

2.3.2 Untersuchung des Stickstoffumsatzes im Flusssediment mit vereinfachten Modellansätzen

Roberto Tatis-Muvdi, Mathias Riechel, Andreas Matzinger und Pascale Rouault (KWB)

Einleitung und Ziele

Die Modellierung der biogeochemischen Prozesse im Sediment mittels QSim (2.3.1) sollte durch den Aufbau eines vereinfachten, prozessbasierten Modellansatzes optimiert werden. Konkret sollte die Weiterentwicklung des Sedimentmoduls SEDFLUX des Gewässergütemodells QSim unterstützt werden, indem die Abbildung des Stickstoffumsatzes im Sediment unter verschiedenen Intensitäten vertikaler Advektion untersucht wird. Diese Arbeiten stellen eine konzeptuelle Prüfung („proof-of-concept“) der im Kapitel 2.3.1 abgeleiteten Hypothesen zum Austausch zwischen Wasser und Sediment dar, sowie ihrer Effekte auf den Stoffumsatz in diesem Kompartiment.

Die Modellergebnisse werden mit Hilfe von Vertikalprofilmessungen plausibilisiert. Die Nutzung vereinfachter Modellansätze ermöglicht die Untersuchung einzelner Prozesse sowie eine schnelle Anwendung auf verschiedene Gewässer. Als Simulationsumgebung wird das frei verfügbare Softwarepaket R-ecosim genutzt (Reichert 2014) (Abb. 2.25).

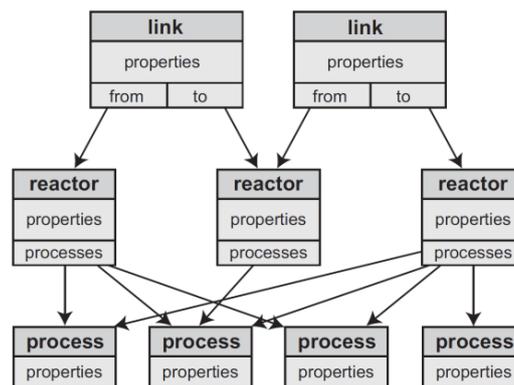


Abbildung 2.25. Allgemeine Struktur eines ecosim-Modells.

Methoden

Das vereinfachte Modell wurde in Anlehnung an die Verhältnisse in der Mittleren Elbe aufgebaut. Bei der Zusammenstellung der Eingangsdaten wurde auf die vorhandene Literatur (Fischer et al. 2005, Pusch and Fischer 2006), Ergebnisse aus NITROLIMIT I, Daten der FGG-Elbe-Datenbank und der BfG zurückgegriffen. Im Mittelpunkt der Modelluntersuchung stand die Beziehung zwischen dem Stoffumsatz im Sediment und dem advektiven Austausch zwischen Wassersäule und Sediment. Dementsprechend wurde ein Modell mit 1 Reaktor für die Wassersäule und 15 Reaktoren für die Sedimentsäule bis zu einer Tiefe von 1 m erstellt (Abb. 2.26). Das Modell deckt eine horizontale Fläche von 5 x 5 m² in der mittleren Region des Elbquerschnitts ab, wo eigene Messungen der BfG eine erhöhte hydraulische und biogeochemische Dynamik festgestellt haben.

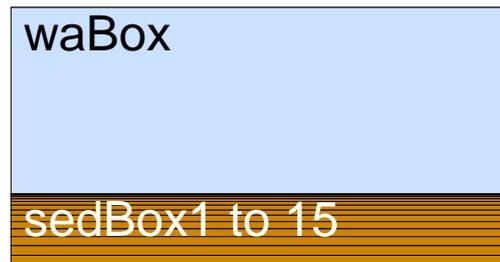


Abbildung 2.26. Struktur des aufgebauten ecosim-Modells. „waBox“ bezeichnet den Wassersäulen-Reaktor. „sedBox1“ bis „sedBox15“ entsprechen den Reaktoren für übereinanderliegende Sedimentschichten bis zu einer Gesamttiefe von ca. 1 m.

