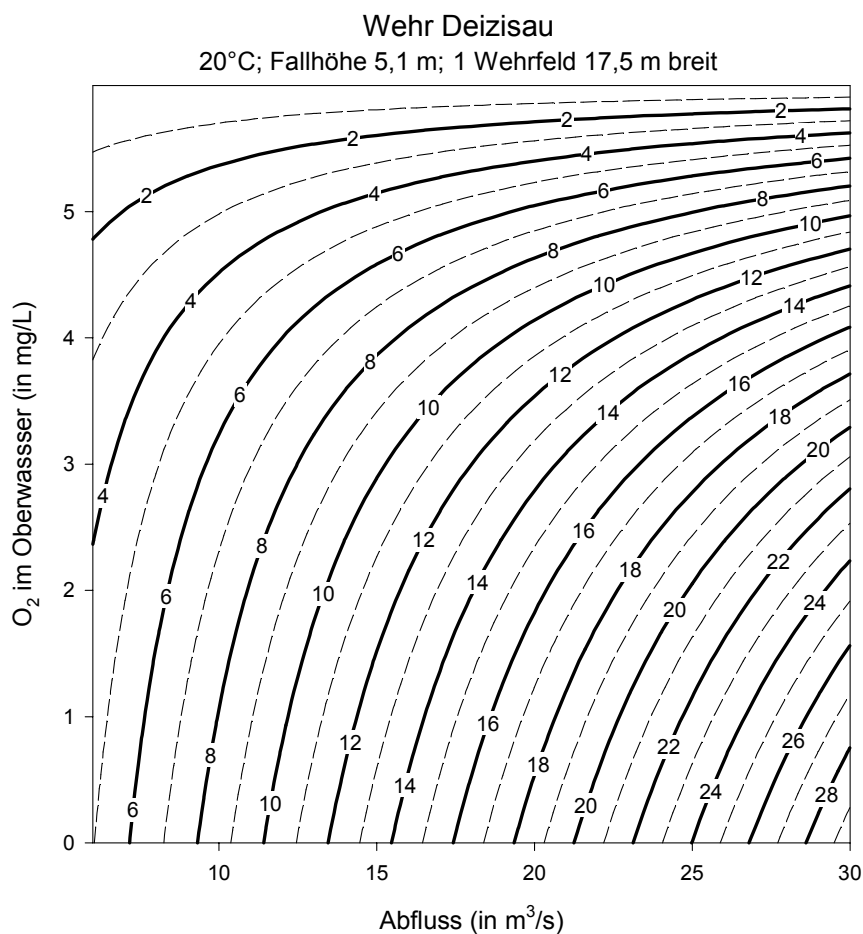
Abb. D6: Abfluss (gestrichelte Linie), Messwerte (Dreiecke) und mit dem ATV-FGSM simulierte Werte der Zielgrößen im Neckar bei Besigheim während des Sommerhalbjahres 1998.

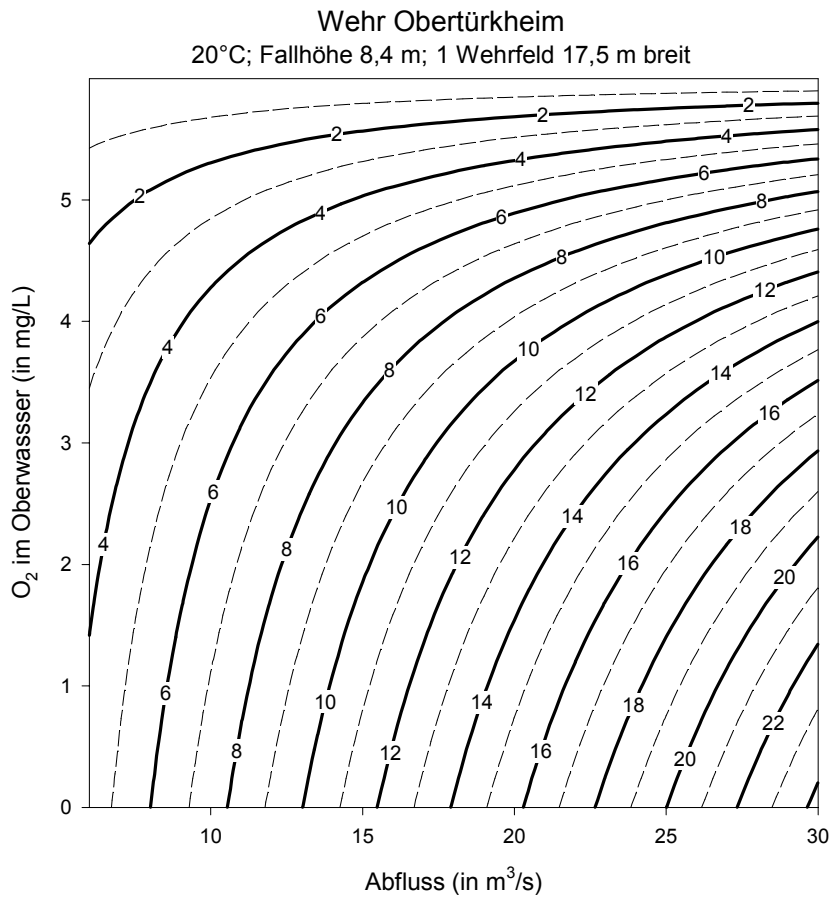
