



UFZ-Bericht

UFZ-Bericht • UFZ-Bericht • UFZ-Bericht • UFZ-Bericht

UFZ - Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH

Nr. 1/1998

**Experimentelle Tracerstudien
und Modellierungen
von Austauschprozessen
in einem meromiktischen Restsee
(Hufeisensee)**

Manfred Maiss, Volker Walz,
Michael Zimmermann, Johann Ilmberger,
Wolfgang Kinzelbach, Walter Gläßer

ISSN 0948-9452

Experimentelle Tracerstudien und Modellierungen von Austauschprozessen in einem meromiktischen Restsee (Hufeisensee)

Abschlußbericht zum Teilprojekt

"Schichtungsdynamik und -stabilität von Tagebaurestseen"

im Projektbereich
Industrie- und Bergbaufolgelandschaften
am UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH

Autoren

Manfred Maiss^{1,3}, Volker Walz¹, Michael Zimmermann¹, Johann Ilmberger¹,
Wolfgang Kinzelbach^{1,4}, Walter Gläßer²

¹ Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg,
INF 366, D-69120 Heidelberg

² UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH, Sektion Hydrogeologie
Hallesche Straße 44, D-06246 Bad Lauchstädt

³ aktuell: Max-Planck-Institut für Chemie, Abt. Luftchemie,
PF 3060, D-55020 Mainz

⁴ aktuell: Institut für Hydromechanik und Wasserwirtschaft,
ETH-Hönggerberg, CH-8093 Zürich

Zusammenfassung

Exemplarisch für meromiktische Restseen werden in dieser Arbeit die Austausch- und Mischungsprozesse im Hufeisensee bei Halle untersucht. Die forcierte Bildung eines solchen Seetyps ist ein wasserwirtschaftliches Konzept zur Vermeidung der Versauerung von Restseen. Durch mehrjährige Zeitserien gemessener Temperatur- und Leitfähigkeitsprofile wird zunächst die Entwicklung der thermischen und halinen Schichtungsverhältnisse dokumentiert. Die wohldurchmischte Deckschicht des Hufeisensees reicht im Sommer bis zur Thermokline ($\approx 5\text{m}$ Tiefe), im Winter bis zur Chemokline ($\approx 27\text{m}$ Tiefe). Die genaue Tiefe ergibt sich aus einer Energiebilanz zwischen potentieller Energie der Dichteschichtung und atmosphärischem Energieeintrag. Unterhalb dieser wohldurchmischten Schicht kann die vertikale Mischung durch einen Diffusionsansatz beschrieben werden.

Zwischen der Thermokline und der Chemokline werden mit Hilfe der Gradient-Fluß-Methode Mittelwerte für tiefenvariable vertikale Diffusionskoeffizienten aus der saisonalen thermischen Entwicklung des Sees gewonnen. Für diese Werte wird auch eine dynamische Parametrisierung in Abhängigkeit vom aktuellen Windenergieeintrag und der Stabilität der Wassersäule gegeben, welche bei der Seemodellierung erfolgreich verwendet wird. Beobachtete saisonale Variationen der Leitfähigkeit sind im oberflächennahen Bereich durch biologische Prozesse bestimmt. Für den Zeitraum von 1992 bis 1996 wurde im See eine leichte Abnahme der mittleren Leitfähigkeit von $2,85\text{mS/cm}$ auf $2,73\text{mS/cm}$ festgestellt, die verschiedenste Ursachen haben kann, und sich z.B. bereits aus einer 10-prozentigen Niederschlagserhöhung ergibt.

Über die Chemokline hinweg und im darunterliegenden Monimolimnion ist die turbulente vertikale Diffusion extrem reduziert. Ohne diskontinuierliche Zu- und Abflüsse sind deshalb natürliche Eigenschaften wie Wärme, Salzgehalt und Isotopie im molekular-diffusiven Gleichgewicht mit ihrer Umgebung. Die räumliche wie zeitliche Veränderung eines künstlich eingebrachten und im Ungleichgewicht befindlichen Tracers ist hier ein sensitives Instrument, um Mischungs- und Austauschprozesse zu studieren. Aus diesem Grund wurde im Oktober 1994 eine Markierung mit SF_6 -gesättigtem Wasser mittig in das 3m mächtige Monimolimnion des Hufeisensees eingebracht. Das Industriegas Schwefelhexafluorid (SF_6) ist ungiftig und chemisch wie biologisch inert. Für Langzeitstudien in aquatischen Systemen ist dieses Gas ein idealer konservativer Transporttracer, da unter Ausschluß der Atmosphäre keine natürlichen Quellen oder Senken existieren. Geringste Mengen von SF_6 (10^{-16}mol) lassen sich noch sehr gut nachweisen. Im Rahmen des Hufeisensee-Experimentes wurden etwa $2\mu\text{mol}$ SF_6 eingebracht. Das entspricht $2,8 \cdot 10^{-3}\text{g}$ SF_6 für einen salinen Tiefenwasserkörper von $2,5 \cdot 10^{10}\text{g}$. Die vertikale Ausbreitung des Tracers wurde über zwei Jahre hinweg durch 13 Profilaufnahmen verfolgt. Eine spezielle Probennahmetechnik wurde entwickelt, um bei der spontanen Ausgasung der Tiefenwasserproben unter Atmosphärendruck kein SF_6 zu verlieren. Die erzeugten Konzentrationsverhältnisse erlauben auch noch in den folgenden Jahren eine Fortsetzung der Beobachtungen. Bereits heute ist dieses Tracerexperiment im Vergleich zu anderen aquatischen SF_6 -Experimenten, wie z.B. im Santa Monica Basin vor Los Angeles [Ledwell und Watson, 1991] oder am

Bodensee [Maiss et al., 1994a,b] das zeitlich ausgedehnteste.

Aus der beobachteten Ausbreitung der SF_6 -Markierung wurde mit Hilfe der Gradient-Fluß-Methode die tiefenabhängige mittlere vertikale Diffusion im Monimolimnion quantifiziert. Zusätzlich zur äußerst geringen molekularen Diffusion von SF_6 ($7 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$) wurden turbulente Diffusionskoeffizienten von $1\text{--}65 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ bestimmt, wobei die minimalsten Werte direkt über Grund zu beobachten sind. Für die Chemokline, die im Hufeisensee 1996 in 27m Tiefe lag, wurde ein mittlerer turbulenter Diffusionskoeffizient von $7 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ abgeschätzt. Solch minimale turbulente Anteile an der Gesamtdiffusion sind mit dem Tracer Wärme nicht und mit dem Tracer Leitfähigkeit (Ionengehalt) nur schlecht zu erschließen, da hier bereits die molekulare Diffusion sehr hoch ist. Die Bilanzierung der wiedergefundenen SF_6 -Mengen im Monimolimnion ergibt auch nach zweijähriger Beobachtungsdauer einen Wert, der im Rahmen der Fehler mit der eingebrachten Menge übereinstimmt. Eine per linearer Regression bestimmte mittlere Verlustrate entspricht ungefähr dem geschätzten diffusiven Verlust über die Chemokline. Zusätzliche Verluste durch eine Spülung mit SF_6 -freiem Wasser können demnach nur sehr klein sein, sind aber wegen der Bilanzierungsfehler so nicht zu quantifizieren. Deshalb wurde untersucht, welche Auswirkungen verschiedene Zu- und Abflußvarianten auf Profile der SF_6 -Konzentration und Profile der vertikalen Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion hätten. Diese Simulationen zeigen, daß ein lateraler Zufluß oder eine Spülung des Monimolimnions des Hufeisensees mit mehr als $\approx 1 \text{ m}^3/\text{Tag}$ (Austauschzeit < 25 Jahre) mit den Beobachtungen nicht verträglich ist und deshalb für den Beobachtungszeitraum ausgeschlossen werden kann.

Leitfähigkeitsprofile, an denen die Lage der Chemokline bestimmt wird, lassen eine fortschreitende Absenkung derselben um $\approx 34 \text{ cm}$ pro Jahr erkennen. Dieser Trend ist keine Folge des aktuellen Seespiegelanstieges oder eines etwaigen Tiefenwasserabflusses. Es handelt sich vielmehr um eine Erosion (im Sommer diffusiv, im Winter konvektiv dominiert), welche etwa bis zum Jahr 2003 zu einer vollständigen Auflösung des Monimolimnions führen wird. Für das Monimolimnion anderer Restseen bedeutet dieses Ergebnis, daß ein dieser Absenkungsrate entsprechendes Volumenäquivalent an Kippenwässern pro Jahr aufgenommen werden kann ohne daß sich an der Tiefenlage der Chemokline etwas ändert.

Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen wurden benutzt, um das Schweizer Seemodell LIMNMOD [Karagounis, 1992] hinsichtlich der speziellen Verhältnisse im mero-miktischen Hufeisensee zu modifizieren. Die Modellgrößen SF_6 , ^{18}O , Deuterium und Tritium wurden hinzugefügt. Prozessformulierungen für Isotopenfraktionierung, Sedimentabsorption für Strahlung und turbulente Energie, Seespiegelvariation, Eisbedeckung, interne konvektive Mischung, richtungsabhängige Windabschattung des Sees und Diffusion im Monimolimnion wurden neu eingeführt. Parameter, welche das Modell zur Eichung an Beobachtungen vorsieht, wurden bestimmt, wobei sich durchweg Werte ergaben, welche im Bereich von Vergleichswerten anderer Seen liegen. Die Verhältnisse im Hufeisensee können mit dem Modell über mehrere Jahre hinweg gut nachvollzogen werden. Insbesondere kann die Chemoklinenerosion richtig beschrieben werden. Durch diese Modellvalidierung ist ein

Einsatz für Simulationsrechnungen mit anderen Randbedingungen erlaubt.

Neben der Diffusion im Monimolimnion mußten einige weitere vom Modell benötigte Eingaben separat bestimmt werden. Diese Ergebnisse sind auch für sich allein bzw. für andere Anwendungen von Interesse: (1) Ein Vergleich der meteorologischen Datensätze dreier Wetterstationen im Umkreis von 15km des Hufeisensees zeigt lokale Unterschiede auf. (2) Für die Isotopie des Niederschlages wurde die "Local Meteoric Water Line" aus Werten der Stationen Berlin, Braunschweig und Hof unter Einbeziehung einiger Leipziger Daten zu $\delta D[\text{‰}] = 7,9 \delta^{18}\text{O}[\text{‰}] + 6,6$ bestimmt. Auf der Basis von Monatsmitteln wird für die Isotopie des Niederschlages in diesem geographischen Dreieck folgende Parametrisierung durch die Lufttemperatur gefunden: $\delta D[\text{‰}] = -76,3 + 1,95 \cdot T [^{\circ}\text{C}]$ bzw. $\delta^{18}\text{O}[\text{‰}] = -10,5 + 0,25 \cdot T [^{\circ}\text{C}]$. (3) Aus einem Wasserbilanzmodell für den Hufeisensee ergibt sich ein um etwa 25% gegenüber der Seeoberfläche höheres mittleres Regeneinzugsgebiet und ein von Pegelstand des oberflächennahen Grundwasserleiters abhängiger Netto-Grundwasserzufluß von 1400-1850 m³/Tag. Im Jahresmittel entspricht dieser Zufluß etwa der Niederschlagsmenge. Bei der Gesamtmodellierung des Sees ergibt sich aus der Isotopenbilanz für Deuterium und ¹⁸O, daß maximal ein um 10% über dem Netto-Grundwasserzufluß liegender Bruttozufluß mit den Beobachtungen vereinbar ist. Dies bedeutet, daß der Hufeisensee im Beobachtungszeitraum praktisch als reine Grundwassersenke anzusehen ist.

Projektdauer: 01.01.1994 - 31.12.1995

Kostenneutral verlängert bis 1997 auf Antrag von Herrn Dr. M. Maiss vom 16.06.1996

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Übersicht	1
2	Der Hufeisensee	7
2.1	Morphometrie	9
2.2	Temperatur und Leitfähigkeit	14
2.2.1	Leitfähigkeit	15
2.2.2	Temperatur	17
2.3	Dichte und Stabilität	21
2.4	Seespiegel- und Chemoklinenvariationen	25
2.5	Grundwasserankopplung	27
2.6	Isotopie und Chemie	29
3	SF₆-Tracerexperiment im Monimolimnion	33
3.1	Physikalische Eigenschaften von SF ₆	33
3.1.1	Löslichkeit	34
3.1.2	Molekulare Diffusion	35
3.2	Einbringen der SF ₆ -Markierung	37
3.2.1	Einbringtechnik	37
3.2.2	Tatsächlich eingebrachte Tracermenge	39
3.3	Probennahmetechnik	40
3.3.1	Fördertechnik	40
3.3.2	Probenbehälter	43
3.4	Konzentrationsbestimmung	48
3.5	Meßergebnisse	52
3.5.1	Hintergrundkonzentration	52
3.5.2	Beobachtete vertikale Ausbreitung	54
3.5.3	Bilanzierung der SF ₆ -Menge im Monimolimnion	56
3.5.4	Verhalten des Konzentrationsmaximums	58
3.5.5	Entwicklung oberhalb des Konzentrationsmaximums	60
3.5.6	SF ₆ -Diffusion über die Chemokline	61
4	Vertikale Mischungsprozesse	67
4.1	Diffusionsansatz im Mixolimnion	67
4.2	Temperaturentwicklung im Winter 95/96	75

4.2.1	Temperaturmeßkette im Monimolimnion	75
4.2.2	Temperaturentwicklung des Mixolimnions unter Eis	77
4.3	Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion	84
4.3.1	Abschätzung des Sedimentwärmeflusses und der Diffusionskoeffizienten aus der Temperaturentwicklung im Winter 95/96	84
4.3.2	Diffusionskoeffizienten aus der Leitfähigkeitsentwicklung	91
4.3.3	Diffusionskoeffizienten aus der SF ₆ -Ausbreitung	95
4.3.4	Vergleich der ermittelten Diffusionskoeffizienten	98
4.3.5	Abschätzung eines maximal möglichen Zuflusses	100
4.4	Bodennahe Zeitreihen der stabilen Isotope	103
5	Physikalische Seemodellierung	107
5.1	Modellwahl	107
5.2	Modellgrößen	108
5.3	Stoffbilanzgleichung	109
5.4	Prozesse	111
5.4.1	Wärmeaustausch mit der Atmosphäre	112
5.4.2	Eisbedeckung	115
5.4.3	Sprungschichtabsenkung	116
5.4.4	Mischungsprozesse im Hypolimnion	121
5.4.5	Isotopenfraktionierung an der Wasseroberfläche	123
5.4.6	Zu- und Abflüsse	127
5.4.7	Variabler Seespiegel	128
5.4.8	Sedimentwärmefluß	130
5.4.9	SF ₆ -Hintergrundkonzentration	131
5.5	Lösungsverfahren und Programmaufbau	131
5.6	Dateneingabe	136
5.7	Datenausgabe und Postprocessing	138
6	Modelleichung Gesamtsee	141
6.1	Eichparameter	141
6.2	Eingabedaten	143
6.2.1	Seegeometrie und Schichtenwahl	143
6.2.2	Meteorologische Daten, Windeffizienzfaktor	143
6.2.3	Stabile Isotope im Regen	154
6.2.4	Zu- und Abflüsse, Wasserbilanzmodell	159
6.3	Meßdaten zur Modelleichung	168
6.4	Wärmeinhalt	173
6.5	Sprungschichtverlauf und Chemoklinenabsenkung	175
6.6	Vertikale Temperaturverteilung	176
6.7	Vertikale Leitfähigkeitsverteilung	181
6.8	Stabile Isotope	186
6.9	Tritium	190

7	Simulation der SF₆-Ausbreitung im Monimolimnion	193
7.1	Modellierung der SF ₆ -Ausbreitung	193
7.2	Numerische Fehler	196
7.3	Zuflußsimulationen	197
7.4	Abflußsimulationen	201
7.5	Diskussion	203
8	Diskussion	204
	Abbildungsverzeichnis	207
	Tabellenverzeichnis	210
	Literaturverzeichnis	211
A	Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion	216
B	Wasseranalysen Hufeisensee	221
C	Molekulare Diffusionskoeffizienten	222
D	Morphometrische Daten	224
E	Übersicht über die SF₆-Profile	227
F	Akima-Interpolation	230

Kapitel 1

Einleitung und Übersicht

In Deutschland werden in den nächsten Jahrzehnten durch die Rekultivierung von Braunkohletagebauen einige, zum Teil sehr große, Tagebaurestseen entstehen. Viele der bereits existierenden Restseen weisen eine starke Versauerung auf. Sie ist eine Folge der Oxidation der im Kippenmaterial vorhandenen sulfidischen Minerale, hauptsächlich Pyrit und Markasit. Die in das Restloch bei einer natürlichen Befüllung eintretenden Kippen- oder Grundwässer fließen über oder durch das Kippenmaterial und bilden dabei schwefelsaure Eisenlösungen. So entstehende Restseen sind sauer und salzhaltig. Dies ist in Hinsicht auf die geplante Nutzung (Freizeit, Erholung, Fischerei) und vor allem aufgrund der ökologischen Konsequenzen nicht erwünscht.

Ein mögliches Konzept zur Vermeidung der generellen Versauerung eines sich langsam füllenden Restlochs ist die schnelle Übersichtung der salzhaltigen Wässer mit Süßwasser, um so den Druck des Salzwasserleiters zu widerstehen. Dabei sollte der salzbedingte Dichtesprung zwischen dem Tiefenwasser und der darüberliegenden leichteren Süßwasserschicht so stark sein bzw. so tief liegen, daß nur letztere von der natürlichen winterlichen Zirkulationsmischung erfaßt wird. Damit ist ein meromiktischer See geschaffen. Ein solcher See unterteilt sich in einen obenliegenden zumindest zeitweise durchmischten Wasserkörper, das Mixolimnion, und einen nicht durchmischten Tiefenwasserkörper, das Monimolimnion. Sie sind durch eine haline Dichtesprungschicht, die Chemokline, getrennt. Während des Sommers bildet sich in der Regel zusätzlich ein thermischer Schichtungszustand aus. Die salzärmere Deckschicht wird dann zusätzlich durch eine thermische Dichtesprungschicht, die Thermokline, in das obenliegende, durchmischte Epilimnion und das darunterliegende Hypolimnion unterteilt.

Im Monimolimnion stellen sich dauerhaft anaerobe Verhältnisse ein, unter denen eine Reduktion von Sulfat zu Sulfid durch Mikroorganismen erfolgt. Der pH-Wert wird angehoben und es findet eine Ausfällung von Eisen- und anderen Metallsulfiden statt. Durch die meromiktischen Bedingungen wird ein Rücktransport des ausgefällten Materials ins Mixolimnion weitgehend verhindert. Das Monimolimnion wirkt dadurch als Sulfidfalle, wobei die Vorgänge der Pyritoxidation praktisch wieder rückgängig gemacht werden. Eine weitere positive Wirkung ist die Begrenzung der Eutrophierung, da ebenfalls verhindert

wird, daß die bei der Mineralisation abgestorbener Biomasse am Gewässergrund freigesetzten Nährstoffe in die oberen produktiven Schichten des Sees zurückkehren.

Eine wasserwirtschaftlich forcierte Meromixis wurde z.B. von Hamm [1991] und Kinzelbach et al. [1991] für das Restloch des geplanten Tagebaus Garzweiler II diskutiert. Inwieweit eine solche Lösung die Gewässergüte des Oberflächenwassers nachhaltig positiv beeinflusst, bedarf einer besseren Kenntnis der Langzeitstabilität der Meromixis. So hätte ein Aufbrechen der Chemokline ein Fischsterben und eine irreversible Verschlechterung der oberflächennahen Gewässergüte durch das plötzliche Einmischen stark mit Schwefelwasserstoff angereicherten Wassers zur Folge. Es war Ziel des vorliegenden Projektes, Grundlagen für das Verständnis der physikalischen Prozesse in meromiktischen Restseen zu erarbeiten. Dies sollte sowohl durch experimentelle Untersuchungen der Austauschprozesse im Monimolimnion bzw. über die Chemokline als auch durch die Entwicklung einer adäquaten modellmäßigen Beschreibung geschehen. Als Studienobjekt wurde der Hufeisensee südöstlich von Halle gewählt. Dieser Restsee weist zu einem eine seit langem bekannte Meromixis auf, zum anderen war es von Vorteil, daß für ihn bereits eine Reihe von Datensätzen vorhanden waren (hydrogeologisches Umfeld; Tiefenvermessung; Temperatur-, Leitfähigkeits- und Isotopenprofile).

Es ergeben sich drei Schwerpunkte für den vorliegenden Projektbericht, zu dem die Diplomarbeiten von Zimmermann [1995] und Walz [1997] maßgeblich beitrugen:

1. Mehrjährige Charakterisierung der saisonalen Entwicklung des gesamten Sees anhand von Beobachtungen der Temperatur, der Leitfähigkeit, der stabilen Isotope und der Seespiegelschwankungen sowie des hydrogeologischen Umfeldes und der meteorologischen Randbedingungen. Dabei spielen Zeit- und Tiefenabhängigkeit der thermischen wie halinen Schichtungsverhältnisse eine entscheidende Rolle.
2. Die Untersuchung der Mischungsprozesse über die Chemokline und im Monimolimnion des Hufeisensees. Zusätzlich zu obigen physikalisch-chemischen Beobachtungen wurde hierzu eigens ein zweijähriges SF_6 -Tracerexperiment durchgeführt.
3. Erweiterung und Anpassung des Schweizer Seemodells LIMMOD [Karagounis, 1992] auf die speziellen Verhältnisse eines meromiktischen Restsees mit variierenden Seespiegel. Letzterer erfordert ein separates Wasserbilanzmodell. Neben der generellen Eichung und Validierung des Seemodells anhand von Beobachtungen wurde hierbei besonderer Wert darauf gelegt, daß die Schichtungsverhältnisse korrekt nachvollzogen werden. Mittels verschiedener Simulationen wird die Grundwasserspülung verschiedener Tiefenbereiche des Sees abgeschätzt.

Der Aufbau des nachfolgenden Berichtes folgt im wesentlichen der Reihenfolge dieser drei Schwerpunkte. Die folgende, an Kapiteln orientierte Inhaltsübersicht soll die Struktur des Berichtes erläutern helfen und Querverbindungen aufzeigen:

Kapitel 2: Der Hufeisensee In diesem Kapitel wird der Hufeisensee vorgestellt und charakterisiert. Neben Lage und Morphometrie wird dabei besonders auf die durch die

Meromixis bedingten typischen Temperatur- und Leitfähigkeitsprofile eingegangen, sowie die Dichte- und Stabilitätsverhältnisse erläutert. Weiterhin wird das hydrogeologische Umfeld, die Grundwasserankopplung, die Signatur der verschiedenen Wasserschichten und die langjährige Entwicklung des Seespiegels und der Chemoklinentiefe kurz beschrieben.

Kapitel 3: SF₆-Tracerexperiment im Monimolimnion In diesem Kapitel erfolgt die komplette Beschreibung des SF₆-Tracerexperimentes. Zunächst werden die Eigenschaften dieses künstlichen Tracers, das Einbringen der SF₆-Markierung, die Probenahme- und Meßtechnik sowie die Auswertung vorgestellt. Unter der Überschrift "Meßergebnisse" wird in Abschnitt 3.5.2 die über zwei Jahre hinweg beobachtete vertikale Ausbreitung der Markierung zusammengefaßt. Erste, einfach ableitbare Aussagen schließen sich daran an. Hier sind vor allem die Bilanzierung der wiedergefundenen SF₆-Menge und eine Abschätzung der Diffusion über die Chemokline zu nennen. Weitergehende Interpretationen finden sich in den Abschnitten "4.3.3 Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion aus der SF₆-Ausbreitung" und "4.3.5 Abschätzung eines maximal möglichen Zuflusses" sowie in Kapitel 7 "Simulation der SF₆-Ausbreitung im Monimolimnion".

Kapitel 4: Vertikale Mischungsprozesse Mit Hilfe der Gradient-Fluß-Methode werden zunächst tiefenabhängige vertikale Diffusionskoeffizienten aus der sommerlichen thermischen Entwicklung des Sees gewonnen. Für diese Werte wird eine dynamische Parametrisierung anhand des, vom Windenergieeintrag und von der Stabilität der Wassersäule abhängigen Auftriebsflusses gegeben. Diese Parametrisierung wird auch bei der Seemodellierung erfolgreich verwendet. Ihr Gültigkeitsbereich reicht bis etwa 20 m Tiefe. Von dieser Tiefe ab bis zur Chemokline in ungefähr 27m Tiefe muss ein konstanter mittlerer turbulenter Diffusionskoeffizient angesetzt werden, dessen Wert ebenfalls aus der thermischen Entwicklung im Hypolimnion abgeschätzt wird. Für die Chemokline selbst und das darunterliegende Monimolimnion sind die jahreszeitlichen Veränderungen der Temperatur wenig aussagekräftig, wenn es darum geht, einen für alle Stoffgrößen (wie z.B. Wärme, Ionengehalt, SF₆) gleichermaßen gültigen turbulenten Anteil der vertikalen Diffusion von nur etwa $1-65 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ zu bestimmen. Der Grund hierfür ist die für jede Stoffgröße immer noch hinzukommende molekulare Diffusion, welche stark von der Stoffgröße selbst abhängt und im Fall der Wärme mit $1350 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ weit über der von Ionen ($10-20 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$) bzw. der von SF₆ ($7 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$) liegt. Die niedrige molekulare Diffusion von SF₆ erlaubt letztendlich auch die sensitivsten Untersuchungen zum turbulentdiffusiven Transport. Gegenüber Salzionen und stabilen Isotopen liegt der Vorteil von SF₆ als künstlich eingebrachter Tracer darin, daß kein stationärer Zustand vorliegt und Beimischungen anderer Wässer immer eine Verdünnung mit SF₆-freiem Wasser bedeuten. Trotz ihrer ungleichen Aussagekraft wurden Beobachtungen zu allen bisher erwähnten Stoffgrößen (Wärme, Ionengehalt, SF₆, stabile Isotope) zur Abschätzung der Diffusion im Monimolimnion herangezogen: So wurden z.B. zur kontinuierlichen Beobachtung der Temperaturentwicklung im Monimolimnion im Dezember 1995 mehrere Temperatursensoren im See verankert. Dieser Einsatz fiel unbeabsichtigt in eine drei Monate andauernde Eisphase. Die dabei aufgezeichnete Temperaturentwicklung erlaubt interessante Einblicke in spezielle Mischungsprozesse im Fall einer Eisbedeckung, was uns einen kleinen Exkurs

in Abschnitt 4.2 "Temperaturentwicklung im Winter 95/96" wert war. Bezüglich der vertikalen Diffusion im Monimolimnion läßt sich aus diesen Beobachtungen jedoch nur die Größe des zusätzlichen Wärmeflusses aus dem Sediment abschätzen und folgern, daß der Anteil der turbulenten Diffusion an der Gesamtdiffusion weit unterhalb der molekularen Diffusion der Wärme liegen muß (Abschnitt 4.3.1). Eine genauere Bestimmung der turbulenten Diffusion erlaubt eine Auswertung der Entwicklung der Leitfähigkeit (Abschnitt 4.3.2) und der SF₆-Markierung (Abschnitt 4.3.3). Diese Ergebnisse für das Monimolimnion werden in Abschnitt 4.3.4 verglichen. Zusammen mit der SF₆-Gesamt mengenbilanz ist damit eine erste Maximalabschätzung für einen eventuellen Wasserzufluß im Monimolimnion möglich (Abschnitt 4.3.5). Den bodennahen Zeitreihen stabiler Isotope (Abschnitt 4.4) ist nur zu entnehmen, daß im Monimolimnion kein signifikanter zeitlicher Trend festzustellen ist. Zuflüsse gleicher Isotope können aber damit nicht ausgeschlossen werden.