Mit dem beschriebenen Modell wurde eine qualitative Sensitivitätsanalyse mit der Intensität und Tiefenverteilung des vertikalen Wasser- und Stoffaustausches als unabhängige Variablen durchgeführt. Diese zwei Größen wurden durch die Parameter v_{vert} [m/s] und α [1/m] beschrieben, wobei v_{vert} der vertikalen Fließgeschwindigkeit an der Sediment-Wasser-Oberfläche (d.h. Austausch zwischen waBox und sedBox1) entspricht und α die Eingriffstiefe dieses Austausches im Sediment bestimmt. In Anlehnung an Higashino and Stefan (2008) wird eine exponentielle Abnahme der vertikalen Fließgeschwindigkeit mit der Tiefe angenommen, wobei kleinere Werte von α zu größeren Eingriffstiefen führen. Die in der Sensitivitätsanalyse verwendeten Werte von v_{vert} und α sind in Tabelle 2.6 ausgeführt.

Tabelle 2.6. Werte von α und v_{vert} .

α [1/m]	v_{vert} [mm/s]
	0
1,00	5,4E-7
0,50	5,4E-6
0,15	5,4E-5
	5,4E-4
	5,4E-0

Die im Modell laufenden Transformationsprozesse sind in Tabelle 2.7 zusammen mit den entsprechenden stöchiometrischen Koeffizienten aufgelistet. Diese Koeffizienten werden von der bilanzierten Reaktionsgleichung abgeleitet und geben die Masse eines Stoffes an, die pro Masseneinheit eines anderen Stoffes in der Reaktion erzeugt (oder verbraucht) wird. In diesem Sinne sind diese Koeffizienten nichts mehr als Proportionalitätskonstanten für die Massen der an der Reaktion teilnehmenden Chemikalien.

Tabelle 2.8 zeigt die dem Modell zugrunde liegenden Prozessgleichungen, welche in Anlehnung an die in der Modellierpraxis typischen Prozessabbildungen (Di Toro et al. 1983, Omlin et al. 2001, Reichert et al. 2001, Thouvenot et al. 2007, Reichert 2014, Kirchesch et al. 2015) ausgewählt wurden. Alle Konzentrationen im Sediment beziehen sich auf das Porenvolumen. Die Werte der kinetischen Parameter in den Gleichungen wurden der Literatur entnommen.

Tabelle 2.7. Prozesstabelle. Die Minuszeichen vor den Koeffizienten bedeuten, dass die jeweiligen Stoffe im entsprechenden Prozess abgebaut werden. DOM = gelöstes organisches Material, POM = partikuläres organisches Material.

Prozess	Stöchiometrische Koeffizienten								Rate
	NH ₄ -N	NO ₃ -N	N ₂	HPO ₄	HCO ₃	O ₂	DOM	POM	
Nitrifikation	-1,000	1,000	0,000	0,000	0,000	-4,571	0,000	0,000	ρ_{nitrif}
Aerobe OM-Mineralisierung	0,037	0,000	0,000	0,003	0,378	-1,011	-1,000	0,000	ρ_{aeMin}
Denitrifikation	0,037	-0,354	0,354	0,003	0,378	0,000	0,000	-1,000	ρ_{anMin}

Tabelle 2.8. Prozessgleichungen für aerobe OM-Mineralisierung (**aeMin**), Denitrifikation (**anMin**) und Nitrifikation (**nitrif**).

Prozessgleichung	Prozess
$\rho_{\text{aeMin}} = k_{\text{aeMin}} \cdot \theta_{\text{aeMin}}^{T-T_0} \cdot \frac{C_{\text{O2}}}{K_{\text{aeMin.O2}} + C_{\text{O2}}} \cdot C_{\text{OM}}$	Aerobe OM-Mineralisierung
$\rho_{\text{anMin}} = k_{\text{anMin}} \cdot \theta_{\text{anMin}}^{T-T_0} \cdot \frac{K_{\text{anMin.O2}}}{K_{\text{anMin.O2}} + C_{\text{O2}}} \cdot \frac{C_{\text{NO3}}}{K_{\text{anMin.NO3}} + C_{\text{NO3}}} \cdot C_{\text{OM}}$	Denitrifikation
$\rho_{\text{nitrif}} = k_{\text{nitrif}} \cdot \theta_{\text{nitrif}}^{T-T_0} \cdot \frac{C_{\text{O2}}}{K_{\text{nitrif.O2}} + C_{\text{O2}}} \cdot C_{\text{NH4}}$	Nitrifikation

Zusammenfassung der Ergebnisse

Die Plausibilisierung der Modellergebnisse mit den Vertikalprofilen von Fischer et al. (2005) zeigt, dass die Modellvarianten mit höherem vertikalem Austausch zwischen Wassersäule und Sediment realistischere Konzentrationsprofile erzeugen (Abb. 2.27). Im Vergleich mit den Messdaten werden ohne advektiven Transport (d.h., nur molekulare Diffusion) zu steile Profile simuliert, in denen die NO₃- und O₂-Konzentrationen ab einer Tiefe von 10 bis 15 cm in Abweichung zu den Messungen auf Null absinken.

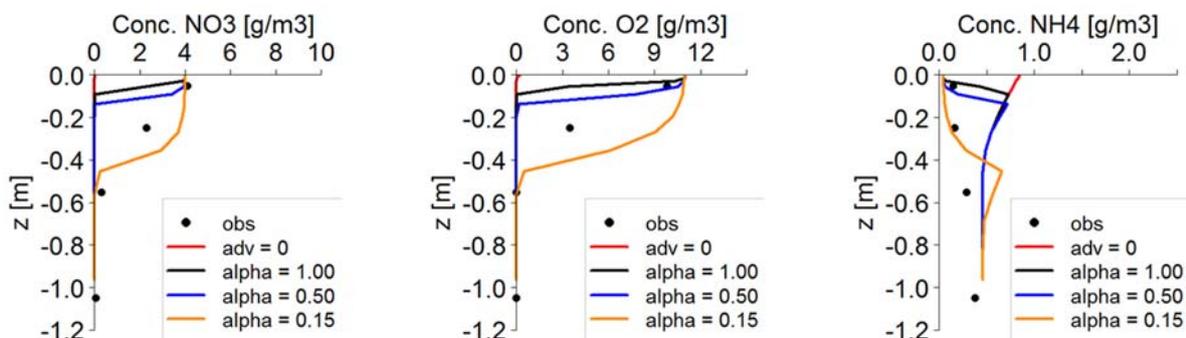


Abbildung 2.27. Vergleich der modellierten vertikalen NO₃-N-, O₂- und NH₄-N-Konzentrationsprofile im Porenwasser mit den Messdaten von Fischer et al. (2005) (Tabelle 3, Stelle Coswig, Gerinnemitte). Links: Nitrat, Mitte: Sauerstoff, rechts: Ammonium. Konzentrationen im Interstitialwasser. $v_{\text{vert}} = 0,54$ mm/s in allen Modellvarianten, außer adv = 0.

Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse (Abb. 2.28) zeigen eine Erhöhung der biogeochemischen Aktivität bzw. der Denitrifikationsintensität mit zunehmender Intensität des Austausches mit der Wassersäule (v_{vert}). Diese Zunahme ist größer für kleinere Werte von α , d.h. je tiefer der Austausch mit dem Sediment reicht. Dieses Verhalten kann auf die Stöchiometrie der beteiligten Prozesse und den Einfluss der Nitrifikation in der oxischen Sedimentschicht zurückgeführt werden. Der advective Wasser- und Stoffaustausch mit der Wassersäule bringt O_2 - und NO_3 -haltiges Wasser in die oberen Sedimentschichten. Da sowohl die aerobe OM-Mineralisierung als auch die Nitrifikation Sauerstoff verbrauchen, erfolgt keine komplette Inhibition der Denitrifikation durch Sauerstoff, weswegen sie mit der Erhöhung des vertikalen Austausches bis zu einem Plateau-Niveau zunimmt (s. Abb. 2.28, oben rechts). Gleichzeitig wirkt die Nitrifikation der Ausschöpfung des Elektronakzeptors (NO_3) der Denitrifikation entgegen. Dieser Erklärung liegen die Tatsachen zugrunde, dass genügend OM für die Mineralisierung zur Verfügung steht (Sedimentspeicher + Zufuhr aus der Wassersäule) und die Inhibition der Denitrifikation durch Sauerstoff durch eine Monod-Kurve (i.e., allmähliche Änderung) und nicht durch eine binäre Funktion (komplette Abschaltung ab einem O_2 -Grenzwert) abgebildet ist.