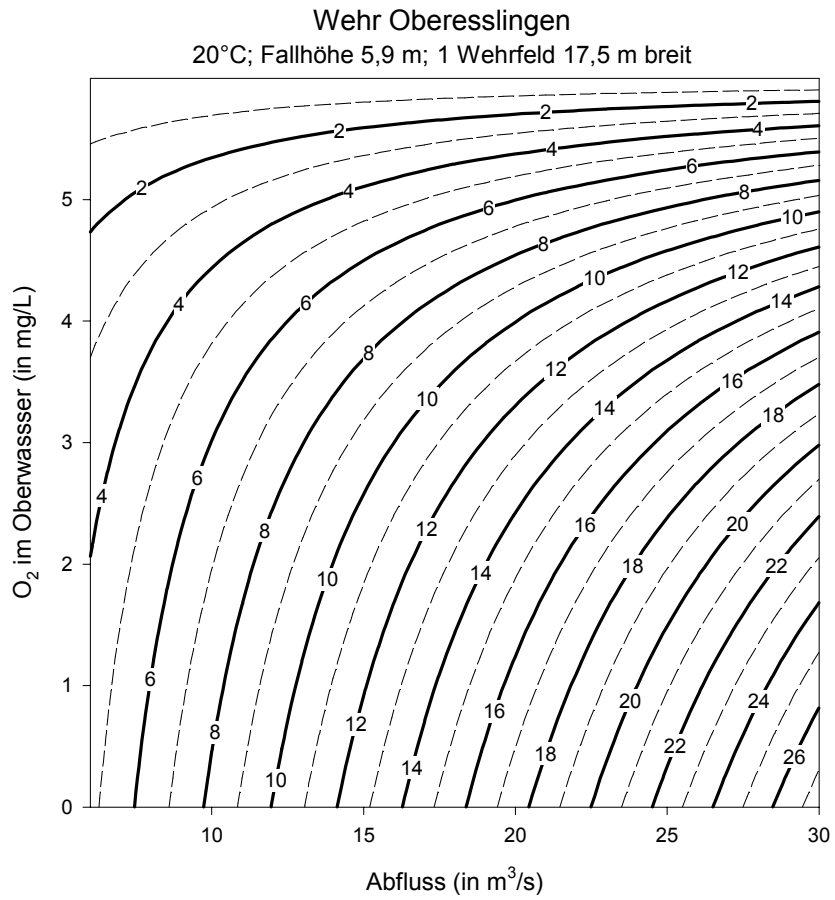
ANHANG E: NOMOGRAMME ZUR WEHRBELÜFTUNG

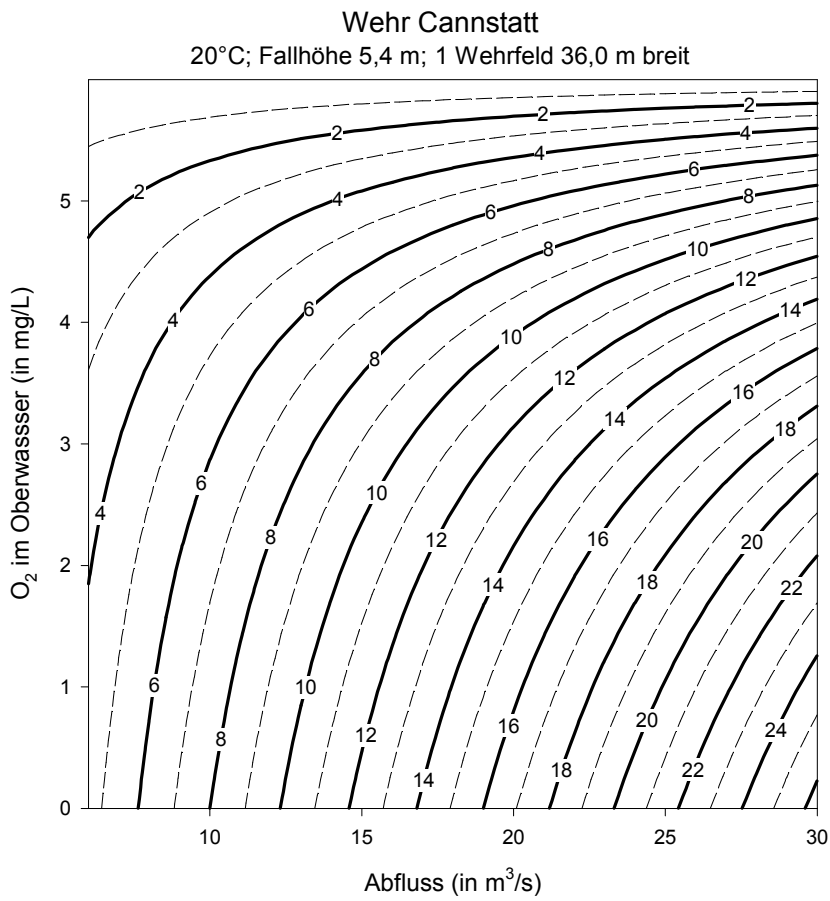
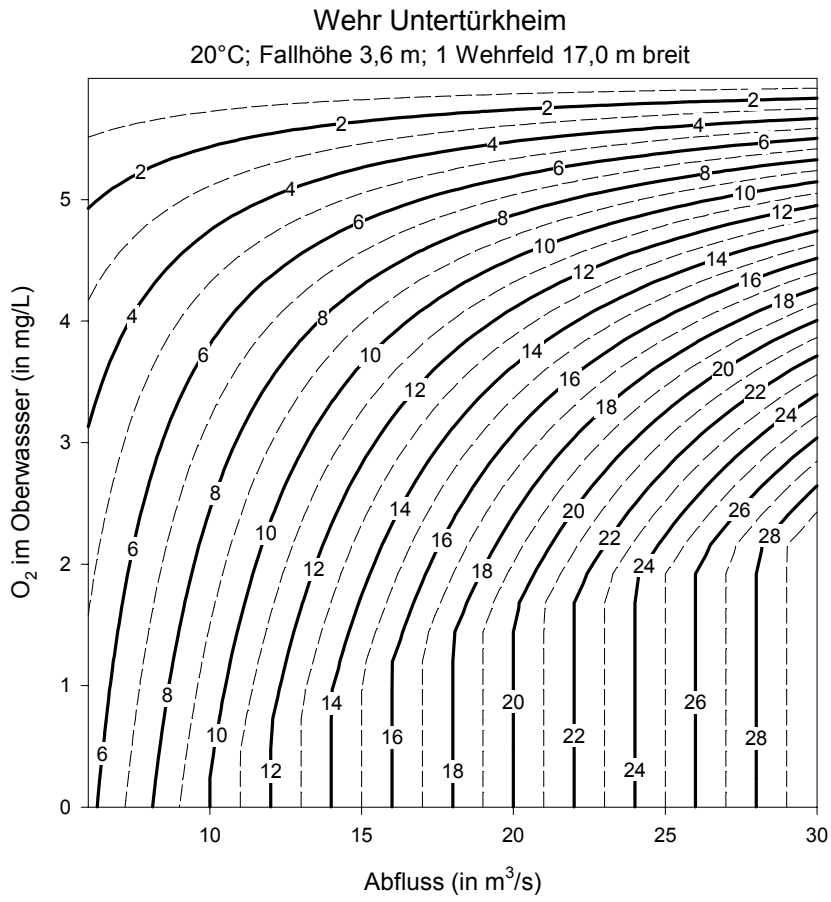
Die nachfolgenden Nomogramme zeigen, mit welchem Durchfluss (in m^3/s) die Wehre beschiekt werden müssen, um nach Mischung mit dem nicht belüfteten Turbinendurchfluss im Unterwasser einen Sauerstoffzielwert von 6 mg/L zu erreichen. Dabei sind der Gesamtabfluss und die Sauerstoffkonzentration im Oberwasser als Steuergrößen vorgegeben.