Kapitel 5: Physikalische Seemodellierung Ein physikalisches Seemodell sollte beobachtete Transport- und Austauschprozesse sowie die Schichtungsverhältnisse in einem meromiktischen Restsee korrekt simulieren und somit weitere Aussagen über noch offene Fragen wie z.B. die längerfristige Schichtungsdynamik und Stoffverteilung erlauben. Insbesondere ist dabei das Verhalten der salzbedingten Dichtesprungschicht und die Entstehung etwaiger Instabilitäten durch Windeinfluß von Interesse. Das Modell muß desweiteren die Berücksichtigung lateraler Zu- und Abflüsse in beliebiger Tiefe zulassen. Zur korrekten Berechnung der Dichtestruktur müssen Temperatur und Leitfähigkeit eingehen. Weiter Modellgrößen (Tracer) und Prozesse sollten eingeführt werden können. Unsere Wahl fiel auf das Seemodell LIMNMOD von Karagounis [1992], welches diesen Anforderungen genügt. Dabei spielten auch praktische Fragen, wie Zugänglichkeit, Übersichtlichkeit, Dokumentation und Modifikationsmöglichkeiten eine entscheidende Rolle. LIMNMOD ist ein gekoppeltes physikalisch-biochemisches Modell, welches bereits erfolgreich auf den Luganersee angewendet wurde. Im Rahmen des vorliegende Berichtes wird vorerst nur der physikalische Modellteil verwendet. LIMNMOD ist ein sogenanntes Sprungschichtmodell, d.h. es erfolgt stets eine Unterteilung in eine von Dichtekonvektionen und/oder vom Wind volldurchmischte Deckschicht und eine darunterliegende Schicht in der Mischungsprozesse mit einem Diffusionsansatz beschrieben werden. Dieser Schichteneinteilung entspricht im sommerlichen Hufeisensee das Epilimnion bzw. der gesamte unterhalb der Thermokline liegende restliche Tiefenbereich. Im Winter, ohne nennenswerte thermische Schichtung, kann sich die wohldurchmischte Deckschicht bis hinab zur Chemokline erstrecken, womit sich der Diffusionsansatz auf das Monimolimnion beschränkt. In Kapitel 5 wird der Aufbau von LIMNMOD kurz beschrieben und dabei auf eine Reihe von Modifikationen für die Anwendung auf den Hufeisensee eingegangen. So wurden zu den bereits vorhandenen Modellgrößen noch SF₆, Deuterium, ¹⁸O und Tritium hinzugefügt. Verschiedene Prozessformulierungen wurden verbessert oder neu eingeführt. Beim Wärmeaustausch mit der Atmosphäre mußte noch die Absorption der kurzwelligen atmosphärischen Einstrahlung bei Erreichen des Seegrundes ergänzt werden. Ein einfaches Eismodell wurde integriert. Die Energiebilanz aus der sich die Tiefe der wohldurchmischten Deckschicht ergibt, bezieht jetzt die reale, sich nach unten verjüngende Seeform mit ein. Desweiteren ist jetzt auch bei Dichteinversionen unterhalb der Oberfläche eine in-

terne konvektive Mischung möglich. Für die korrekte Beschreibung der Isotopie im See mußte der Prozess der Isotopenfraktionierung durch Verdunstung an der Wasseroberfläche neu eingeführt werden. Um Seespiegelschwankungen nachvollziehen zu können, wurde die Dicke der obersten Modellschicht variabel formuliert. Der einzugebende Meteorologiedatensatz wurde um die Windrichtung erweitert. Zeitreihen zu Bewässerungsentnahmen und Grundwasserpegeln werden als zusätzliche externe Datensätze eingelesen. Die Ausgabedateien wurden so formatiert, daß sie direkt in ein LOTUS 1-2-3 Arbeitsblatt eingelesen werden können, welches umgehend den graphischen und rechnerischen Vergleich mit beobachteten Werten ermöglicht.

Kapitel 6: Modelleichung Gesamtsee In diesem Kapitel wird versucht, die saisonale Entwicklung der beobachteten Größen über einen Zeitraum von drei Jahren (17.09.1992-12.10.1995) durch eine Gesamtmodellierung korrekt nachzuvollziehen. Anhand einzelner Simulationsergebnisse müssen zunächst noch einige Prozessparameter optimiert werden (Abschnitt 6.1). Eine Validierung des Gesamtmodells ergibt sich dann aus dem abschließenden mehrjährigen Vergleich von Beobachtung und Simulation. Die vom Modell benötigte Seegeometrie inklusive ihrer vertikalen Diskretisierung in Modellschichten, die gemessenen Startwerte für alle Modellgrößen, die Größe von Zu- und Abflüssen, ihre Stoffrachten bzgl. aller Modellgrößen sowie die meteorologische Eingangsdaten werden in Abschnitt 6.2 vorgestellt. Einige dieser Eingangsdaten müssen zuerst überprüft bzw. erarbeitet werden. Zum Beispiel werden meteorologische Datensätze von drei Wetterstationen in der näheren Umgebung des Sees verglichen, um dann einen für die Verhältnisse am Hufeisensee möglichst realistischen Datensatz zu bilden (Abschnitt 6.2.2). Desweiteren erfordert die Form und Lage des Hufeisensee die Skalierung des Windenergieeintrages durch einen windrichtungsabhängigen Effizienzfaktor in den die Windabschattung der Seefläche eingeht. Aktuelle Isotopenverhältnisse (^{18}O und Deuterium) im Niederschlag liegen nicht kontinuierlich vor und werden mittels einer Parametrisierung durch die Lufttemperatur abgeschätzt. Diese Parametrisierung muss erst erarbeitet werden und beruht auf gemessenen Monatsmitteln der Stationen Leipzig, Berlin, Braunschweig und Hof aus den Jahren 1982-1991 (Abschnitt 6.2.3). In Abschnitt 6.2.4 wird aus den beobachteten Seespiegelvariationen, Niederschlagshöhen, Bewässerungsentnahmen und Grundwasserpegelhöhen mit Hilfe eines separat aufgestellten Wasserbilanzmodells das Regeneinzugsgebiet und der Netto- Grundwasser-Zufluß für den See bestimmt. Einen Überblick über alle vorhandenen und im Rahmen des vorliegenden Projektes hinzugekommenen Meßdaten vom Hufeisensee gibt Abschnitt 6.3. Um die Vergleichbarkeit der Leitfähigkeitsmessungen zu verbessern, welche mit verschiedenen Sonden und Kalibrationen durchgeführten wurden, war eine Nachkalibrierung dieses gesamten Datensatzes von Nöten. Den nachfolgenden Abschnitten 6.4-6.9 sind dann die Meßdaten vom Hufeisensee im Rahmen verschiedenster Gegenüberstellungen mit Modellergebnissen zu entnehmen. Wie bereits erwähnt, werden diese Gegenüberstellungen auch benutzt, um einzelne noch offene Prozessparameter zu eichen, die Qualität des Gesamtmodells durch einen mehrjährigen Vergleich zu validieren, bzw. weitere noch unbekannte Größen zu quantifizieren. Zu letzterem zählt eine Bilanz der stabilen Isotope ^{18}O und Deuterium im See, aus der sich ergibt, daß der Hufeisensee im Beobachtungszeitraum eine reine Grundwassersenke ohne nennenswerten Durchfluß gewe-

sen sein muß. Benutzte Eingabedatensätze und die im Rahmen des vorliegenden Projektes erhobenen Messdaten können vorbehaltlich externer Urheberrechte bei den Autoren bezogen werden. Im Fall des Seemodell-Quellcodes bedarf es zusätzlich einer Zustimmung der Schweizer Autoren.

Kapitel 7: Simulation der SF₆-Ausbreitung im Monimolimnion Mit dem validierten Gesamtmodell wird hier zunächst die Entwicklung der SF₆-Verteilung im Monimolimnion rein diffusiv nachvollzogen. Daraufhin wird untersucht, inwieweit die Beobachtungen mit zusätzlichen Annahmen von Zu- und Abflüssen in unterschiedlichen Tiefen und mit verschiedenen Schüttungsraten bzw. Abflußmengen verträglich sind.

Kapitel 8: Diskussion Eine abschließende Diskussion beschäftigt sich mit den Konsequenzen einiger zentraler Ergebnisse und mit der Übertragbarkeit von Methoden und Resultaten. Zudem werden Anregungen und Perspektiven für zukünftige Arbeiten gegeben.

Kapitel 2

Der Hufeisensee

Der Hufeisensee ist ein Tagebaurestloch am östlichen Rand von Halle/Saale in unmittelbarer Nähe der Ortschaften Kanena und Reideburg (Abbildung 2.1).

Er befindet sich im mitteldeutschen Braunkohlerevier Halle-Bitterfeld. Regionalgeologisch ist der Hufeisensee dem südöstlichen Harzvorland zuzuordnen. Die beherrschende tektonische Struktur ist die nur wenige Kilometer entfernte Hallesche Marktplatzverwerfung, eine nach Südosten verlaufende Fortsetzung der Harz-Nordrand-Störung. Der Untergrund gliedert sich stratigraphisch in Sedimente des Quartär, des Tertiär, des Mesozoikums und

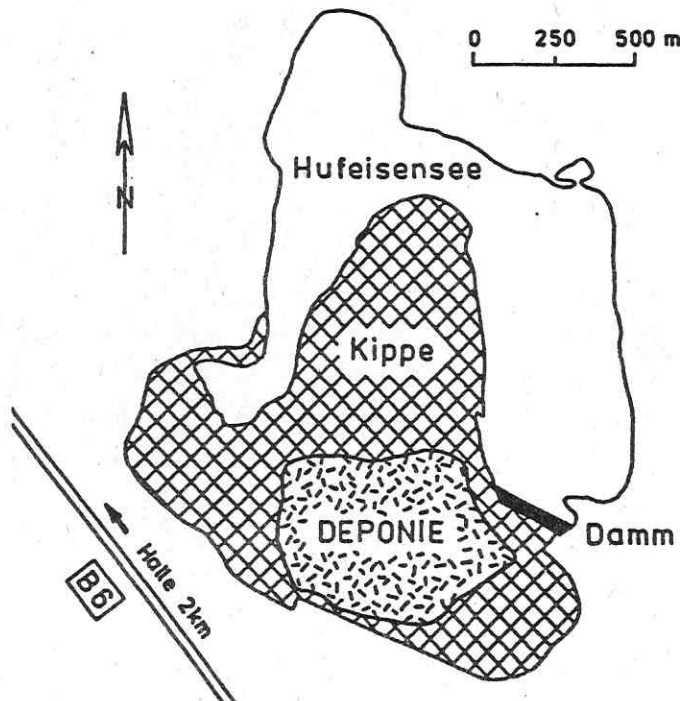


Abb. 2.1: Lageplan des gefluteten Tagebaurestloches mit der Deponie, dem Damm und der Innenkippe [Gläser und Klapper, 1992]

des Perms auf. Ein genauer Abriß der Geologie ist in Strauch et al. [1996] zu finden. Das quartäre Deckgebirge baut sich aus 2 m Löß, saaleglazialen Schmelzwassersanden in etwa gleicher Mächtigkeit sowie aus mit Bänderton durchsetztem Geschiebemergel auf. Der Hufeisensee entstand aus dem Restloch des Braunkohletagebaues Bruckdorf/Nord, das durch Sand- und Kiesgewinnung (Saale-Hauptterrasse) im Norden und Osten der Bergbauhohlform erweitert wurde. Der etwa um 1905 zunächst im Tiefbau begonnene Braunkohlebergbau war auf die eozänen Flöze Bruckdorf (Unterflöz) und Lochau (Oberflöz) angesetzt. 1941 wurde der Bergbau aufgrund des hohen Salzgehaltes der Kohleflöze eingestellt [Dermietzel et al., 1995]. Während des Braunkohleabbaus wurde das Abraumaterial am Rand des Tagebaus abgelegt. Die dadurch entstandene Innenkippe prägt zusammen mit dem 1964 aufgegebenen Kiesabbau im nördlichen Teil des westlichen Sei-

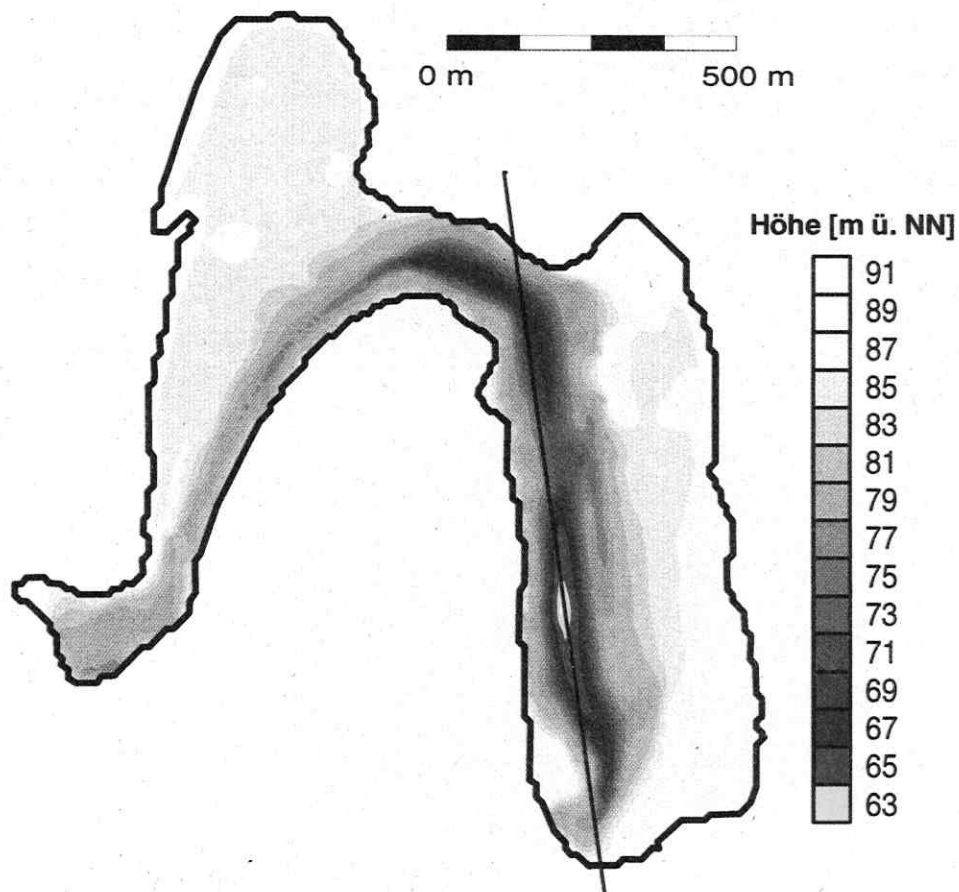


Abb. 2.2: Morphometrische Gestalt des Hufeisensees nach Daten von Wieser und Birger [1994]. Die Form des Sees wurde durch den Bergbau geprägt. Die flachen Randzonen entstanden durch den späteren Kiesabbau. Der tiefste Bereich des Sees, in dem sich ein anaerober, saliner Tiefenwasserkörper (Monimolimnion) befindet, ist hellgrau gekennzeichnet. Die schwarze Linie kennzeichnet die Position des in Abbildung 2.7 dargestellten Seequerschnitts.

tenarms die jetzige Form des Sees, der er auch seinen Namen verdankt.

Im südlichen Teil des Restloches wurde in den vierziger Jahren eine Deponie angelegt. Etwa 66% des Deponievolumens bestehen aus Hausmüll und kommunalen Abfällen, es wurde aber auch Bauschutt, Erdaushub, Industrieasche und Sondermüll der metallurgischen und chemischen Industrie sowie militärischer Müll eingebracht [Hennig et al., 1992]. Zwischen der Deponie und dem sich mit Grundwasser füllenden Restloch wurde ein Damm aufgeschüttet, um einen Eintritt von Deponiewasser in den sich bildenden See zu verhindern. Durch Beprobungen des Seewassers kam jedoch die Vermutung auf, daß dennoch hochkontaminiertes Deponiewasser durch den Damm in den See sickert. Die Deponie stellt somit eine potentielle Bedrohung der Wasserqualität des Sees dar [Gläser, 1995].

Der Hufeisensee ist wegen seiner stabilen halinen Schichtung in $\approx 26\text{m}$ Tiefe ein meromiktischer See. Der Salzeintrag erfolgte nicht wie bei anderen Tagebaurestseen durch saure Kippenwässer, sondern vor allem durch saline Grundwasserleiter. Dadurch bildete sich in der tiefsten Rinne im östlichen Hauptarm des Sees ein undurchmischter anaerober Tiefenwasserbereich, welcher als Monimolimnion bezeichnet wird (Abbildung 2.2).

2.1 Morphometrie

Die verwendeten Volumendaten (siehe auch Tabellen D.1 und D.2 in Anhang D) basieren auf einer bathymetrischen Karte des Hufeisensees von Wieser und Birger [1994] (Abbildung 2.2). Diese Karte wurde auf der Datengrundlage einer Echolotvermessung des Sees in Transekten erstellt. Zusätzlich wurde die Auswertung historischer Luftbilder mit einbezogen, auf denen die Randlinien unterschiedlicher Flutungszustände des Restloches bestimmt und als Höhenlinien übernommen werden konnten.

Aus der Karte lassen sich die verschiedenen Tiefenzonen des Hufeisensees entnehmen. Im Norden und Osten liegen durch Auskiesung entstandene Flachwasserzonen. Den Innentiefenwasserzonen umgibt eine Tiefenwasserrinne, die in der östlichen Seehälfte ihre tiefste Stelle erreicht, welche durch eine leichte Verflachung vom restlichen Rinnensystem abgeschnitten wird. Dadurch entsteht an der tiefsten Stelle des Sees eine ausgeprägte Beckenstruktur.

Die Seefläche (Abbildung 2.3, oben) wurde nach digitalisierten Daten von Wieser und Birger [1994] in 1-Meter-Tiefenschritten berechnet. Die Sedimentfläche wurde aus der Seeflächenänderung aus der Flächenänderung mit der Tiefe berechnet. Die Sedimentflächenverteilung mit der Tiefe (Abbildung 2.3, unten) spiegelt die verschiedenen Tiefenzonen des Hufeisensees wieder: Die durch Auskiesung entstandenen Flachwasserzonen sind im Sedimentflächenverlauf als Maximum bei etwa 87 m NN zu erkennen. Das zweite Maximum der Sedimentfläche bei etwa 81m NN kommt durch die Fläche des Seegrundes im südwestlichen Seitenarm des Sees zustande. Die Tiefenwasserrinne liefert durch den steilen Abfall des Seegrundes in diesem Bereich keinen großen Beitrag zur gesamten Sedimentfläche.

Betrachtet man aber das Verhältnis von Sedimentfläche zu Schichtvolumen (Abbildung 2.3 unten), so läßt sich erkennen, daß sich dessen Verlauf mit der Tiefe umgekehrt zum Verlauf der absoluten Sedimentfläche verhält. Die zwei erwähnten Maxima zeichnen sich auch im Quotienten Sedimentfläche/Schichtvolumen deutlich ab. In größeren Tiefen steigt der Quotient deutlich an, bis er in der Maximaltiefe sogar größer wird als in der Tiefe,

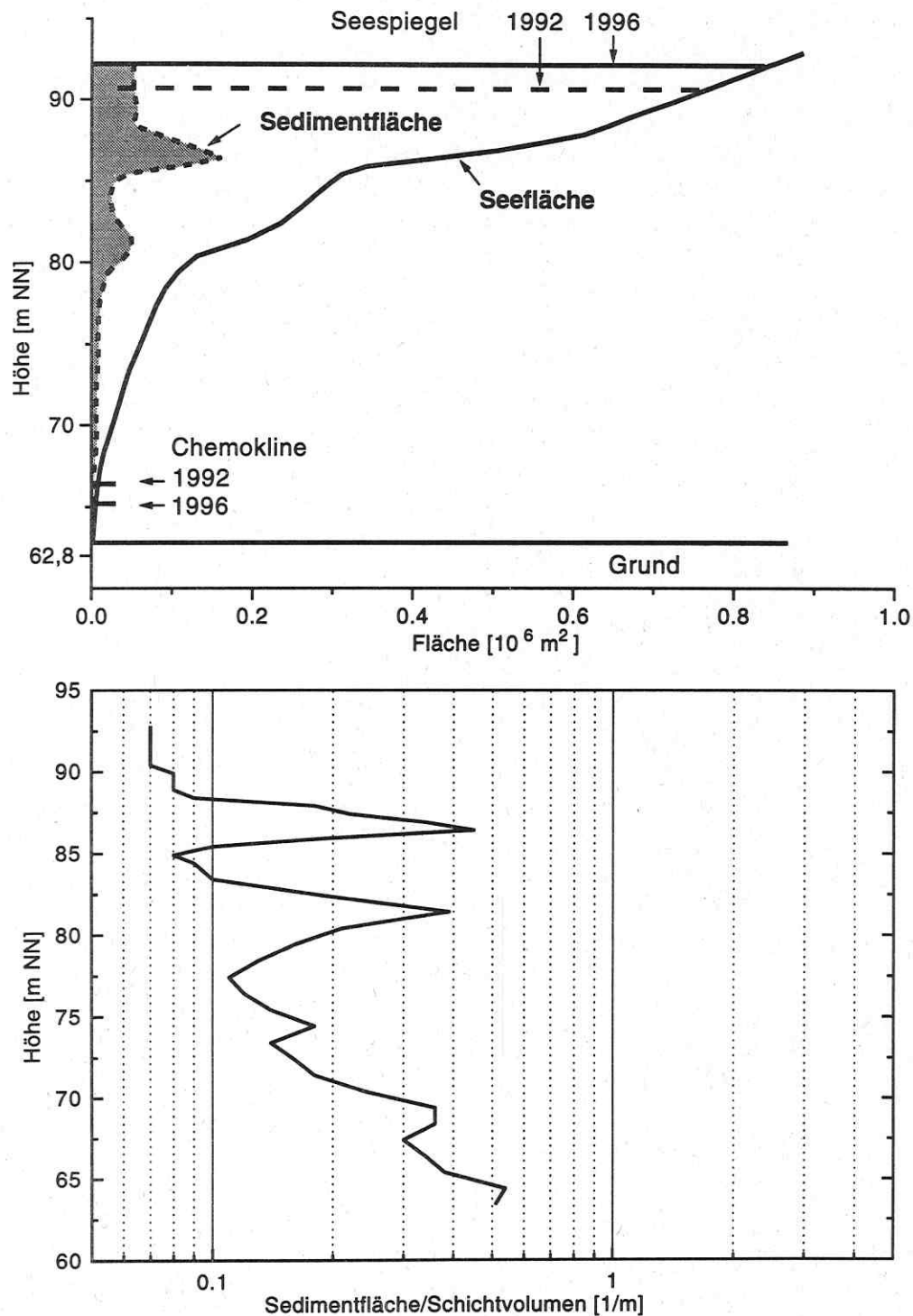


Abb. 2.3: Oben: See- und Sedimentfläche des Hufeisensees. Die Sedimentfläche wird in 1-Meter-Tiefenschritten aus der Differenz der Seeflächen ermittelt. Das obere Maximum ergibt sich durch die nordwestliche Auskiesungsfläche, das untere durch den südwestlichen Seitenarm. Unten: Verhältnis von Seefläche zu Schichtvolumen in 1-Meter-Tiefenschritten. Die zwei Maxima zeichnen sich auch in dieser Auftragung deutlich ab; zum Seegrund hin wächst das Verhältnis stark an.

in der die Sedimentfläche am größten ist. Größen, die Quellen oder Senken im Sediment besitzen oder im Austausch mit ihm stehen, erfahren demnach in größeren Tiefen stärkere Änderungen durch Sedimentprozesse.

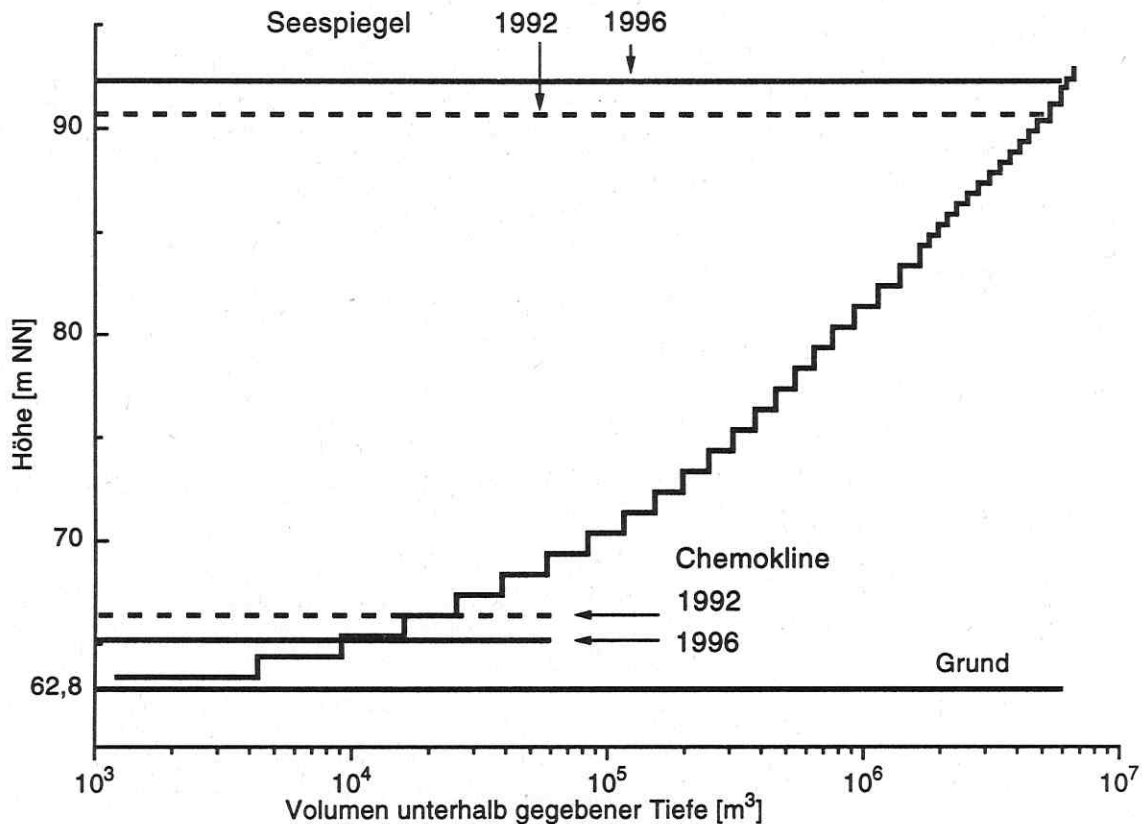


Abb. 2.4: Volumen des Hufeisensees Für die Jahre 1992 und 1996 sind der mittlere Seespiegel und die Lage der Chemokline eingezeichnet. Die Volumenwerte für die höheren Wasserstände nach 1992 wurden extrapoliert.

Der Volumenverlauf mit der Tiefe wurde aus den in 1-Meter-Tiefenschritten ermittelten Seeflächen berechnet. Die Werte für die höheren Wasserstände wurden extrapoliert. Der See besaß 1996 bei einem mittleren Pegelstand von 92,3m NN ein Volumen von 6,15 Mio. m³ (Abbildung 2.4).

Die Flächen- und Volumenberechnung durch Interpolation der Tiefendaten liefert für den Hufeisensee Werte bis zu einer Tiefe von 59,1m NN. Diese Tiefe wird in der bathymetrischen Karte durch einen einzigen Punkt repräsentiert [Wieser, 1995]. Die Glaubwürdigkeit der berechneten Volumina und Flächen auf den letzten Metern über Grund ist demnach fraglich. Die maximalen Tiefen, die bei der Aufnahme von Temperatur- und Leitfähigkeitsprofilen je erreicht wurden, unterschritten eine Tiefe von 62,8m NN nie. Daher wird eine Seebodenhöhe von 62,8m NN angenommen.

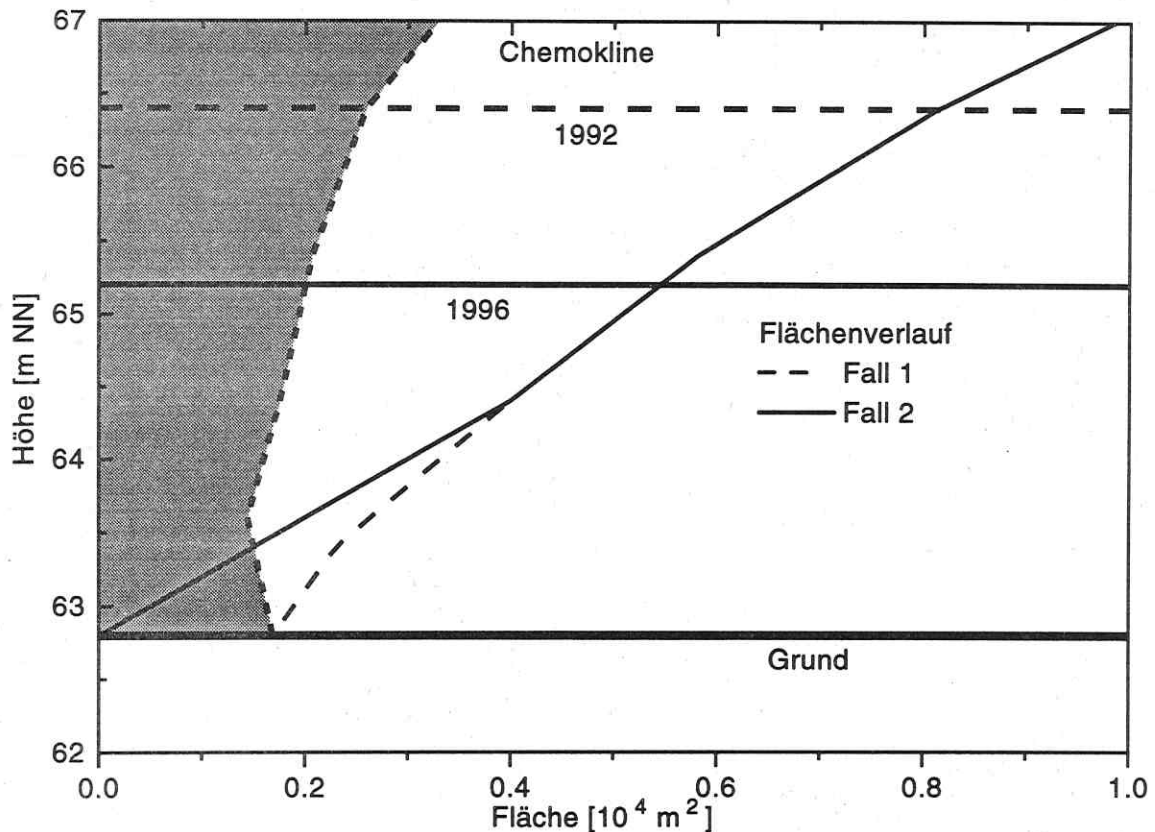


Abb. 2.5: See- und Sedimentfläche im Monimolimnion. Fall 1 und Fall 2 beschreiben die Grenzfälle des Flächenverlaufs, wie sie sich aus einer angenommenen maximalen Tiefe bei 62,8m NN ergeben. Die Sedimentfläche für den Fall 1 ist grau eingezeichnet. Die mittlere Lage der Chemokline in den Jahren 1992 und 1996 ist ebenfalls wiedergegeben.

Volumen des Monimolimnions Für die Auswertung des SF_6 -Ausbreitungsexperimentes und die Modellierung der Temperatur-, Leitfähigkeits- und SF_6 -Verteilung sind die Volumendaten des Monimolimnions und deren Fehler von besonderem Interesse. Sie sollen in diesem Abschnitt genauer betrachtet werden.

Das Volumen des Monimolimnions wird durch die Lage der Chemokline bestimmt. Im Verlauf des betrachteten Zeitraums von 1992 bis 1996 sank die Chemokline von etwa 66,4m NN auf 65,1m NN ab, d.h. etwa $34 \pm 2 \text{ cm}$ pro Jahr. Die Tiefe des Sees wird aus den oben angeführten Gründen zu 62,8m NN angenommen. Das Monimolimnion besaß demnach 1996 eine Mächtigkeit von $\approx 2,4$ Metern mit abnehmender Tendenz. Das Volumen betrug zu dieser Zeit etwa 0,4% des gesamten Seevolumens.

Die Annahme einer maximalen Seetiefe von 62,8m NN in dieser Arbeit bedingt eine Korrektur der von Wieser und Birger [1994] auf einen tiefsten Punkt von 59,1m NN bezogenen Flächen- und Volumendaten. Es werden zwei Grenzfälle des Volumenverlaufs angenommen (Abbildung 2.5):

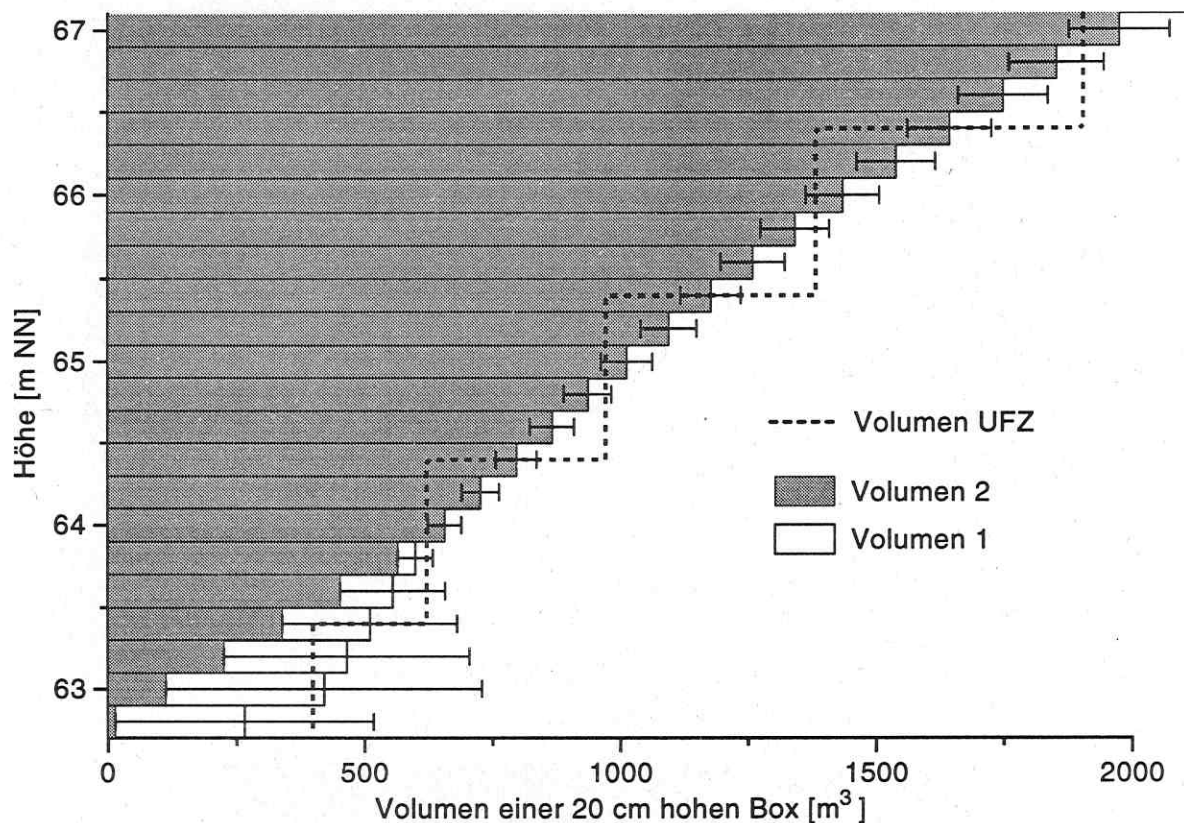


Abb. 2.6: Volumen des Monimolimnions. Es sind die Volumina von 20cm-Schichten für Fall 1 und Fall 2 dargestellt. Die Ausgangsdaten des UFZ (1-Meter-Schichten) sind gestrichelt dargestellt.

- **Fall 1:** Der Flächenverlauf wird direkt aus der Datenbasis von Wieser und Birger [1994] übernommen, jedoch der Seegrund als ebene Fläche in der Maximaltiefe von 62,8m NN angesetzt. Die Neigung des Seebodens oberhalb der maximalen Tiefe ändert sich demnach gegenüber der ursprünglichen Datenbasis nicht.
- **Fall 2:** Extrapoliert aus dem Tiefenverlauf zwischen 65 und 67 m NN wird eine trichterförmige Verengung des Seequerschnitts bis auf einen einzigen Punkt in der maximalen Tiefe (62,8m NN) angesetzt. Sowohl die Fläche als auch das Volumen gehen mit zunehmender Tiefe bis auf Null zurück.

Der verwendeten Datenbasis liegen Tiefenschritte von einem Meter zugrunde. Im Monimolimnion liegen daher nur drei Werte für die Fläche und das Volumen vor. Für die Modellierung der Prozesse im Monimolimnion (Kapitel 6) und die SF_6 -Gesamtbilanz (Kapitel 5) wird aber eine höhere Tiefenauflösung benötigt. Die Volumendaten wurden aus diesem Grund linear interpoliert. Abbildung 2.6 zeigt die berechneten Volumina für 20cm dicke Schichten sowie die Volumina der 1-Meter-Schichten der ursprünglichen Datenbasis. Die Fehler des Volumens im Monimolimnion ergeben sich für die Tiefen unterhalb von

63,9m NN aus der Differenz der Volumina des Falles 1 und 2. In den Tiefenbereichen, in denen die Volumina der beiden Fälle übereinstimmen, wird ein Fehler von 5% angenommen.

2.2 Temperatur und Leitfähigkeit

Aus den Temperatur- und Leitfähigkeitsprofilen lassen sich die verschiedenen Schichtungsstadien eines Sees erkennen. Der Hufeisensee weist im Sommer eine Dreischichtung mit einer Gliederung in Epilimnion, Hypolimnion und Monimolimnion auf. Epi- und Hypolimnion sind durch eine Thermokline, Hypo- und Monimolimnion durch eine Chemokline getrennt (Abbildung 2.7). Im Winter bleibt die Chemokline durch den hohen Salzgehalt des Monimolimnions stabil, während die Wassersäule darüber durchmischt wird. Der Huf-

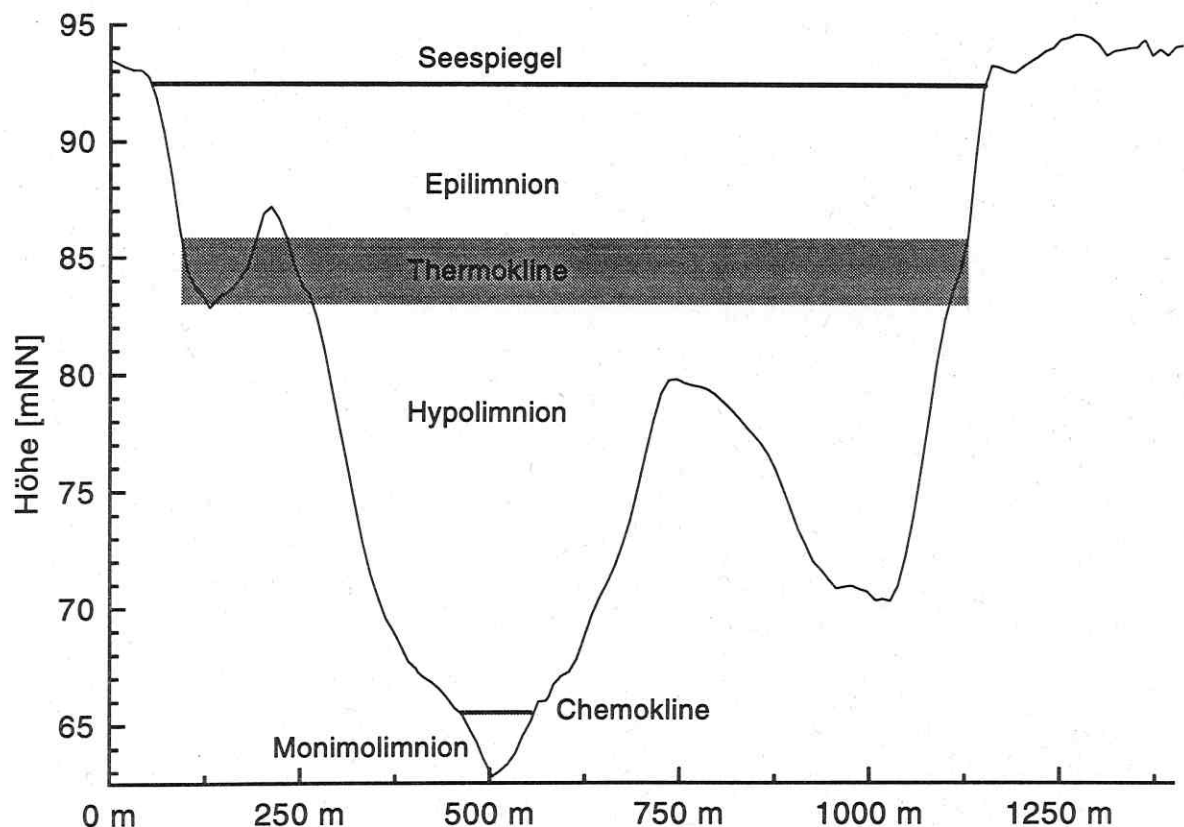


Abb. 2.7: Längsschnitt durch den Hufeisensee entlang der in Abbildung 2.2 eingezeichneten Linie; er führt durch den tiefsten Punkt des Sees. Es ist eine sommerliche Schichtung mit der ungefähren Lage der Thermokline und der Chemokline sowie der Aufteilung des Wasserkörpers in Epilimnion, Hypolimnion und Monimolimnion eingezeichnet. Die geringen Abmessungen des Monimolimnions im Vergleich zum gesamten See werden deutlich.

eisensee fällt damit in die Klasse der meromiktischen Seen, da er einen Tiefenwasserkörper besitzt, der nicht an der winterlichen Vollzirkulation teilnimmt.

Im folgenden sollen zunächst einige Betrachtungen zur Leitfähigkeit angestellt und sodann die verschiedenen Schichtungsstadien anhand der Leitfähigkeits- und Temperaturentwicklung im Lauf eines Jahres erklärt werden.

2.2.1 Leitfähigkeit

Die elektrische Leitfähigkeit kann in wäßrigen Lösungen als Summenparameter zur Erfassung gelöster Ionen und damit des Salzgehalts verwendet werden, da alle Stoffe, die bewegliche Ladungsträger aufweisen, eine elektrische Leitfähigkeit besitzen [WTW, 1993]. Es gehen sowohl die temperaturabhängige Beweglichkeit der Ionen als auch die Ionenzusammensetzung des Wassers in die Leitfähigkeit ein.

Leitfähigkeit als Summenparameter Die gemessene Leitfähigkeit setzt sich additiv aus den Beiträgen der einzelnen Ionen zusammen. Bei einer Wassertemperatur T erhält man für die Leitfähigkeit κ in situ

$$\begin{aligned}\kappa_T &= \kappa(c_1, \dots, c_n, T) \\ &= \sum_{i=1}^n f_i \lambda_i^\infty(T) Z_i c_i \quad [\text{mS/cm}]\end{aligned}\quad (2.1)$$

i Ionensorte

c_i Konzentration [mol/l]

λ_i^∞ Leitfähigkeit pro Ladungseinheit bei unendlicher Verdünnung [(mS/cm)/(eq/l)]

Z_i elektrische Ladung

f_i Koeffizient, der die Abhängigkeit von der Konzentration beschreibt

Die Koeffizienten f_i gelten nur in einem begrenzten Konzentrationsbereich und stellen daher eine der Schwierigkeiten bei der Bestimmung der Leitfähigkeit über einen weiten Konzentrationsbereich dar. Wüest et al. [1996] geben einen Einblick in die Problematik der Leitfähigkeitsmessungen in Seen.

Umrechnung der Leitfähigkeit auf eine Referenztemperatur Die bei in situ - Temperaturen gemessene Leitfähigkeit κ_T muß auf eine Referenztemperatur umgerechnet werden, da sowohl die Beweglichkeit der Ionen als auch die Anzahl der dissoziierten Moleküle temperaturabhängig ist. Die Referenztemperatur ist heute nach allgemeiner Konvention 25°C. Mit einem Polynom 4. Ordnung können in der Regel alle vorkommenden Temperaturabhängigkeiten beschrieben werden [WTW, 1993]. Für natürliche Wässer existieren verschiedene empirische Formeln. Eine davon ist die Temperaturkorrekturfunktion von Bührer und Ambühl [1975]:

$$f(\Theta) = 1,72118 - 0,0541369 \Theta + 1,14842 \cdot 10^{-3} \Theta^2 - 1,222651 \cdot 10^{-5} \Theta^3 \quad (2.2)$$

Θ Temperatur [°C]

Die Umrechnung auf κ_{25} erfolgt mit obiger Funktion gemäß $\kappa_{25} = \kappa_T \cdot f(\Theta)/f(25^\circ\text{C})$. Abbildung 2.8 zeigt zwei für den Hufeisensee typische Leitfähigkeitsprofile. Es ist ein Profil vom 1.12.1995 dargestellt, das die Verhältnisse während der winterlichen Vollzirkulation des Mixolimnions wiedergibt, und eines vom 1.10.1996, welches am Ende der sommerlichen Schichtungsphase aufgenommen wurde. Aus den beiden Profilen ist eine Unterteilung des Wasserkörpers in ein zeitweise vollaufgemischtes Mixolimnion und ein selbst im Winter nicht durchmishtes Monimolimnion zu erkennen.

Die Leitfähigkeit im Mixolimnion lag während des Beobachtungszeitraumes 1992 - 1996 im Mittel bei 2,7 mS/cm. Saisonale Schwankungen durch Biomasseproduktion, Regen und Verdunstung bewegen sich im Bereich von $\pm 0,2$ mS/cm.

In Tiefen unterhalb von 65,5m NN steigt die Leitfähigkeit signifikant an. Im Monimolimnion liegt sie in einem Bereich von 25 mS/cm bis zu 29,7 mS/cm direkt über dem Grund.

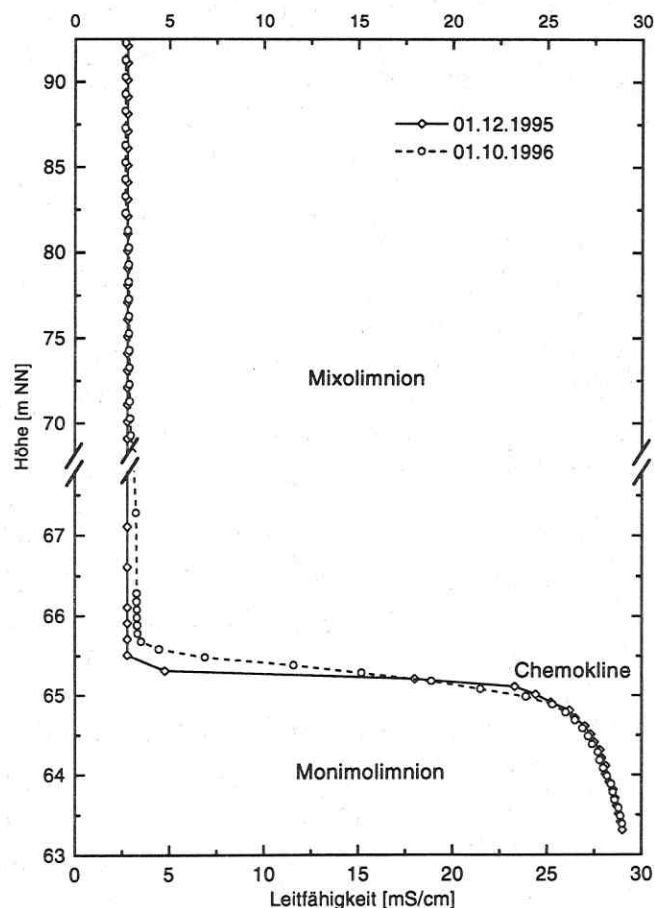


Abb. 2.8: Die Leitfähigkeit zeigt die haline Schichtung des Hufeisensees. Die dargestellten Profile vom 1.12.1995 und 1.10.1996 zeigen die Unterschiede der Leitfähigkeitsprofile während der winterlichen Vollzirkulation des Mixolimnions im Vergleich zum Ende der sommerlichen Schichtungsphase.

Dies entspricht einer Salzkonzentration von 15 - 17 g/l und damit ungefähr der halben Meerwasserkonzentration. Die Schichtung bleibt durch den hohen Unterschied der Salzkonzentration zwischen Mixolimnion und Monimolimnion, der einen Dichteunterschied bewirkt, das ganze Jahr über stabil.

Saisonale Einflüsse bewirken geringe, für die jeweilige Jahreszeit charakteristische Unterschiede in den Leitfähigkeitsprofilen.

Sommer Im Epilimnion wird durch Biomasseproduktion [Karagounis, 1992] und Calcitfällung im Sommer die Konzentration der gelösten Stoffe und damit die Leitfähigkeit herabgesetzt. Eine Erhöhung der Leitfähigkeit durch Eindampfung (Verdunstung) wird durch den entgegengesetzten Effekt des Regens ausgeglichen. Abbildung 2.9 zeigt die Unterschiede des späten sommerlichen Profils vom 1.10.1996 gegenüber dem Winterprofil vom 1.12.1995. Das Hypolimnion und das Monimolimnion sind durch die Thermokline von einer konvektiven oder einer unmittelbaren windinduzierten Durchmischung ausgeschlossen. Hauptsächlich Transportmechanismus ist die turbulente oder molekulare Diffusion. Dementsprechend verbreitert sich die Chemokline rein diffusiv. Die Diffusionsfront verhält sich dann entsprechend einer Fehlerfunktion, d.h. die Salzkonzentration über der ursprünglichen Grenzschicht nimmt kontinuierlich zu, während sie darunter abnimmt. Das Leitfähigkeitsprofil wird im Bereich der Chemokline sozusagen "gekippt", die Chemokline verbreitert sich. Dies entspricht der Beobachtung (Abbildung 2.8). Die Leitfähigkeit ist am Ende der Sommerperiode im tiefen Hypolimnion erhöht und nimmt zum Monimolimnion hin zu. In den oberen Schichten des Monimolimnions ist die Leitfähigkeit über den Sommer abgesunken, da durch die Diffusion ein Transport ins Hypolimnion stattgefunden hat. Der Leitfähigkeitssprung verläuft am Ende der Sommerperiode über einen Bereich von 50 - 60 cm.

Winter Im Winter (Profil vom 1.12.1995) findet eine Volldurchmischung bis zur Chemokline statt. Die Leitfähigkeit wird oberhalb des Monimolimnions auf einen konstanten Wert gestellt. Die Chemokline wird nicht mehr durch eine Thermokline vor windinduzierter Mischung geschützt. Die oberen Bereiche der Chemokline mit relativ geringem Leitfähigkeitsgradient und damit geringer Stabilität werden durch die Windeinwirkung soweit erodiert, bis durch die Verschärfung der Sprungschicht eine genügend hohe Stabilität entsteht, um der Windmischung zu widerstehen. Der Leitfähigkeitssprung verläuft am Ende des Winters typischerweise in einem Bereich von lediglich 10 - 20 cm. Die jahreszeitlichen Veränderungen der Chemokline wirken sich auch im oberen Teil des Monimolimnions aus, während in der Nähe des Seebodens nahezu keine zeitliche Veränderung festzustellen ist.

Die Leitfähigkeit eignet sich somit gut, die Lage und vertikale Ausdehnung der Chemokline und des Monimolimnions zu beschreiben.

2.2.2 Temperatur

Der Wärmehaushalt eines Sees wird hauptsächlich durch den Wärmeaustausch mit der Atmosphäre an der Seeoberfläche beziehungsweise in der obersten Wasserschicht bestimmt.

Es treten lang- und kurzwellige Einstrahlung, langwellige Abstrahlung des Wasserkörpers sowie konvektiver und latenter Wärmeaustausch auf (s. auch Abschnitt 5.4.1).

Zu den einzelnen Jahreszeiten herrschen verschiedene Schichtungsphasen vor (Abbildung 2.9):

Sommer Im Sommer weist der Hufeisensee sowohl eine thermische als auch eine haline Schichtung auf. Die in den obersten Wasserschichten eingetragene Wärme wird durch Windeinwirkung im Epilimnion vermischt. Die Temperatur des Oberflächenwassers, die Windgeschwindigkeit und die Windrichtung bestimmen, wie tief diese Durchmischung reicht. Die geringere Dichte des warmen Oberflächenwassers bewirkt eine stabile Schichtung, die den turbulenten Wärmetransport in tiefere Schichten verringert. Dadurch bildet sich unterhalb des Epilimnions eine Temperatursprungschicht (Thermokline oder auch Metalimnion) aus, in der die Temperatur von dem Wert des Epilimnions auf den Wert des sich unter der Thermokline anschließenden Hypolimnions abfällt. Die Temperatur des Hypolimnions entspricht zu Anfang des Sommers der Temperatur des Mixolimnions zum Zeitpunkt der letzten Volldurchmischung und erhöht sich im Lauf des Sommers durch Wärmetransport über die Thermokline. Im September 1995 betrug die mittlere Hypolimniontemperatur $7,7^{\circ}\text{C}$. Die Temperatur des sich unter der Chemokline befindlichen Monimolimnions konnte sich im Sommer der Hypolimniontemperatur durch Wärmediffusion nahezu anpassen.

Herbst Im Herbst verringert sich der Wärmeeintrag durch Einstrahlung, während das noch warme Oberflächenwasser für eine hohe thermische Abstrahlung sorgt. Insgesamt ergibt sich eine Abkühlung der oberen Wasserschichten, was zu einer Erhöhung der Dichte des Oberflächenwassers und daher zu einer konvektiven Durchmischung führt. Die Thermokline sinkt ab und der See kann bis in größere Tiefen durchmischt werden. Im Monimolimnion ändert sich die Temperaturverteilung noch nicht wesentlich.

Winter Mit der fortschreitenden Abkühlung wird der See bis in größere Tiefen durchmischt, bis schließlich eine Vollzirkulation bis zur Chemokline eintritt. Das Temperaturprofil vom 1.12.1995 zeigt eine Homothermie des gesamten Mixolimnions (ca. 92 - 65,5m NN) mit einer Temperatur von $4,5^{\circ}\text{C}$, also über dem Dichtemaximum, welches bei etwa $3,7^{\circ}\text{C}$ liegt. Das Monimolimnion nimmt an der Volldurchmischung nicht teil, da der hohe Salzgehalt des Wassers eine größere Dichte bewirkt. Der Austausch über die Chemokline ist daher durch die stabile haline Schichtung unterdrückt. Es entsteht eine Temperaturinversion; die oberen Schichten des Monimolimnions kühlen sich ab, während im tiefen Monimolimnion nahezu keine Temperaturänderung auftritt.

Im Winter kann in windarmen Zeiten auch an der Wasseroberfläche eine inverse Temperaturschichtung auftreten, die ein Effekt der Dichteanomalie des Wassers ist. Ist die gesamte Wassersäule auf eine Temperatur gestellt, die dem Dichtemaximum des Wassers von etwa $3,7^{\circ}\text{C}$ entspricht, so bewirkt eine weitere oberflächennahe Abkühlung eine Verminderung der Dichte der oberen Schichten des Wasserkörpers. Es kann sich eine stabile Schichtung entwickeln, bei der die Temperatur des Oberflächenwasser bis auf 0°C absinken und sich

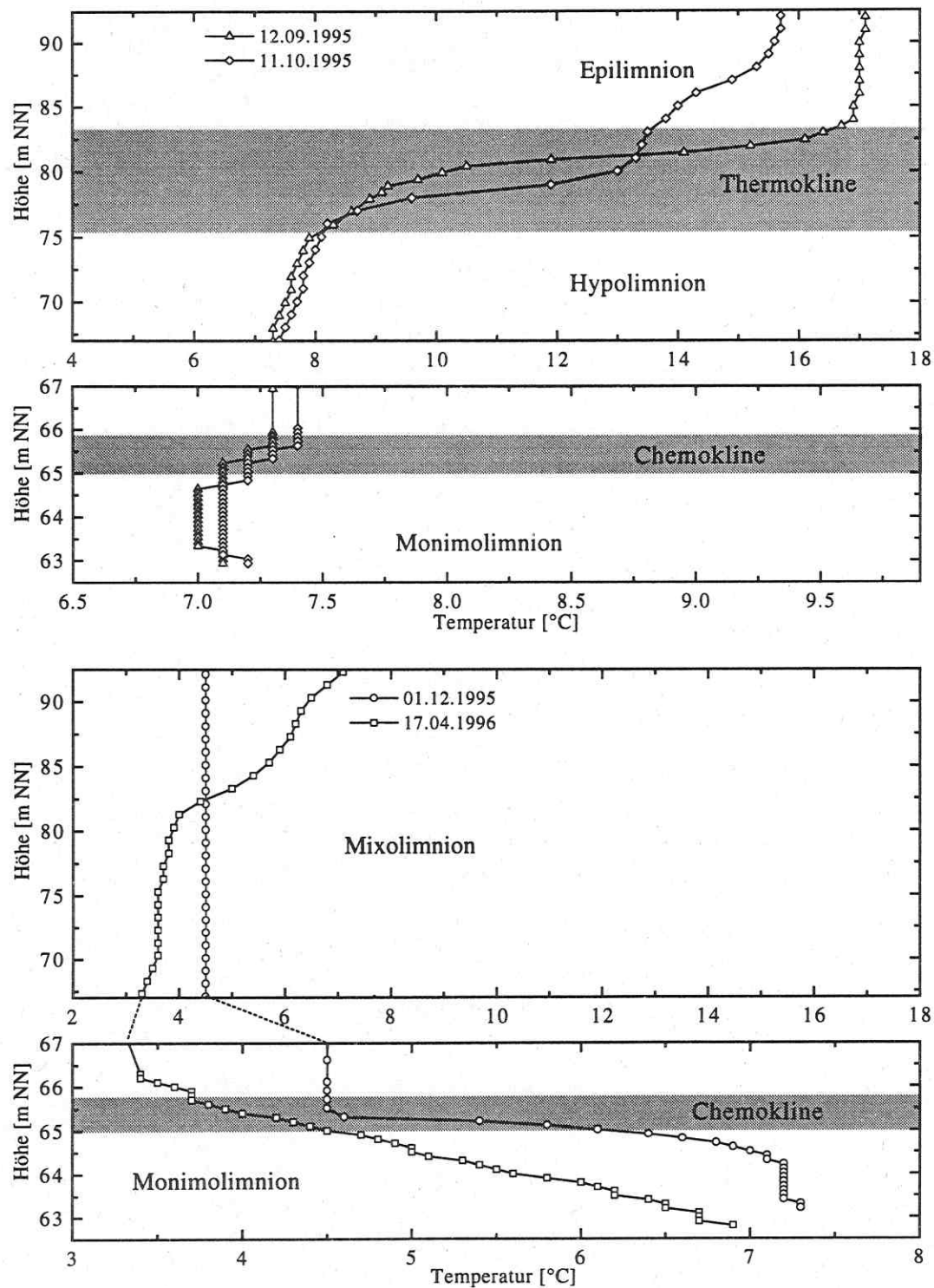


Abb. 2.9: Thermische Schichtung des Hufeisensees zu verschiedenen Jahreszeiten. Oben: Die Sommerprofile zeigen eine thermische Schichtung des Sees mit Unterteilung in Epilimnion, Thermokline und Hypolimnion sowie Chemokline und Monimolimnion. Unten: Das Winter- und Frühjahrsprofil lassen eine Temperaturinversion im Monimolimnion erkennen.

eine Eisbedeckung ausbilden kann. Der Dichteunterschied und damit die Stabilität dieser inversen Schichtung ist aber durch den maximal möglichen Temperaturunterschied zwischen 0°C und der Temperatur des Dichtemaximums begrenzt. Da die Dichteänderungen mit der Temperatur zudem in diesem Temperaturbereich aufgrund des Verhaltens der Dichtefunktion geringer ausfallen als in einem höheren Temperaturbereich, ist die mögliche Stabilität nur gering.

Frühjahr Im Frühjahr baut sich mit der zunehmenden solaren Einstrahlung eine thermische Schichtung auf. Am Temperaturprofil vom 17.4.96 läßt sich eine schwach ausgeprägte Thermokline erkennen, die das Mixolimnion bereits in ein Epi- und ein Hypolimnion aufteilt. Einzelne Sturmereignisse können jedoch in dieser Phase des Schichtungsaufbaus aufgrund der noch geringen Stabilität zu einer Volldurchmischung des Mixolimnions führen. Das Monimolimnion weist im Frühjahr eine deutliche Temperaturinversion auf. Von der Chemokline bis zum Grund hat sich eine nahezu linearer Temperaturanstieg mit der Tiefe eingestellt. Am Grund veränderte sich die Temperatur über Winter nicht wesentlich, sie nahm lediglich um 0,2 - 0,3°C ab. Demnach kann während des Winters Wärme aus dem Monimolimnion ins kältere Mixolimnion diffundieren. Dieser Diffusionsprozess geht jedoch relativ langsam vor sich, so daß die tieferen Schichten des Monimolimnions erst nach einem entsprechend langem Zeitraum eine Temperaturänderung erfahren. Die Diffusionskoeffizienten liegen dabei im Bereich der molekularen Diffusion der Wärme (siehe auch Kapitel 4.3.1).

Die Leitfähigkeit und die Temperatur zeigen somit im Monimolimnion im Jahreslauf ein unterschiedliches Verhalten. Während die Leitfähigkeit zumindest im tiefen Monimolimnion das ganze Jahr nahezu konstant bleibt und im oberen Monimolimnion allenfalls abnimmt, variiert der Temperaturverlauf von annähernder Homothermie am Ende des Sommers bis zur Temperaturinversion im Frühjahr. Diese unterschiedliche Entwicklung läßt sich durch den großen Unterschied zwischen den molekularen Diffusionskoeffizienten von Wärme und Ionen erklären. Der molekulare Diffusionskoeffizient der Wärme liegt etwa zwei Größenordnungen höher als der der Ionen. Damit dieser Größenunterschied der molekularen Diffusionskoeffizienten die beschriebenen Auswirkungen auf die Profile haben kann, darf die turbulente Diffusion höchstens in einem Bereich von $10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ liegen, damit sie die molekulare Diffusion nicht überdeckt. Die Gesamtdiffusion der Wärme ist allein durch die molekulare Diffusion schon so groß, daß die beobachteten Variationen der Temperatur durch sie erklärt werden können.

Die Verwendung der Temperatur als Tracer im Monimolimnion ist daher sehr eingeschränkt. Durch die hohe Wärmediffusion werden die Variationen der Quellen und Senken relativ schnell (im Vergleich etwa zur Leitfähigkeit) in das Monimolimnion transportiert. Die wichtigste Quelle ist dabei die Temperatur des Mixolimnions direkt über der Chemokline. Die Temperaturänderung aufgrund des Einflusses der Mixolimniontemperatur überdeckt dadurch einen möglichen Einfluß des umgebenden Grundwassers.

2.3 Dichte und Stabilität

Die Dichte von Wasser kann aus der Temperatur und der Ionenzusammensetzung berechnet werden. Da die Ionenzusammensetzung aber aufwendig zu messen ist, ist es das Ziel, von dem leicht meßbaren Parameter Leitfähigkeit auf den Salzgehalt des Wassers und auf die von den Ionen verursachte Dichteänderung zu schließen. Die Dichte wird dann als Funktion der Temperatur und der Leitfähigkeit, welche von der Ionenzusammensetzung abhängig ist, ausgedrückt.

Das Mixolimnion des Hufeisensees besitzt eine ähnliche Ionenzusammensetzung wie z.B. die Quellwässer des Lago Cadagno in der Schweiz, für den eine Untersuchung der Abhängigkeit der Dichte von der Ionenzusammensetzung beziehungsweise der Leitfähigkeit vorliegt [Uhde, 1992]. Dort wird die Dichte als eine lineare Funktion der Leitfähigkeit angenähert. Nach Uhde ist

$$\rho(T, \kappa_{25}) = \rho(T) + \gamma \kappa_{25} \quad [\text{kg/m}^3] \quad (2.3)$$

ρ	Dichte des Wassers $[\text{kg/m}^3]$
κ_{25}	Leitfähigkeit, auf 25°C umgerechnet $[\text{mS/cm}]$
T	Temperatur $[\text{°C}]$
γ	Proportionalitätsfaktor: $0,63 [(\text{kg/m}^3)/(\text{mS/cm})]$

Aufgrund der ungefähren Übereinstimmung der Ionenzusammensetzung der Quellwässer des Lago Cadagno mit dem Wasser im Mixolimnion des Hufeisensees kann obige Beziehung für die Dichte verwendet werden. Dies darf aber nur als eine Näherung betrachtet werden, da keine genaue Ionenanalyse des Hufeisensee-Wassers vorliegt und somit Unterschiede zwischen den Quellwässern und dem Wasser des Hufeisensees nicht auszuschließen sind. Beide Wässer sind aber Ca^{2+} - SO_4^{2-} dominiert.

Die Ionenzusammensetzung des Monimolimnionwassers entspricht mit einer Dominanz von Na^+ und Cl^- -Ionen (siehe Kapitel 2.6) eher der des Meerwassers. Die Dichte könnte daher auch durch eine Beziehung ausgedrückt werden, wie sie von Siedler und Peters [1986] für Meerwasser gefunden wurde. Ein Vergleich der beiden Ansätze für die Dichte ergibt bei der im Monimolimnion maximal auftretenden Leitfähigkeit von $29,7 \text{ mS/cm}$ folgende maximalen Werte der Dichte:

Dichte von Meerwasser bei $29,7 \text{ mS/cm}$	$\approx 1014 \text{ kg/m}^3$
Dichte nach Uhde bei $29,7 \text{ mS/cm}$	$\approx 1018,5 \text{ kg/m}^3$

Die Summe der gelösten Stoffe im Wasser unterhalb von 24 m Seetiefe beträgt im Mittel ungefähr 18 g/l (s. auch Anhang B). Das entspricht eine mittleren Dichte von 1018 kg/m^3 . Diese wird durch den Ansatz der Dichte in Abhängigkeit von der Leitfähigkeit nach Uhde [1992] besser wiedergegeben. Aus diesem Grund wird im Rahmen dieser Arbeit die Beziehung 2.3 mit dem angegebenen Wert von γ auch im Monimolimnion verwendet.

Die reine Temperaturabhängigkeit der Dichte wird durch die Formel von Bührer und Ambühl [1975] ausgedrückt:

$$\rho(T) = 999,84298 - 6,54891 \cdot 10^{-2} T - 8,56272 \cdot 10^{-3} T^2 + 5,9385 \cdot 10^{-5} T^3 \quad [\text{kg/m}^3] \quad (2.4)$$

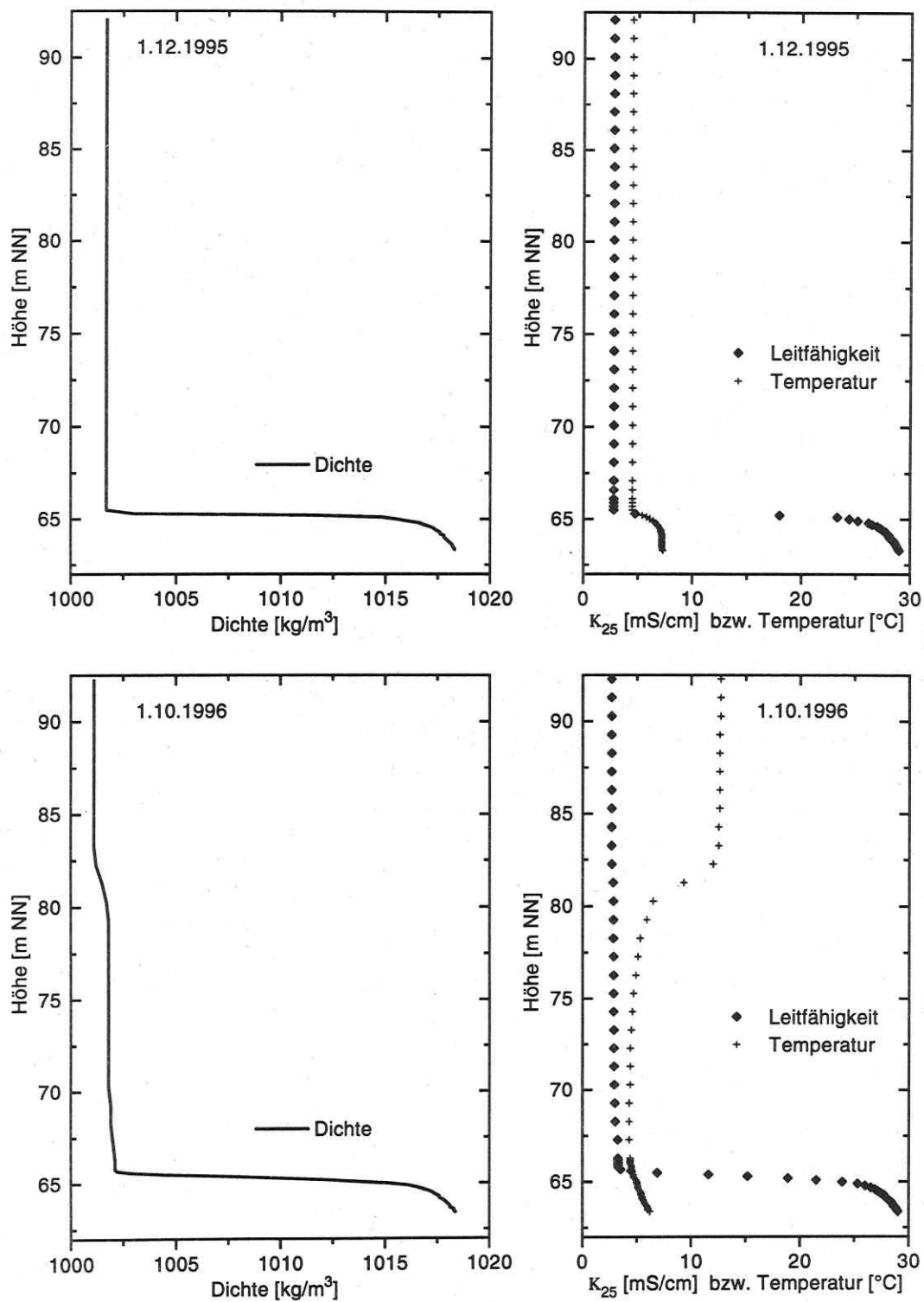


Abb. 2.10: Dichteprofile in Relation zu den Temperatur- und Leitfähigkeitsprofilen, aus denen sie berechnet wurden. Das Profil vom 1.10.1996 (unten) gibt eine spätsommerliche Schichtungssituation wieder, das Profil vom 1.12.1995 (oben) eine winterliche Situation.

$\rho(T)$	Dichte des Wassers ohne Berücksichtigung der Ionen [kg/m ³]
T	Temperatur [°C]

Es genügen schon kleine Veränderungen der Leitfähigkeit, um eine Dichteänderung zu bewirken, welche nur durch größere Unterschiede in der Temperatur zu erreichen wären. Eine Änderung der Leitfähigkeit um $\Delta\kappa_{25} = 0,42$ mS/cm führt zu einer Dichteänderung, die einer Erwärmung des Wassers von einer typischen Hypolimniontemperatur von 5°C auf 10°C entspricht. Der Dichteunterschied, der zwischen einem 15°C warmen Epilimnion und einem 5°C warmen Hypolimnion besteht, ist nach Gleichung 2.3 mit 2.4 der gleiche wie zwischen zwei Schichten, die einen Leitfähigkeitsunterschied von 1,36 mS/cm aufweisen. Abbildung 2.10 zeigt die Ergebnisse der Dichteberechnung für zwei unterschiedliche Schichtungssituationen. Die sommerliche Schichtungsphase ist durch die Profile vom 1.10.1996 wiedergegeben. Vergleicht man die Temperatur- und Leitfähigkeitsprofile mit dem daraus berechneten Dichteprofil, so wird deutlich, daß die Dichte im Mixolimnion hauptsächlich von der Temperatur bestimmt wird. Das Wasser des Epilimnions besitzt eine höhere Temperatur und damit eine geringere Dichte. Erst im tiefen Hypolimnion führt die zunehmende Leitfähigkeit zur Chemokline hin zu einer Dichtezunahme. Im Monimolimnion ist die Dichte durch die Leitfähigkeit dominiert.

Die winterliche Situation wird durch die Profile vom 1.12.1995 dargestellt. Das Mixolimnion ist volldurchmischt, die Temperatur und Leitfähigkeit und damit auch die Dichte sind in der ganzen Wassersäule über der Chemokline homogen. Im Monimolimnion ist wiederum eine Dichtezunahme durch die hohe Salzkonzentration zu verzeichnen.

Stabilität Aus den Dichteprofilen kann die Stabilität der Schichtung bestimmt werden. Die Brunt-Väisälä-Stabilitätsfrequenz N ist ein Maß für die Stärke der Schichtung in der Wassersäule und kann aus dem Dichtegradient errechnet werden (z ist positiv nach oben).

$$N = \sqrt{\frac{g}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial z}} \quad [1/s] \quad (2.5)$$

g	Schwerebeschleunigung: 9,81 m/s ²
ρ	Dichte des Wassers [kg/m ³]
$\frac{\partial \rho}{\partial z}$	Dichtegradient [kg/m ⁴]

Anschaulich läßt sich N als die Frequenz vorstellen, mit der ein Wasserpaket bei stabiler Schichtung um seine Ruhelage schwingt. Der Einfachheit halber wird aber meist nur das Quadrat N^2 der Stabilitätsfrequenz betrachtet. Für die stabile Wassersäule ist N^2 umso größer, je größer der Dichtegradient ist. Der Zustand des Systems ist also umso stabiler, je größer N^2 ist; negative N^2 bedeuten instabile Verhältnisse.

Da in die Dichte die Temperatur und die Leitfähigkeit eingehen, kann der Dichtegradient durch die Vertikalgradienten der Temperatur und Leitfähigkeit ausgedrückt werden. Mit obigem Ausdruck ergibt sich dann für die Stabilitätsfrequenz

$$N^2 = -\frac{g}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial \kappa_{25}} \frac{\partial \kappa_{25}}{\partial z} \right) \quad [1/s^2] \quad (2.6)$$

ρ	Dichte des Wassers [kg/m ³]
g	Schwerebeschleunigung: 9,81 m/s ²
$\frac{\partial T}{\partial z}$	Temperaturgradient [°C/m]
$\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial z}$	Leitfähigkeitsgradient [(mS/cm)/m]

Die Temperatur und Leitfähigkeitsgradienten gehen in diese Beziehung additiv mit unterschiedlichen Gewichtungsfaktoren ein. Im oberen Mixolimnion dominiert insbesondere der erste Term, da die Leitfähigkeitsänderungen gering sind. Erst im tiefen Hypolimnion gewinnt der zweite Term an Bedeutung, bis in der Chemokline und im Monimolimnion der Temperaturterm vernachlässigt werden kann und die Stabilität in guter Näherung eine Funktion der Leitfähigkeit wird.

Abbildung 2.11 zeigt für die in Abbildung 2.10 dargestellten Dichteprofile die entsprechenden Stabilitätsprofile im Bereich des Monimolimnions und der Chemokline. Oberhalb der

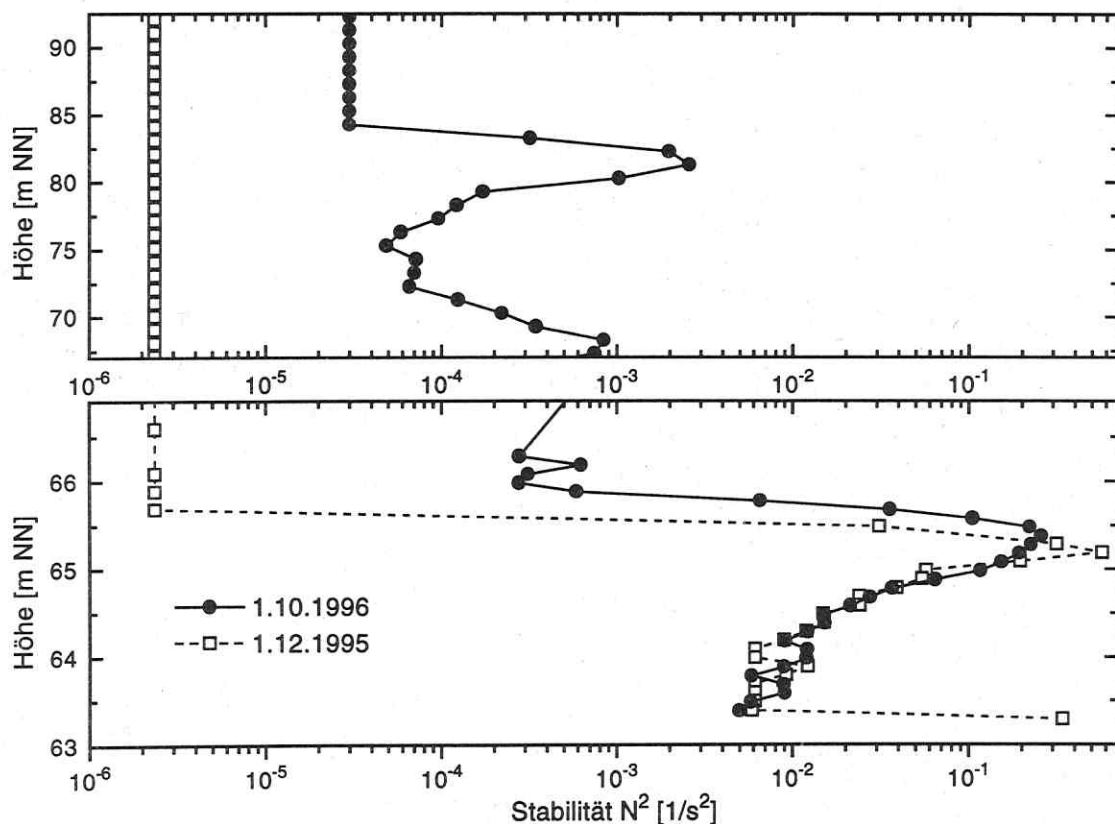


Abb. 2.11: Stabilität in der Wassersäule: Das Spätsommer- und das Winterprofil unterscheiden sich insbesondere oberhalb der Chemokline. Während die Stabilität im Winter direkt über der Chemokline auf Werte von 10^{-6} bis 10^{-7} $1/s^2$ zurückgeht, ist hier am Ende des Sommers die Schichtung nahezu so stabil wie in der Thermokline. In der Chemokline selbst ist die Stabilität mit Werten von $1 - 5 \cdot 10^{-1}$ $1/s^2$ sehr hoch. Im Winter ist sie höher als im Sommer.

Chemokline unterscheiden sich die beiden Profile wesentlich. Im Profil vom 1.12.1995 geht die Stabilität über der Chemokline auf Werte von 10^{-6} bis 10^{-7} 1/s^2 zurück, da sowohl die Temperatur als auch die Leitfähigkeit durch die Volldurchmischung des Mixolimnions auf einen nahezu konstanten Wert gestellt sind und somit keine großen Vertikalgradienten existieren. Demgegenüber liegt die Stabilität im Profil vom 1.10.1996 in den ersten Metern über der Chemokline durch den Leitfähigkeitsgradienten (s. auch Abbildung 2.8) in einem Bereich von 10^{-4} bis 10^{-3} s^{-2} , also bei einem Wert, der ungefähr der Stabilität in der Thermokline entspricht.

In der Chemokline steigt die Stabilität auf Werte von bis zu $0,5 \text{ s}^{-2}$, wobei durch die schärfer ausgeprägte Chemokline im Winter die Stabilität höhere Werte als im Sommer annimmt. Im Monimolimnion fällt die Stabilität ab und geht auf 10^{-3} bis 10^{-2} s^{-2} zurück, was aber immer noch eine stabilere Schichtung als in einer typischen sommerlichen Thermokline bedeutet.

Die Lage der Chemokline kann über die Stabilität bestimmt werden, der größte Wert der Stabilitätsfrequenz entspricht der Mitte der Chemokline. Da die Stabilität in der Chemokline aber durch den Leitfähigkeitsgradienten dominiert wird, kann dieser auch direkt als Maß für die Lage der Chemokline verwendet werden. Die Leitfähigkeitswerte sind im Mixolimnion und im tiefen Monimolimnion annähernd zeitlich konstant. Die Tiefe des Mittelwertes des Leitfähigkeitssprunges (16 mS/cm) entspricht daher in guter Näherung dem stärksten Leitfähigkeitsgradient und somit auch der größten Stabilität. Die Grenze zwischen Mixolimnion und Chemokline wird entsprechend bei einem Leitfähigkeitswert von $3,5 \text{ mS/cm}$ festgelegt, die Grenze zwischen Chemokline und Monimolimnion bei 23 mS/cm .

2.4 Seespiegel- und Chemoklinenvariationen

Die Flutung des Restloches des Braunkohletagebaus Bruckdorf/Nord begann 1940, nachdem 1939 der Tagebau beendet und die bergmännische Wasserhaltung eingestellt worden war [BKK, 1974]. Im Jahr 1946 erreichte der See einen ersten Höchststand von $88,5 \text{ m NN}$ [Hennig et al., 1992]. Zur Trockenaus Kiesung wurde nochmals eine Absenkung des Wasserspiegels auf einen Pegel von $77,7 \text{ m NN}$ vorgenommen. Nach Scharf et al. [1996] wurde der Sand- und Kiesabbau 1964 eingestellt. Danach konnte der See bis 1975 auf $91,7 \text{ m NN}$ ansteigen. Durch Brauchwasserentnahme zu landwirtschaftlichen Bewässerungszwecken wurde er in der Folge aber auf einem Wasserspiegel von ungefähr 91 m NN gehalten.

Der Seepegel hat sich bis heute durch einen Pegelanstieg des Grundwassers auf einen Pegel von etwas über 92 m NN eingestellt. Eine geplante Anbindung an den Vorfluter Reidebach über einen Entwässerungsgraben soll den Seewasserspiegel in Zukunft auf einem Niveau von 91 m NN konstant halten, da durch den hohen Wasserstand eine Gefährdung grundwassernaher Ortsteile von Kanena und ein Ansteigen des Grundwasserspiegels im Innern der Deponie und damit eine Vernässung bisher trockener Deponiebereiche nicht auszuschließen ist [Strauch et al., 1996]. Bei einem derzeitigen Wasserstand von etwa $92,3 \text{ m NN}$ beträgt die maximale Seetiefe ungefähr $29,5 \text{ Meter}$.

Abbildung 2.12 zeigt die Entwicklung des Seepegels seit 1992. Ab 1993 ist eine deutli-

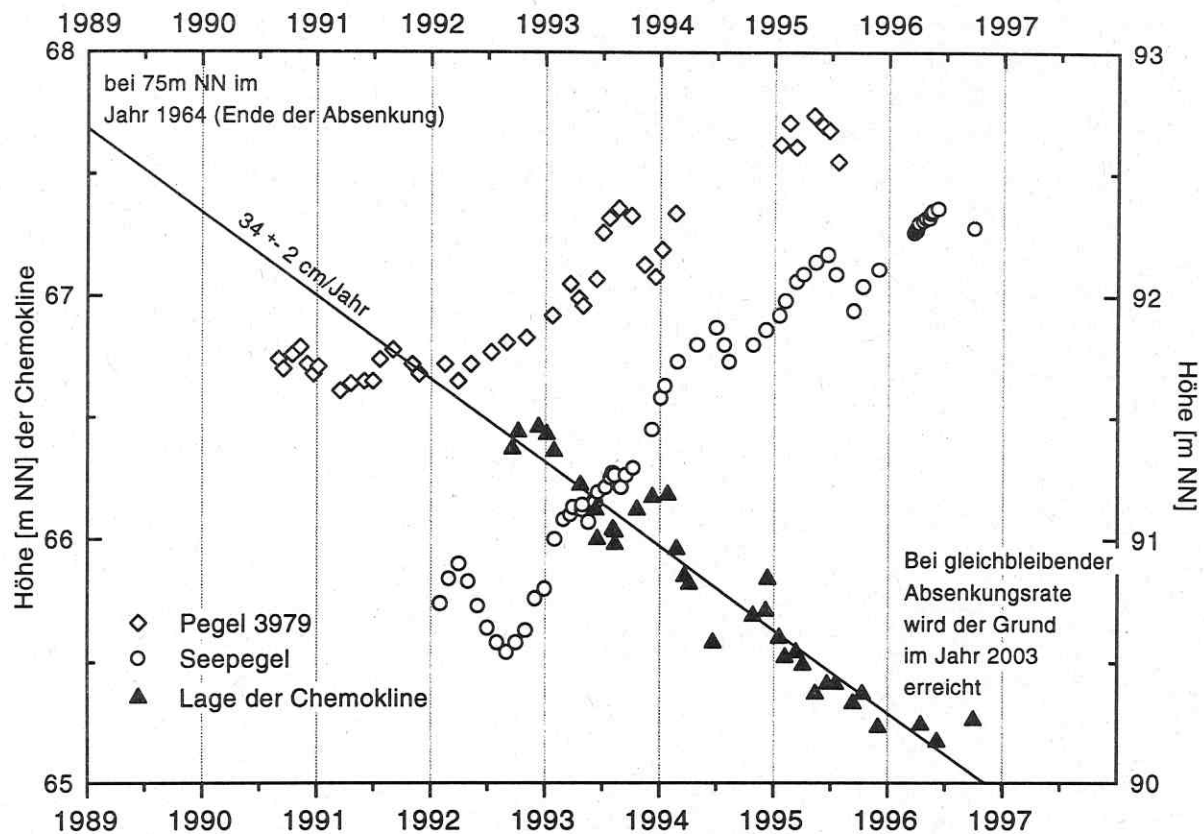


Abb. 2.12: Pegelstände des Sees und des Grundwasserpegels 3979o sowie Lage der Chemokline

che Erhöhung des Seespiegels entsprechend der Verminderung der Brauchwasserentnahme und insbesondere der Erhöhung des Grundwasserspiegels zu beobachten. Insbesondere im Winter steigt der See an, während im Sommer der Pegelstand tendentiell absinkt. In der Abbildung ist ebenfalls der Pegelstand des Grundwasserpegels 3979 dargestellt, der das Zeitverhalten des Grundwasserleiters 15 (Saale-Hauptterrasse) widerspiegeln soll. Es ist eine Korrelation zwischen dem Seewasserstand und dem Pegelstand zu verzeichnen. Diese wird in Kapitel 6.2.4 in einem Wasserbilanzmodell benutzt. Die Pegelstände des Grundwasserpegels 3979 wurden freundlicherweise von Fischer [1997] bereitgestellt. Der Salzwassereintrag in die Seerinne erfolgte wahrscheinlich während der Wasserhaltung vor 1964 durch saline Grundwasserleiter, bis auf deren Höhe (70 - 77m NN) das entstehende Monimolimnion ursprünglich vermutlich reichte. Die Chemokline senkte sich bis heute ab. Ende 1996 lag sie bei 65,2m NN. Das Monimolimnion ist demnach bei einem Seegrund in 62,8 m NN (s. Abschnitt 2.1) etwa nur noch 2,4 Meter mächtig. Abbildung 2.12 zeigt die Lage der Chemokline für die Jahre 1992 - 1996. Für die Jahre 1992 bis 1994 wurden Leitfähigkeitsprofile im Vorfeld des vorliegenden Projektberichts ausgewertet. Eine Aussage über den mittleren Trend der Chemoklinenabsenkung läßt sich durch Anfiten einer linearen Regressionsgeraden an die Zeitserie erhalten. Die mittlere Absenkung beträgt 34 ± 2 cm pro Jahr. Bei einer gleichbleibenden Absenkungsrate wäre demnach in

$7 \pm 0,5$ Jahren der Grund erreicht. Die Absenkung läßt sich vollständig auf ein zyklisches Zusammenwirken von molekular-diffusive Verbreiterung der Chemokline im Sommer und darauffolgender Erosion während des Winters zurückführen (Kapitel 2.2.1).

Die beobachtete Chemoklinenabsenkung könnte einen Hinweis auf die Entstehung des Monimolimnions geben. Nimmt man an, daß bei der Wasserhaltung während der Trockenaus-kiesung hauptsächlich das aus dem Hauptgrundwasserleiter 15 eintretende Frischwasser abgepumpt wurde und durch die so entstehende Druckentlastung salines Wasser aus den Grundwasserleitern 92 und 98 in das Restloch einfließen und es bis auf die Höhe dieser Grundwasserleiter (75 ± 2 m NN) auffüllen konnte, so hätte eine Erosion des gebildeten Monimolimnions erst ab der Einstellung der Wasserhaltung im Jahr 1964 erfolgen können. Ab diesem Zeitpunkt hätte sich das zufließende Frischwasser des Hauptgrundwasserleiters 15 über dem gebildeten Monimolimnion einschichten müssen, durch den sich erhöhenden hydrostatischen Druck wäre der Zufluß aus den tertiären Grundwasserleitern unterbunden worden. Geht man davon aus, daß das Monimolimnion nach seiner Entstehung bis auf 75 ± 2 m NN reichte und setzt für den gesamten Zeitraum ab 1964 eine konstante Abnahmerate von 34 ± 2 cm/Jahr an, so erhält man für das Jahr 1996 eine errechnete Chemoklinenlage von $65,2 \pm 2,3$ m NN. Dies stimmt mit der beobachteten Chemoklinenlage relativ gut überein und unterstützt somit obige Hypothese über die Entstehung des Monimolimnions.

Da sich die Chemokline im vorliegenden Beobachtungszeitraum um etwa den gleichen Betrag absenkt um den sich der Seespiegel erhöht, wäre es denkbar, daß letzterer durch seinen hydrostatischen Druck Wasser aus dem Monimolimnion preßt. Daß dem nicht so ist, werden zukünftige Chemoklinenbeobachtungen bei sich nicht mehr änderndem Seespiegel zeigen. Die beobachtete Absenkung beruht nämlich auf Diffusion und Mischung. Dies läßt sich folgendermaßen abschätzen:

Eine scharfe Konzentrationskante weitet sich um $\Delta z = \sqrt{2 \cdot K_v \Delta t}$ auf. Mit $\Delta t = 1$ Jahr und $K_v = 2 \cdot 10^{-9}$ m²/s ergibt sich ein $\Delta z = 0,36$ m. Da diese Verbreiterung jeden Winter weitgehend durch konvektive Mischung abgetragen wird (Schärfung der Chemokline), ergibt sich als Resultat die beobachtete Absenkung der Chemokline, welche eigentlich eine Erosion ist.

2.5 Grundwasserankopplung

Die hydrogeologische Situation im Umfeld des Hufeisensees ist durch Locker- und Festgesteinsgrundwasserleiter unterschiedlichen Speichervolumens und Transportvermögens bestimmt. Das quartäre Deckgebirge besitzt im Untersuchungsgebiet eine Mächtigkeit von etwa 10 - 15 Metern und baut sich aus 1 - 2 Metern feinsandigem Löß, 1 - 2 Metern saaleglazialen Schmelzwassersanden und bis zu 4 Metern mächtigen Geschiebemergeln, die durch eine Zwischenschicht aus Bänderton und Schmelzwassersanden zweigeteilt sind, auf. Im Mittel liegen die Kiese und Schotter der Saalehauptterrasse 8 - 12 Meter unter Flur. Die Tertiärbasis besteht aus in seiner Mächtigkeit stark variierendem Liegendton und wird von möglicherweise klüftig ausgebildeten kaolinierten Schichten des oberen Buntsandsteins sowie den Sedimenten des Zechsteins unterlagert [Strauch et al., 1996]. Durch den

Kohlebergbau wurde im Bereich des Hufeisensees durch die Ausräumung stauender Horizonte als Abraum beziehungsweise zur Rohstoffgewinnung ein hydraulischer Kurzschluß bewirkt.

Die zwischen etwa 92m NN bis 88m NN liegenden, bis zu 4m mächtigen Schotter und Kiese der Saalehauptterrasse mit k_f -Werten von 10^{-3} bis 10^{-4} m/s bilden den quartären Hauptgrundwasserleiter 15. Aufgrund der hohen k_f -Werte stellt er für den Hufeisensee den größten Zufluß dar. Die Hauptströmrichtung des Grundwassers geht von Nordnordost nach Südsüdwest; sie kann aber im Bereich des Hufeisensees stark verändert sein [Strauch et al., 1996]. Nach Scharf et al. [1996] gelangt das anströmende Grundwasser von Nordwesten in den See.

Als weiterer Grundwasserleiter sind die Sande und Schluffe des Zwischenmittels zwischen

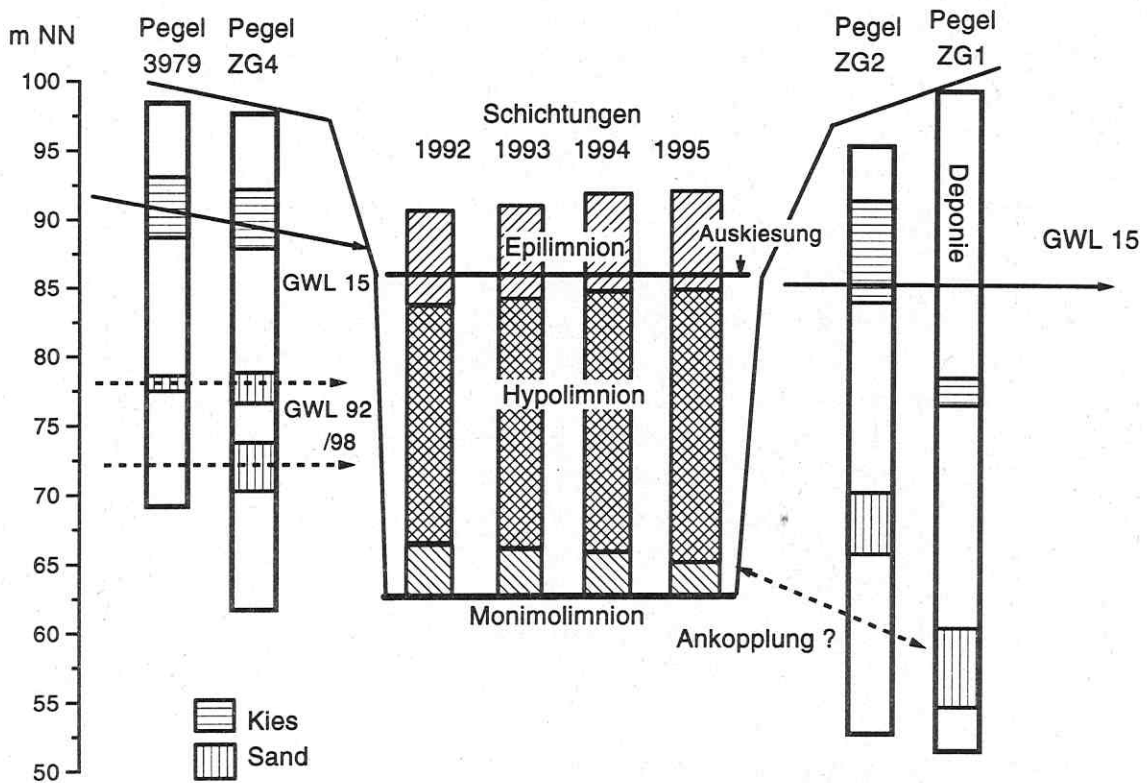


Abb. 2.13: Schematische Darstellung des hydrogeologischen Umfelds des Hufeisensees. Die Pegelbohrungen 3979, ZG4, ZG2 und ZG1 befinden sich ungefähr in der Grundwasserfließrichtung. Die Tiefe der Auskiesung ist durch eine Linie angedeutet. Für die Jahre 1992 bis 1995 sind die Schichtungsverhältnisse im Sommer mit Aufgliederung in Epilimnion, Hypolimnion und Monimolimnion eingezeichnet. Die Ankopplung des Grundwasserleiters 15 an das Epilimnion im Sommer beziehungsweise an das Mixolimnion im Winter wird deutlich. Eine eventuelle Ankopplung des Monimolimnions an die Deponie, deren hydrogeologische Verhältnisse in etwa durch den Pegel ZG1 repräsentiert werden, ist eine Fragestellung der vorliegenden Arbeit.

den beiden Flözen (GWL 92) und Sande der Tertiärbasis (GWL 98) vor [Dermietzel et al., 1995] zu nennen. Sie besitzen einen k_f -Wert von 10^{-4} bis 10^{-6} m/s und sind damit ebenso wie die Braunkohle (k_f -Wert $< 10^{-6}$ m/s) [Strauch et al., 1996] für den Hufeisensee von untergeordneter Bedeutung.

Abbildung 2.13 zeigt das hydrogeologische Umfeld des Hufeisensees anhand einiger Pegelbohrungen im Überblick. Die Pegel 3979 und ZG4 liegen im Anstromgebiet des Grundwasserleiters 15, der Pegel ZG1 im Bereich der Deponie und der Pegel ZG2 im Abstrom des Hufeisensees. In allen Pegelbohrungen mit Ausnahme des Deponiepegels ist der Grundwasserleiter 15 zu finden. Die Pegel 3979 und ZG4 zeigen bei etwa 78m NN und 70 - 74m NN (nur Pegel ZG4) wasserführende Schichten, die den Grundwasserleitern 92 und 98 zugeordnet werden können. Es ist jedoch nicht klar, ob diese Schichten durchgängige Grundwasserleiter sind oder nur kleinere Wasserlinsen darstellen [Gläßer, 1995].

Der Hauptgrundwasserleiter 15 schichtet sich entsprechend seiner Leitfähigkeit von ungefähr 2,7 mS/cm und seiner Eintrittshöhe ins Mixolimnion des Hufeisensees ein. Der saline Grundwasserleiter 98 besitzt hohe Leitfähigkeiten und könnte sich demnach im Monimolimnion einschichten. Ein Zufluß ist aber allenfalls in geringem Umfang möglich. Eine Ankopplung des Monimolimnions an unterschichtende Deponielösungen, die in Salzgehalt und Isotopenwerten ähnlich sind, ist unklar. Gläßer weist in Strauch et al. [1996] mittels geoelektrischer Verfahren einen Kontaminationspfad von Deponiewasser aus der Deponie heraus über den südlichen Teil des aufgeschütteten Damms nach. Der Pfad tangiert den See. Ein diffusiver Stoffeintrag in den See über den Damm kann demnach nicht ausgeschlossen werden. Möglicherweise ist auch das abstromseitige Vorfeld des Tagebaurestloches gefährdet.

2.6 Isotopie und Chemie

Der Hufeisensee läßt sich in zwei Wasserkörper einteilen, die eine unterschiedliche Signatur tragen. Der Wasserkörper in der Rinne nimmt nur in geringen Umfang am Transportgeschehen innerhalb des Sees teil und stellt damit sowohl von der isotopischen Signatur als auch von der hydrochemischen Charakteristik eine Besonderheit dar. Weiterhin sind die Wässer des An- und Abstroms des quartären Hauptgrundwasserleiters 15 zu betrachten, die die Isotopie und die Chemie des Sees wesentlich mitbestimmen. Tabelle 2.1 zeigt die wichtigsten Werte der aufgeführten Wasserkörper im Überblick.

Aus den Leitfähigkeitswerten läßt sich erkennen, das der Grundwasseranstrom und -abstrom sowie der See oberhalb von 24m Tiefe schwach bis mäßig salzbelastet sind. Demgegenüber enthalten die Seeschichten unterhalb 24m Tiefe hohe Salzfrachten.

Aus den Anteilen der einzelnen Kationen und Anionen läßt sich anhand der vorherrschenden Ionen der jeweilige Wassertyp bestimmen. Nach Strauch et al. [1996] werden für das Untersuchungsgebiet drei Grundtypen gefunden.

- X-Y-SO₄-Typ (X = Ca, Mg; Y = Mg, Na, Ca)
- NaSO₄-Typ
- NaCl-Typ

	Hufeisensee		Hauptgrundwasserleiter 15	
	Mixolimnion	Monimolimnion	Anstrom	Abstrom
Leitfähigkeit κ_{25} [mS/cm]	2,5 – 2,9	23,0 – 29,7	2,0 – 7,3	2,2 – 4,3
pH-Wert	7,7	6,8	6,1 – 7,1	6,6 – 7,0
Tritium [TU]	17 – 23	0 – 5	30 – 35	–
$\delta^{18}\text{O}$ [‰]	-3,1 – -4,4 ¹⁾	-8,0 – -8,5	-8,6 – -8,8	-8,3 – -8,9
δD [‰]	-32 – -38 ¹⁾	-63 – -58	-63,3 – -65,7	-62,3 – -65,1
O ₂ [mg/l]	2 – 13	0	–	–
Wassertyp (vorherrschende Ionen)	Ca-Mg-SO ₄ ²⁾ Na-Ca-SO ₄ -HCO ₃	Na-Cl ²⁾	Ca-Mg-SO ₄ -HCO ₃ , Ca-Na-SO ₄ , Ca-Na-SO ₄ -HCO ₃	

¹⁾ Diese Werte werden im Jahresgang durch Verdunstung und Regen verändert

²⁾ Eine Tabelle der Ionenanalysen des Seewassers befindet sich im Anhang B

Tab. 2.1: Zusammenfassung der Wasseranalysen des Hufeisensees und des Hauptgrundwasserleiters 15

Der See oberhalb von 24m Tiefe ist durch den Wassertyp Ca-Mg-SO₄ beziehungsweise Na-Ca-SO₄-HCO₃ dominiert. Der quartäre Hauptgrundwasserleiter weist sowohl im Anstrom als auch im Abstrom verschiedene Wassertypen auf. Es treten im Anstrom Ca-Mg-SO₄-HCO₃ und Na-Cl-SO₄ dominierte Wässer auf, im Abstrom sind Ca-Mg-SO₄-HCO₃, Ca-Na-SO₄-HCO₃, Ca-Na-SO₄ - Wassertypen und die im See vorherrschenden Wässer des oben aufgeführten Typs zu finden. Nach Strauch et al. [1996] passt sich das Seewasser (im Bereich oberhalb von 24m Tiefe) hydrochemisch in das Quartär - Wasserfeld ohne nennenswerte Unterschiede ein.

Das Wasser des Monimolimnions weist demgegenüber einen hohen Chloridanteil (8g/l) auf und ist dem Wassertyp Na-Cl zuzuordnen. Das hohe Salinar-Verhältnis Cl/SO₄ (Chlorid-Vormacht) wird auf die Sulfatreduktion im anaeroben Mileu zurückgeführt [Dermietzel et al., 1995]. Andererseits weist der tertiäre Grundwasserleiter 98 ähnlich hohe Salinarverhältnisse auf und könnte damit als Ursprung des Monimolimnionwassers in Frage kommen.

Die Werte für die stabilen Isotope ¹⁸O und Deuterium im Mixolimnion des Hufeisensees sind stark durch Verdunstungsprozesse bestimmt. Das Seewasser im Epilimnion wird durch Eindampfungseffekte während der thermischen Schichtungsphase isotopisch schwerer (siehe auch Kapitel 5.4.5 und 6.8). Die winterliche Vollzirkulation führt zur Durchmischung des Mixolimnions und damit zur Einstellung eines Mischwertes der Isotopenwerte. Im Monimolimnion liegen die Verhältnisse grundlegend anders. Die ¹⁸O und Deuterium-Werte entsprechen eher dem der Grundwässer. Die Isotopenwerte zeigen in den einzelnen Tiefen eine zeitliche Konstanz (siehe auch Abschnitt 4.4) und deuten damit auf einen stationären Zustand hin, da das Monimolimnion nicht an der winterlichen Vollzirkulation teilnimmt und somit ein Austausch nur über die Chemokline hinweg beziehungsweise durch Zufluß von Grundwasser möglich ist. Strauch et al. [1996] bezeichnen aufgrund

der Isotopensignaturen und des Chemismus den Wasserkörper des Monimolimnions als ein Mischwasser aus aufsteigendem salinen Grundwässern des Buntsandstein- und Zechsteinaquifers und Wässern des tertiären beziehungsweise älteren Zuflüssen des quartären Grundwasserleiters. Dabei stammen höchstwahrscheinlich mindestens 75% des Rinnenwassers aus einem Bildungszeitraum vor 1955 [Strauch et al., 1996].

Die tieferliegenden salinen Grundwasserleiter unterscheiden sich in ihrer Signatur vom Hauptgrundwasserleiter 15. Insbesondere die Tritiumwerte und die Leitfähigkeit zeigen erhebliche Abweichungen. Es sind Salzgehalte entsprechend den Leitfähigkeitswerten von 32 - 40 mS/cm zu finden. Während der Grundwasserleiter 15 Tritiumwerte von 30 - 35 TU aufweist, was deutlich die heutigen Werte im Niederschlag übersteigt, sind in den salinen Grundwasserleitern Tritiumwerte von < 1 TU zu finden. Diese Wässer stammen damit aus der "Vorbombenzeit" vor 1960. Die Wässer des Grundwasserleiters 15 enthalten zudem einen bedeutenden Anteil Wasser aus den 60er bis 70er Jahren [Strauch et al., 1996].

Kapitel 3

SF₆-Tracerexperiment im Monimolimnion

Im Rahmen dieser Arbeit sollen die Transport- und Austauschprozesse im Monimolimnion des Hufeisensees untersucht werden. Insbesondere sind der Austausch über die Chemo- kline und die Erkennung einer eventuellen Grundwasserspülung von Interesse. Natürliche Tracer wie die Temperatur und die Leitfähigkeit eignen sich zu einer solchen Unters- suchung nur eingeschränkt, da beispielsweise das System schon im Gleichgewichtszustand sein kann und somit keine Änderungen mehr feststellbar wären. Aus diesem Grund wurde der künstliche Tracer Schwefelhexafluorid (SF₆) eingesetzt, der eine geringe Hintergrund- konzentration besitzt und in geringsten Mengen nachweisbar ist. Somit ist schon mit einer geringen Einbringmenge eine hoher Konzentrationsgradient zwischen Monimolimnion und Hypolimnion zu erreichen. Da SF₆ in Gewässern keine natürlichen Quellen oder Senken besitzt, kann auch eine Spülung mit Grundwasser erkannt werden.

In diesem Kapitel sollen zunächst die Eigenschaften von SF₆, das Einbringen der SF₆- Markierung sowie die Probenahmetechnik und die Konzentrationsbestimmung beschrie- ben werden. Weiterhin werden die Ergebnisse der Probenahmen und die Ausbreitung der SF₆-Markierung vorgestellt.

3.1 Physikalische Eigenschaften von SF₆

Schwefelhexafluorid (SF₆) ist ein ungiftiges Gas, dessen Quellen anthropogen sind und von industriellen Anwendungen stammen. Es ist thermisch sehr stabil (bis 800°C) und besitzt eine hohe elektrische Durchschlagsfestigkeit. Dies macht es zum geeigneten Schutzgas in elektrischen Hochspannungsanlagen. SF₆ ist chemisch und biologisch inert und läßt sich mit einem Elektronen-Einfang-Detektor (ECD) noch in geringsten Konzentrationen nach- weisen. Stoffmengen von 0,05 fmol ($f = \text{''femto''} = 10^{-15}$) lassen sich noch auf etwa 10% genau nachweisen. In von der Atmosphäre abgeschlossenen Gewässern besitzt SF₆ keine biologischen oder chemischen Quellen oder Senken, es zeigt also konservatives Verhalten. Damit wird es zum idealen Tracer für aquatische Mischungsprozesse, wobei es aufgrund seiner gesundheitlichen Unbedenklichkeit auch in Gewässern, die zur Trinkwassergewin- nung genutzt werden, für Ausbreitungsexperimente eingesetzt werden kann [Maiss et al.,

1994a, 1994b].

Die mittlere atmosphärische Background-Konzentration der Nordhemisphäre lag nach Maiss et al. [1996] Ende 1994 bei 3,4 ppt (parts per trillion, $1:10^{12}$) mit einem jährlichen Anstieg von 6,9% durch den anthropogenen Eintrag, was für 1996 einen mittleren Wert von 3,8 ppt ergibt. Die geringe Löslichkeit von SF_6 im Wasser (Ostwaldsche Löslichkeit $< 0,01$ für $T > 10^\circ\text{C}$) bewirkt im aquatischen Bereich eine noch geringere Background-Konzentration. Dadurch sind nur geringe Tracermengen nötig, um eine Markierung zu erzeugen, die sich deutlich vom Background abhebt (zur Backgroundkonzentration im Hufeisensee siehe Kapitel 3.5.1).

3.1.1 Löslichkeit

Die Berechnung der SF_6 -Konzentration einer Wasserprobe erfordert die Kenntnis der Löslichkeit von SF_6 . Diese ist sowohl von der Temperatur als auch vom Salzgehalt des Wassers abhängig. Allgemein wird das Lösungsgleichgewicht zwischen der Gas- und Wasserphase einer Substanz durch die Ostwaldsche Löslichkeit α als dimensionsloses Verhältnis

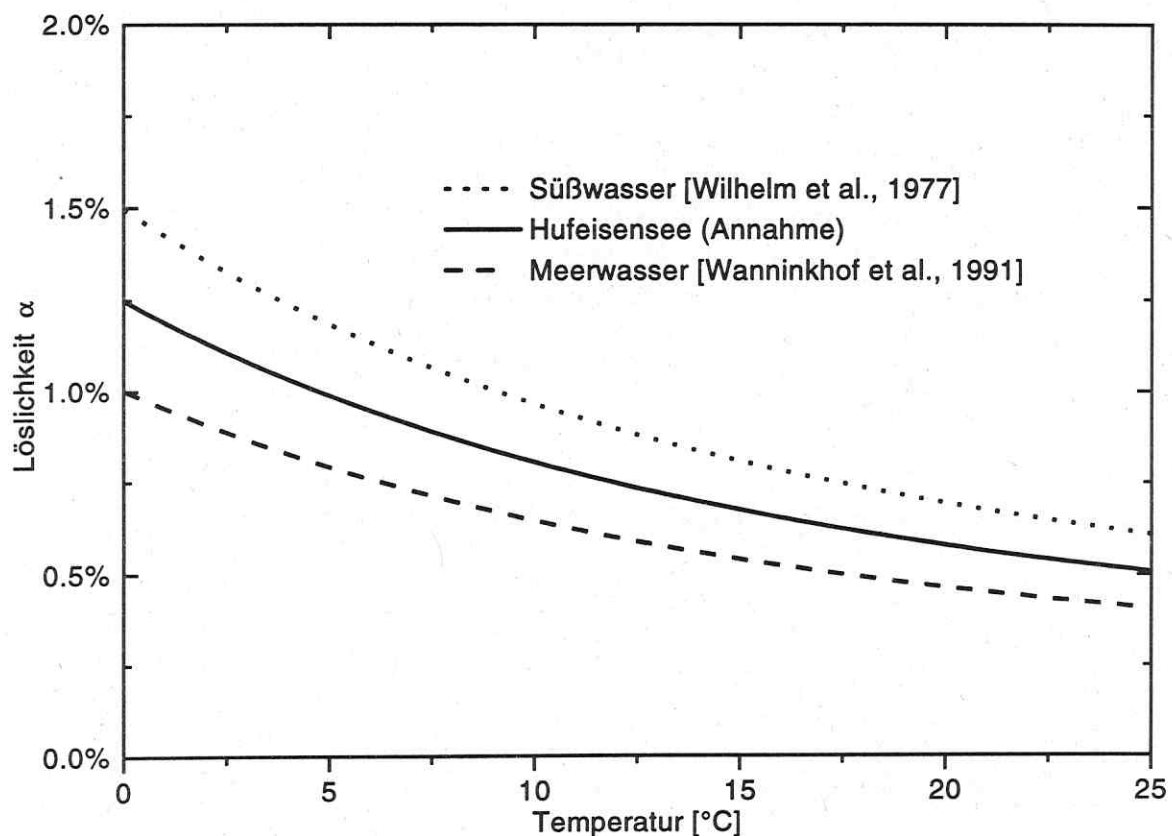


Abb. 3.1: Ostwaldsche Löslichkeit von SF_6 als Funktion der Wassertemperatur. Für das Monimolimnion des Hufeisensees wird das Mittel der Löslichkeit in Süß- und Meerwasser verwendet.

nis

$$\alpha = \frac{C_W}{C_G} \quad [-] \quad (3.1)$$

ausgedrückt. C_G und C_W sind dabei die Konzentrationen der Substanz im Gas beziehungsweise im Wasser. Ist C_G eine molare Konzentration, so kann sie mit dem Partialdruck der Substanz in Verbindung gesetzt werden

$$C_G = \frac{m}{V} = \frac{p}{RT} \quad [\text{mol m}^{-3}] \quad (3.2)$$

V	Volumen [m ³]
p	Partialdruck [Pa]
R	Gaskonstante: 8,314 J mol ⁻¹ K ⁻¹
T	Absolute Temperatur [K]
m	Molbruch der Substanz [-]

Damit wird die Konzentration im Wasser

$$C_W = \alpha \frac{p}{RT} \quad [\text{mol m}^{-3}] \quad (3.3)$$

Wilhelm et al. [1977] geben für Süßwasser eine Formel für die Ostwaldsche Löslichkeit α von SF₆ in Abhängigkeit von der absoluten Temperatur T [K] an (gültig für den Bereich 276 K bis 323 K):

$$\alpha_{\text{Süßwasser}} = e^{(63,91417 \cdot \ln(T) + \frac{21161,8}{T} - 440,255)} \quad [-] \quad (3.4)$$

Wanninkhof et al. [1991] ermittelten die Ostwaldsche Löslichkeit für Meerwasser, indem die Löslichkeit für Süßwasser und für Meerwasser bei 21°C gemessen und durch Vergleich neue Koeffizienten für die Formel nach Wilhelm et al. [1977] ermittelt wurden. Dies ergibt folgende Beziehung, die für einen Salzgehalt von 35 g/l gilt:

$$\alpha_{\text{Meerwasser}} = e^{(63,918 \cdot \ln(T) + \frac{21163}{T} - 440,663)} \quad [-] \quad (3.5)$$

Das Wasser des Monimolimnions des Hufeisensees besitzt jedoch nur einen Salzgehalt von etwa 18 g/l, weder Formel 3.4 noch Formel 3.5 sind deshalb gültig. Die Löslichkeit von SF₆ im Monimolimnionwasser wird deshalb als Mittelwert aus dem Süß- und dem Meerwasserwert angenommen. Abbildung 3.1 zeigt den Verlauf der Ostwaldschen Löslichkeiten für die verschiedenen Wässer in Abhängigkeit von der Temperatur.

3.1.2 Molekulare Diffusion

Der molekulare Diffusionskoeffizient von SF₆ ist ebenfalls von der Temperatur abhängig. King und Saltzman [1995] geben für reines Wasser und für eine NaCl-Lösung mit einem Salzgehalt von 35 g/l Beziehungen für die Abhängigkeit des molekularen Diffusionskoeffizienten von der Temperatur an (Abbildung 3.2). Es wurden jeweils die Diffusionskonstanten für 5°C, 15°C und 25°C gemessen und eine Beziehung der Form

$$D = A \cdot e^{\frac{-E}{RT}} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (3.6)$$

- A experimentell zu bestimmender Parameter [m^2/s]
 E experimentell zu bestimmender Parameter [J/mol]
 R Gaskonstante: $8,314 J mol^{-1} K^{-1}$
 T Absolute Temperatur [K]

an diese Werte angepasst.

Für reines Wasser ist $E = 19,3 kJ/mol$ und $A = 2,9 \cdot 10^{-6} m^2/s$, während für die NaCl-Lösung $E = 18,7 kJ/mol$ und $A = 2,2 \cdot 10^{-6} m^2/s$ gilt. Da die relativen Fehler für diese Angaben aber 3,5% für reines Wasser beziehungsweise 14% für die Salzlösung betragen, lassen sich die gemessenen Diffusionskoeffizienten für die Salzlösung im Rahmen der Fehler nicht von denen für reines Wasser unterscheiden. Dementsprechend ist bei der mit der Tiefe zunehmenden Salinität im Monimolimnion des Hufeisensees nicht mit einer Änderung der molekularen Diffusionskonstanten von SF_6 zu rechnen.

Während die Temperaturen im bodennahen Bereich nahezu konstant bei ungefähr $7^\circ C$ bleiben, schwanken sie im oberen Teil des Monimolimnions im Verlauf eines Jahres zwischen $1^\circ C$ und $8^\circ C$. Damit ändern sich die Diffusionskoeffizienten im oberen Monimolimnion zwischen $6,1 \cdot 10^{-10} m^2/s$ und $7,6 \cdot 10^{-10} m^2/s$ und unterscheiden sich vom unteren Teil

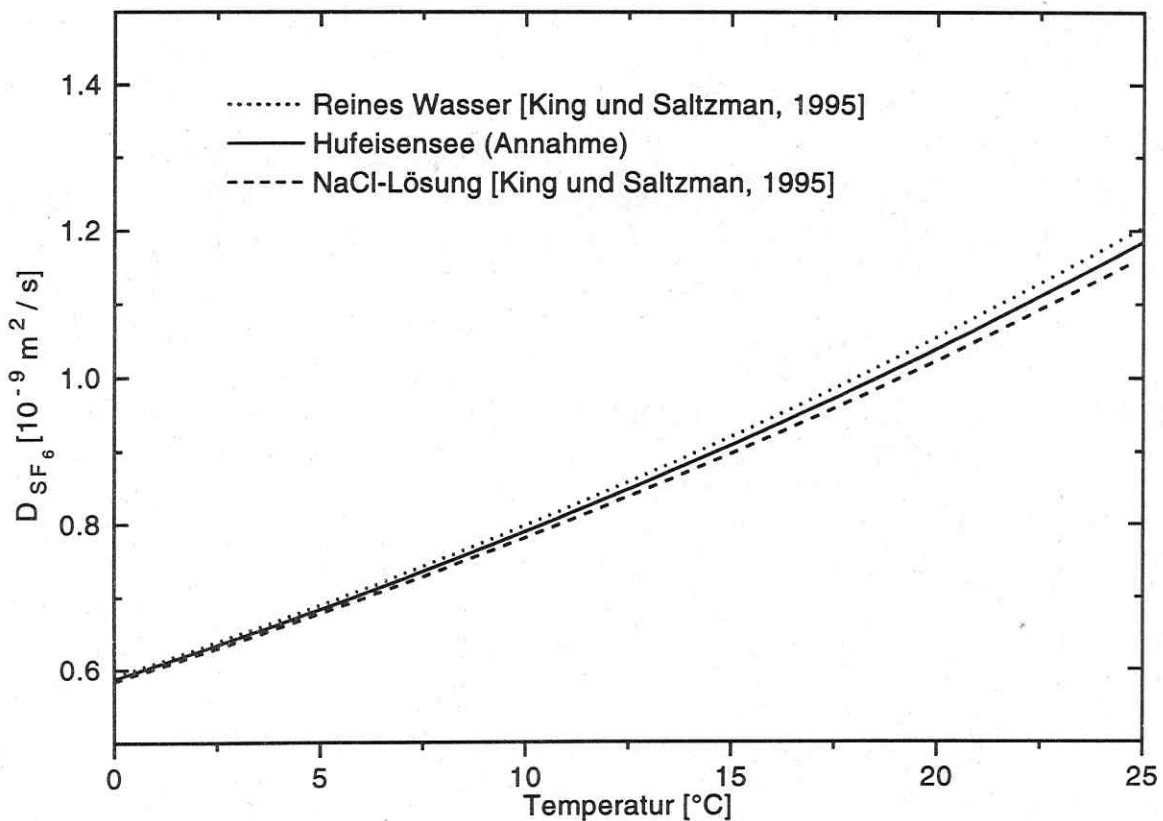


Abb. 3.2: Molekulare Diffusionskoeffizienten von SF_6 als Funktion der Wassertemperatur. Die Relationen für Salzwasser und reines Wasser sind im Rahmen der Fehler gleich.

des Monimolimnions um bis zu 20%.

3.2 Einbringen der SF₆-Markierung

Die Schwefelhexafluorid-Markierung wurde am 27.10.1994 in das Monimolimnion des Hufeisensees gesetzt. In Zimmermann [1995] wird eine genauere Beschreibung des Einbringens gegeben. Hier soll eine kurze Darstellung der Einbringtechnik sowie der Ermittlung der tatsächlich eingebrachten Tracermenge erfolgen.

3.2.1 Einbringtechnik

Die Einbringtechnik mußte zwei Bedingungen genügen:

- Zum Studium der vertikalen Mischungsprozesse muß der Tracer in einem definierten engen Tiefenbereich eingebracht werden
- Oberhalb der Chemokline soll die Background-Konzentration nicht durch versehentlich eingebrachte Tracermengen erhöht werden.

Diese Bedingungen werden durch eine punktuelle Zufuhr des Tracers in das Monimolimnion erfüllt. Dies läßt sich dadurch erreichen, daß der Tracer in Wasser gelöst wird, welches dann in einer entsprechenden Tiefe in den See eingebracht wird. Damit sich das Wasser in der gewünschten Tiefe, auf jedem Fall aber unterhalb der Chemokline einschichtet, muß durch eine Aufsalzung eine dem Monimolimnionwasser entsprechende Dichte eingestellt werden. Eine Zugabe von 30g/l NaCl erhöht die Dichte weit über die des Monimolimnions (≈ 18 g/l) und sollte auch einen Dichteunterschied aufgrund der Temperaturdifferenz (etwa 5°C, das entspricht ungefähr einem Dichteunterschied von 1 g/l) zwischen Oberflächen- und Tiefenwasser überkompensieren. Das eingebrachte Wasser sollte daher auf den Grund absinken.

Die horizontale Diffusion ist im Vergleich zur vertikalen Diffusion um einige Zehnerpotenzen größer, da in der Horizontalen keine austauschhemmende Dichteschichtung auftritt. Insbesondere für das Monimolimnion des Hufeisensees kann aufgrund seiner geringen Abmessungen (etwa 200 mal 50 Meter) davon ausgegangen werden, daß sich ein punktuell eingebrachter Tracer über wenige Tage hinweg horizontal verteilt. Aufgrund der zu erwartenden horizontalen Homogenität der SF₆-Verteilung im Monimolimnion sollte bei späteren Messungen eine rein vertikale Betrachtung der Ausbreitung genügen. Für die maximal in das Monimolimnion einzubringende Menge SF₆ bestand die Bedingung, daß bei einer späteren Probennahme und Messung der Linearitätsbereich des Gaschromatographen (0 - 10 fmol) nicht überschritten werden sollte. Dies führt für die damals vorgesehene Probennahmetechnik auf eine maximal einzubringende Menge von 20 - 25 μmol SF₆. Diese Menge sollte in einer kleinen Menge Wasser, die dann in den See eingebracht wird, gelöst werden. Zu diesem Zweck wurde ein Gasgemisch aus 1% SF₆ und 99% N₂ (Volumenprozent) 20 min lang durch eine Glasfritte in einen offenen Tank mit 20l Wasser eingeleitet. Nach Gleichung 3.3 stellt sich im Lösungsgleichgewicht im Wasser (für $p = 1013$ Pa; $T = 10^\circ\text{C}$) eine Konzentration von $\approx 4 \cdot 10^{-6} \frac{\text{mol}}{\text{l}}$ ein. Geht man davon aus, daß in 20 min dieses

Gleichgewicht höchstens zu 50% erreicht wird, so müssen 10 l des angereicherten Wassers in den See eingeleitet werden, um die oben angegebene SF_6 -Menge einzubringen.

Abbildung 3.3 zeigt den experimentellen Aufbau beim Einbringen des Tracers. Die Arbeitsplattform wurde über der tiefsten Stelle des Sees verankert und ein Schlauch auf etwa 64m NN (1,5m über Grund) mit Gewichten fixiert. In Tank 1, 2 und 3 befanden sich mit 30g/l NaCl versehenes Oberflächenwasser. Das Wasser in Tank 2 wurde in der oben beschriebenen Weise mit SF_6 angereichert und mit Kaliumpermanganat versetzt, um beim Einbringen eine optische Kontrolle zu gewährleisten. Der Einbringvorgang ging folgendermaßen vor sich : Aus Tank 1 wurden zuerst etwa 20 l Salzwasser zur Durchspülung durch den Schlauch in den See abgelassen, danach ohne Belüftung des Schlauches Tank 2 mit dem SF_6 -haltigen Wasser angekoppelt und etwa 10 l eingebracht. Sodann wurde mit 20 l Wasser aus Tank 3 der Schlauch vollständig freigespült. Die SF_6 -Konzentration in dem eingebrachten Wasser sollte am Gaschromatograph nachgemessen werden, zu diesem Zweck wurden zu Beginn, in der Mitte und am Ende des Einbringens über einen Drei-Wege-Hahn drei Glasspritzen (Volumen ca. 100 ml) mit Wasser aus Tank 2 befüllt.

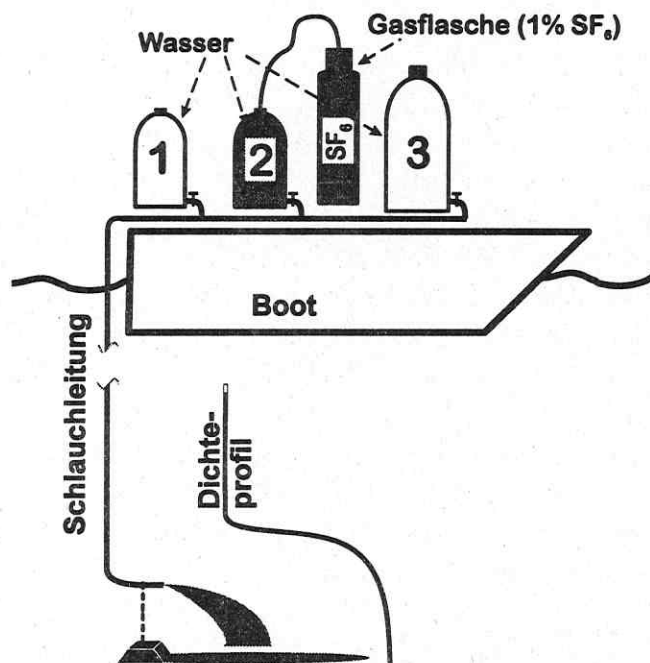


Abb. 3.3: Experimenteller Aufbau beim Einbringen des Tracers am 27.10.94. In den nummerierten Behältern befindet sich mit 30 g/l NaCl angereichertes Wasser, wobei Behälter 1 Wasser zum Vorspülen enthält, Behälter 3 Wasser zum Nachspülen und Behälter 2 mit SF_6 angereichertes Wasser für das Setzen der Markierung. Der Schlauch ist 1,5m über Grund verankert.

3.2.2 Tatsächlich eingebrachte Tracermenge

Die tatsächlich eingebrachte SF₆-Menge ergibt sich aus der Konzentration und dem Volumen des eingebrachten angereicherten Wassers. Die Masse wurde bereits auf dem See durch Wägung des Wasserbehälters 2 vor und nach dem Einleiten des Tracers bestimmt. Nach Umrechnung über die Dichte ergibt sich ein Volumen von $9,8 \pm 0,2$ Liter.

Die SF₆-Konzentration wurde in Heidelberg am Gaschromatographen gemessen. Aufgrund der sehr hohen Konzentration mußten die Proben verdünnt werden, da sonst der Linearitätsbereich des Gaschromatographen überschritten worden wäre. Hierzu wurde gemäß Abbildung 3.4 aus der Probenspritze ein Volumen V_1 der Konzentration c_w mit Wasser des Volumens V_A der Flasche A vermischt, dieser ein Volumen V_2 der Konzentration c_A entnommen und mit dem Wasser der zweiten Flasche des Volumens V_B vermischt. Die Konzentration c_B des Wassers in der Flasche B wurde am Gaschromatograph gemessen. Die ursprüngliche Konzentration c_w ergibt sich aus einer Bilanzrechnung. Nimmt man dabei an, daß das zugegebene beziehungsweise entnommene Volumen V_1 und V_2 die Wassermenge in der Flasche nicht verändert, so ergibt sich für

$$\text{Flasche A: } c_A V_A = c_w V_1 + c_0 V_A \quad (3.7)$$

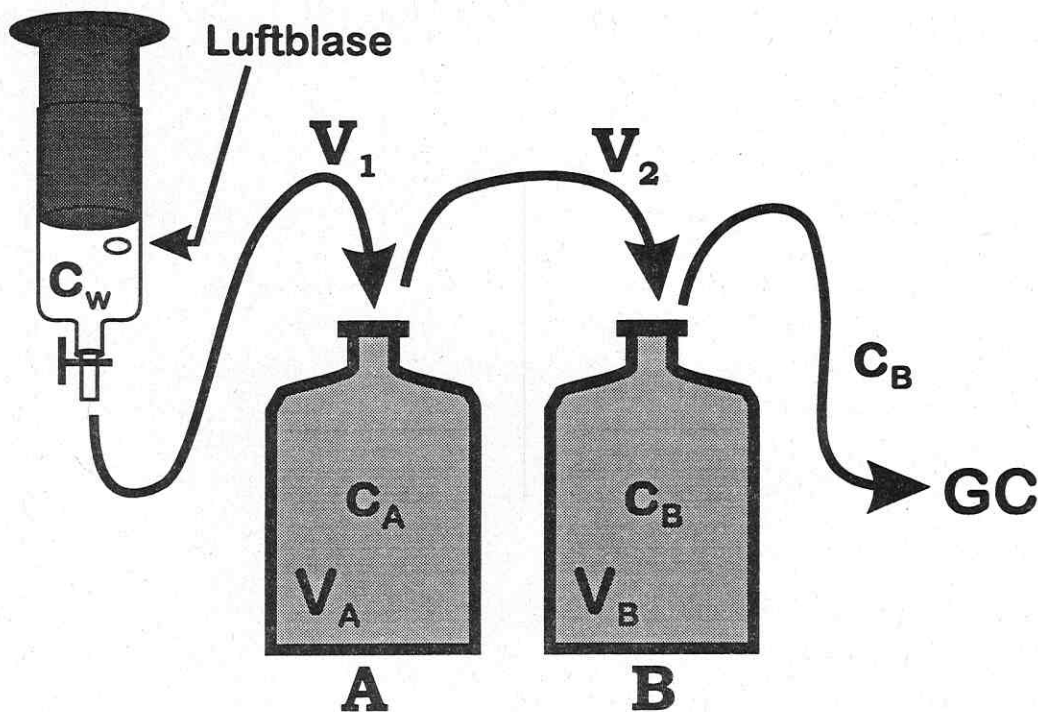


Abb. 3.4: Zur Messung der Konzentration des mit SF₆ angereicherten eingebrachten Wassers sind mehrere Verdünnungsschritte erforderlich. c_w ist die Konzentration in der Probenspritze, c_A , c_B , V_A und V_B sind die Konzentrationen und Volumina der Flaschen A und B, V_1 und V_2 die im ersten und zweiten Verdünnungsschritt den Flaschen entnommene Volumina. GC bedeutet Gaschromatograph.

$$\text{Flasche B: } c_B V_B = c_A V_2 + c_0 V_B \quad (3.8)$$

und damit für die Konzentration c_w

$$c_w = \frac{(c_B - c_0) V_A V_B}{V_1 V_2} - \frac{c_0 V_A}{V_1} \quad [\text{fmol/l}] \quad (3.9)$$

Dabei ist c_0 die Hintergrundkonzentration des Wassers der Flaschen A und B. Sie betrug $3,05 \pm 0,02$ fmol/l. Die Volumina der Flasche wurden gravimetrisch zu $V_A = 5344$ ml und $V_B = 5357$ ml bestimmt. Als Mittelwert aus den drei Probenspritzen wurde eine Konzentration von $\bar{c}_w = 1,79 \pm 0,10$ $\mu\text{mol/l}$ ermittelt. Der Fehler ist die Standardabweichung der drei Einzelmessungen.

Auf dem Transport hatten sich durch Entgasung Luftblasen in den Glasspritzen gebildet und es waren etwa 30 ml des Probenwassers zwischen dem Stempel und der Glaswand der Spritze ausgetreten. Bei einer Abschätzung der dadurch entstandenen Konzentrationsveränderung wird davon ausgegangen, daß die Luftblasen entstanden waren, bevor Wasser aus der Spritze austrat. Die ursprüngliche Konzentration c_u des markierten Wassers läßt sich dann errechnen zu

$$c_u = 1,11 \bar{c}_w = 2,0 \pm 0,2 \mu\text{mol/l} \quad (3.10)$$

Damit ergibt sich eine eingebrachte Gesamtmenge von $m = V \cdot c_u = 9,8 \text{ l} \cdot 2,0 \mu\text{mol/l}$, also $19,4 \pm 1,8 \mu\text{mol}$ bzw. $2,8 \text{ mg SF}_6$.

3.3 Probennahmetechnik

Die Probennahme auf dem Hufeisensee wurde von einem Boot des örtlichen Wasserskiver eins aus durchgeführt. An der tiefsten Stelle des Sees, die durch eine Boje markiert war, wurde das Boot mittels zweier Anker positioniert. Durch Winddruck konnte die Position des Bootes sich aber im Tagesverlauf um bis zu 20 - 30m ändern. Dies führte dazu, daß letztendlich die Position über exakt der tiefsten Stelle des Sees nicht immer beibehalten wurde, da der tiefste Bereich des Hufeisensees in Form einer Rinne ausgebildet ist. Diese ist relativ schmal, so daß ein Abtreiben an den Rand der Rinne und damit in Bereiche geringerer Tiefe führt.

3.3.1 Fördertechnik

Die Wasserproben werden mittels einer Pegelpumpe des Typs MP 1 (Grundfos, Wahlsted) genommen, die von einem Frequenzumrichter BTI/MP1 gesteuert wird. Dazu wird, wie in Abbildung 3.5 dargestellt, die Pumpe mittels eines Rohrgestänges auf die gewünschte Tiefe gebracht. Das Rohrgestänge dient zugleich als Steigleitung für das geförderte Wasser. Am oberen Ende des Rohres wird ein Schlauch angeschlossen, der einen Spülausgang mit Absperrventil und einen Ausgang mit Dreiwegehahn zum Abfüllen der Proben besitzt. In jeder Tiefe wird die Rohrleitung etwa 5 Minuten lang durchspült. Bei einer Pumpleistung von etwa 10 l/min (was einer Pumpfrequenz von 200 - 250 Hz entspricht) und einem

Rohrvolumen von etwa 10 l (entsprechend der maximalen Rohrlänge von 30m), wird die Steigleitung somit etwa 5 mal durchspült. Dies gewährleistet, daß beim Wechseln der Meßtiefe Wasser der vorherigen Meßtiefe, welches sich noch im Rohr befindet, ausgespült wird. Zum Abfüllen der Probe wird der Spülausgang geschlossen, der Probenbehälter angekoppelt und befüllt, wobei darauf geachtet wird, daß sich keine Luftblase im Ventil befindet.

Die Pumpe arbeitet als Druckpumpe und erzeugt daher sowohl während des Spülens als auch während des Abfüllens einen Pumpendruck im Schlauch. Da das Wasser des Monimolmnions hohe Mengen an gelösten Gasen (CH_4 , CO_2 , H_2S) enthält und in 27 - 29 m Wassertiefe sich unter einem Druck von 2,6 - 2,8 bar befindet, würde es bei Druckentlastung spontan ausgasen. Dabei würde das gelöste SF_6 hauptsächlich in die Gasphase übergehen, was auch für Luftblasen im Rohr oder in der Schlauchleitung gilt. Dies könnte das Meßergebnis stark verfälschen. Daher ist die Aufrechterhaltung des Pumpdrucks, der die Ausgasung verhindert, zwingend notwendig. Die Bildung von Gasblasen kann im Bereich des Schlauches, der aus Klarsichtmaterial besteht, kontrolliert und der Pumpdruck dementsprechend eingestellt werden.

Probennahmetiefen An den ersten beiden Meßterminen (7.12.94 und 19.1.95) wurden drei Tiefen im Monimolmnion beprobt. Dies erwies sich als nicht ausreichend, woraufhin bis zum 18.7.95 monatlich Vertikalprofile mit 20cm Tiefenauflösung genommen wurden. Nach diesem Datum wurden die Probennahmen in größeren Zeitabständen durchgeführt, wobei jeweils die am 12.10.95 beprobten Tiefen wieder einzustellen versucht wurden. Dazu wurde für jede Tiefe die Höhe der Meßkante, das ist der Abstand zwischen Wasser und Bezugskante (siehe auch Abbildung 3.5), nachgemessen und die einzustellende Rohrlänge

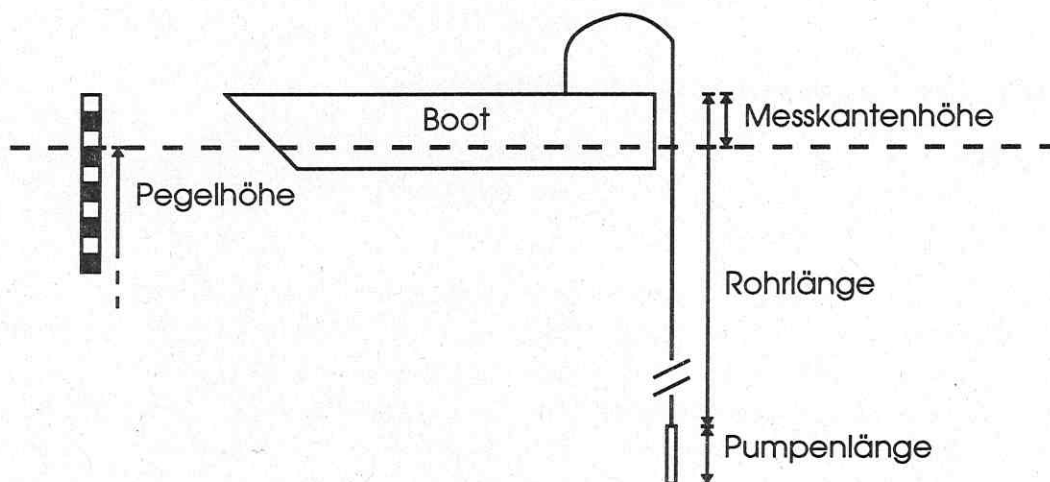


Abb. 3.5: Aufbau zur Probennahme und Bestimmung der Meßtiefe. Für jede Tiefe wurde die Höhe der Meßkante bestimmt und mit der Pegelhöhe die jeweilige Rohrlänge berechnet, um die vorgebene Meßtiefe (in m NN) zu erreichen.

gemäß

$$\text{Rohrlänge} = \text{Pegelhöhe} + \text{Meßkantenhöhe} - \text{Meßhöhe} + \text{Pumpenlänge} \quad [\text{m}] \quad (3.11)$$

errechnet. Die Länge der Pumpe wird dabei so angenommen, als ob das Wasser aus einem Bereich von 5cm unterhalb der Eintrittsöffnung angesaugt wird.

Die Meßhöhen werden dabei in m NN ausgedrückt und sind

65,52m NN	64,67m NN	63,86m NN	63,06m NN
65,30m NN	64,47m NN	63,66m NN	
65,09m NN	64,26m NN	63,46m NN	
64,89m NN	64,05m NN	63,26m NN	

An drei Tagen wurden zudem noch weitere Tiefen dicht über der Chemokline und im Hypolimnion beprobt. Dies waren am

12.9.95:	66,07m NN	11.10.95:	67,07m NN	30.9.96:	76,44m NN
	65,97m NN		67,11m NN		73,54m NN
	65,87m NN		66,61m NN		71,54m NN
	65,77m NN		66,11m NN		69,54m NN
	65,67m NN		65,91m NN		68,54m NN
	65,57m NN		65,81m NN		67,54m NN
	65,47m NN		65,71m NN		66,54m NN
	65,37m NN		65,61m NN		66,06m NN
			65,51m NN		65,66m NN
			65,36m NN		65,46m NN
					65,28m NN

Folgende Tiefenfehler können bei der Probennahme auftreten:

- Schwankungen des Bootes durch Wellen. Insbesondere bei stärkerem Wind kann die Arbeitsplattform um einige Zentimeter schwanken, wodurch Fehler von bis zu ± 5 cm auftreten können.
- Ungleiche Gewichtsverteilung und unterschiedlicher Beladungszustand des Bootes. Da das Boot lediglich eine Größe von etwa 2 mal 3 Meter besitzt, macht sich eine Gewichtsverlagerung oder ein unterschiedlicher Beladungszustand deutlich bemerkbar, es können dadurch ebenfalls Höhenänderungen von ± 5 cm auftreten. Dieser Fehler wurde durch Einmessen der Rohrlänge für jede Tiefe wie oben beschrieben und Beibehalten der Gewichtsverteilung während der Probennahme versucht zu minimieren.
- Unbekannte Ansaugcharakteristik der Pumpe. Die Pumpe MP 1 ist für Grundwasserpegel konstruiert und entwickelt im Freiwasser eine unbekannte Ansaugcharakteristik. Dadurch entsteht ein systematischer Fehler. Es wird vereinfachend angenom-

men, daß die Pumpe Wasser aus einem Bereich von 5 cm unterhalb der Eintrittsöffnung ansaugt. Da aber alle Proben mit derselben Pumpe abgefüllt werden, ist die Vergleichbarkeit der Proben und auch der Profile untereinander gewährleistet.

3.3.2 Probenbehälter

Zur Probennahme wurden zwei verschiedene Probenbehälter eingesetzt. Dies waren zum einen Waschflaschen, die Dalmolin [1993] für Grundwasserproben entwickelte und erprobte. Diese Flaschen wurden am Hufeisensee für die Probennahme oberhalb der Chemokline eingesetzt. Sie garantieren für die dortigen Konzentrationen im Bereich der Background-Konzentration eine ausreichende Meßgenauigkeit.

Für die Probennahme unterhalb der Chemokline sind die Waschflaschen aber aus verschiedenen Gründen ungeeignet. Zum einen drückt die hohe Ausgasung des Monimolimnionwassers von bis zu 5% Wasser aus der Flasche, wobei nicht bestimmt werden kann, wieviel SF_6 dabei verloren geht. Zum anderen sind die SF_6 -Konzentrationen im Monimolimnion so hoch, daß bei einer Probennahme und Konzentrationsbestimmung im Headspaceverfahren mit Waschflaschen der Linearitätsbereich des Gaschromatographen überschritten

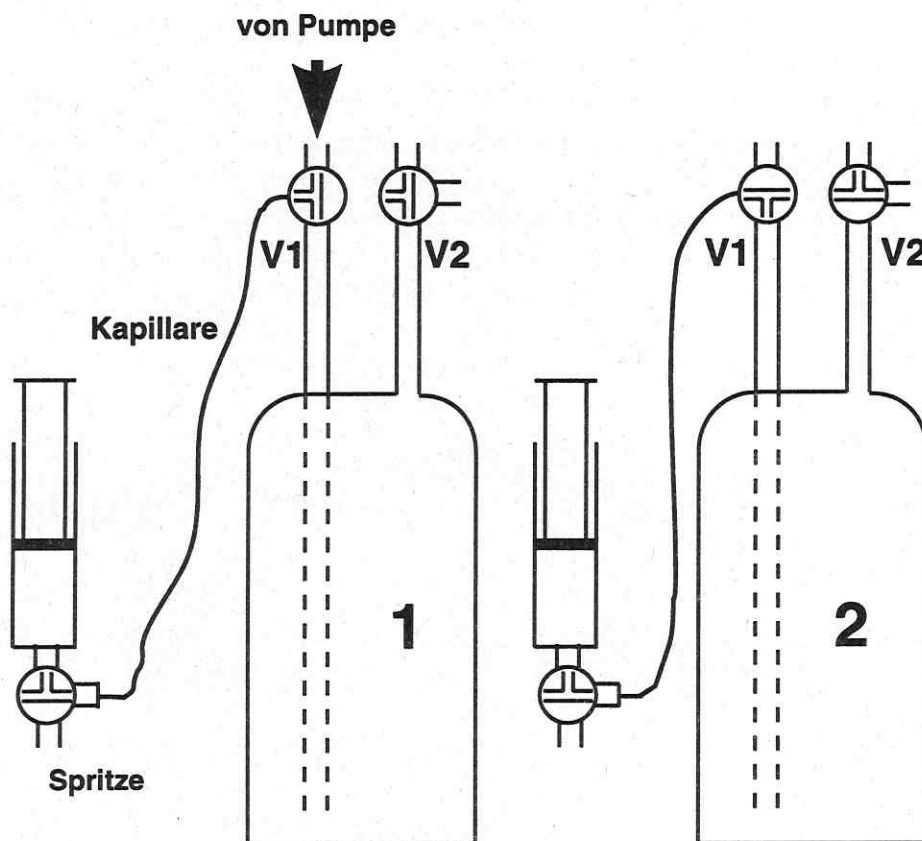


Abb. 3.6: Probennahme mit Waschflaschen. Flasche 1 zeigt die Stellung der Hähne beim Abfüllen, Flasche 2 die Stellung der Hähne für den Transport.

würde. Aus diesem Grund wurde ein Probennahmeverfahren mit Alubeuteln entwickelt, was die obengenannte Nachteile umgeht. Beide Verfahren sollen hier kurz beschrieben werden.

Waschflaschen Abbildung 3.6 zeigt den Aufbau einer Waschflasche und die Stellung der Dreiwegehähne (Luer -Lock) beim Befüllen und beim Transport. Das Volumen der Flaschen beträgt etwa 700 ml. Die Konstruktionsart der Waschflaschen gewährleistet eine vollständige Durchspülung der Flasche beim Abfüllen. Die Zuleitung wird an das Steigrohr angeschlossen (V1). Ein restloser Austausch des Flascheninhalts gegen das neue Probenwasser wird durch Spülen mit dem 3-5 fachen Volumen der Flasche erreicht. Das Wasser schichtet sich dabei von unten nach oben in die Flasche, während der alte Flascheninhalt, Luft oder Wasser, durch V2 hinausgedrückt wird. In den Zuleitungen und in dem Steigrohr dürfen sich beim Spülen und Abfüllen keine Luftblasen befinden. Durch die eingezeichnete Stellung des Dreiwegehahns V1 wird die Kapillare beim Befüllen mit gespült. Sie ist über einen Dreiwegehahn an eine Spritze angeschlossen, die vor der Probennahme mit etwas Wasser gefüllt wird. Dabei ist wiederum darauf zu achten, daß sich keine Luftblasen in der Kapillare und der Spritze befinden. Durch entsprechende Stellung des Dreiwegehahns können etwaige Luftblasen aus der Kapillare entfernt werden. Dann wird der Hahn in eine solche Stellung gedreht, daß Spritze und Flasche ein geschlossenes System bilden. An eine Spritze können mittels mehrerer Dreiwegehähne einige Flaschen angeschlossen werden. Am Ende des Abfüllens werden die Hähne an der Flasche in die Stellung gebracht, wie sie für die Flasche 2 eingezeichnet sind. Dehnt sich das kalte Wasser durch Erwärmung aus, kann ein Volumenausgleich durch die Kapillare erfolgen. Bei einer Abkühlung wird etwas Wasser aus der Spritze in die Flasche zurückgezogen. Der dadurch entstehende Fehler in der SF_6 -Konzentration wird durch diese Konstruktion möglichst gering gehalten, da eine Kontamination der Probe durch Diffusion von Außenluft in die Flasche verhindert wird.

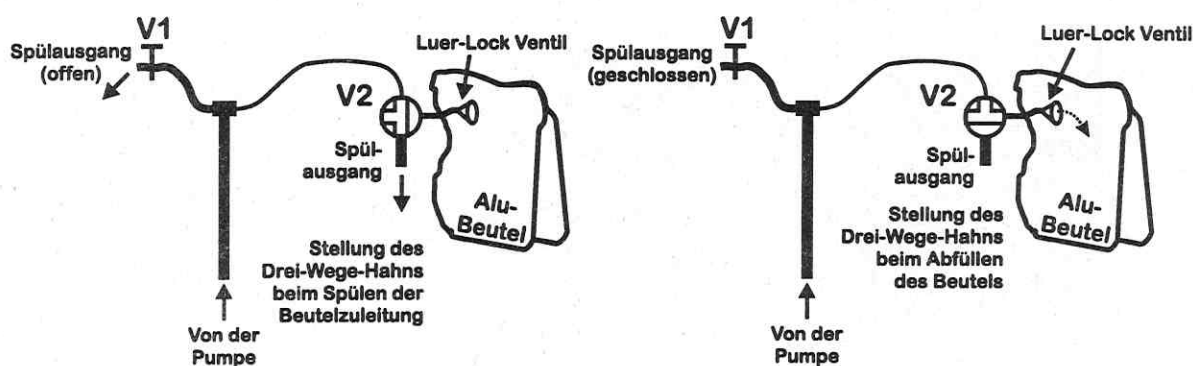


Abb. 3.7: Vorgehensweise beim Befüllen der Alu -Beutel. Zum Spülen des Rohrgestänges und der Beutelszuleitung wird V1 geöffnet und der Drei-Wege-Hahn V2 mehrmals gedreht, um etwaige Luftblasen im Bereich zwischen dem Hahn V2 und dem Luer-Lock Ventil des Beutels auszutreiben. Soll der Beutel befüllt werden, wird V1 geschlossen.

Aufgrund der geringen Fehler dieser Technik wurde auf Doppelproben in den einzelnen Tiefen verzichtet.

Alubeutel Diese Probennahmetechnik basiert auf kunststoffverstärkten Aluminiumbeuteln (Pet/A1/PE 12/12/75 300 x 400 mm, Tesseraux Container, Burstadt, Deutschland). Die Beutel haben ein maximales Volumen von etwa 5 l und sind flexibel, so daß bei nur teilweiser Füllung des Beutels eine Ausgasung des Wassers möglich ist. Die Beutel werden wie die Waschflaschen mittels Luer-Lock-Anschlüssen an die Pumpleitung angekoppelt. Zur Vorbereitung der Probennahme werden die Alubeutel evakuiert und gewogen. Bei der Probennahme wird der Schlauch zunächst gespült, wobei der Spülausgang V1 (Abbildung 3.7) geöffnet ist. Zum Abfüllen des Beutels wird V1 geschlossen, der Drei-Wege-Hahn V2 mehrmals durchgedreht, um Luftblasen auszutreiben und schließlich in die eingezeichnete Stellung gebracht. Sodann wird das Luer-Lock Ventil des Beutels geöffnet. Zur Beendigung des Abfüllvorgangs wird in umgekehrter Reihenfolge vorgegangen. Ein Nachteil der Beutel- gegenüber der Waschflaschentechnik ist die geringere Genauigkeit in der Konzentrationsbestimmung. Aus diesem Grund werden in jeder Tiefe Doppelproben genommen. Ein weiteres Problem ist die geringe mechanische Festigkeit der Beutel, sie bekommen leicht Risse oder Löcher.

Ausgasungskontrolle für die Alubeutel Die Probennahmetechnik mit Alu-Beuteln gibt die Möglichkeit einer Ausgasungskontrolle der Proben. Dazu wird durch Wägung die Menge des Wassers und weiterhin das Volumen des Headspace-Gases bestimmt. Die Ausgasung wird dann als Verhältnis zwischen Gas- und Wasservolumen definiert. Die Ausgasung ist in guter Näherung eine lineare Funktion der Tiefe. Damit kann das Ausgasungsprofil als Kontrolle dienen, ob ein Beutel undicht war oder sonstige Unregelmäßigkeiten bei der Messung auftraten. Abbildung 3.8 zeigt im oberen Teilbild ein Ausgasungsprofil vom 12.10.95. Die Ausgasung der Proben liegt für alle Tiefen recht nahe bei der Regressionsgeraden. Dies spiegelt sich auch in den SF_6 -Konzentrationen (unteres Teilbild) wieder, die für die Einzelmessungen in einer Tiefe jeweils sehr dicht beieinanderliegen. Ist ein Beutel undicht, so kann sich dies auf verschiedene Arten in der Ausgasung niederschlagen:

<u>Beim Transport:</u>	Gas verloren:	Ausgasung wird niedriger
	Wasser verloren:	Ausgasung würde höher, aber der Beutel kann auch sonst schon als undicht erkannt und aussortiert werden.
	Gas und Wasser verloren:	wie oben
<u>Bei der Messung:</u>	Gas verloren:	Ausgasung wird niedriger
	Wasser verloren:	kein Effekt, da der Beutel schon vor der Messung gewogen wurde
	Gas und Wasser verloren:	Ausgasung wird niedriger

Eine unerkannte Undichtigkeit eines Beutels sollte sich demnach in einem geringeren Ausgasungsverhältnis zeigen. Entsprechend der in Abschnitt 3.4 angeführten Auswertemetho-

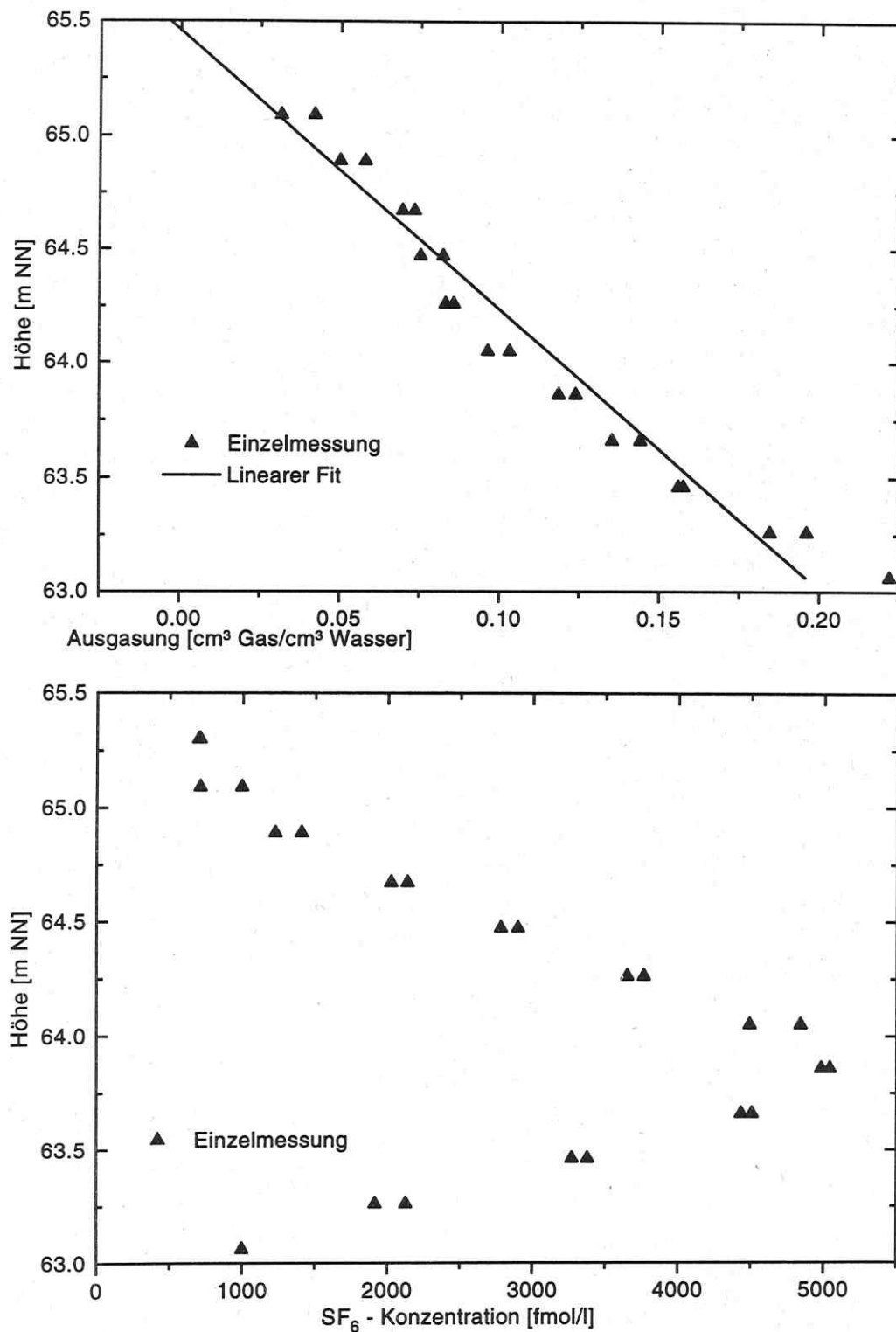


Abb. 3.8: Ausgasung und SF_6 -Konzentrationen der einzelnen Proben am 12.10.95. Die Ausgasungswerte liegen für alle Tiefen nahe bei der Regressionsgeraden. Entsprechend mußte keine der Proben verworfen werden.

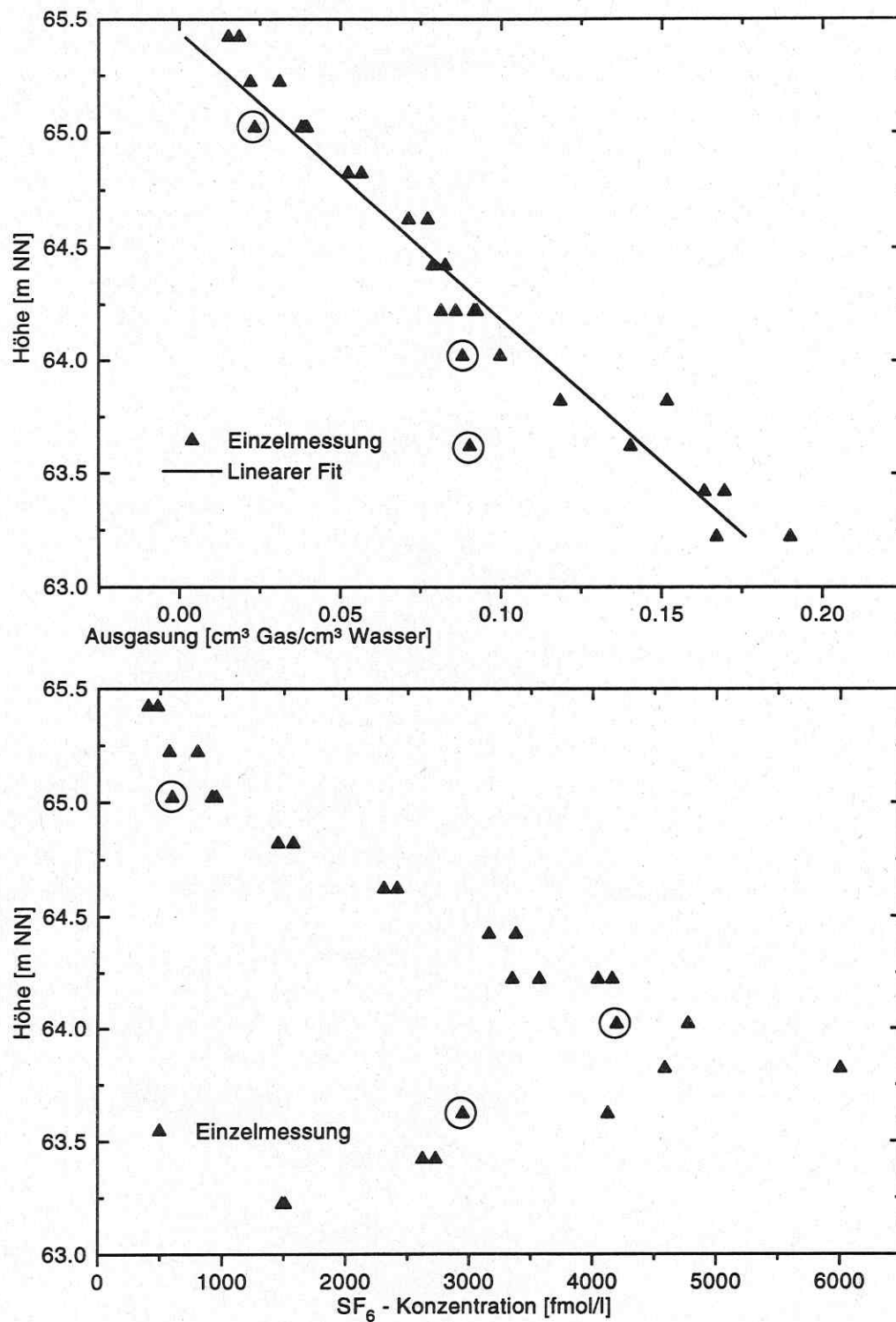


Abb. 3.9: Ausgasung und SF₆-Konzentrationen am 13.9.95. Die Ausgasung einiger Beutel (Kreise) liegt weit von der Regressionsgeraden oder von der Ausgasung der anderen Proben der jeweiligen Tiefe entfernt. Dies zeigt sich auch in den entsprechenden SF₆-Konzentrationen, die ebenfalls von denen der restlichen Beutel der jeweiligen Tiefe abweichen.

de führt dies auch zu einem geringeren Wert der bestimmten SF₆-Konzentration. Liegt also sowohl die Ausgasung weit abseits der angepaßten Geraden als auch deutlich unter der des zweiten Beutels der entsprechenden Tiefe und ist zusätzlich die SF₆-Konzentration niedriger als die des zweiten Beutels, so muß der Meßwert verworfen werden. Als Beispiel ist ein Profil vom 13.9.95 in Abbildung 3.9 gezeigt. Die mit Kreisen markierte Werte entsprechen in der Ausgasung und in der SF₆-Konzentration dem obigen Kriterium und werden demnach nicht für die mittlere Konzentration der jeweiligen Meßtiefe berücksichtigt. Dabei wird der Beutel in etwa 65m NN verworfen, da in dieser Tiefe vier Proben genommen wurden, von denen drei sowohl in der Ausgasung als auch in der SF₆-Konzentration sehr dicht beieinanderlagen.

Die Ausgasungsverhältnisse sind für die einzelnen Meßtage unterschiedlich, damit ergibt sich auch für jedes Profil eine eigene Regressionsgerade.

3.4 Konzentrationsbestimmung

Der SF₆-Gehalt der Proben wird mittels der von Maiss [1992] entwickelten Meßapparatur für SF₆ bestimmt. Das Meßprinzip ist die Gaschromatographie mit einem Elektron-Capture-Detector (ECD) als Nachweisgerät.

Waschflaschen Zur Bestimmung der SF₆-Menge der Waschflaschenproben werden ungefähr 50 ml SF₆-freies Trägergas (N₂, Reinheit 5.0) durch V2 (s. Abbildung 3.6) in die Flasche gedrückt. Das verdrängte Wasser wird durch Hahn V1 in eine Mensur geleitet, um das ungefähre Volumen der Gasmenge abzuschätzen. Danach wird zuerst Hahn V2 zugedreht, dann V1, so daß der Druck in der Flasche mit dem Umgebungsluftdruck equilibriert wird. Die exakte Gasmenge wird durch Wägung vor und nach dem Befüllen mit N₂ ermittelt. Das Lösungsgleichgewicht wird mechanisch durch Ausschütteln auf einem Rüttler hergestellt. Nach Dalmolin [1993] entspricht eine Schüttelzeit von 20 Minuten einer Gleichgewichtseinstellung von > 99,5%.

Bei der Waschflaschentechnik wird zur SF₆-Mengenbestimmung das gesamte Headspacegas in eine Probenschleife mit einem Volumen von 83 ml transferiert. Die Probenflasche wird dazu verschlossen über V2 an die Spülseite der Probenschleife angeschlossen, wobei der Hahn bei der Spülung der Schleife mitgespült wird. Zum Beschicken wird dann mittels einer an V1 angeschlossenen, mit Wasser gefüllten Spritze der Headspace in die Schleife gedrückt.

Die Konzentration von SF₆ im Headspacegas ergibt sich nach

$$C_L = \frac{F \cdot U \cdot 1000}{V_H} \quad [\text{fmol/l}] \quad (3.12)$$

F Peakfläche [mVs]

U Umrechnungsfaktor [mVs/fmol]

Dabei ist V_H das Headspace-Volumen, welches sich aus dem Gewicht der vollen Waschflasche G_V, dem Gewicht mit N₂ G_G, und der Salzwasserdichte bestimmt. Nach Damolin

[1993] muß zusätzlich berücksichtigt werden, daß ein Teil des Headspacegases in den Zuleitungen der Probeschleife verbleibt und nicht mitgemessen wird. Dieses Totvolumen wurde für den verwendeten Verbindungsschlauch zu 2,9 ml bestimmt.

$$V_H = \frac{G_V - G_G}{\rho_{\text{Salzwasserdichte}}} \cdot 10^3 - \text{Totvolumen} \quad [\text{ml}] \quad (3.13)$$

Die Konzentration im Wasser ergibt sich dann aus einer SF₆-Mengenbilanz vor und nach der Gleichgewichtseinstellung

$$m_G + m_W = \tilde{m}_G + \tilde{m}_W \quad \text{und mit } m = c \cdot V \quad (3.14)$$

$$C_G V_G + C_W V_W = \tilde{C}_G V_G + \tilde{C}_W V_W \quad (3.15)$$

V_G, V_W	Volumina der Gas- und Wasserphase [m ³]
C_G, C_W	SF ₆ Konzentrationen vor der Entgasung [fmol/l]
$\tilde{C}_G, \tilde{C}_W$	SF ₆ Konzentrationen nach der Entgasung [fmol/l]

wobei $C_G = 0$ als Anfangsbedingung gilt. Man erhält daraus mit $\tilde{C}_W = \alpha \cdot \tilde{C}_G$ (Gleichung 3.1) für die Konzentration im Wasser

$$C_W = \tilde{C}_G \left(\frac{V_G}{V_W} + \alpha(T) \right) \quad [\text{fmol/l}] \quad (3.16)$$

mit

$$V_W = \frac{G_G - G_L}{\rho_{\text{Salzwasserdichte}}} \cdot 10^3 - 0,01 \cdot (G_V - G_L) \quad [\text{ml}] \quad (3.17)$$

$$V_G = \frac{G_V - G_G}{\rho_{\text{Salzwasserdichte}}} \cdot 10^3 \quad [\text{ml}] \quad (3.18)$$

G_V	Gewicht der vollen Waschflasche [kg]
G_G	Gewicht der Waschflasche mit aufgedrücktem Headspace-Gas [kg]
G_L	Leergewicht der Waschflasche [kg]

Der letzte Term in der oberen Zeile berücksichtigt, daß nach Dalmolin [1993] das Wasser des Steigrohres der Waschflasche nicht an der Einstellung des Lösungsgleichgewichtes teilnimmt. Das Volumen des Steigrohres ist etwa 1 % des gesamten Flaschenvolumens. Der Fehler der Auswertung ist nach dem Gaußschen Fehlerfortpflanzungsgesetz

$$\begin{aligned} \Delta C_W^2 = & \left(\frac{\partial C_W}{\partial U} \Delta U \right)^2 + \left(\frac{\partial C_W}{\partial F} \Delta F \right)^2 + \left(\frac{\partial C_W}{\partial G_V} \Delta G_V \right)^2 + \left(\frac{\partial C_W}{\partial G_L} \Delta G_L \right)^2 \\ & + \left(\frac{\partial C_W}{\partial G_G} \Delta G_G \right)^2 + \left(\frac{\partial C_W}{\partial T} \Delta T \right)^2 \end{aligned} \quad (3.19)$$

Durch die Wägefehler ΔG entsteht ein Fehler von $< 0,1 \%$ für die Konzentration im Wasser. Der Temperaturfehler wird zu $\Delta T = 2^\circ\text{C}$ angenommen und führt zu einem Fehler von $< 0,5 \%$.

$$\frac{\partial C_W}{\partial U} = \frac{F}{V_{\text{gem}}} \left(\frac{V_G}{V_W} + \alpha(T) \right) \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial C_W}{\partial F} = \frac{F}{V_{\text{gem}}} \left(\frac{V_G}{V_W} + \alpha(T) \right) \quad (3.21)$$

Die größten Fehler entstehen durch Unsicherheiten in der Peakfläche und im Umrechnungsfaktor. Der Fehler des Umrechnungsfaktors ΔU ergibt sich aus mehreren Eichgasmessungen am Gaschromatographen, die nach Maiss [1992] ausgewertet werden. Er beträgt ungefähr $\Delta U = 0,5$ ($\approx 1,5$ %). Der Fehler der Peakfläche ist etwa $\Delta F = 0,5$ ($\approx 0,5 - 1$ %). Dies führt mit Gleichung 3.20 bzw. 3.21 zu Fehlern in der Konzentrationsbestimmung von ungefähr jeweils 0,5 - 1 %.

Insgesamt ergibt sich demnach ein Analytikfehler von ca. 2 %. Fulda [1996], der Messungen von Grundwasserproben am gleichen Gaschromatographen ebenfalls mit der Waschflaschentechnik durchführte, ermittelte durch Mehrfachprobennahmen einen statistischen Fehler von 2 %, der die Fehler, die bei der Probennahme entstehen können, mit einschließt. Die obige Abschätzung des reinen Analytikfehlers war konservativ und ist damit eher als Maximalabschätzung zu sehen. Als ein Gesamtfehler ist ein Wert von 2% realistisch.

Alubeutel Die SF_6 -Menge im Headspace der Alu-Beutel-Proben wird nicht wie bei den Waschflaschen durch Injektion des gesamten Headspacegases in eine Probeschleife bestimmt, da dies zu einer Überschreitung des Linearitätsbereiches des Gaschromatographen führen würde. Vielmehr wird nur eine kleine Menge des Headspacegases in eine Probeschleife des Volumens 104 μl beziehungsweise für niedrigere Konzentrationen von 1006 μl eingebracht und die SF_6 -Menge des Headspace aus den Probeschleifen- und Gasvolumina errechnet. Die maximal meßbare Konzentration zeigt bei dieser Technik eine hohe Dynamik, da durch Aufdrücken von N_2 eine Konzentrationsminderung im Headspace erzielt werden kann, so daß der Linearitätsbereich des Gaschromatographen nicht überschritten wird.

Vor der Messung wird der Beutel zur Bestimmung des Wasservolumens V_W gewogen. Sodann wird er 45 Minuten gerüttelt. Diese Zeit ist zur Einstellung des Löslichkeitsgleichgewichtes nötig. Der Beutel wird danach an den Spülausgang der Probeschleife angeschlossen und nach dem Spülen der Gasinhalt des Beutels vollständig durch die Schleife gedrückt. Am Ausgang der Probeschleife wird eine mit Wasser gefüllte Waschflasche angeschlossen. Das durch die Probeschleife gedrückte Gas sammelt sich in dieser Flasche. Durch deren Wägung vor und nach der Messung kann das Volumen V_L des Headspace-Gases ermittelt werden.

$$V_L = F_{\text{kor}} \frac{(G_W - G_L)}{\rho} \quad [\text{m}^3] \quad (3.22)$$

Es gelten die Bezeichnungen aus dem Abschnitt Waschflaschen. F_{kor} ist ein Korrekturfaktor, der den Druckunterschied in der Waschflasche gegenüber dem Umgebungsdruck, hervorgerufen durch das Wasser im Steigrohr, berücksichtigt. Die Höhe der Wassersäule wurde experimentell von in Abhängigkeit des unkorrigierten Volumens bestimmt und ein

linearer Korrekturfaktor daraus ermittelt. Die Größenordnung der Korrektur liegt im Prozentbereich.

Die SF₆-Konzentration im Probengas errechnet sich aus der Peakfläche F, dem Umrechnungsfaktor U und dem Probenschleifevolumen V_{PrS} gemäß

$$C_L = \frac{U \cdot F}{V_{PrS}} \quad [\text{fmol/l}] \quad (3.23)$$

F Peakfläche [mVs]

U Umrechnungsfaktor [mVs/fmol]

V_{PrS} Probenschleifevolumen [l]

Die Konzentration im Wasser erhält man dann aus Gleichung 3.16 mit $C_L = \tilde{C}_G$. Der Fehler der Auswertung errechnet sich dann gemäß:

$$\left(\frac{\Delta C_W}{C_W}\right)^2 = \left(\frac{\Delta F}{F}\right)^2 + \left(\frac{\Delta U}{U}\right)^2 + \left(\frac{\Delta V_{PrS}}{V_{PrS}}\right)^2 + \frac{\left(\frac{U \cdot F}{V_{PrS}} \Delta \alpha\right)^2}{C_W^2} + \frac{\left(\frac{U \cdot F \cdot V_L}{V_{PrS} \cdot V_W} \Delta F_{korrr}\right)^2}{C_W^2} \quad (3.24)$$

Die Fehler für die Berechnung der Volumina sind kleiner als 0,4%; die durch Peakfläche und Umrechnungsfaktor entstehenden Fehler sind von der gleichen Größenordnung wie bei den Waschflaschen ($\approx 1\%$). Die Volumina der Probeschleifen wurden von Maiss [1992] zu $104 \pm 1,4 \mu\text{l}$ und $1006 \pm 2 \mu\text{l}$ bestimmt. Der Fehler der Ostwaldschen Löslichkeit wird durch Temperaturfehler verursacht. Für den Korrekturfaktor wird ein Fehler ΔF_{korrr} von 2% angenommen.

Desweiteren existiert noch ein systematischer Fehler, der nicht korrigiert werden kann. Beim Transfer des Probengases aus dem Beutel in die Meßapparatur kann nicht kontrolliert werden, ob die Gasmenge restlos aus dem Beutel gepreßt wurde, da der Beutel nicht transparent ist. Die im Beutel verbleibenden Gas Mengen wurden auf bis zu 4 ml bestimmt, was zu einem Fehler von bis zu 8% führen kann. Die berechneten Konzentrationswerte und deren Fehler sind in Anhang E zu finden.

3.5 Meßergebnisse

In diesem Abschnitt wird zunächst die im Hufeisensee ermittelte SF₆-Hintergrundkonzentration besprochen. Im weiteren werden die gemessenen Vertikalprofile im Monimolimnion vorgestellt und deren Entwicklung mit der Zeit betrachtet. Weiterhin werden SF₆-Profile aus dem Hypolimnion, welche Aussagen über den Transport durch die Chemokline geben können, vorgestellt. Schließlich soll eine Bilanzierung der SF₆-Menge Aussagen über den Verlust an SF₆ aus dem Monimolimnion liefern.

3.5.1 Hintergrundkonzentration

Am 27.10.1994 wurde die Hintergrundkonzentration von SF₆ im Hufeisensee erstmalig bestimmt [Zimmermann, 1995]. Der See war an diesem Termin noch thermisch geschichtet. Es wurden Proben aus dem Epi- und Hypolimnion sowie aus dem Monimolimnion genommen. Die Probennahmetiefen und die ermittelten Konzentrationen sind der Tabelle

Probennahmetiefe vom Seespiegel aus gemessen [m]	SF ₆ -Konzentration im Wasser [fmol/l]	Temperatur [°C]	Rückgerechnete SF ₆ -Konzentration in der Atmosphäre [pptv]
27.10.1994 (Seespiegel: 91,80m)			
Mixolimnion			
9,9	1,94 ± 0,01	10 ± 2	4,8 ± 0,4
16,0	1,85 ± 0,01	10 ± 2	4,5 ± 0,4
22,0	1,98 ± 0,01	7 ± 1	4,3 ± 0,2
25,5	2,09 ± 0,01	7 ± 1	4,5 ± 0,2
Monimolimnion			
27,7	1,78 ± >>0,01		
12.9.1995 (Seespiegel: 91,94m)			
6	1,78 ± 0,04	15,5 ± 3	5,4 ± 0,6
18	2,81 ± 0,05	7,5 ± 1	6,2 ± 0,3
6.6.1996 (Seespiegel: 92,36m)			
4	1,77 ± 0,04	16 ± 3	5,5 ± 0,6
20	2,79 ± 0,05	1,5 ± 1	4,6 ± 0,3

Tab. 3.1: Hintergrundkonzentrationen. Die atmosphärischen Konzentrationen sind aus den Konzentrationen im Wasser errechnet (27.10.1994: [Zimmermann, 1995]; 12.9.95 und 6.6.96: [Walz, 1997]).

3.1 zu entnehmen.

Die Hintergrundkonzentration von SF_6 im Wasser des Hufeisensees wurde am 12.9.1995 und 6.6.1996 erneut gemessen [Walz, 1997]. Am 12.9.1995 war der See durch die sommerliche Schichtung noch in Epi- und ein Hypolimnion geteilt. Es wurden je eine Waschflasche mit einer Wasserprobe aus dem vollaufgemischten Epilimnion in 6 m Tiefe und aus dem Hypolimnion in 18 m Tiefe befüllt. Die SF_6 -Konzentration wurde zu $1,78 \pm 0,04$ fmol/l für die Probe aus 6m Tiefe und zu $2,81 \pm 0,05$ fmol/l für die Probe aus 18 m Tiefe bestimmt.

Anhand von Gleichung 3.1 und 3.4 lassen sich aus den im Wasser gemessenen Hintergrundkonzentrationen die Gleichgewichtskonzentrationen in der Atmosphäre errechnen und kontrollieren, ob die Background-Werte im Wasser diejenigen in der Luft widerspiegeln oder aber erhöht sind.

Aus den Hintergrundkonzentrationen vom 27.10.1994 erhält man aus den Hypolimnionswerten (22,0 und 22,5m Probennahmetiefe, gemittelte Konzentration 2,03 fmol/l) unter Annahme einer Bildungstemperatur von $7,0 \pm 1$ °C (siehe Abbildung 6.21) eine atmosphärische Konzentration von $4,4 \pm 0,2$ ppt. Die Hintergrundkonzentrationen des Epilimnions führen mit einer Bildungstemperatur von $10,0 \pm 2$ °C auf eine atmosphärische Gleichgewichtskonzentration von $4,7 \pm 0,5$ ppt. Der große Fehler für die Temperatur muß angenommen werden, da die genauen Zeitpunkte der SF_6 -Gleichgewichtseinstellung nicht bekannt sind.

Da die Temperatur des Monimolimnionswassers bei der Lösungsgleichgewichtseinstellung nicht bekannt ist, kann aus der Hintergrundkonzentration im Monimolimnion kein atmosphärischer Gleichgewichtswert ausgerechnet werden.

Für die Umrechnung der Werte vom 12.9.95 auf atmosphärische Konzentrationen wird die gemessene mittlere Temperatur von $15,5 \pm 3$ °C des Epilimnions für die Probe aus 6m Tiefe und die Temperatur von $7,5 \pm 1$ °C der letzten Vollaufmischung Anfang Mai 1995 für die Probe aus 18m Tiefe verwendet. Man erhält atmosphärische Konzentrationen von $5,4 \pm 0,6$ pptv (6m Tiefe) beziehungsweise $6,2 \pm 0,3$ pptv (18m Tiefe).

Am 6.6.1996 war durch das Temperaturprofil schon eine beginnende sommerliche Schichtung mit einer Thermokline in etwa 8 m Tiefe festzustellen. Es wurden wiederum je eine Waschflasche mit einer Wasserprobe aus dem vollaufgemischten Epilimnion in 4 m Tiefe und aus dem tiefen Hypolimnion in 20 m Tiefe befüllt. Die Probe aus 4m Tiefe besaß eine SF_6 -Konzentration von $1,77 \pm 0,04$ fmol/l und diejenige aus 20m Tiefe eine Konzentration von $2,79 \pm 0,05$ fmol/l. Die Konzentration in der Luft wird wie oben ausgeführt berechnet. Die mittlere Temperatur des Epilimnions betrug 16 ± 3 °C. Zum Zeitpunkt der letzten Vollaufmischung seit der Probennahme (Ende Dezember 1995) betrug die mittlere Temperatur des Mixolimnions $1,5 \pm 1$ °C; diese Temperatur wurde für die Hintergrundkonzentrations-Bestimmung aus der Probe aus 20 m Tiefe verwendet. Man erhält atmosphärische Konzentrationen von $5,5 \pm 0,6$ pptv (4 m Tiefe) beziehungsweise $4,6 \pm 0,3$ pptv (20m Tiefe).

Alle Werte sind nochmals in Tabelle 3.1 zusammengefaßt.

Die errechneten atmosphärische Werte liegen über dem in Abschnitt 3.1 angegebenen Wert für die mittlere nordhemisphärische Hintergrundkonzentration. Mehrjährige Messungen

an Heidelberger Luft [Dalmolin, 1993; Maiss, 1997] zeigen aber, daß in industriellen Ballungsgebieten die Konzentrationen durchaus in diesem Bereich liegen. Es ist zudem zu berücksichtigen, daß die aus den gemessenen Konzentrationen im Wasser errechneten atmosphärische Konzentrationen ein Mittel über einen unbestimmten Zeitraum darstellen. Die Konzentrationen in der Luft können sich aufgrund von Emission in Ballungsgebieten schnell ändern, während die Lösungsgleichgewichts-Einstellung nicht instantan erfolgt. Die SF₆ - Hintergrundkonzentration im Wasser des Hufeisensees ist somit nicht signifikant erhöht.

3.5.2 Beobachtete vertikale Ausbreitung

Seit dem Einbringen der SF₆-Markierung am 27.10.1994 wurden insgesamt 13 Profile der SF₆-Konzentration aufgenommen, anhand derer die vertikale Ausbreitung des Tracers betrachtet werden kann. Die letzte Beprobung wurde am 1.10.1996 durchgeführt, womit der gesamte Beobachtungszeitraum knappe zwei Jahre beträgt.

Abbildung 3.10 gibt einen Überblick über die ermittelten SF₆-Profile. Zur besseren Übersichtlichkeit sind die Profile gegeneinander verschoben, wobei die Abfolge der zeitlichen Reihenfolge, der Betrag der Verschiebung aber nicht dem Zeitabstand entspricht. Die Konzentration ist nach links aufgetragen, wobei die punktierten Linien die Nulllinie für das jeweilige Profil darstellen. Die Lage der Chemokline (16 mS/cm) ist zur Orientierung durch einen Querbalken angedeutet. In den Probenahmetiefen (Abschnitt 3.3.1) wurden jeweils Doppelproben genommen. Die SF₆-Konzentrationen der Proben einer Tiefe wurden gemittelt und die so erhaltenen Tiefenmittel zu einem Vertikalprofil zusammengefaßt. Die Fehler ergeben sich für die Einzelproben gemäß obiger Fehlerbetrachtung. Der Gesamtfehler in einer Tiefe ergibt sich aus der Standardabweichung der Doppelproben. Ist sie größer als der Fehler der Einzelproben, wird davon ausgegangen, daß ein Beutel defekt war oder sonstige Probennahmefehler auftraten. In diesem Fall wird die Standardabweichung als Fehler der Doppelprobe veranschlagt. Ist die Standardabweichung kleiner als die Fehler der Einzelproben, dominieren diese den Gesamtfehler.

Die Meßwerte und Fehler der SF₆-Konzentrationen der einzelnen Tiefen für alle Probenahmetage sind in Anhang E zusammengefaßt.

Bis auf die ersten beiden Profile vom 7.12.94 und 19.1.95 wurden alle Profile zur nachfolgenden Auswertung interpoliert. Dabei wurde eine Interpolationsmethode nach Akima [c't, 1989] verwendet (s. Anhang F). Diese Interpolation berücksichtigt im Gegensatz zur linearen Interpolation die Forderung nach Stetigkeit der Funktion und ihrer Ableitung an den Stützstellen sowie die Steigung der Flanken des Peaks, die ebenfalls eine Information über Lage des Peaks beinhalten. Bei der Interpolation kann zudem ein Ausgleich erfolgen, wobei der Fehler der SF₆-Konzentration als Grenze miteinbezogen wird. Die interpolierten Profile sind durchgezogen eingezeichnet. Die durchgezogenen Linien der ersten beiden Profile entsprechen einer linearen Interpolation.

Weiterhin enthält Abbildung 3.10 ein hypothetisches Startprofil. Rechnet man die eingebrachte SF₆-Menge auf diejenige 20cm - Box um, die in der Tiefe des Peaks liegt, so erhält man eine Konzentration von 33000 fmol/l. Eine derart hohe Konzentration kann durch die Messungen aber in keiner Weise bestätigt werden.

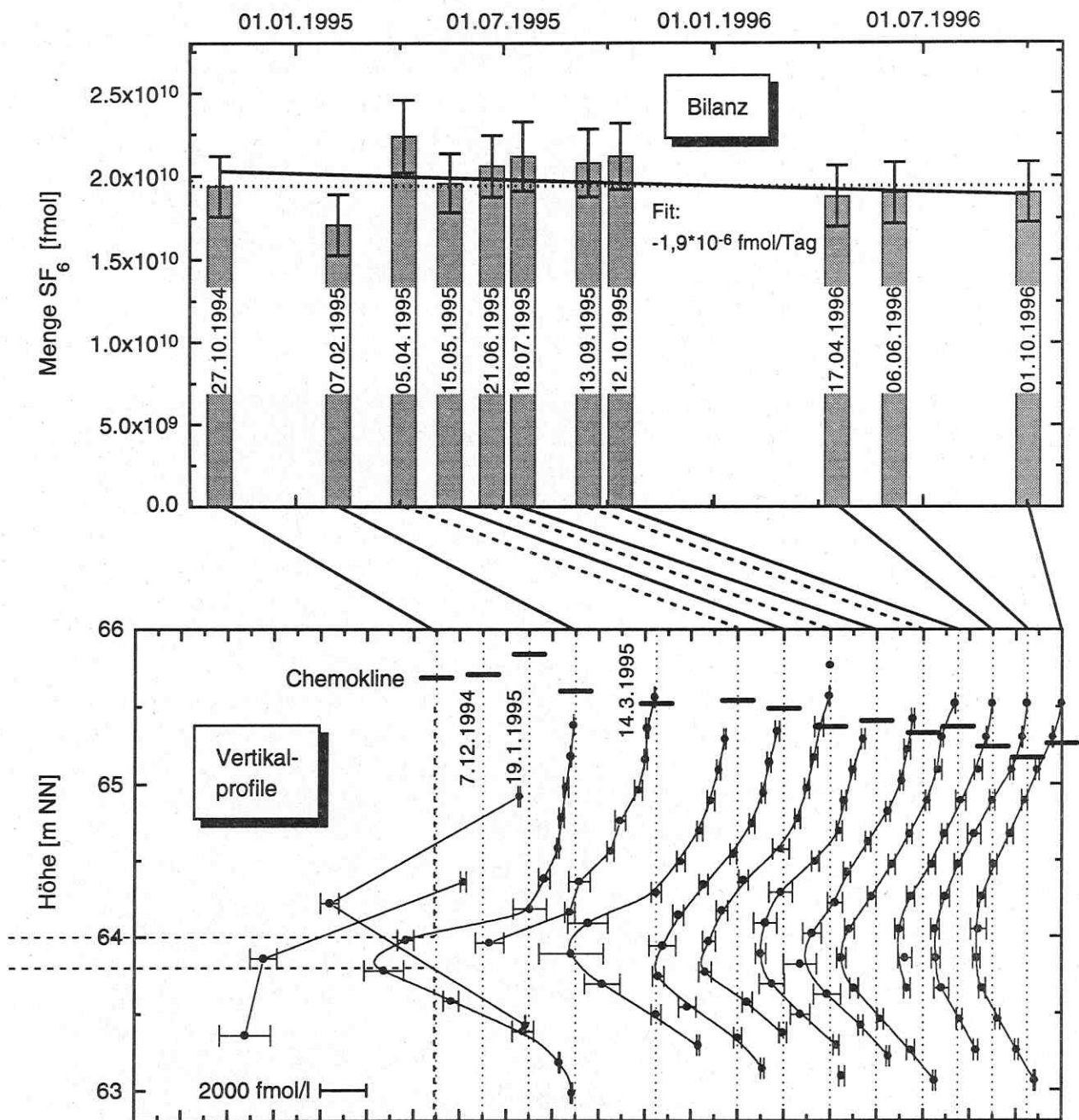


Abb. 3.10: SF₆-Profile und Bilanz im Monimolimnion. Oben: Im Rahmen der Fehler wird an allen Meßterminen die eingebrachte Tracermenge (27.10.1994) wiedergefunden. Unten: Zeitliche Entwicklung des SF₆-Vertikalprofils. Es sind die Meßwerte mit Fehlern sowie die Akima-interpolierten Profile dargestellt. Die Lage der Chemokline (16mS/cm) ist durch einen Balken angedeutet; die punktierten Linien geben die Nulllinien des jeweiligen Profils wieder. Ein hypothetisches Startprofil ist gestrichelt eingezeichnet.

Die ersten 8 Profile vom 7.12.1994 bis zum 18.7.1995 nahm Zimmermann [1995] auf. Die ersten beiden Profile vom 7.12.1994 und 19.1.1995 sind nicht direkt mit den restlichen Profilen vergleichbar, da an diesen Tagen nur jeweils drei Meßtiefen beprobt wurden. Zudem fällt bei der Messung vom 7.12.1994 auf, daß die höchste Konzentration in einer größeren Tiefe als bei den restlichen Profilen auftritt. Eine Erklärung könnte dadurch gegeben werden, daß in dem Zeitraum von 41 Tagen zwischen dem Einbringen des Tracers am 27.10.1994 und der Profilnahme die angenommene horizontale Homogenisierung noch nicht vollständig stattgefunden hat und das aufgenommene Profil daher nur eine punktuelle Situation darstellt. Alle weiteren Profile geben keinen Hinweis auf eine horizontale Inhomogenität. Sowohl die Profilform als auch die Gesamtbilanz (Abschnitt 3.5.3), welche unter der Annahme horizontaler Homogenität für alle Meßtermine Werte ergibt, die im Rahmen der Fehler mit der eingebrachten Tracermenge übereinstimmen, deuten auf eine horizontale Homogenisierung ab Februar 1995 hin.

Die Profile ab Februar 1995 wurden mit einer Tiefenauflösung von 20cm aufgenommen. Bei einer Tiefe des Monimolimnions von 2 - 2,5 Metern ergibt dies 10 - 13 Meßtiefen. Das Profil vom 14.3.1995 muß aus den folgenden Betrachtungen ausgeklammert werden, da an diesem Tag zwei Umstände zu einer Verfälschung des Profils führten. Zum einen konnten durch einen starken Wind, der zu einem Abtreiben an den Rand des Monimolimnions führte nur wenige Meßtiefen beprobt werden. Zum anderen fehlte an diesem Tag der Kühlmantel der Pumpe, was zu einem Tiefenfehler von 30cm und einer veränderten Ansaugcharakteristik führte.

Die 5 Profile vom 13.9.1995 bis zum 1.10.1996 (Abbildung 3.10) wurden von Walz [1997] aufgenommen. Die Zeitabstände zwischen den einzelnen Profilnahmen wurden länger gewählt, da die Prozesse im Monimolimnion offenbar so langsam verlaufen, daß kürzere Beobachtungsintervalle unnötig erschienen.

Das SF₆-Profil vom 17.4.1996 benötigt eine besondere Bemerkung. Einerseits konnte bei der Probennahme keine Probe aus der größten Tiefe des Monimolimnions genommen werden. Zum anderen traten sowohl beim Transport der Probenbeutel als auch bei der Konzentrationsbestimmung Undichtigkeiten der Beutel auf, so daß in mehreren Tiefen nur eine Einzelprobe zur Verfügung stand. Insbesondere fällt die im Vergleich zum Profil vom 6.6.1996 geringere Konzentration in einer Tiefe von 63,83m NN auf. Dieser Wert basiert auf einer Einzelprobe, die in der Ausgasung jedoch zu niedrig lag. Entsprechend wurde der Fehler für die SF₆-Konzentration in dieser Tiefe als doppelter Wert des Einzelfehlers angesetzt. Da der qualitative Verlauf der oberen Flanke des Peaks aber kein abweichendes Verhalten im Vergleich zum Profil vom 6.6.1996 zeigt, wird dieses Profil in die nachfolgenden Betrachtungen miteinbezogen.

3.5.3 Bilanzierung der SF₆-Menge im Monimolimnion

Aus einer Bilanzierung der SF₆-Menge unterhalb der Chemokline können Aussagen über den Verlust von SF₆ über die Chemokline und/oder durch eine eventuelle Spülung des Monimolimnions mit Grundwasser gewonnen werden.

Die wiedergefundene SF₆-Menge eines Meßtermins wird aus den Volumina der 20cm Boxen und der aus den Akima-interpolierten Profilen gewonnenen SF₆-Konzentrationen ermit-

telt. Da nicht bei allen Meßterminen die Maximaltiefe erreicht werden konnte, wurden für die fehlenden Konzentrationswerte als Minimalabschätzung die Werte des vorhergehenden Meßtermins verwendet. Dies gewinnt besonders bei dem Profil vom 17.4.1996 an Bedeutung, da bei diesem Termin mehrere Meßwerte unterhalb des Peaks nicht vorhanden sind. Das Profil vom 14.3.1995 wurde wegen der oben erwähnten Fehler bei der Probennahme nicht in die Bilanz miteinbezogen.

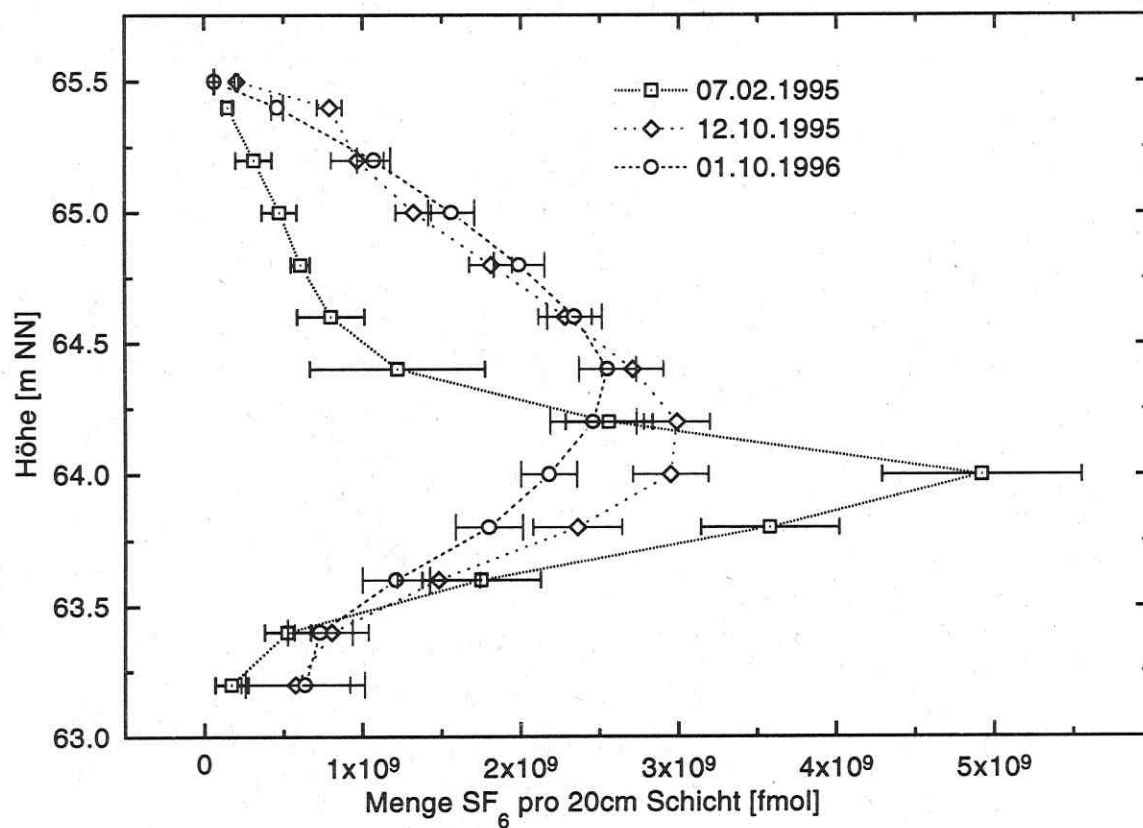


Abb. 3.11: SF_6 -Menge pro 20cm-Box. Die drei dargestellten Profile zeigen, daß ein Transport von SF_6 zur Chemokline hin stattfindet; der Schwerpunkt der SF_6 -Verteilung wandert zur Chemokline hin.

Abbildung 3.11 zeigt die SF_6 -Menge pro 20cm-Box für die drei Termine 7.2.1995, 12.10.1995 und 1.10.1996. Ein Transport des Tracers in Richtung der Chemokline ist deutlich zu erkennen. Aus den Mengenverläufen mit der Tiefe ist zudem ersichtlich, daß sich in Tiefen unterhalb von 63.4m NN nur ein geringer Anteil ($< 10\%$) der gesamten SF_6 -Menge befindet. Die tatsächlich erreichten maximalen Meßtiefen haben demnach auf die Bilanzierung der Gesamtmenge nur einen geringen Einfluß.

Die Fehler der Bilanz ergeben sich aus den Fehlern der SF_6 -Konzentration in den einzelnen Tiefen und aus den Volumenfehlern. Für die Bilanzierung wurde ein aus Fall 1 und Fall 2 des Volumenverlaufs (Abschnitt 2.1) gemitteltetes Volumen verwendet. Der Fehler des

Volumens ergibt sich dann wie in Abschnitt 2.1 beschrieben. Der Fehler der Bilanzen liegt bei 9 - 11% und wird von den Volumenfehlern dominiert, die alleine schon einen Fehler von 8 - 9% verursachen. Demgegenüber haben die Konzentrationsfehler lediglich einen Bilanzfehler von 2 - 5% zur Folge.

Die wiedergefundene SF₆-Menge stimmt an allen Probenahmenterminen im Rahmen der Fehler mit der Einbringmenge überein (Abbildung 3.10). Die großen Fehler sowohl der Einbringmenge am 27.10.1994 als auch der Bilanzen aller nachfolgenden Termine erlauben keinen signifikanten Trend abzuleiten. Eine erneute Volumenbestimmung des Monimolimnions würde hier eine Verbesserung bringen. Die Anpassung einer Regressionsgerade an die dargestellten Bilanzwerte ergibt eine mittlere Abnahme der SF₆-Menge um $1,9 \cdot 10^6$ fmol/Tag, allerdings mit einer Standardabweichung von $2,7 \cdot 10^6$ fmol/Tag. Dies entspricht einer theoretischen Austauschzeit von $\approx 29 \pm 41$ Jahre. Eine Extrapolation der Geraden auf den Einbringtermin führt zu einer Einbringmenge von $2,0 \cdot 10^{10} \pm 1,0 \cdot 10^9$ fmol, was im Bereich der Fehler mit der in Abschnitt 3.2.2 errechneten Menge gut übereinstimmt.

Ein Verlust von SF₆ kann nur über die Chemokline oder durch Spülung mit Grundwasser erfolgen. In den Abschnitten 3.5.5 und 3.5.6 wird eine Mindestabschätzung des Verlustes über die Chemokline gemacht. Es ergibt sich insgesamt für den Zeitraum vom April '95 bis Oktober '96 ein Verlust von minimal $1,0 \cdot 10^9$ fmol beziehungsweise $1,7 \cdot 10^6$ fmol/Tag. Dieser Wert ist kleiner als der Fehler der Bilanzen. Der Verlust über die Chemokline kann somit aus der Bilanz im Monimolimnion nicht erkannt werden. Damit wird auch eine Aussage über eine Spülung des Monimolimnions mit Grundwasser aus der SF₆-Bilanz im Monimolimnion unmöglich.

3.5.4 Verhalten des Konzentrationsmaximums

In diesem Kapitel soll das zeitliche Verhalten des Konzentrationsmaximums besprochen werden. Es werden nur die hochaufgelösten Profile aus dem Zeitraum vom 7.2.1995 bis zum 1.10.1996 betrachtet; das Profil vom 14.3.1995 wird dabei nicht berücksichtigt.

Die größten gemessenen Konzentrationen liegen zu Anfang des Beobachtungszeitraumes noch über 7000 fmol/l. Diese Werte sind aber mit hohen Fehlern behaftet. Am 1.10.1996 konnten noch maximale Konzentrationen von über 3500 fmol/l gemessen werden. Die Abnahme der maximal gemessenen Konzentration ist auf die Verbreiterung des Peaks durch die Verteilung der eingebrachten Tracermenge aufgrund der vertikalen Mischungsprozesse im Monimolimnion zurückzuführen. Die Tiefe, in der die maximale Konzentration gefunden wird, verändert sich innerhalb des Beobachtungszeitraumes und im Rahmen der Fehler nicht. Bei der Bestimmung der Lage des Peak-Maximums treten allerdings Schwierigkeiten auf. Einerseits existieren im Bereich des Konzentrationsmaximums die größten Fehler in der SF₆-Konzentration, die eventuell durch Tiefenfehler verursacht wurden, insbesondere bei den Profilen vom 7.2.1995 und 5.4.1995. Andererseits ist die Lage des Maximums trotz der Tiefenauflösung von 20cm insbesondere bei den Profilen vom Anfang des Beobachtungszeitraumes nicht klar zu erkennen, da die maximale Konzentration aufgrund der steilen Peakform zwischen zwei Meßpunkten liegen kann.

Die Lage des Maximums wurde daher aus den Akima-interpolierten SF₆-Profile bestimmt.

Bei der Akima-Interpolation wird bei der Berechnung des Kurvenstückes an der Stelle der Maximalkonzentration die Steigung der Flanken des Profils berücksichtigt. Je nach der Steigung der Flanken kann die berechnete Maximalkonzentration auch über den maximal gemessenen Konzentrationen der Stützstellen liegen. Dies wird beispielsweise im Profil vom 7.2.1995 in Abbildung 3.10 ersichtlich. Die Lage des Maximums wird aus den Akima-interpolierten Profilen vom 5.4.1995 und 18.7.1995 zu $63,9 \pm 0,1$ m NN bestimmt. