

DWA-Gewässergütemodell

Kurzbeschreibung der Modellbausteine

Im folgenden Text werden die wesentlichsten Merkmale des DWA-Modells zur Simulation der Wasserbeschaffenheit der oberirdischen Fließgewässer vorgestellt. Die Erläuterungen beschränken sich auf die auszugsweise Beschreibung der Bausteine. Eine vollständige Darstellung der Struktur und der Modellkomponenten befindet sich in dem DWA-Modellhandbuch (DWA-HANDBUCH GEWÄSSERGÜTEMODELL 2001) und in der DWA-Modellbeschreibung (DWA-MODELLBESCHREIBUNG 2002).

1. Wasserabfluss

Für die Simulation des Wasserabflusses werden die aus Massen- und Impulsbilanz entstandenen St. Venant-Gleichungen zu Grunde gelegt (Gleichung 1, 2). Die Berechnung des Abflusses erfolgt 1-dimensional. Dies setzt voraus, dass die Abweichungen von der 1-dimensional gerichteten Strömung vernachlässigbar klein sind. Für die Simulation der Gewässerbeschaffenheit ist diese Einschränkung in der Regel ohne Belang. Beachtet werden muss aber, dass z.B. großflächige Überflutungen der Vorländer, lokale Untiefen etc. nur näherungsweise dargestellt werden können.

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{B} \frac{\partial Q}{\partial x} = \frac{q}{B}$$

Gleichung 1

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + B(c^2 - u^2) \frac{\partial h}{\partial x} + 2u \frac{\partial Q}{\partial x} = u^2 \frac{\partial \hat{A}}{\partial x} + g A(I_s - I_e)$$

Gleichung 2

mit

$B = \hat{B}(x, h)$	Wasserspiegelbreite [m]
$A = \int_0^h \hat{B}(x, z) dz$	durchströmte Querschnittsfläche [m ²]
q	linienförmiger Zufluss [m ³]
$u = \frac{Q}{A}$	Fließgeschwindigkeit berechnet nach Strickler
	$= k_{\text{St}} * R_{\text{hydraul.}}^{2/3} * \Delta_{\text{Energiehöhe benachbarter Querschnitte}}$ [m/s]

$$c = \sqrt{g \frac{A}{B}}$$

g Erdbeschleunigung [m/s²]

I_S Sohlgefälle

$$I_E = \frac{u |u|}{k_{St}^2 * R_H^{\frac{4}{3}}}$$

Reibungsgefälle

Anmerkung: Die vorgenannte formelmäßige Beziehung gilt nur für den Fall der unterkritischen Strömung $|u| < c$.

Folgende Knotenpunkttypen verbinden die Gewässerstrecken, in denen die St. Venant-Gleichungen gelten:

- Zufluss;
- Einleitung;
- Entnahme;
- Ausleitung;
- Zusammenfluss;
- Wehr;
- Ausfluss.

Zur numerischen Lösung der oben genannten hyperbolischen Differenzialgleichungen wird das IMOC-Verfahren, ein implizites Charakteristikenverfahren (SCHLEIP, H. 1998) verwendet. Es zeichnet sich durch gute Konvergenzeigenschaften, unabhängig von den Courant-Bedingungen (Verhältnis: Zeit- zu Ortsschrittweite), aus.

2. Transportgleichung

In dem DWA-Gewässergütemodell wird die 1-dimensionale Transportgleichung zur Beschreibung der Massenänderung eines Stoffes auf dem Fließweg in Abhängigkeit von der Fließzeit in der nachstehenden Form verwendet (DYCK, S. 1979):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{A} \frac{\partial(A * D_L * \frac{\partial c}{\partial x})}{\partial x} - u \frac{\partial c}{\partial x} + c * k_1 + k_0 + \frac{q_z}{A} (c_z - c) + \frac{q_v}{A} * c$$

Gleichung 3

mit

- c Stoffkonzentration [mg/L]
- t Zeit [s]
- A durchflossene Querschnittsfläche [m²]
- D_L longitudinaler Dispersionskoeffizient [m²/s]
- x Weg in Fließrichtung [m]
- u querschnittsgemittelte Fließgeschwindigkeit [m/s]
- k₁ Reaktionsrate 1. Ordnung [1/d]
- k₀ Reaktionsrate 0. Ordnung [1/d]
- q_z linienförmiger Zufluss [m³/s]
- c_z Stoffkonzentrationen der linienförmigen Zuflüsse [mg/L]
- q_v linienförmige Verdunstungsverluste [m³/(s*m)]

Die punktförmigen Quellen und Senken definieren den Beginn bzw. das Ende der jeweiligen Transportstrecken und werden deshalb an den Anfangs- und Endpunkten als lokale Änderung des Abflusses und der Konzentration berücksichtigt und nicht in der oben genannten Gleichung aufgeführt.

Zur Lösung der Transportgleichung wird auf die Modellbeschreibung verwiesen (DWA-MODELLBESCHREIBUNG 2002). Bei der Beschreibung der nachfolgenden Modellbausteine wird der Übersicht halber der Diffusions-, der Advektions- und der Verdunstungsterm aus der oben angegebenen Transportgleichung durch die folgende Rechenvorschrift (Gleichung 4) zusammengefasst:

$$LC = \frac{1}{A} * \frac{\partial(A * D_l * \frac{\partial c}{\partial x})}{\partial x} - u * \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{q_v}{A} * c$$

Gleichung 4

3. Strahlung

Die Strahlung wird im DWA-Modell benötigt zur Simulation

- des Wärmehaushalts in Fließgewässern (290 – 4000 nm);
- der Photosynthese durch Algen und Makrophyten (400 – 700 nm);
- des photolytischen Abbaus der organischen Einzelsubstanzen (290 – 380 nm).

Im Modell wird der komplette Strahlengang differenziert nach Wellenlängen von der Sonne bis in den Wasserkörper näherungsweise dargestellt.

Zunächst wird für jeden Tag des gewählten Simulationszeitraums spektral aufgelöst die mittlere Intensität der extraterrestrischen Strahlung an der Grenzschicht Troposphäre zu Atmosphäre über dem geografischen Ort des betrachteten Flussgebiets unter Berücksichtigung der elliptischen Umlaufbahn der Erde um die Sonne berechnet. Der Tagesgang der Globalstrahlung ergibt sich aus der berechneten mittleren Strahlung und dem aktuellen Höhenwinkel der Sonne für jeden Simulationszeitschritt des Lichttags. Die Globalstrahlung ist die Summe aus direkter und diffuser Sonnenstrahlung.

Die Globalstrahlung, gemindert um die Dämpfungseinflüsse in der Atmosphäre durch Extinktion an Luftmolekülen, und unter Berücksichtigung der Transmissivitäten von Wasserdampf, Ozon, sonstigen Gasen und Aerosolen ergibt den Anteil der direkten Strahlung, der die Erdoberfläche erreicht. Der Anteil der diffusen Strahlung, der zur Erde gerichtet ist, wird aus der Streuung der direkten Strahlung an Luftmolekülen, Aerosolen, Wolkentröpfchen und durch die Albedo geneigter Erdoberflächen errechnet (VDI 3789 1992).

Die Dämpfung der Strahlung durch 8 mögliche Bewölkungsklassen wird im Modell als von der spektralen Verteilung unabhängig angesehen. Die Bewölkung kann vom

Anwender als dynamisch veränderliche Größe über den Simulationszeitraum eingegeben werden.

Die Horizontüberhöhung durch das angrenzende Gelände wird im DWA-Modell berücksichtigt, da hierdurch der Einfallswinkel der direkten Strahlung in den Morgen- bzw. Abendstunden limitiert wird. Außerdem wird der Anteil der diffusen Strahlung, der durch die Horizontüberhöhung abgeschirmt wird, vom gewässerverfügbaren Lichtdargebot in Abzug gebracht.

Die Dämpfung des Lichtklimas durch die anrainende Vegetation wird im Modell differenziert nach Vegetationstypen, abhängig vom jahreszeitlichen Belaubungszustand, berücksichtigt. Somit können die Auswirkungen von Renaturierungsmaßnahmen auf den Wärmehaushalt des Gewässers und auf die photochemischen und photobiologischen Prozesse betrachtet werden. Ebenso kann die Abschattung durch die in Gewässernähe errichtete Bebauung berücksichtigt werden.

Die Reflektion an der Wasseroberfläche wird abhängig von dem Sonnenstand zum jeweiligen Simulationszeitpunkt und abhängig von der angenommenen Bewölkung berechnet. Im Modell wird die Lichtextinktion der direkten und diffusen Strahlen im Wasserkörper mit Absorptionskoeffizienten für Schwebstoffe, Huminstoffe und Algen, wahlweise für homogen durchmischte Verhältnisse oder für vertikale Konzentrationsgradienten spektral aufgelöst, ermittelt.

Für die Berechnung der Wassertemperatur werden im Strahlungsmodul folgende Bilanzglieder berechnet:

- Strahlung an der Wasseroberfläche inklusive der langwelligen, atmosphärischen Gegenstrahlung an der Wolkenunterseite nach Abzug der Reflektion an der Wasseroberfläche;
- Wärmeabstrahlung von der Wasseroberfläche;
- Verdunstungs- bzw. Kondensationswärme bei Berücksichtigung der vorgegebenen Windverhältnisse;
- Wärmeverlust bzw. -gewinn durch Konvektion.

4. Wassertemperatur

Im DWA-Modell werden folgende Prozesse zur Berechnung der Wassertemperatur berücksichtigt:

- Atmosphärische Gegenstrahlung,
- Wärmeabstrahlung,
- Verdunstung,
- Konvektion;
- Aufwärmung durch den Anteil der Globalstrahlung, der die Wasseroberfläche durchdringt und nicht durch Extinktion bei dem Durchgang durch den Wasserkörper bis zu dem Gewässerboden gezehrt wird;
- Aufwärmung durch Reflektion der Reststrahlung von der Gewässersohle abzüglich des durch Extinktion bei dem Durchgang durch den Wasserkörper bis zur Wasseroberfläche gezehrten Anteils und abzüglich des in die Atmosphäre rückgestrahlten Anteils;
- Wärmeaustausch mit dem Sediment;
- linienförmige und punktuelle Einleitungen.

Zur Aufwärmung tragen gemäß Gleichung 5 folgende Bilanzglieder bei:

$$\frac{\partial TV}{\partial t} = LC + \frac{EHSNET - HTEMP\ 3 * HTEMP\ 1 - HTEMP\ 2}{ROW * TCPW * HYTIEFE} + \frac{HYQEL}{HYA} * (TEL - TV)$$

Gleichung 5

mit

TV Wassertemperatur [°C]

EHSNET Nettostrahlung [kJ/(h*m²)]

$HTEMP3 = 1 - EREFS * (1 - EPARS/EPAR)$

EREFS Strahlungsanteil, der vom Gewässerboden reflektiert wird

EPARS photosynthetisch aktive Strahlung am Gewässerboden [kJ/(h*m²)]

EPAR photosynthetisch aktive Strahlung unmittelbar unterhalb der Wasseroberfläche [kJ/(h*m²)]

$$HTEMP1 = EHG * EPARS / EPAR$$

EHG Globalstrahlung [kJ/(h*m²)]

$$HTEMP2 = EWTk * (TV - TS)$$

EWTk Wärmeübergangskoeffizient [kJ/(K*m²*h)]

TS Temperatur an der Sedimentoberfläche [°C]

ROW Dichte des Wassers [kg/m³]

TCPW spezifische Wärmekapazität des Wassers [kJ/(kg*K)]

HYTIEFE Wassertiefe [m]

HYQEL Wasserabfluss der linienförmigen Einleitungen

HYA durchflossener Querschnitt

TEL Wassertemperatur der linienförmigen Einleitungen

5. Konservative Substanzen

Der Baustein dient zur Beschreibung des Verhaltens inerter Stoffe in Fließgewässern (z.B. Chlorid). Der Massenaustausch konservativer Substanzen ist nur durch Dispersion und Advektion bestimmt. Einleitungen und Entnahmen werden über Mischungsrechnungen berücksichtigt.

Der Transport konservativer Substanzen lautet gemäß Gleichung 6 :

$$\frac{\partial US}{\partial t} = LC + \frac{HYQEL}{HYA} * (USEL - US) \quad \text{Gleichung 6}$$

mit

USEL Konzentrationen der konservativen Substanzen der linienförmigen Einleitungen [mg/L]

US Konzentration der konservativen Substanzen im Gewässer [mg/L]

6. Biochemischer Sauerstoffbedarf / Chemischer Sauerstoffbedarf

Im Modell sind 4 unter aeroben Bedingungen verschieden abbaubare Substanzgruppen mit spezifischen Abbauraten in unterschiedlichen Mischungsverhältnissen an der Gesamtabbaubarkeit beteiligt (Tabelle 1).