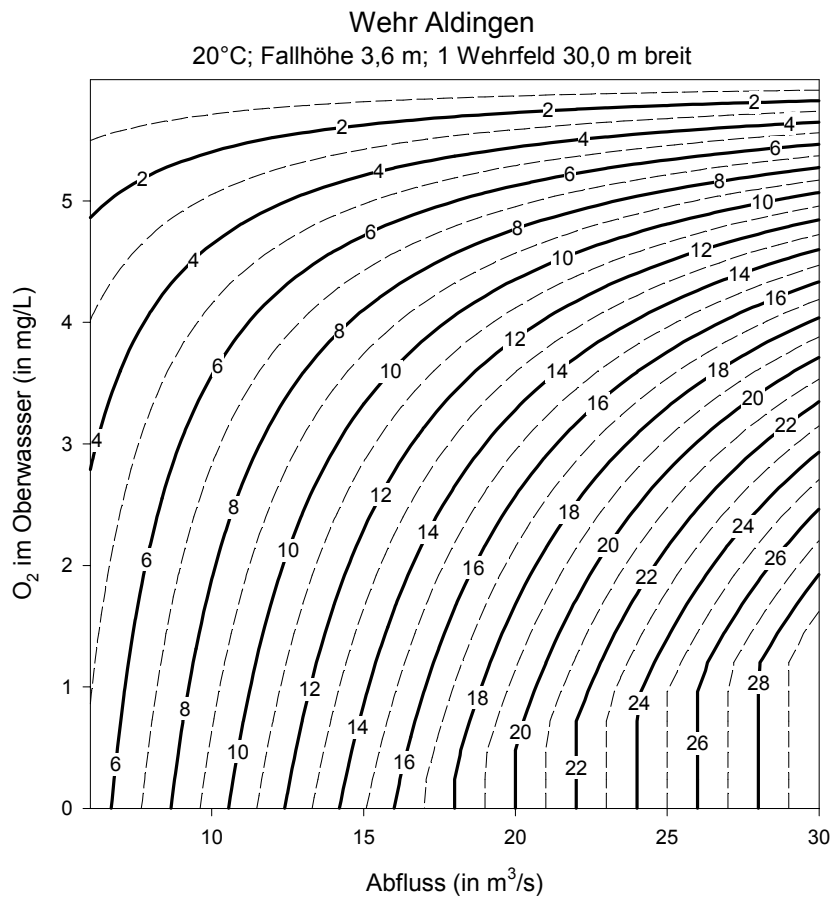
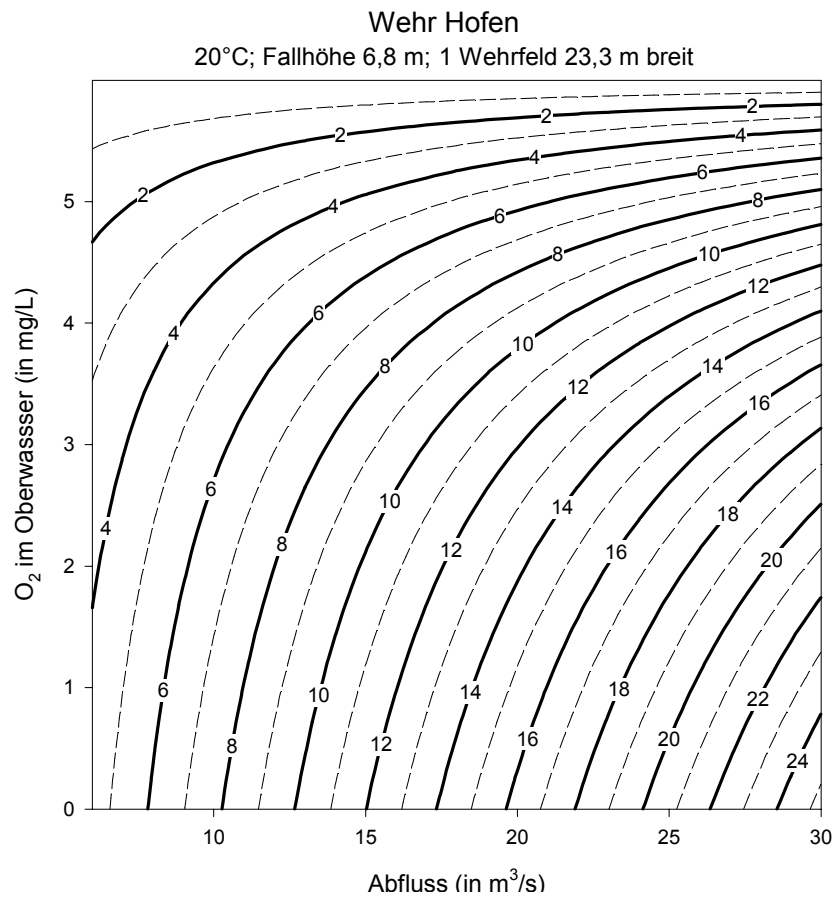
Für die Erstellung der Nomogramme wurde von einer Wassertemperatur von 20°C ausgegangen und angenommen, dass zur Wehrbelüftung jeweils ein Wehrfeld eingesetzt wird.

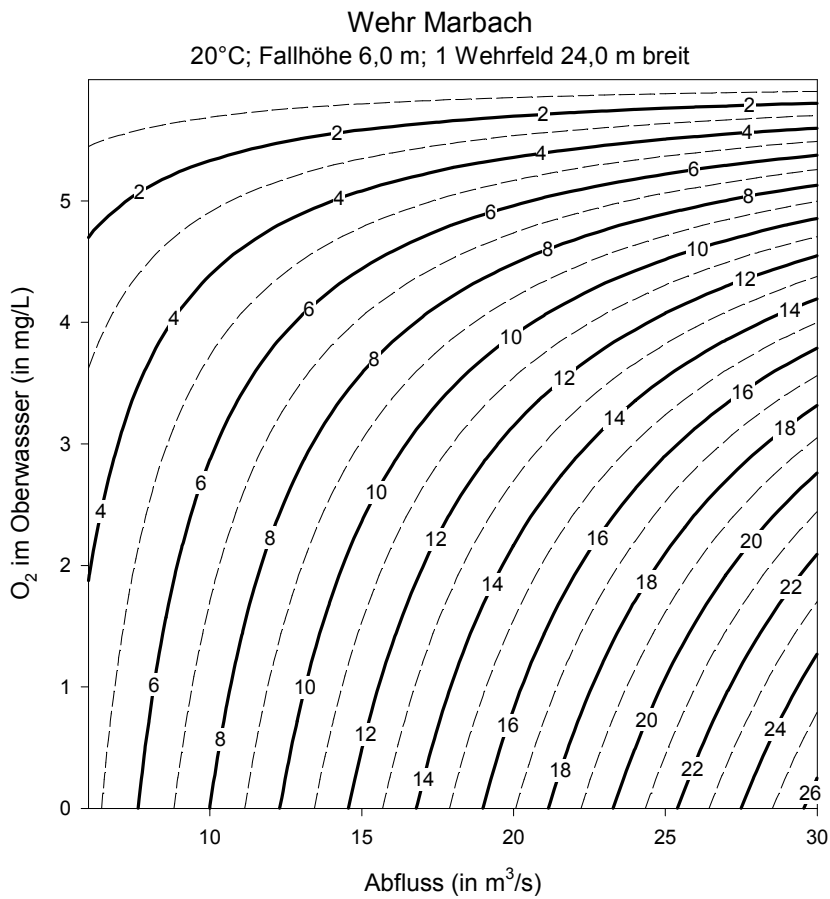