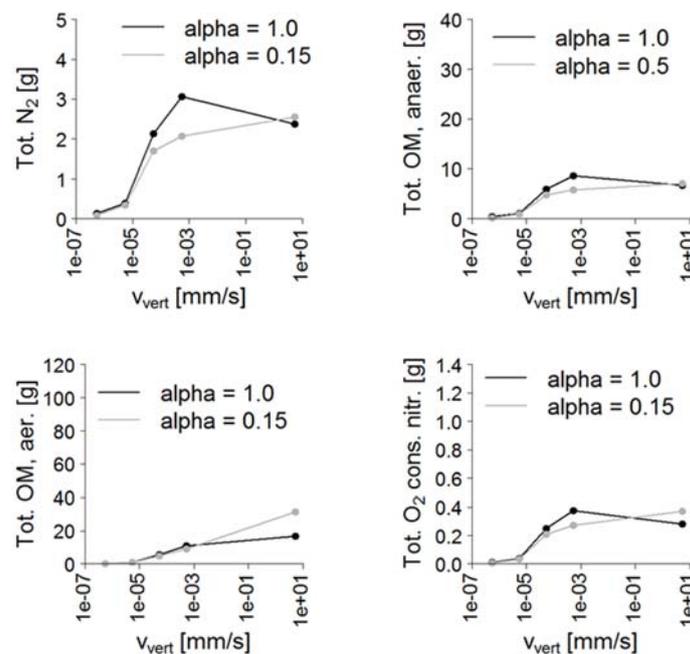


Abbildung 2.28. Beziehung zwischen Prozessintensität und advektivem Austausch mit der Wassersäule. (v_{vert} , X-Achse). Die Y-Achse zeigt die in den letzten 6 Simulationstagen verbrauchte oder produzierte (je nach Prozess) Gesamtstoffmenge. Oben links: N_2 aus der Denitrifikation, oben rechts: anaerob verbrauchtes organisches Material (DOM + POM), unten links: aerob verbrauchtes organisches Material (DOM + POM), unten rechts: durch Nitrifikation verbrauchter Sauerstoff.

Die Ergebnisse dieser Modellstudie unterstützen die Hypothese der hyporheischen Dynamik und ihrer stimulierenden Wirkung auf die Umsatzprozesse in Fließgewässersedimenten (Fischer et al. 2005, Harvey et al. 2013, Boano et al. 2014). Mit den plausibelsten v_{vert} - und α -Werten ($0,54$ mm/s bzw. $0,15$ m^{-1}) werden im Modell in einer Sedimentsäule mit 1 m Tiefe ca. $55,3$ mgN pro m^2 und Tag denitrifiziert (1.47 mg NO_3 -N/ m^2 ·h), was hochgerechnet auf eine aktive Querschnittsbreite von 120 m und über eine Fließlänge von 1 km eine N-Senke von ca. 200 kgN in 30 Tagen ausmachen würde.