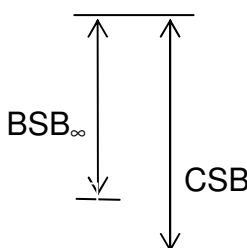
Substanzgruppe	Abbauraten	
leicht biologisch abbaubare Stoffe	1,2	
mittel biologisch abbaubare Stoffe	0,5	
schwer biologisch abbaubare Stoffe	0,085	
nicht biologisch abbaubare Stoffe	0	

Tabelle 1: BSB-Abbauraten.

Die in der Realität gegebene zeitliche Änderung der Abbaurate wird durch die Verschiebung der Mischungsverhältnisse hin zu den schwer abbaubaren Substanzen berücksichtigt. Für typische Mischungsverhältnisse abhängig von dem Vorabbau existieren im Modell Datenvorgaben.

In dem BSB-Baustein wird ausschließlich der BSB der organischen Kohlenstoffverbindungen entsprechend dem $BSB_{mit\ ATH}$ bzw. C-BSB betrachtet. Zunächst werden aus den Eingabewerten des BSB_5 für die Punkt- und Linienquellen, den zugehörigen Mischungsverhältnissen und den Abbauraten die korrespondierenden Werte für den BSB_∞ berechnet. Über eine Mischungsrechnung erhält man die BSB_∞ -Gewässerkonzentration für die unterschiedlich abbaubaren Stoffgruppen an dem Fließquerschnitt in Höhe der Einleitpunkte bei Annahme vollständiger Durchmischung. Aus den vom Modellanwender vorgegebenen sedimentierfähigen Anteilen des BSB_5 werden unter Annahme, dass die sedimentierfähigen Anteile des BSB_5 und des BSB_∞ gleich sind, die sedimentierten Anteile des BSB_∞ je Zeitschritt gemäß der nachstehenden Methode berechnet und zur Ermittlung des Freiwasser- BSB_∞ abgezogen. Analog wird für den CSB verfahren. Der refraktäre Anteil des Sauerstoffbedarfs ist nicht an Umsetzungsprozessen beteiligt und unterliegt lediglich der Dispersion und Advektion.

In der BSB-Bilanzgleichungen (Gleichung 7) sind die BSB-Freisetzungen der exkretierten und abgestorbenen Biomasse des Phytoplankton, der Periphyten und

der Makrophyten, des Makrozoobenthon und des Zooplankton als Quellen zu berücksichtigen (Tabelle 2). Als BSB-Senke wird neben dem erwähnten Entzug durch Sedimentation der Kohlenstoff im Modell berücksichtigt, der bei der Denitrifikation durch den C-BSB-Abbau freigesetzt wird. Die Denitrifikationsrate ist abhängig von dem Nitratgehalt, der Wassertemperatur, der sessilen Bakterienbiomasse (WOLF, P. 1974) und von dem Sauerstoffgehalt. Die genannten Abbauraten gemäß Tabelle 2 für den bakteriellen BSB-Abbau unter aeroben Bedingungen werden im Modell auf die lokalen, gewässerspezifischen Bedingungen umgerechnet (Wassertemperatur, Rauigkeit, Makrophytendichte, Wassertiefe, Sauerstoffgehalt).

Quellen	Senken
Punktuelle Einleitungen Nebenflüsse Headwater	Sedimentation
Lineare Zuflüsse	Denitrifikation
Exkretion durch Kieselalgen, Grünalgen, Makrophyten, Periphyten, Zooplankton, Makrozoobenthon	Bakterieller Abbau

Tabelle 2: Berücksichtigte Quellen und Senken des BSB-Bausteins.

In dem BSB-Baustein werden außerdem Übergabeparameter für die Bausteine Stickstoff, Phosphor, Sauerstoff, Schwebstoffe und Strahlung sowie für die organischen Einzelsubstanzen berechnet (Tabelle 3).

Substanz	Prozess	Baustein
N _{org.} , Phosphor	Freisetzung durch aeroben, bakteriellen Abbau und Denitrifikation	Stickstoff, Phosphor
Sauerstoff	Verbrauch durch aeroben, bakteriellen Abbau	Sauerstoff
Schwebstoffe	Abnahme durch Abbau des partikulären BSB	Schwebstoffe
hochmolekularer DOC	näherungsweise C-Gehalt der Huminstoffe aus gelöstem Anteil des refraktären CSB	Strahlung Organische Einzelsubstanzen

Tabelle 3: BSB-abhängige Übergabeparameter.

Die Bilanzgleichung lautet:

$$\frac{\partial BLO_i}{\partial t} = LC - BK_i T * BLO_i - HCOND * BXX_i + HCON_i + \frac{HYQEL}{HYA} * (BLOEL_i - BLO_i)$$

Gleichung 7

mit

$BK_i T$	BSB-Abbauraten der Stoffgruppe i unter Standardbedingungen [1/d]
BLO_i	BSB _∞ -gesamt des Gewässers der Stoffgruppen i [mg/L]
$HCOND$	Abbau von BSB _∞ bei der Denitrifikation [mg/L]
BXX_i	Mischungsverhältnisse des BSB _∞ -gesamt der Stoffgruppen i
$HCON_i$	BSB-Freisetzung differenziert nach den Stoffgruppen i aus exkretierter und abgestorbener Biomasse [mg/L]
$BLOEL_i$	BSB _∞ -Gesamt Konzentrationen der linienförmigen Einleitungen differenziert nach den Stoffgruppen i [mg/L]

7. Phosphor

Im Modell wird grundsätzlich unterschieden nach der gelösten hochmolekularen organischen Phosphorfraktion (DOP – dissolved organic phosphorous) und den gelösten anorganischen Phosphorverbindungen (DIP – dissolved inorganic phosphorous).

Die DOP-Fraktion wird als vollständig in Biomasse gebunden angenommen und ist deshalb erst mit der Freisetzung durch den bakteriellen Abbau (siehe Kapitel 6, BSB-Baustein) algenverfügbar. Dagegen ist die DIP-Fraktion unmittelbar für die Primärproduzenten verwertbar. Werden die allochtonen P-Einträge als P_{gesamt} angegeben, wird deshalb im Modell der in der Biomasse (BSB, Kiesel- und Grünalgen, herbivore und carnivore Konsumentenebene) inkorporierte, nicht unmittelbar algenverfügbare Phosphor von P_{gesamt} abgezogen. Im Modell sind die Phosphorgehalte einer Standard-Biomasse aus den Untersuchungen von KIRCHESCH (DWA-MODELLBESCHREIBUNG 2002) hinterlegt.

Die P_{reaktiv} -Gewässerkonzentration wird über die Mischungsrechnung an dem Fließquerschnitt in Höhe der Einleitpunkte bei Annahme vollständiger Durchmischung ermittelt. Außer der Phosphorfreisetzung aus dem Bodenschlamm werden alle Glieder der Bilanzgleichung (*Gleichung 8*) aus den entsprechenden Bausteinen übernommen. Die Rücklösung des Phosphors aus dem Bodenschlamm ist gekoppelt an die Ammoniumfreisetzung aus dem schlammigen Sohlmaterial. Derzeit in Bearbeitung durch die zuständige Arbeitsgruppe GB-1.4 der DWA ist die Beschreibung der Eisen-Phosphor Beziehung (SCHLÄGER, F. 2001), um insbesondere für die vom Bergbau geprägten Fließgewässer den Entzug des Phosphors durch gewässerinterne Fällungsreaktionen mit Eisen darstellen zu können (Tabelle 4).

Quellen	Senken
Punktuelle Einleitungen Nebenflüsse Headwater Lineare Zuflüsse	Inkorporation in Grünalgen, Kieselalgen, Makrophyten, Periphyten
Respiration durch Kieselalgen, Grünalgen, Makrophyten, Periphyten, Zooplankton, Makrozoobenthon Freisetzung aus Bodenschlamm Bakterieller Abbau organischer Substanz	geplant: Entzug durch Ausfällung von Eisenphosphat

Tabelle 4: Berücksichtigte Quellen und Senken des Phosphor-Bausteins.

Die Bilanzgleichung lautet:

$$\frac{\partial P_{\text{REAKT}}}{\partial t} = LC + PAKI + PAGR + PMPHYT + PPEPHYT + PREZOO + PREFKON + PREBOF \\ + PABBSB + PABSCH + \frac{HYQEL}{HYA} * (PEL - P_{\text{REAKT}})$$

Gleichung 8

mit

P..	Änderung der Phosphorkonzentrationen durch Kiesel- und Grünlagen, Makrophyten und Periphyten [mg/(L*d)]
PRE..	Freisetzung reaktiven Phosphors aus respirierter Biomasse durch Konsumenten I / II und Makrozoobenthon [mg/(L*d)]
PABBSB	Freisetzung reaktiven Phosphors bei dem Abbau organischer Kohlenstoffverbindungen [mg/(L*d)]
PABSCH	Freisetzung reaktiven Phosphors bei dem Abbau organischer Substanz im Bodenschlamm [mg/(L*d)]
PEL	Phosphorkonzentrationen der linienförmigen Einleitungen [mg/L]
PREAKT	reaktiver Phosphor [mg/L]

8. Stickstoff

In dem DWA Modell werden die Änderung der Stickstoffkomponenten organischer Stickstoff, Ammoniumstickstoff und Nitratstickstoff durch Einleitungen und Umsetzprozesse je Zeitschritt berechnet (Tabelle 5).

Quellen	Senken
Punktuelle Einleitungen Nebenflüsse Headwater	Sedimentation der Nitrifikanten
Lineare Zuflüsse	Ammonifikation des organischen Stickstoffs
Organischer Stickstoff: Respiration durch Kieselalgen, Grünalgen, Makrophyten, Periphyten, Zooplankton, Makrozoobenthon	Nitrat: Inkorporation in Algen Denitrifikation
Ammonium: Abbau organischer Verbindungen Freisetzung aus Bodenschlamm	Ammonium: Inkorporation in Algen, Makrophyten, Periphyten
Nitratbildung durch Nitrifikation	Nitrifikation Entgasung von Ammoniak

Tabelle 5: Berücksichtigte Quellen und Senken des Stickstoff-Bausteins.

Zunächst sind die Einleitkonzentrationen des organischen Stickstoffs um die im BSB und in der Biomasse gebundenen Anteile zu reduzieren, da diese als Freisetzung abhängig von den Milieubedingungen in den jeweiligen Bausteinen berücksichtigt werden. Es verbleibt im Wesentlichen der gelöste organische Stickstoff in Form von Harnstoff (DWA-HANDBUCH GEWÄSSERGÜTEMODELL 2001), der wegen der höheren Stickstoffgehalte nicht in die Zellsubstanz der Biomasse eingebaut werden kann.

Sodann werden zur Ermittlung der Ausgangskonzentrationen im Gewässer die punktuellen Einleitungen des gelösten, organischen Stickstoffs, des Ammonium und des Nitrats in den Fließquerschnitt an der Einleitstelle als vollständig durchmischt eingerechnet. Ebenso wird mit der Zufuhr von suspendierten Nitrifikanten verfahren. Diese werden im Modell, im Gegensatz zu den sessilen Nitrifikanten (Raten abhängig von Milieuverhältnissen), als dynamische Bilanzglieder angesehen.

In der Bilanzgleichung für den organischen Stickstoff (Gleichung 9) werden die freigesetzten Mengen des organischen Stickstoffs aus der Veratmung der Biomasse aus den entsprechenden Bausteinen übernommen. Die Rate, mit welcher der organische Stickstoff ammonifiziert, wird im Modell auf die aktuellen Wassertemperaturen bezogen und mit der Ausgangskonzentration des gelösten, organischen Stickstoffs im Gewässer verrechnet.

In die Bilanzgleichung der suspendierten Nitrifikanten (Gleichung 10) wird die Konzentrationsänderung durch Sedimentation, das lokale Wachstum und eine Grundmortalität der Nitrifikantenbiomasse berücksichtigt. Die lokale Wachstumsrate ist abhängig von der vorherrschenden Wassertemperatur, dem aktuellen Sauerstoffgehalt und dem Angebot an Ammoniumstickstoff.