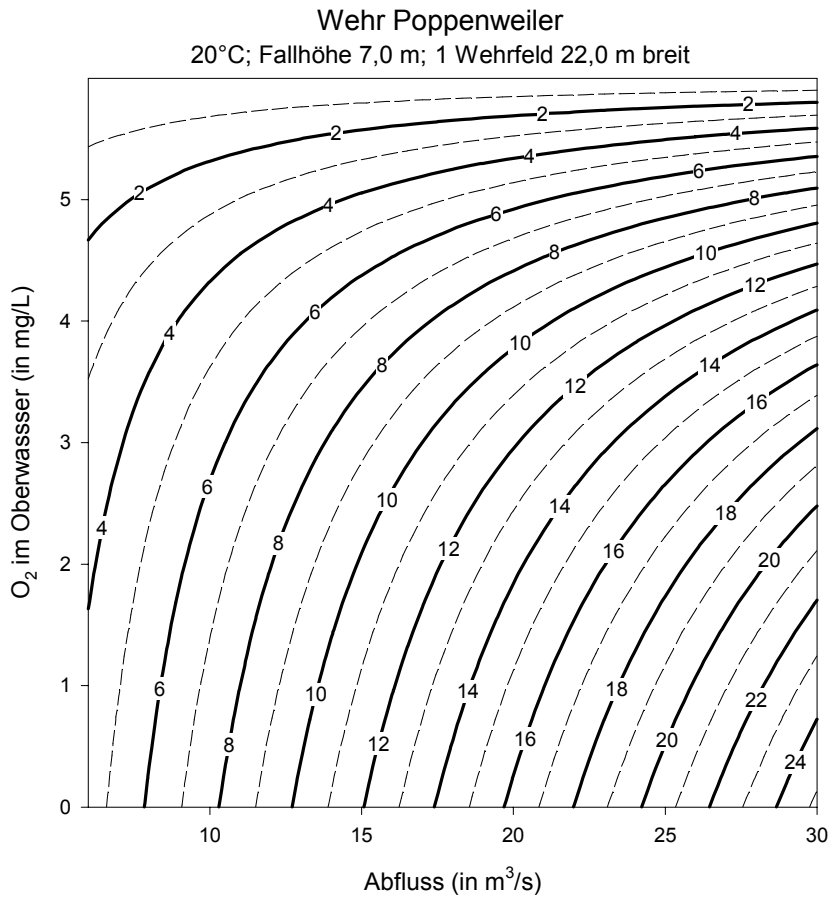
An den Wehren Untertürkheim und Aldingen, können extreme Situationen auftreten, bei denen dieser Zielwert nicht erreicht werden kann. In diesem Fall geben die Nomogramme vor, dass der gesamte Abfluss über das Wehr geführt wird.

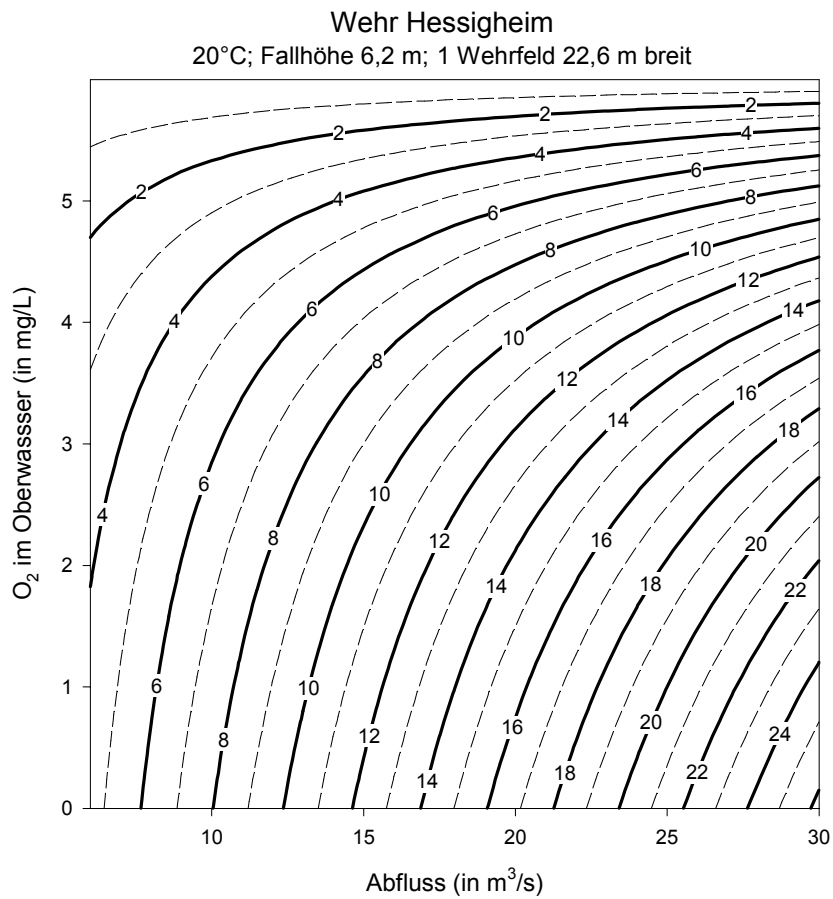