Die modellierten Denitrifikationsraten liegen eine Größenordnung unter den Werten, die für dieses Untersuchungsgebiet anhand von in-channel Bilanzierungsmethoden ermittelt worden sind (Ritz, unpub.). Diese Ungenauigkeit kann durch die Kalibrierung der Reaktionsraten reduziert werden, sowie

durch die Verwendung einer im Vertikalprofil nicht gleich verteilten Denitrifikationsrate (Fischer et al. 2005). Auf die zentralen Schlussfolgerungen dieser Untersuchung hätte dies aber keinen Einfluss, da es sich hier um eine qualitative Sensitivitätsanalyse für die Realitätsnähe der im Modell erzeugten Konzentrationsprofile handelt. Die gezeigten Ergebnisse wurden im Rahmen des 4. QSim-Anwendertreffen in der BfG (28.09. - 29.09.2015) und am Lehrstuhl für Gewässerschutz der Fakultät für Umweltwissenschaften der btu-Cottbus vorgestellt und mit allen an der Modellierung beteiligten Projektpartnern ausführlich diskutiert.

Ein wissenschaftlicher Bericht mit einer detaillierten Darstellung der Methoden, Ergebnissen und ihrer Auswertung liegt am KWB vor und steht allen Projektpartnern zur Verfügung.

Ausblick

Alle Arbeiten sind entsprechend dem Planungs- und Ressourcenrahmen durchgeführt worden. Die Abschlusspräsentation und -übergabe der Modelle und Ergebnisse an die BfG werden im Rahmen des NITROLIMIT-Seminars erfolgen. Eine BfG-interne Diskussion zur Implementierung eines hydraulischen Ansatzes im Sedimentmodul von QSim ist vor Projektabschluss vorgesehen.

Literatur

- Boano, F., J. W. Harvey, A. Marion, A. I. Packman, R. Revelli, L. Ridolfi, A. Wörman (2014): "Hyporheic flow and transport processes: Mechanisms, models, and biogeochemical implications." *Reviews of Geophysics* 52(4): 603–679.
- Di Toro, D., J. Fitzpatrick, R. V. Thomann (1983): Documentation for Water Quality Analysis Program (WASP) and Model Verification Program (MVP). EPA 600/-81-044, U.S. Environmental Protection Agency, Environmental Research Laboratory.
- Fischer, H., F. Kloep, S. Wilzcek, M. Pusch (2005): "A River's Liver – Microbial Processes within the Hyporheic Zone of a Large Lowland River." *Biogeochemistry* 76(2): 349-371.
- Harvey, J., J. K. Böhlke, M. Voytek, D. Scott, C. Tobias (2013): "Hyporheic zone denitrification: Controls on effective reaction depth and contribution to whole-stream mass balance." *Water Resources Research* 49: 6298-6316.
- Higashino, M., H. Stefan (2008): "Velocity Pulse Model for Turbulent Diffusion from Flowing Water into a Sediment Bed." *Journal of Environmental Engineering* 134(7): 550-560.
- Kirchesch, V., T. Bergfeld-Wiedemann, H. Fischer, A. Schöl (2015): Das Sediment-Modul „SEDFLUX“ im Gewässergütemodell QSim. BfG-1843, Bundesanstalt für Gewässerkunde: 51.
- Omlin, M., P. Reichert, R. Forster (2001): "Biogeochemical model of Lake Zürich: model equations and results." *Ecological Modelling* 141(1–3): 77-103.
- Pusch, M. T., H. Fischer (2006): Stoffdynamik und Habitatstruktur in der Elbe – Konzepte für die nachhaltige Entwicklung einer Flusslandschaft, Bd. 5, Weißensee Verlag, Berlin.
- Reichert, P. (2014): "ecosim: Toolbox for Aquatic Ecosystem Modeling." from <http://CRAN.R-project.org/package=ecosim>.
- Reichert, P., D. Borchardt, M. Henze, W. Rauch, P. Shanahan, L. Somlyódy, P. Vanrolleghem (2001): "River Water Quality Model no. 1 (RWQM1): II. Biochemical process equations." *Water Science and Technology* 43(5): 11–30.
- Thouvenot, M., G. Billen, J. Garnier (2007): "Modelling nutrient exchange at the sediment–water interface of river systems." *Journal of Hydrology* 341(1–2): 55-78.