Die Bilanzgleichung des Ammoniumstickstoffs (Gleichung 11) berücksichtigt, wie viel Ammonium unter aktuellen, lokalen Wachstumsbedingungen durch die suspendierten Nitrifikanten nitrifiziert wird. Außerdem wird die Ammonifikation des organischen Stickstoffs abhängig von der Wassertemperatur ausgedrückt. Die Nitrifikationsleistung der sessilen Nitrifikanten wird abhängig von den gewässertypspezifischen Entwicklungsbedingungen durch eine

Ammoniumumsatzrate und die vorhandene, besiedelbare Oberfläche berücksichtigt (WOLF, 1974). Die Ammoniumumsatzrate im aktuellen Zeitschritt ist abhängig von:

- dem Ammoniumangebot;
- der Wassertemperatur;
- dem Sauerstoffgehalt;
- der Fließgeschwindigkeit im Verhältnis zur Wassertiefe (KIRCHESCH IN DWA-MODELLBESCHREIBUNG 2002).

Weitere Bilanzglieder sind die Ammoniumaufnahme durch Algen, Makrophyten und die Periphyten. Eine zusätzliche Ammoniumsenke stellen der Entgasungsverlust des freien Ammoniaks auf der Fließstrecke und der punktförmige Verlust durch Entgasung an Wehranlagen dar. Weitere Quellen sind die Ammoniumfreisetzung aus dem C-BSB Abbau und die Freisetzung aus dem Sediment bei schlammiger Sohle.

Der Sauerstoffverbrauch durch die Nitrifikation im Freiwasser ist abhängig von der temperatur- und sauerstoffabhängigen Effizienz der suspendierten Nitrifikanten Ammonium zu nitrifizieren. Der berechnete Sauerstoffverbrauch wird als Verlustgröße an den Sauerstoffbaustein übergeben.

Der Nitratstickstoffgehalt im Gewässer wird neben den Einträgen aus den punktuellen und den linienförmigen Einleitungen durch die Nitrifikation des Ammoniums beeinflusst. An der Nitrifikation sind die suspendierten Nitrifikanten und die sessilen Nitrifikanten beteiligt. Gemindert wird der Nitratstickstoffgehalt durch die Nitrataufnahme auf der Produzenten- und Konsumentenebene und durch die Denitrifikation, deren Rate im BSB-Baustein in Abhängigkeit von den vorherrschenden Sauerstoffverhältnissen in Bodennähe ermittelt wird (siehe Gleichung 12).

$$\frac{\partial NORG}{\partial t} = LC - NKNORG * HCONT * NORG + NREKI + NREGR + NREMPHYT + NREPEPHYT + NREZOO + NREFKON + NREBOF + \frac{HYQEL}{HYA} * (NORGEL - NORG)$$

Gleichung 9

mit

NKNORG	Ammonifikationsrate des organisch gebundenen Stickstoffs bei 20 °C
HCONT	Temperatureinfluss auf die Umsetzungsgeschwindigkeit des organisch gebundenen Stickstoffs zu Ammonium
NORG	Konzentration des organisch gebundenen Stickstoffs im Gewässer [mg/L]
NRE..	Freisetzung des organisch gebundenen Stickstoffs aus respirierter Biomasse durch Primärproduzenten, Konsumenten I / II, Makrophyten, Periphyten, Makrozoobenthon [mg/(L*d)]
NORGEL	Konzentration des organisch gebundenen Stickstoffs der linienförmigen Einleitungen [mg/L]

$$\frac{\partial XO}{\partial t} = LC + (MUEN - NKNMORT) * XO + \frac{HYQEL}{HYA} * (XOEL - XO)$$

Gleichung 10

mit

MUEN	lokale Wachstumsrate der suspendierten Nitrifikanten [1/d]
NKNMORT	Mortalitäts- bzw. Abbaurate der Nitrifikanten [1/d]
XO	Nitrifikantenbiomasse im Gewässer [mg/L]
XOEL	Nitrifikantenbiomasse der linienförmigen Einleitungen [mg/L]

$$\begin{aligned} \frac{\partial NH_4N}{\partial t} = & LC - \frac{MUEN * XO}{NSPEC} + NKNORG * HCONT * NORG - NH_4NBETT \\ & - NHWA - NHMPHYT - NHPEPHYT + NABBSB + NABSCH - NH_3VOL \\ & + \frac{HYQEL}{HYA} * (NH_4NEL - NH_4N) \end{aligned}$$

Gleichung 11

mit

NSPEC	Effizienzfaktor für Nitrifikanten [mg/mg Nitrifikantenbiomasse/NH ₄ -N]
HCONT	Temperatureinfluss auf die Umsetzungsgeschwindigkeit des organisch gebundenen Stickstoffs zu Ammonium

NH4NBETT	Ammoniumoxidationsrate durch sessile Nitrifikanten [mg/(L*d)]
NH..	Ammoniumaufnahme durch Algen gesamt (WA), Makrophyten und Epiphyten [mg/(L*d)]
NABBSB	Freisetzungsrates des Ammoniums durch den Abbau organischer Kohlenstoffverbindungen [mg/(L*d)]
NABSCH	Freisetzungsrates des Ammoniums aus dem Bodenschlamm [mg/(L*d)]
NH3VOL	Volatilisationsrate des dissoziierten Ammoniaks [mg/(L*d)]
NH4NEL	NH4-N-Konzentrationen der linienförmigen Einleitungen [mg/L]
NH4N	NH4-N-Konzentration im Gewässer [mg/L]

$$\frac{\partial NO_3N}{\partial t} = LC + \frac{MUEN * XO}{NSPEC} - NKNO_3 * NO_3N + \frac{BFNO_3NA - BFNO_3NH}{HYTIEFE} - NDEABSCH - NOWA - NOMPHYT - NOPEPHYT + \frac{HYQEL}{HYA} * (NO_3NEL - NO_3N)$$

Gleichung 12

mit

MUEN	lokale Wachstumsrate der suspendierten Nitrifikanten [1/d]
XO	Nitrifikantenbiomasse im Gewässer [mg/L]
NSPEC	Effizienzfaktor für Nitrifikanten [mg/mg Nitrifikantenbiomasse/NH ₄ -N]
NKNO ₃	Denitrifikationsrate [1/d]
NO ₃ N	NO ₃ -N-Konzentration im Gewässer [mg/L]
BFNO ₃ NA	Nitratzunahme durch Nitrifikation [g/(m ² *d)]
BFNO ₃ NH	Nitratumsetzung durch Denitrifikation [g/(m ² *d)]
NDEABSCH	Verlust durch Denitrifikation an der Schlammoberfläche [mg/(L*d)]
NO..	Nitrataufnahme durch Primärproduzenten (WA), Makrophyten, Periphyten [mg/(L*d)]
NO ₃ NEL	Nitratstickstoffkonzentration der linienförmigen Einleitung [mg/L]
NO ₃ N	Nitratstickstoffkonzentration im Gewässer [mg/L]

9. Silikat

Gelöstes Silikat ist essentiell für die Kieselalgen und kann bei Stickstoff- und Phosphorüberschuss die limitierende Größe für den Aufbau des Kieselgerüsts darstellen. Silikat wird in erster Linie aus Kläranlagen und über diffuse Quellen in die Gewässer eingetragen. Selten liegen jedoch belastbare Eingabedaten für die Gewässergütemodellierung vor. Untersuchungen der Abläufe von kommunalen Kläranlagen des Erftverbands zeigen im Mittel für SiO_2 gelöst x_y mg/L. Im DWA Modell wird neben der Siliziumaufnahme durch Kieselalgen, Makrophyten und Periphyten die wenn auch geringe Rücklösung aus dem Sediment (KOPF, W., PÖHLMANN, W. UND REIMANN, K. 1988) berücksichtigt.

$$\frac{\partial \text{SIL}}{\partial t} = LC + (\text{SIABSCH} - \text{SIAKI} - \text{SIMPHYT} - \text{SIPEPHYT} + \frac{\text{HYQEL}}{\text{HYA}} * (\text{SIEL} - \text{SIL}))$$

SIABSCH	Rücklösung des Silikats aus dem Gewässersohlmateriale [mg/(L*d)]
SIAKI	Silikatbedarf der Kieselalgen [mg/(L*d)]
SIMPHT	Silikatbedarf der Makrophyten [mg/(L*d)]
SIPEPHYT	Silikatbedarf der Periphyten [mg/(L*d)]
SIEL	Silikatkonzentrationen der linienförmigen Einleitungen [mg/L]
SIL	Silikatkonzentration im Gewässer [mg/L]

10. Kieselalgen

Im DWA Modell werden die Kieselalgen und Grünalgen wegen der unterschiedlichen Stoffumsatzraten differenziert betrachtet. Zur Abschätzung der Mengenanteile der Algenarten werden wegen der unterschiedlichen Temperaturpräferenz der jeweiligen Algenspezies die Wassertemperaturen zu Beginn der Simulation herangezogen. Als Maß zur Ermittlung der Algenkonzentration wird der Chlorophyll a Gehalt für die Algenbiomasse zu Grunde gelegt.

Die aktuelle Wachstumsrate wird ermittelt aus der maximalen Wachstumsrate für Kieselalgen relativiert durch

- die vorherrschenden Wassertemperaturen;

- das Angebot an Nährstoffen als Sättigungsfunktion nach Michaelis-Menten (CHAPRA, 1997) für Ammonium, Nitrat, reaktiven Phosphor und gelöstes Silikat;
- die Verweilzeit der Algenzellen in der euphotischen Zone;
- die Aufenthaltszeit der Algenzellen in der unbelichteten Zone.

Zur Berechnung der Lichtabhängigkeit der Wachstumsrate wird ausgehend von der berechneten, photosynthetisch aktiven Strahlung unmittelbar unter der Wasseroberfläche (siehe Kapitel 3, Strahlungsbaustein) der in der jeweiligen Fließtiefe verbleibende Strahlungsanteil in Abhängigkeit von der Lichtdämpfung ermittelt. Für jede festgelegte vertikale Schicht wird der tiefenabhängige Strahlungsrest mit der Optimalbelichtung für Kieselalgen in das Verhältnis gesetzt und mit der Algenkonzentration in der betrachteten Fließtiefe, die ebenfalls im Modell berechnet wird (siehe Kapitel 10), gewichtet. Werden die gewichteten Anteile aufsummiert für alle vertikalen Schichten und in das Verhältnis mit der durchschnittlichen Kieselalgenkonzentration über die Fließtiefe gesetzt, ergibt sich der Lichteinflussfaktor, welcher die Abhängigkeit der Wachstumsrate von der mittleren Lichtintensität ausdrückt.

Die Verweilzeiten der Algen in den Profilhöhen des Wasserkörpers sind insofern von Bedeutung, da sich die Algenzellen in der produktiven Schicht, der durch Lichtüberangebot gehemmten Zone oder der unbelichteten Wasserschicht befinden können. Im Modell werden die Verweilzeiten der Algen in der jeweiligen Fließtiefe mit Hilfe des transversalen Dispersionskoeffizienten (FISCHER, H.B. 1979) geschätzt und für den betrachteten Zeitschritt in das Verhältnis mit der Austauschzeit im Fließquerschnitt gesetzt. Hierbei wird der Einfluss der vertikalen Konzentrationsverteilung auf die Lichtextinktion berücksichtigt. Die Abnahme der Photosynthese durch ein Lichtüberangebot wird im Modell ausgedrückt durch die Verweildauer der Algenbiomasse in der Zone der Lichthemmung.

Die Bilanzgleichung für die Kieselalgen (Gleichung 13) enthält, neben den bereits erwähnten Bilanzgliedern Sedimentation, Advektion und Dispersion, das von der Wachstumsrate abhängige Kieselalgenwachstum abzüglich der

temperaturabhängigen Respiration und Mortalität gemindert um die Kieselalgenverluste infolge Abweidung durch Primär- und Sekundärkonsumenten. Die Verluste durch Abweidung werden in den Konsumenten-Bausteinen berechnet und an die Algenbausteine übergeben.

$$\frac{\partial AKI}{\partial t} = LC + (AKGROW - AKRES - AKMOR - AKEX) * AKI - ZALKI - FAKI - BOFAKI - \frac{HYQEL}{HYA} * AKI$$

Gleichung 13

mit

AKGROW	aktuelle Wachstumsrate [1/d]
AKRES	aktuelle Respirationsrate [1/d]
AKMOR	aktuelle Mortalitätsrate [1/d]
AKEX	Exkretionsrate der Kieselalgen [1/d]
AKI	Kieselalgenkonzentration im Gewässer [mg/L]
ZALKI	Grazingverluste bei Kieselalgen durch Zooplankton [mg/(L*d)]
FAKI	Grazingverluste bei Kieselalgen durch Konsumenten II [mg/(L*d)]
BOFAKI	Grazingverluste bei Kieselalgen durch Makrozoobenthonten [mg/(L*d)]

11. Grünalgen

Die Wachstumsrate der Grünalgen (AGGROW, Gleichung 14) ist unabhängig von der Anwesenheit des Nährstoffs Silizium. Der Baustein Grünalgen ist ansonsten vom Aufbau identisch mit dem Kieselalgen-Baustein (Gleichung 13). Es ist lediglich von anderen Umsatzraten auszugehen.

Beide Algenbausteine beeinflussen das Zooplankton und die zweite Konsumentenebene, den Gehalt an gelöstem Sauerstoff, den BSB und CSB, den Schwebstoffgehalt und den pH-Wert.

$$\frac{\partial AGR}{\partial t} = LC + (AGGROW - AGRES - AGMOR - AGEX) * AGR - ZALGR - FAGR - BOFAGR - \frac{HYQEL}{HYA} * AGR$$

Gleichung 14

Anmerkung: Erläuterung zu den Bilanzgliedern analog zu Gleichung 13

12. Zooplankton (1. Ebene der Konsumenten)

In dem Baustein Primärkonsumenten wird ausschließlich das herbivore Zooplankton, im Wesentlichen zur Modellierung des Grazingeffekts auf Algen, dargestellt. Als Quellen werden Einträge über das Headwater und die Nebenläufe betrachtet, sowie die Effizienz der Zooplankter, Algen als Nahrungsquelle in die Mehrung der Zooplanktonbiomasse umzusetzen. Relevante Senken sind die Respiration körpereigener Substanz, die Basismortalität, die Mortalität aufgrund von Mangelercheinungen und die Predation durch Sekundärkonsumenten (carnivores Zooplankton, Makrozoobenthon).

Die Grazingrate für Algen wird ermittelt ausgehend von der maximalen Grazingrate, relativiert durch das Verhältnis des aktuell verfügbaren Nahrungsangebots an verwertbarer Kiesel- u. Grünalgenbiomasse zu dem Optimalangebot, wobei berücksichtigt wird, dass die Filtrierer bei zu großer Algendichte an der Nahrungsaufnahme gehindert werden. Ebenso wird die Nahrungsaufnahme bei einer minimalen Algendichte eingestellt. Bei der Ermittlung der Grazingrate wird das Verhältnis der vorherrschenden Wassertemperatur zu der Optimaltemperatur für den Zooplankton-Stoffwechsel und zu der Maximaltemperatur, ab der Zooplankter die Nahrungsaufnahme einstellen, berücksichtigt. Die Grazingeffekte werden an die Algenbausteine als Bilanzgrößen (Senkenterm) übergeben.

Die assimilierte Anteil (Respiration und Inkorporation) der aufgenommenen Algenbiomasse nimmt mit der verfügbaren Menge an Algenbiomasse ab. Der exkretierte Anteil nimmt entsprechend zu (BSB-Freisetzung). Bei geringem Algenangebot wird ein Großteil der aufgenommenen Biomasse „veratmet“. Je größer das Algenangebot ist, umso größer ist der Algenanteil, der für das Zooplanktonwachstum (Quellterm) verwendet wird. Zusätzlich wird eine Basisrespiration der körpereigenen Substanz der Zooplanktonbiomasse berechnet, welche ausschließlich von der Wassertemperatur abhängig ist.

Die Sterblichkeit infolge Sauerstoffmangel addiert sich ab einer kritischen Sauerstoffkonzentration zu der natürlichen, generationsbedingten Grundmortalität (temperaturabhängige Lebensdauer) und führt bei Abwesenheit von gelöstem Sauerstoff zum Auslöschen der Zooplanktonzönose. Ebenso ist im Modell die Mortalität durch Nahrungsmangel bei Unterschreitung einer minimalen Algenkonzentration berücksichtigt, welche gegebenenfalls mit der Mortalität durch Sauerstoffmangel konkurriert.

Die im Modell berücksichtigten Bilanzglieder sind in Gleichung 15 dargestellt.

$$\frac{\partial ZOO}{\partial t} = LC + (ZGROW - ZRESG - ZMOR - \frac{HYQEL}{HYA}) * ZOO - ZPRED - BOZPRED$$

Gleichung 15

mit

ZGROW	Wachstumsrate der Zooplanktonbiomasse [1/d]
ZRESG	Respiration körpereigener Substanz [1/d]
ZMOR	Zooplankton-Mortalität [1/d]
ZOO	Zooplanktonbiomasse [mg/L]
ZPRED	Biomassenverlust durch Predation der Konsumenten II [mg/(L*d)]
BOZPRED	Biomassenverlust durch Predation des Makrozoobenthon [mg/(L*d)]

13. Carnivores Zooplankton (2. Ebene der Konsumenten)

Dieser Baustein dient im Wesentlichen zur Darstellung der Bestandsregulierung (Predation) des herbivoren Zooplanktons (1. Konsumentenebene) durch das carnivore Zooplankton. Optional kann in diesem Baustein der bestandsregulierende Fraß des herbivoren Zooplanktons durch Fische, ausgehend von einer standorttreuen Fischpopulationsdichte zum Simulationsstartzeitpunkt, berechnet werden. Zuwanderung und Fluchtverhalten während des Simulationszeitraums werden nicht berücksichtigt.

Es werden keine Sedimentationsprozesse angenommen, da Organismen, die in diesem Baustein betrachtet werden, eigenbeweglich sind. Der Zuwachs erfolgt über

die Inkorporation der aufgenommenen Biomasse. Die Reduzierung der Biomasse wird durch Respiration, Mortalität, Predation und gegebenenfalls durch den Fischfang bestimmt (Gleichung 16).

$$\frac{\partial FKON}{\partial t} = LC + (FGROW - FRESG - FMOR - FPRED - \frac{HYQEL}{HYA}) * FKON$$

Gleichung 16

mit

FGROW	Wachstumsrate der Biomasse [1/d]
FRESG	Grundrespirationsrate der körpereigenen Substanz [1/d]
FMOR	Mortalitätsrate [1/d]
FPRED	Predationsrate [1/d]
FKON	Biomasse der Konsumenten II [mg/L]

14. Prozesse am Gewässerbett

(Makrophyten, Periphyten unterschieden nach Epiphyten und Phytobenthon, Makrozoobenthon)

Vor allem bei Gewässern mit kleinem oder mittlerem Wasserabfluss, bei welchen das Verhältnis benetzter Radius zur durchflossenen Querschnittsfläche groß ist, können die Prozesse am Gewässerbett für die Umsetzungsvorgänge in Fließgewässern von entscheidender Bedeutung sein. Hierbei ist das Lichtangebot am Gewässerboden, welches durch die Wassertiefe und den Schwebstoffgehalt limitiert wird, ein wesentlicher Steuerparameter. Für die Modellierung der Prozesse am Gewässerbett werden Daten zur Sedimentbeschaffenheit und zur Besiedlung des Flussbetts für homogene Gewässerabschnitte (Abschnittsbildung abhängig von der Substratbeschaffenheit und dem Lichtangebot) eingegeben. In dem DWA-Modell werden Angaben für die Flussbetteigenschaften differenziert nach Gewässertypen vorgehalten.

Sedimentation

Der Entzug von Feststoffen (Schweb, BSB, CSB, Algen, Nitrifikanten) aus dem Freiwasser durch Sedimentation wird nach dem Verfahren

„Konzentrationsänderungen von Feststoffen durch Sedimentation“ (s. Anhang) berechnet.

Stoffaustausch des Sediments mit dem Freiwasser

Folgende Prozesse werden in diesem Baustein berücksichtigt:

- Sauerstoffverbrauch durch Schlammrespiration;
- Ammoniumfreisetzung aus Bodenschlamm;
- Denitrifikation an Schlammoberfläche;
- Phosphorfreisetzung gekoppelt an die Ammoniumfreisetzung;
- Silikatrücklösung aus schlammiger Sohle.

Resuspension wird wegen der Unvorhersehbarkeit nicht berücksichtigt, aber durch den Hinweis auf Überschreiten der kritischen Schubspannungsgeschwindigkeit bekannt gegeben.

Makrozoobenthon

Für die Bilanzierung des Makrozoobenthos wird keine Transportgleichung gelöst, da dispersive und advective Prozesse nicht zum Tragen kommen. Die Anfangsdichte und die Maximaldichte des Makrozoobenthos sind vom Anwender vorzugeben.

Abhängig von der Gewässertypologie sind für die jeweiligen Flussbetteigenschaften im Modell Datenempfehlungen hinterlegt. Das Mischungsverhältnis des herbivoren und des carnivoren Makrozoobenthos kann ebenfalls vom Anwender vorbestimmt werden. Optional wird vom DWA-Modell das Verhältnis über die Algendichte und die Zooplanktendichte berechnet.

Die Fressraten des herbivoren und carnivoren Makrozoobenthos werden abhängig von der Algen- bzw. Zooplanktendichte und abhängig von der Wassertemperatur ausgedrückt. Limitierend wirken der Mangel an verfügbarem Nahrungsangebot und kritisch niedrige Sauerstoffkonzentrationen. Die aktuelle Assimilationsleistung wird berechnet ausgehend von einer maximalen Assimilationsrate, die bei knappem Nahrungsangebot erreicht wird, reduziert um die Dämpfung der Assimilationsrate durch das aktuelle Nahrungsangebot. Aus der aktuell assimilierten Nahrungsmenge errechnet sich die anteilige respirierte Menge inklusive der damit verbundenen

Stickstoff- und Phosphorfreisetzung und des Sauerstoffverbrauchs. Als Differenz der aufgenommenen Nahrungsmenge zu der assimilierten Menge wird der exkretierte Anteil ermittelt, welcher die Menge des durchschnittlich abbaubaren BSB erhöht. Die Grundmortalität wird aus der mittleren Lebensdauer des Zooplanktons ermittelt. Die Mortalität erhöht sich durch Sauerstoffmangel oder durch pH-Werte außerhalb der Toleranzgrenzen.

Makrophyten

Die Makrophytenentwicklung im Jahresverlauf ist im DWA-Modell als Normjahresgang mit einem definierten Zeitpunkt für den Wachstumsbeginn, den Zeitpunkt der maximalen Biomasseentwicklung und für das Ende der Wachstumsperiode hinterlegt. Der Anwender erhält außerdem Empfehlungen hinsichtlich der minimalen und der maximal möglichen Makrophytendichte für unterschiedliche Gewässertypen in gemäßigten Klimazonen bei optimalen Bedingungen (unbeschatteter Gewässerabschnitt, optimales Substrat, adäquate Fließgeschwindigkeit, ausreichende Nährstoffzufuhr). Mit diesen Angaben kann der Jahresgang der Makrophytenentwicklung unter Optimalbedingungen mit den Zyklen Wachstum, Ruhephase und Absterben für von dem Anwender spezifizierte, weitgehend homogene Gewässerabschnitte dargestellt werden. Die Ausgangsbedingungen während des Simulationszeitraums sind damit ebenfalls festgelegt.

Die 1. Ableitung der jahreszeitlichen Verteilung der optimalen Biomasseentwicklung ergibt unter Berücksichtigung der artspezifischen, konstanten Respirationsrate die tägliche Wachstums- bzw. Absterberate. Für die tageszeitliche Verteilung der täglichen Biomasseproduktion wird ein sinusförmiger Verlauf während des Lichttages angenommen.

Dämpfende Faktoren wie die Selbstbeschattung, die Alterung der Biomasse und die von der Jahreszeit abhängigen Lichtverhältnisse sind in dem Jahresverlauf unter Optimalbedingungen und in der Angabe der maximalen Makrophytendichte subsummiert. Da Makrophyten über Rhizome und über das Blattwerk mehrfach Zugang zu Nährstoffen haben, wird keine Wachstumslimitierung durch Nährstoffmangel angenommen. Die gewässerabschnittsweise wirksame Beschattung

wird dagegen wegen ihrer Bedeutung berücksichtigt durch das Verhältnis der aktuellen photosynthetisch aktiven Strahlung unmittelbar unter der Wasseroberfläche zu der optimalen photosynthetisch aktiven Strahlung unmittelbar unter der Wasseroberfläche ohne Bewölkung und Abschattung durch Gehölze, Bauwerke und Horizontüberhöhung.