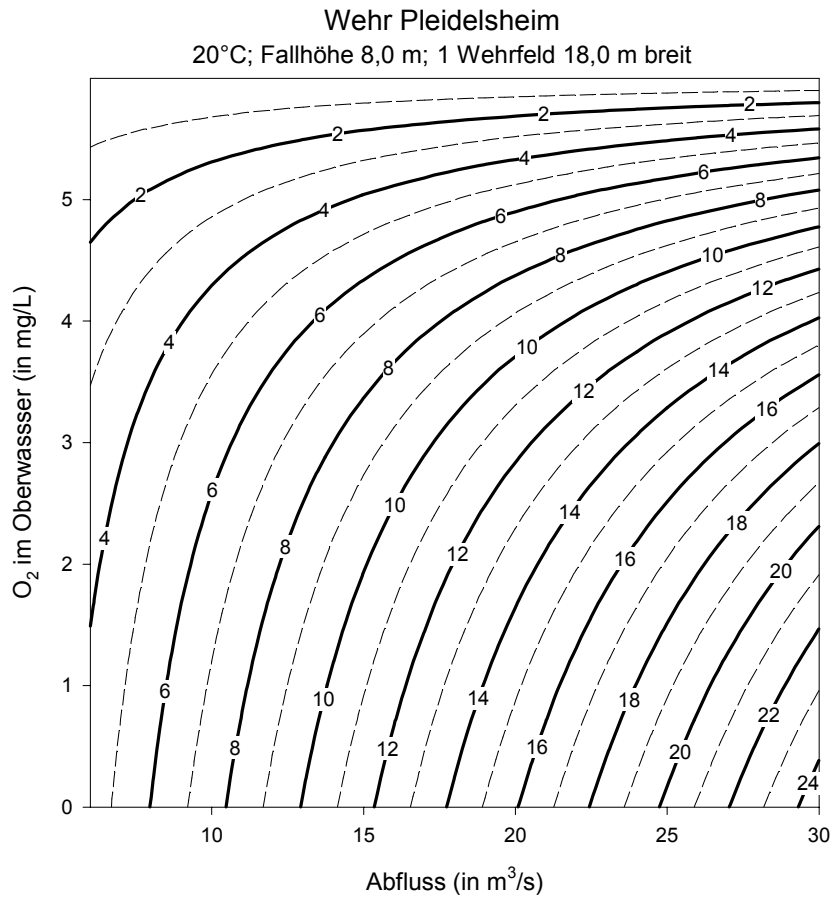












ANHANG F: LISTE DER AUS DIESEM UND DEM VORGÄNGERPROJEKT SEIT 1999 HERVORGEGANGENEN PUBLIKATIONEN

- Haag, I. & Westrich, B.: Correlating Erosion Threshold and Physicochemical Properties of Natural Cohesive Sediment. *Proceedings of the 29th IAHR congress*, Beijing, Theme D, Volume 2, 84-90, 2001.
- Haag, I. & Westrich, B.: Empirische Identifikation der für den Stoffhaushalt im Neckar maßgebenden Prozesse. In: Hamm, A. (Hrsg.) Tagungsbericht der Deutschen Gesellschaft für Limnologie (DGL) Kiel, 2001 (im Druck).
- Haag, I. & Westrich, B.: Modelling Dissolved Oxygen and Phytoplankton in the River Neckar. In Schmitz, G. H. (Hrsg.) *Water Resources and Environment Research*, Volume II, 351 – 356, 2002.
- Haag, I. & Westrich, B.: Processes governing river water quality identified by principal component analysis. *Hydrological Processes*, **16**, 18 S. (im Druck).
- Haag, I., Hollert, H., Kern, B., Braunbeck T. & Westrich, B.: Flood Event Sediment Budget for a Lock-Regulated River Reach and Toxicity of Suspended Particulate Matter. In Schmitz, G. H. (Hrsg.) *Water Resources and Environment Research*, Volume II, 33 – 37, 2002.
- Haag, I., Kern, U. & Westrich B.: Assessing in-stream erosion and contaminant transport using the end-member mixing analysis (EMMA). In: Stone M. (Ed.) *The Role of Erosion and Sediment Transport in Nutrient and Contaminant Transfer. IAHS-Publ. 263*, 293 – 300, 2000.
- Haag, I., Kern, U. & Westrich B.: Comprehensive assessment of contaminated fluvial sediments – erosion risk and ecological hazard. *Proceedings of the 28th IAHR congress*, CD-ROM, Graz 1999.
- Haag, I., Kern, U. & Westrich, B.: Erosion investigation and sediment quality measurements for a comprehensive risk assessment of contaminated aquatic sediments. *Science of the Total Environment*, **266**(1-3), 249-257, 2001.
- Haag, I., Kern, U. & Westrich, B.: Erosive Freisetzung von partikulären Stoffen aus Gewässersedimenten – Quantifizierung mit Hilfe der Quellkomponenten-Mischungsanalyse. *Hydrologie und Wasserbewirtschaftung* **44**(5), 235 – 244, 2000.
- Haag, I., Kern, U. & Westrich, B.: Kombinierte Bewertung kontaminierter Gewässersedimente: Tiefenabhängige Messung von Erosionsrisiko und Sedimentqualität. *Wasser und Boden* **51**(5), 42 – 47, 1999.
- Haag, I., Pintér, I. & Westrich, B.: Entwicklung des Sauerstoffhaushalts in der Bundeswasserstraße Neckar – 1975 bis 1998. *Vom Wasser* (in Vorbereitung).
- Hollert, H., Dürr, M., Haag, I., Winn, N., Wetterauer, B., Holtey-Weber, R., Erdinger, L. & Braunbeck, T.: Erosionsrisiko, toxisches, genotoxisches und endokrines Schädigungspotenzial von kontaminierten Sedimenten in staugeregelten Flüssen. *Deutschsprachige SETAC*, Berlin, 2001.
- Hollert, H., Dürr, M., Haag, I., Winn, N., Holtey-Weber, R., Kern, U., Färber, H., Westrich, B., Erdinger, L. & Braunbeck, T.: A combined hydraulic and *in vitro* bioassay approach to assess the risk of erosion and ecotoxicological implications of contaminated sediments in a lock-regulated river system. BfG-Mitteilungen **22**: *International Symposium Sediment Assessment in European River Basins*, 156 – 160, 2000.
- Hollert, H., Dürr, M., Winn, N., Islinger, M., Haag, I., Kern, U., Färber, H., Karrasch H., Erdinger, L. & Braunbeck, Th.: Risk Assessment of a flood event, Part 1: Cyto-, genotoxicity and endocrine-disrupting potential of suspended matter. *Proceedings of the European SETAC Conference*, Leipzig 1999.

- Hollert, H., Haag, I., Dürr, M., Wetterauer, B., Holtey-Weber, R., Kern, U., Westrich, B., Färber, H., Erdinger, L. & Braunbeck, T.: Untersuchungen zum ökotoxikologischen Schädigungspotenzial und Erosionsrisiko von kontaminierten Sedimenten in staugeregelten Flüssen. *UWSF – Z. Umweltchem. Ökotox.* (im Druck).
- Kern, U., Haag, I., Schürlein, V., Holzwarth, M. & Westrich, B.: Ein Strömungskanal zur Ermittlung der tiefenabhängigen Erosionsstabilität von Gewässersedimenten: das SETEG-System. *Wasserwirtschaft* **89**(2), 72 – 77, 1999.