Da die Selbstbeschattung der Makrophyten bei realen, d.h. in der Regel suboptimalen Verhältnissen geringer ist als bei dem optimalen Makrophytenwachstum, wird die Wachstumsrate in Anlehnung an das Verhältnis aus der aktuellen Makrophytendichte zu der maximalen Makrophytendichte erhöht.

Falls die Makrophytenbiomasse auf Grund günstiger Konditionen vor dem festgelegten Zeitpunkt die Maximaldichte erreicht, wird der Makrophytenzuwachs auf die Höhe der Abnahme durch Respiration und Mortalität solange begrenzt (Stagnation), bis der festgelegte Zeitpunkt erreicht wird und damit die Ruhephase durch die Absterbephase abgelöst wird. Die Mortalitätsraten während der Absterbephase entsprechen den negativen Gradienten aus der 1. Ableitung der jahreszeitlichen Verteilung der maximalen Biomasseentwicklung.

Zu der Biomasse der Makrophyten wird im Modell die wirksame Biomasse der Rhizome als konstanter Anteil der maximalen Makrophytendichte berücksichtigt. Für den Bedeckungsgrad der Sohle durch Makrophyten muss der Anwender prozentuale Schätzwerte vorgeben, damit aus der berechneten Dichte der Makrophytenbiomasse die Biomasse der mit Wasserpflanzen bestandene Flusssohle ermittelt werden kann.

Die Änderungen der Gehalte von Stickstoff (N_{org} , NO_3 , NH_4), Phosphor und Silikat durch Makrophyten errechnet sich aus der Differenz der respirierten Biomasse zu der aufgebauten Biomasse, wobei für die Nährstoffe NO_3 , NH_4 , P, und Si berücksichtigt wird, dass diese für das Makrophytenwachstum anteilig aus der fließenden Welle entnommen werden. Für die Sauerstoffbilanzierung sind die Sauerstoffproduktion der wachsenden Makrophytenbestände und der Sauerstoffverbrauch durch die Respiration zu berücksichtigen. Die abgestorbene Makrophytenmasse wird anteilig als leicht abbaubarer und als schwer abbaubarer BSB betrachtet.

Die Bilanzierung der Makrophyten während der Wachstumsphase berücksichtigt folgende Prozesse (*Gleichung 17*):

$\frac{\partial MPHYT}{\partial t}$	$= (MGROW - MRES - MMOR) * MPHYT$	<i>Gleichung 17</i>
-------------------------------------	-----------------------------------	---------------------

MGROW	aktuelle Wachstumsrate [1/d]
MRES	Respirationsrate [1/d]
MMOR	Moratalitätsrate [1/d]
MPHYT	Makrophytendichte an der Gewässersohle [g/m ²]

15. Epiphytische und benthische Aufwuchsalgen

Anfangsbedingungen

Die epiphytische Aufwuchsbioasse ist gebunden an die Anwesenheit der Makrophyten als besiedelbare Oberfläche. Die maximale Aufwuchsdichte der Epiphyten wird vor dem Zeitpunkt der maximalen Makrophytendichte beobachtet (Bayerische Landesanstalt für Wasserforschung *in* DWA-MODELLBESCHREIBUNG 2002). Die Lichtbedingungen sind dann wegen der geringeren Belaubung der Ufervegetation günstiger. Zudem ist die Ausbreitung der Makrophyten im Fließquerschnitt noch gering und damit die Abriebwirkung durch die Strömung sowie die Reibung der Pflanzenteile weniger stark. Es wird angenommen, dass die maximale Epiphytenbioasse dann gegeben ist, wenn das Makrophytenwachstum am größten ist (Abbildung 1).

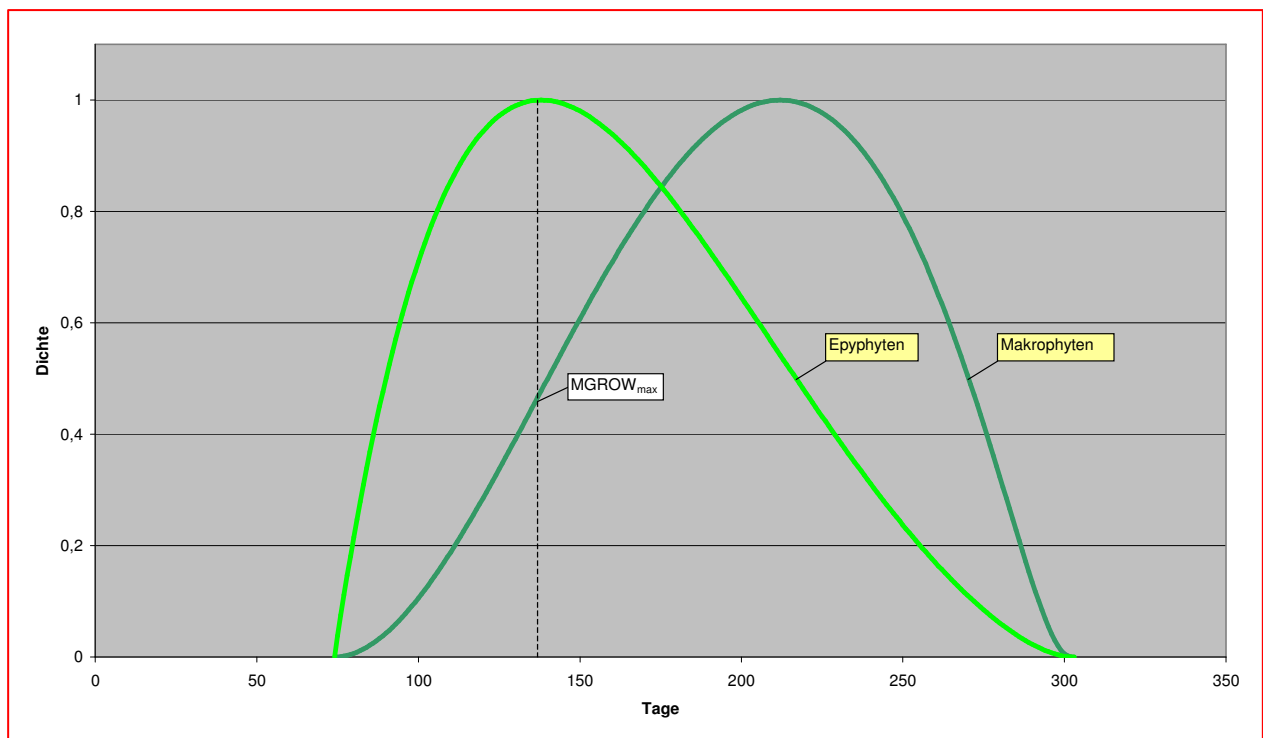


Abbildung 1: Standardisierter, optimaler Wachstumsverlauf der Epiphyten und der Makrophyten ($MGRWO_{max}$ = Zeitpunkt des maximalen Makrophytenwachstums).

Bei der Ermittlung der Epiphytenkonzentration zu dem Startzeitpunkt der Simulation werden folgende Eingangsgrößen berücksichtigt:

- jahreszeitunabhängige Basiskonzentration;
- möglicher Schwankungsbereich der Epiphytendichte;
- Verteilungswert für Optimalbedingungen gemäß Abbildung 1;
- Abminderungsfaktor für suboptimale Verhältnisse;
- Makrophytendichte.

Für den Zeitraum außerhalb der Vegetationsperiode ist im Modell eine konstante minimale Epiphytenkonzentration hinterlegt.

Umsatzprozesse

Die Unterscheidung der Algenspezies ist wegen der unterschiedlichen Auswirkungen auf den Stoffhaushalt von Bedeutung. Das Mischungsverhältnis der Epiphyten (Kieselalgen und Grünalgen) wird ebenso wie bei dem Baustein Phytoplankton aus den Wassertemperaturverhältnissen bestimmt. Die maximalen Wachstumsraten für

die epiphytischen Kiesel- und Grünalgen werden von den planktischen Algen übernommen.

Die aktuelle Wachstumsrate ist abhängig von der

- Nährstoffkonzentration;
- Wassertemperatur;
- photosynthetisch aktiven Strahlung.

Der Nährstoffeinfluss und der Temperatureinfluss werden wie bei den Algenbausteinen modelliert. Die lichtabhängige Wachstumsrate wird berechnet aus dem verfügbaren, photosynthetisch aktiven Licht an der Flusssohle und der vorherrschenden Makrophytendichte. Von einer Nährstoffversorgung aufgrund diffusiver Prozesse und von Hemmeffekten durch übermäßiges Lichtangebot wird im Modell nicht ausgegangen.

Die Respiration der Epiphyten setzt sich zusammen aus der vom Licht unabhängigen Basisrespiration und der an die lichtabhängige Wachstumsrate gebundenen Photorespiration. Die durch Lichteinfluss respirierte Epiphytenbiomasse wird mit den vorherrschenden Wassertemperaturen gewichtet und ergibt damit die respirierte Biomasse des Kieselalgen- und des Grünalgenaufwuchses.

Die Mortalität der Epiphyten setzt sich zusammen aus einer Grundmortalität und einem Anteil, mit welchem Nährstoffmangelsituationen und die Temperaturabhängigkeit der Sterberate abgebildet werden. Außerdem muss noch anteilig die Mortalität des Trägermaterials, der Makrophyten, als Verlustterm berücksichtigt werden. Die Abweidung durch Konsumenten wird mit einer zeitunabhängigen Grazingsrate dargestellt, gewichtet durch die vorherrschende Wassertemperatur im Verhältnis zur Maximal- und Optimaltemperatur für die Nahrungsaufnahme.

Der Anteil der Epiphyten, welcher nach Überschreiten der maximalen Aufwuchsdichte produziert wird, unterliegt dem Ablösungsprozess. Außerdem werden Epiphyten von den Makrophyten abhängig von der Fließgeschwindigkeit

abgelöst. Im Modell wird die Epiphytenbiomasse bei Eintreffen der steuernden Randbedingungen um die abgelösten Anteile reduziert und im BSB-Baustein als Quelle abbaubarer Biomasse betrachtet.

Benthischer Aufwuchs

Die benthische Aufwuchsbiomasse ist abhängig von der Ausdehnung der vegetationslosen Flusssohle. Kieselalgen besitzen bei niedrigen Wassertemperaturen und geringen Lichtintensitäten Vorteile. Deshalb werden die Kiesel- und Grünalgenanteile abhängig von der Wassertemperatur und von den Lichtverhältnissen bestimmt. Die Anfangsdichte, die Umsetzungsprozesse Wachstum, Respiration, Mortalität, Abweidung und Ablösung werden für den benthischen Aufwuchs analog der Verfahrensweise bei den Epiphyten dargestellt.

Der benthische Aufwuchs erhöht die Kolmatierung der Sohle. Dadurch wird die kritische Schubspannungsgeschwindigkeit, ab der Sohlmaterial resuspendiert, heraufgesetzt. Im Modell wird ausgehend von den Untersuchungen von HEINZELMANN C. (1992) die Modifikation der kritischen Schubspannungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Chlorophyllgehalt des Phytobenthon berücksichtigt.

16. Schwebstoffe

Im Allgemeinen wird zur Feststellung der Einleitbedingungen der Schwebstoffgehalt als Gesamtschwebstoff aus mineralischen und organischen Bestandteilen gemessen. Im Modell werden die Schwebstoffe organischer Herkunft in den jeweiligen „biologischen“ Bausteinen berücksichtigt. Deshalb muss aus den Messdaten des Gesamtschwebstoffs für Punkteinleitungen zur Ermittlung der Anfangsbedingungen für den Schwebstoffbaustein zunächst der mineralische Anteil durch Abzug der lebenden Biomasse und des sedimentierfähigen Anteils des BSB_∞ bestimmt werden. Für linienförmige Einleitungen wird kein Eintrag lebender Biomasse angenommen.

Der sedimentierte Anteil der mineralischen, sedimentierfähigen Stoffe je Zeitschritt wird gemäß den Angaben unter „Konzentrationsänderung durch Sedimentation“ bestimmt und von der mineralischen Schwebstoffkonzentration SSM abgezogen.

Damit kann der Transport der verbleibenden Schwebstoffe in der Transportgleichung berechnet werden (Gleichung 18). Der Gesamtschwebstoffgehalt am Ende des Zeitschritts errechnet sich aus den mineralischen Schwebstoffen und den Schwebstoffen aus dem Phytoplankton, dem Zooplankton und den Konsumenten.

$$\frac{\partial SSM}{\partial t} = LC + \frac{HYQEL}{HYA} * (SSMEL - SSM)$$

Gleichung 18

mit

SSMEL	eingeleitete Schwebstoffe durch linienförmige Einleitungen [mg/L]
SSM	Konzentration der mineralischen Schwebstoffe im Gewässer [mg/L]

17. Sauerstoff

Im DWA Modell wird die Temperaturabhängigkeit der Sauerstofflöslichkeit mit der Sauerstoffsättigungsfunktion nach CHURCHILL ET AL. (1962) beschrieben. Der Einfluss des vorherrschenden Luftdrucks auf die Sättigung ergibt sich nach dem HENRY-DALTON-GESETZ aus dem atmosphärischen Luftdruck und dem Sättigungsdampfdruck bei den gegebenen Wassertemperaturen. Das Sättigungsdefizit berechnet sich aus der Differenz der Sauerstoffsättigung zu den ermittelten Sauerstoffkonzentrationen.

Im Modell wird dem Sauerstoffeintrag durch technische Bauwerke besondere Aufmerksamkeit geschenkt. Der Knotenpunkt Staustufe im Modell kann maximal 3 Knotenelemente enthalten: Wehranlagen, Schleusen und Turbinen. Der Wasserabfluss wird im Modell folgendermaßen aufgeteilt:

Über das Wehr wird ein Mindestwasserabfluss zur Erhaltung einer ausreichenden Wassermenge im Unterwasser abgeführt. Die Mindestabgabe über das Wehr ist vom Anwender vorzugeben. Von der verbleibenden Wassermenge wird, falls eine Schleuse vorhanden ist, die Erfüllung des Schleusenbetriebs sicher gestellt. Zur Unterhaltung der Schleuse ergibt sich die erforderliche Wassermenge aus dem Schleusenvolumen und der Anzahl der Schleusungen je Tag. Mit der dann noch verfügbaren Wassermenge wird bis zu einem kapazitätsabhängigen

Maximaldurchfluss die Turbine betrieben. Die nach Erfüllung der vorgenannten Erfordernisse vorhandene Restwassermenge wird über das Wehr abgeführt.

Sauerstoffeintrag durch Wehre, Kaskaden und Turbinen

Im Modell kann der Anwender zwischen den Wehrbelüftungsformeln nach IMHOFF (IMHOFF, K. UND K. R., 1999) oder alternativ nach AVERY S. T. & NOVAK P. (1978) entscheiden. Bei beiden Verfahren wird die Form, in welcher der Wasserabfluss das Wehr passiert, unterschieden:

- unterströmtes Wehr,
- Wehr mit anliegendem Strahl,
- Wehr mit frei fallendem Strahl.
- Kaskade.

Bei dem Verfahren nach IMHOFF werden Schätzwerte als Belüftungsraten für die oben angegebenen Unterscheidungsmerkmale verwendet. Aus der Belüftungsrate, dem Wehrabfluss, der Fallhöhe und dem Sättigungsdefizit ergibt sich mit einer Temperaturkorrektur der Sauerstoffgehalt nach Wehrüberfall. Der einfache Modellansatz nach IMHOFF wird in der Regel gewählt, wenn die Auswirkungen künstlicher Belüftungsmaßnahmen zur Stützung des Sauerstoffgehalts abgeschätzt werden sollen. Der künstliche Sauerstoffeintrag ergibt sich aus der Leistung des eingesetzten Belüfters und der verfahrensabhängigen Belüftungsrate (Oberflächenbelüfter, Lufteinperlung) im Verhältnis zu dem Sättigungsdefizit der belüfteten Wassermenge.

Zur Einschätzung der Sauerstoffänderungen durch Wehranlagen ist das Verfahren nach AVERY S. T. & NOVAK P. vorzuziehen. Bei dieser Berechnungsmethode wird der Einfluss der Wehrbreite auf die Belüftung berücksichtigt. Außerdem wird die Belüftungsrate berechnet. Damit kann z. B. die Wirkung von Kaskadenstufen auf den Sauerstoffgehalt besser abgebildet werden. Nach der Methode von AVERY S. T. & NOVAK P. wird mit der Froude- und Reynolds-Zahl des Wehrüberfalls und mit dem Sauerstoffsättigungsdefizit nach Temperaturkorrektur der eingetragene Sauerstoffgehalt in einer empirischen Funktion berechnet.

Im DWA Modell kann die Steuerung des Sauerstoffgehalts bei Über- oder Unterschreiten eines vorgegebenen oberen bzw. unteren Sättigungsgrenzwerts durch optimierte Abflussaufteilung und Turbinenbelüftung simuliert werden. Es wird angenommen, dass ein Schleusenbetrieb keinen signifikanten Einfluss auf den Sauerstoffgehalt ausübt.

Zur Abschätzung des physikalischen Sauerstoffein- und austrags über die Wasseroberfläche sind im Modell verschiedene Modellansätze hinterlegt, die alle die Fließgeschwindigkeit, die Wassertiefe und die Wassertemperatur berücksichtigen, einige auch die Sohlrauigkeit. Der Ansatz nach WOLF (WOLF, P. 1974) eignet sich insbesondere für Fließgewässer mit geringer Wassertiefe.

Der Sauerstoffverbrauch durch die Schlammrespiration wird mit einem Schätzverfahren nach KIRCHESCH (in DWA-MODELLBESCHREIBUNG 2002) festgelegt. Dabei wird zur Einordnung der Sedimentbeschaffenheit und der damit verbundenen Schlammzehrung die Schubspannungsgeschwindigkeit bei Mittelwasser herangezogen. Von der Schubspannungsgeschwindigkeit abhängig ergeben sich 5 verschiedenen Klassen mit einer temperatur- und sauerstoffabhängigen Basis-Schlammzehrung. Bei geringen Schubspannungsgeschwindigkeiten $< 0,0085 \text{ m/s}$ wird mit $0,14 \text{ g/(m}^2\cdot\text{d)}$ eine konstante Rate für die Methanoxidation angenommen.

Die Bilanzgleichung für den Gewässerabschnitt (Gleichung 19) berücksichtigt neben der Advektion und der Dispersion

- die physikalische Be- und entlüftung,
- die Reduzierung des Sauerstoffgehalts durch den BSB-Abbau und durch die Nitrifikation,
- die Sauerstoffzehrung durch den Bodenschlamm,
- den Sauerstoffzugewinn durch die Photosyntheseleistungen der Kiesel- und Grünalgen, der Makrophyten und der Epiphyten,
- den Sauerstoffverbrauch durch das Zooplankton und die Konsumenten Zooplankton sowie die Konsumenten der Ebene 2
- den Sauerstoffeintrag aus linienförmigen Einleitungen.

Der Sauerstoffeintrag aus punktförmigen Quellen wird über die Mischungsrechnungen an den Einleitstellen berücksichtigt.

$$\frac{\partial DO}{\partial t} = LC - DOK2 * DO + DOK2 * DOS - DOABBSB - DOABN - \frac{DOABSCH}{HYTIEFE} + DOAKI + DOAGR + DOMPHYT + DOPEPHYT - DOZOO - DOFKON - DOBOF + \frac{HYQEL}{HYA} * (DOEL - DO)$$

Gleichung 19

mit

DOK2	Sauerstoffeintragsrate berechnet aus Wehrbelüftungsformel [1/d]
DO	aktueller Sauerstoffgehalt [mg/L]
DOS	Sauerstoffsättigungskonzentration [mg/L]
DOABBSB	Sauerstoffänderung durch BSB-Abbau [mg/(L*d)]
DOABN	Sauerstoffänderung durch Nitrifikation [mg/(L*d)]
DOABSCH	Sauerstoffänderung durch Schlammrespiration [g/(m²*d)]
HYTIEFE	Wassertiefe [m]
DO...	Sauerstoffänderung durch Kieselalgen (AKI), Grünalgen (AGR), Makrophyten (MPHYT), Epiphyten (EPHYT), Zooplankton (ZOO), Konsumenten II, Makrozoobenthon (BOF)
DOEL	Sauerstoffgehalt linienförmiger Einleitungen [mg/L]

18. pH-Wert

Für die Berechnungen des pH-Werts im Gewässer sind folgende Angaben aus den Einleiterdaten notwendig:

- pH-Wert,
- Leitfähigkeit,
- Ca^{2+} -Konzentration,
- m-Wert,
- Wassertemperatur.

Für jeden Zeitschritt werden an dem Eingangsquerschnitt und für alle relevanten Einleitungen die Konzentrationen der H^+ -Ionen und der OH^- -Ionen aus den gemessenen pH-Werten sowie die Kohlenstoffionensummen ermittelt. Durch Mischrechnungen werden aus den Angaben für die Einleitungen die gewässerbezogenen Ca^{2+} -Konzentrationen, Kohlenstoffionenkonzentrationen, die m-Werte und die Leitfähigkeiten am Einleitquerschnitt bestimmt.

Folgende gewässerinterne Prozesse werden abgebildet:

- Änderung der Ionenkonzentrationen durch Calcitfällung;
- Änderung der CO_2 -Konzentration durch
 - physikalischen CO_2 -eintrag und –austrag auf der Fließstrecke und an Wehranlagen;
 - den BSB-Abbau organischer Kohlenstoffverbindungen;
 - Algen- und Makrophyten (Wachstum und Respiration);
- Änderung der H^+ -Ionenkonzentration durch Nitrifikation;
- Änderung der Ca^{2+} -Konzentrationen durch Bikarbonatverbrauch der Algen

$$\begin{aligned}\frac{\partial RMM}{\partial t} &= LC + \Delta RHCO_3M * \Delta RCO_3M + \Delta RCO_2M + \frac{HYQEL}{HYA} * (RMMEL - RMM) \\ \frac{\partial RCM}{\partial t} &= LC + \Delta RHCO_3M + 2\Delta RCO_3M + \Delta ROHM - \Delta RHM + \frac{HYQEL}{HYA} * (RCMEL - RCM) \\ \frac{\partial RCAM}{\partial t} &= LC + \Delta RCAM + \frac{HYQEL}{HYA} * (RCAMEL - RCAM) \\ \frac{\partial RLEIT}{\partial t} &= LC + \Delta RLEIT + \frac{HYQEL}{HYA} * (RLEITEL - RLEIT)\end{aligned}$$

$\begin{aligned}\frac{\partial RMM}{\partial t} &= LC + \Delta RHCO_3M * \Delta RCO_3M + \Delta RCO_2M + \frac{HYQEL}{HYA} * (RMMEL - RMM) \\ \frac{\partial RCM}{\partial t} &= LC + \Delta RHCO_3M + 2\Delta RCO_3M + \Delta ROHM - \Delta RHM + \frac{HYQEL}{HYA} * (RCMEL - RCM) \\ \frac{\partial RCAM}{\partial t} &= LC + \Delta RCAM + \frac{HYQEL}{HYA} * (RCAMEL - RCAM) \\ \frac{\partial RLEIT}{\partial t} &= LC + \Delta RLEIT + \frac{HYQEL}{HYA} * (RLEITEL - RLEIT)\end{aligned}$
--

Gleichung 20

mit

RMM	m-Wert [mol/L]
RHCO3M	HCO ₃ -Konzentration [mol/L]
RCO3M	CO ₃ -Konzentration [mol/L]
RCO2M	CO ₂ - Konzentration [mol/L]
RCM	Kohlenstoffionensumme [mol/L]
ROHM	OH ⁻ -Ionenkonzentration [mol/L]
RHM	H ⁺ -Ionenkonzentration [mol/L]
RCAM	Ca ²⁺ -Ionenkonzentration [mol/L]
RLEIT	Leitfähigkeit [μS/cm]
...EL	 der linienförmigen Einleitungen

19. Schwermetalle

Im Schwermetallbaustein werden die Einleiterdaten als Gesamtmetallgehalte für Zink, Kupfer, Cadmium und Nickel eingegeben. Hieraus werden abhängig von dem pH-Wert und von den Schwebstoffgehalten an Hand vorgegebener Verteilungskoeffizienten die sich einstellenden Metallgehalte, unterschieden nach der partikulären und der gelösten Fraktion, im Gewässer berechnet. Außerdem wird der Anteil der metallbeladenen, partikulären Fraktion ermittelt, der im aktuellen Zeitschritt sedimentiert. Bislang wird hinsichtlich der Sorptionseigenschaften nicht zwischen mineralischen und im BSB enthaltenen Schwebstoffen unterschieden.

Die toxischen Wirkungen der Metalle auf die aquatische Fauna und Flora werden wegen der großen Unsicherheiten nicht modelliert. Es ist aber davon auszugehen, dass die gelöste Fraktion leichter bioverfügbar ist. Aus den Ergebnissen, differenziert nach der partikulären und der gelösten Fraktion, kann die Wirkung der Schwermetalle an Hand von Literaturhinweisen abgeschätzt werden.

Für die Bilanzierung der Schwermetalle wird die Gleichung Gleichung 21 im Modell verwendet.

$$\frac{\partial SMET}{\partial t} = LC + \frac{HYQEL}{HYA} * (SMETEL - SMET)$$

Gleichung 21

SMET Schwermetallkonzentration gesamt [mg/L]

SMETEL Schwermetallkonzentrationen gesamt der
linienförmigen Einleitungen [mg/L]

20. Organische Einzelsubstanzen

Es werden fraktionsspezifisch folgende Prozesse im Modell abgebildet:

- | | |
|-------------------------------|--------------------------------|
| • Biotransformation (Biolyse) | Gesamtfraktion |
| • Oxidation | Gesamtfraktion |
| • Hydrolyse | gelöste / partikuläre Fraktion |
| • Volatilisation | gelöste Fraktion |
| • Photolyse | gelöste Fraktion |
| • Sorption, Desorption | Gesamtfraktion |
| • Sedimentation | Gesamtfraktion |

Folgende Einschränkungen sind zu bedenken:

- Keine Simulation der toxischen Wirkungen der Metalle;
- Keine Simulation von Substanzen, die aus Transformationsprozessen herrühren;
- Keine Berücksichtigungen von Änderungen der Milieubedingungen, die aus Transformationsprozessen herrühren;
- Keine Differenzierung nach Molekülspezies (ungeladen, geladen);
- Adsorptionsisothermen über die gesamten Konzentrationsbereiche linear.

Die Reaktionsraten der Biotransformation sind nach der Abbaubarkeit in 5 Stufen von „leicht abbaubar“ bis „kaum abbaubar“ mit entsprechenden Abbaubeiwerten (siehe BSB-Baustein) klassifiziert. Die Abhängigkeit des Abbaus von der Wassertemperatur wird mit der Funktion nach **ARRHENIUS** (WWW.CHEMIE/UNI-REGENSBURG.DE) ausgedrückt.

Die chemische Oxidation wird ebenfalls durch eine Reaktionsrate ausgedrückt, die vom Anwender vorgegeben werden kann.

Im Modell wird die saure, neutrale und basische Hydrolyse differenziert betrachtet. Die H^+ und OH^- -Ionenkonzentrationen werden aus dem pH-Baustein (Kapitel 18) übernommen. Die Hydrolyseraten werden temperaturabhängig gewichtet.

Im Modell wird die photolytische Umwandlung der betrachteten Substanz durch die auftreffende Lichtenergie im wirksamen Wellenlängenbereich zwischen 290 nm und 380 nm modelliert. Wesentliche Übergabeparameter stammen aus dem Strahlungsbaustein (Kapitel 3).

Die Entgasung der gelösten Phase volatiler Substanzen über die Wasseroberfläche wird für die freie Fließstrecke und den Wehrüberfall an Wehranlagen betrachtet,

Organische Schadstoffe adsorbieren vorzugsweise an organischem Kohlenstoff. Der Verteilungskoeffizient der organischen Spurenstoffe partikulär / gelöst korreliert linear mit dem Octanol-Wasser-Verteilungskoeffizient (KARICKHOFF zitiert in BURNS L. A., CLINE D., LASSITER R. R. 1982), welcher für zahlreiche organischen Einzelsubstanzen bekannt ist. Der Gesamtkohlenstoffgehalt wird, differenziert nach der sedimentierfähigen und der nicht sedimentierfähigen Fraktion, aus dem BSB-Baustein (Kapitel 6) übergeben. Damit ist der Entzug adsorbierter organischer Einzelsubstanzen durch die im Zeitschritt berechnete Sedimentation der sedimentierfähigen Fraktion bestimmt. Der Baustein Organische Einzelsubstanzen wurde auf Basis der folgenden Modellansätze entwickelt:

- EXAMS-II (BURNS L. A., CLINE D., LASSITER R. R. 1982);
- TOXIWASP (AMBROSE, R. B. 1983);
- QWASI (MACKAY, D., JOY, M., PATERSON, S. 1983);
- EXWAT (BRÜGGEMANN, R. & DRESCHER-KADEN, U. 2003).

Die Bilanzgleichung ist in Gleichung 22 wiedergegeben.

$$\frac{\partial OST}{\partial t} = LC - (OKI + OKCHEM) * OST + \frac{HYQEL}{HYA} * (OSEL - OST)$$

$\frac{\partial OSG}{\partial t}$	$= -(OKHG + OKPHOTG * OSFPHOTG + OKV) * OSG$
$\frac{\partial OSP}{\partial t}$	$= -(OKPHOTP * OSFPHOTP * OKHP) * OSP$

Gleichung 22

mit

Biolyse und chemische Oxidation der Gesamtfraktion:

OST	Gesamtkonzentration der organischen Einzelsubstanzen [mmol/L]
OK1	Reaktionsrate für die biochemische Transformation [1/d]
OKCHEM	Reaktionsrate für die chemische Oxidation [1/d]
OSEL	Gesamtkonzentration der organischen Einzelsubstanzen der linienförmigen Einleitungen [mmol/L]

Hydrolyse, Photolyse und Entgasung der gelösten Fraktion:

OSG	Konzentration der gelösten, organischen Einzelsubstanzen [mmol/L]
OKHG	Reaktionsrate für die Hydrolyse, gelöste Fraktion [1/d]
OKPHOTG	Reaktionsrate für die Photolyse, gelöste Fraktion [1/d]
OSFPHOTG	Anteil der photoinstabilen, gelösten Fraktion
OKV	Reaktionsrate für die Entgasung [1/d]

Photolyse und Hydrolyse der partikulären Fraktion:

OSP	Konzentration der organischen Einzelsubstanz, an Kohlenstoff sorbierte Fraktion [mmol/L]
OKPHOTP	Reaktionsrate für die Hydrolyse, partikuläre Fraktion [1/d]
OSFPHOTP	Anteil der photoinstabilen, partikulären en Fraktion
OKHP	Reaktionsrate für Hydrolyse gesamt, partikuläre Fraktion [1/d]

21. Hygiene

Dieser Baustein befindet sich derzeit in der Entwicklung. Aus mehreren Forschungsvorhaben (UNIVERSITÄT BONN, ERFTVERBAND 2004) konnten die Keimemissionen (Bakterien, Parasiten, Viren) herrührend aus Kläranlagen, Mischwasserbehandlungsanlagen und aus linienförmigen Einträgen für typische

Lastfälle spezifiziert werden. Diese Angaben dienen im DWA-Modell als Datenvorgaben für die Charakterisierung des Emissionsinventars. Die gewässerinternen Umsatzprozesse sind im Wesentlichen bestimmt durch die stark dezimierende Wirkung des Sonnenlichts (zitiert in YÖRÜK, A. 2005). Zur Zeit wird in umfangreichen Versuchen die diesbezügliche Dosis-Wirkungsbeziehungen ermittelt (ERFTVERBAND 2006), damit die lichtabhängige Mortalitätsrate im DWA Modell implementiert werden kann.

Anhang

Konzentrationsänderung durch Sedimentation

Die Konzentrationsänderungen von Feststoffen im Freiwasser durch Sedimentation werden nach KAESER, F. (DWA-Modellbeschreibung 2002) als Summe der nicht sedimentierbaren Feststoffe und der Feststoffe, die nicht im entsprechenden Zeitschritt sedimentieren, berechnet.

Zunächst wird aus dem Gesamsubstanzgehalt (Feststoffe) zu Beginn des Zeitintervalls und einem im Modell vorgelegten bzw. gewählten sedimentierfähigen Anteil für das ruhende Medium die potenziell sedimentierbare, partikuläre Substanzkonzentration berechnet. Die Sinkgeschwindigkeit der Fraktion im ruhenden Medium, die unter Turbulenzbedingungen die Grenzfraktion zwischen sedimentierbaren und nicht sedimentierbaren Anteil bildet, wird in Abhängigkeit von der aktuellen Schubspannungsgeschwindigkeit als sogenannte Grenzsinkgeschwindigkeit berechnet (Abbildung 2).

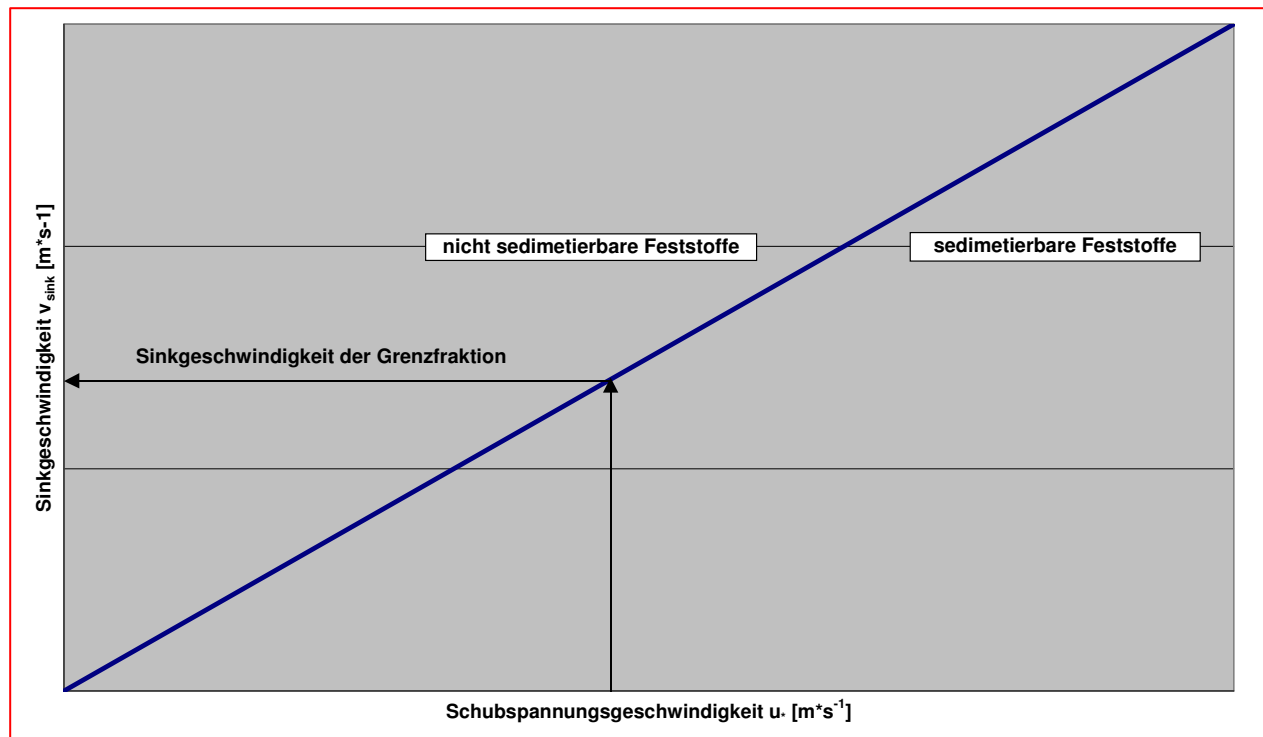


Abbildung 2: Grenzsinkgeschwindigkeit im turbulenten Medium – prinzipielle Darstellung.

Eine empirisch ermittelte Summenhäufigkeitsfunktion der Sinkgeschwindigkeiten partikulärer Einzelfractionen im ruhenden Medium liefert für die ermittelte Grenzsinkgeschwindigkeit die entsprechenden Summenhäufigkeit (Abbildung 3). Mit der Summenhäufigkeit für die Grenzsinkgeschwindigkeit und dem potenziell sedimentierbaren, partikulären Stoffgehalt wird der Gehalt der bei aktuellen Turbulenzbedingungen nicht sedimentierbaren Feststoffe ermittelt. Damit ist der Summand c_{eq} der Gleichung 23 zur Bestimmung der Konzentrationsänderung nach KÄSER (1981) bestimmt.

$$c_t = \frac{c_0 - c_{eq}}{e^{\frac{P \cdot W_{st} \cdot \Delta t}{H}}} + c_{eq}$$

Gleichung 23

mit

- c_t Feststoffgehalt der Freiwasserzone am Ende des Zeitintervalls [mg/L]
- c_0 Feststoffgehalt der Freiwasserzone am Beginn des Zeitintervalls [mg/L]
- c_{eq} Gehalt der nicht sedimentierbaren Feststoffe in der Freiwasserzone bei aktuellen Turbulenzbedingungen [mg/L]
- P Proportionalitätsfaktor

W_{st} mittlere Sinkgeschwindigkeit der absetzbaren Feststoffe
bei aktuellen Turbulenzbedingungen [m/s]

H = Wassertiefe [m]

Δt = Zeitschrittweite [s]

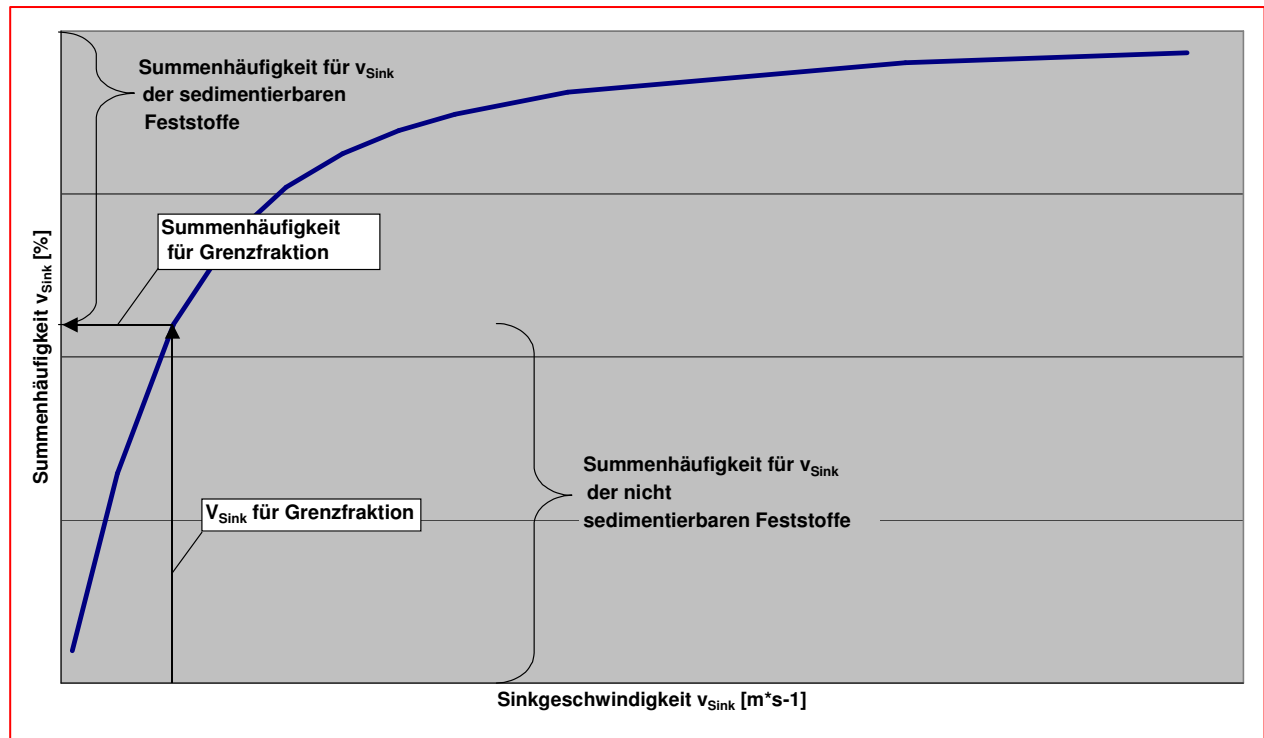


Abbildung 3: Summenhäufigkeitsfunktion der Sinkgeschwindigkeiten partikulärer Einzelfractionen im ruhenden Medium – prinzipielle Darstellung.

Aus der Summenhäufigkeit der Grenzsinkgeschwindigkeit lässt sich die Summenhäufigkeit der mittleren Sinkgeschwindigkeit des sedimentierbaren Anteils und daraus die mittlere Sinkgeschwindigkeit für das ruhende Medium bestimmen. Die Sinkgeschwindigkeit bezieht sich auf 20 °C und muss wegen der temperaturabhängigen Zähigkeit des Wassers auf die aktuelle Wassertemperatur umgerechnet werden. Diese Sinkgeschwindigkeit wird auf die Sinkgeschwindigkeit im turbulenten Medium über eine empirische Beziehung abhängig von der Schubspannungsgeschwindigkeit ermittelt. Damit ist auch der Anteil der absetzfähigen Feststoffe, die nicht im entsprechenden Zeitschritt sedimentieren, bestimmbar.

Die vorgenannte Verfahrensweise zur Bestimmung der Konzentrationsänderungen von Feststoffen durch Sedimentation wird im DWA-Modell nicht nur im

Zusammenhang mit dem BSB-Baustein verwendet, sondern es werden ebenso entsprechende Koeffizienten für CSB, Nitrifikanten und verschiedene Algenkulturen berechnet.

Konzentrationsverteilung im vertikalen Profil

Aus der Diffusionstheorie (FISCHER, H. B. 1968) ist bekannt, dass unter Turbulenzbedingungen das Verhältnis aus der Konzentration suspendierter, sedimentierfähiger Stoffe in einer beliebigen Höhe über der Sohle zu der Suspensakonzentration in der sohl nahen Schicht abhängig ist von der Sinkgeschwindigkeit der partikulären Substanz im turbulenten Strömungsfeld sowie von der vorherrschenden Schubspannungsgeschwindigkeit. Diese Beziehung wird durch den transversalen Dispersionskoeffizienten ausgedrückt.

Im Modell wird bei der Ermittlung der Konzentrationsverteilung im vertikalen Profil unterschieden nach Kieselalgen, Grünalgen und mineralischen Schwebstoffen. Die Berechnung der vertikal geschichteten Konzentrationen wird wie folgt durchgeführt: Die mittlere Sinkgeschwindigkeit der betrachteten partikulären Substanz wird in der Sedimentationsroutine „Konzentrationsänderung durch Sedimentation“ ermittelt. Die Schubspannungsgeschwindigkeit wird im Hydraulikbaustein berechnet. An Hand dieser Kenngrößen für die partikuläre Substanz und die Turbulenz errechnet sich die Suspensakonzentration in der sohl nahen Schicht aus der sedimentierfähigen Fraktion und dem Integral des transversalen Dispersionskoeffizienten über die Wassertiefe schrittweise für jeweils 5 cm Schichten.

Die örtliche Konzentration suspendierter, sedimentierfähiger Stoffe (Algen oder mineralische Schwebstoffe) wird mit diesen Eingangsgrößen bestimmt. Der vertikale Konzentrationsgradient dient zur Wichtung des verfügbaren Lichtangebots bei der Berechnung der mittleren Wachstumsrate der Algen (siehe Kieselalgenbaustein).

Literatur

AMBROSE, R. B. 1983

Watershed & Water Quality Modeling Technical Support Center. WASP - Water Quality Analysis and Simulation Model by USEPA. • WASP4, rri.karico.co.kr/r2007/main_e/workshop/2008/water_05.pdf (Recherche vom 29.07.2009)

AVERY, S. T. & NOVAK, P. 1978

OXYGEN TRANSFER AT HYDRAULIC STUDIES. JOURNAL OF THE HYDRAULIC DIVISION, ASCE, 104 (1978) No. HY11 S. 1521 – 1540

BURNS L. A., CLINE D., LASSITER R. R. 1992

EXPOSURE ANALYSIS MODELLING SYSTEM (EXAMS): USER MANUAL AND DOCUMENTATION. EPA-600 / 3-82-023, ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, ATHENS, GEORGIA, USA

CHAPRA, S. C. 1997

Surface water-quality Modeling, University of Colorado at Boulder, WCB/McGraw-Hill Companies Inc., ISBN 0-07-011364-5

CHURCHILL, M. A., ELMORE, H. A., BUCKINGHAM, R. A. 1962

THE PREDICTION OF STREAM REAERATION RATES. JOURNAL OF THE SANITARY ENGINEERING DIVISION, ASCE, 88 (1962) No. SA 4, S. 1

DYCK, S. 1979

Angewandte Hydrologie Teil 2, Der Wasserhaushalt der Flussgebiete, 2. überarbeitete Auflage, Verlag von Wilhelm, Ernst & Sohn, Berlin – München, ISBN 3-433-00882-5

DWA-HANDBUCH GEWÄSSERGÜTEMODELL 2001

Bezug bei Erftverband aquatec GmbH im Auftrag der DWA (Deutsche Vereinigung für Wasserwirtschaft, Abwasser und Abfall e.V.), Hennef 2001

DWA-MODELLBESCHREIBUNG 2002

Müller, St. (Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft, München)

Bezug bei Erftverband aquatec GmbH im Auftrag der DWA (Deutsche Vereinigung für Wasserwirtschaft, Abwasser und Abfall e.V.), Hennef 2002

ERFTVERBAND 2006

Hemmwirkung der solaren Strahlung am Beispiel von *escherischia coli* (Bergheim, unveröffentlicht)

FISCHER, H. B. 1968

DISPERSION PREDICTIONS IN NATURAL STREAMS. JOURNAL OF THE SANITARY ENGINEERING DIVISION, ASCE, 94 (1968) No. SA 5, SA 5, S. 927-943

HEINZELMANN, C. 1992

Hydraulische Untersuchungen über den Einfluss benthischer Diatomeenbiofilme auf Strömungswiderstand und Transportbeginn ebener Sandsohlen
Technische Berichte über Ingenieurhydrologie und Hydraulik der TU Darmstadt

IMHOFF, K. UND K. R. 1999

Taschenbuch der Stadtentwässerung, 29. Auflage, Verlag Oldenburg, München , ISBN 3-486-26333-1

KAESER, F. 1981

Transport partikulärer Substanzen in Fließgewässern, Modellierung und Naturmessungen. Wasserwirtschaft 71; 1981; S. 139-144

KOPF, W., PÖHLMANN, W. U. REIMANN, K. 1988

Grundlagen der Eutrophierung von Fließgewässern, dargestellt am Beispiel von Main und Regnitz. Bericht d. Bayer. Landesanstalt f. Wasserforschung (Hrsg.) München, 1988.

MACKAY, D., JOY, M., PATERSON, S. 1983

A Quantitative Water, Air, Sediment Interaction (QWASI) Fugacity Model for Describing The Fate of Chemicals in Lakes. Chemosphere. 12: 981-997.

SCHLÄGER, F. 2001

Die Gewässergütesimulation von Fließgewässern als Grundlage der langfristigen Flussgebietsbewirtschaftung, Mitteilungen des Lehrstuhls für Wasserbau und Wasserwirtschaft der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, Herausgeber Univ.-Professor Dr.-Ing. Jürgen Köngeter, 1. Auflage 2003, ISBN 3-86130-114-8 Verlag Mainz, Wissenschaftsverlag Aachen

SCHLEIP, H. 1998

Simulation instationärer Strömungen in Fluß- und Kanalsystemen durch Hyperbolische Netze, Dissertationsschrift Technische Universität München, Fakultät für Mathematik

BRÜGGEMANN, R. & DRESCHER-KADEN, U. 2003

Einführung in die modellgestützte Bewertung von Umweltchemikalien, Datenabschätzung, Ausbreitung, Wirkung und Bewertung, Springer Verlag

UNIVERSITÄT BONN, ERFTVERBAND 2004

Untersuchungen zur mikrobiellen Fließgewässerbelastung durch Regenentlastungen der Mischkanalisationen am Beispiel der Swist, Universität Bonn Institut für Hygiene und Öffentliche Gesundheit, Erftverband Bergheim im Auftrag des Ministeriums für Umwelt, Naturschutz, Landwirtschaft und Verbraucherschutz NRW

VDI 3789 1992

Umweltmeteorologie; Wechselwirkungen zwischen Atmosphäre und Oberflächen; Berechnung der kurz- und der langwelligen Strahlung, Verein Deutscher Ingenieure, Beuth Verlag

WOLF, P. 1974

Simulation des Sauerstoffhaushaltes in Fließgewässern, Stuttgarter Berichte zur Siedlungswasserwirtschaft, 53, Stuttgart, S. 150 ff.

YÖRÜK, A. 2005

Schlussbericht „Erstellung eines Hygienebausteins für das ATV-DVWK-Gewässergütemodell“ Universität der Bundeswehr, München 2005, im Auftrag des Bayerischen Landesamtes für Wasserwirtschaft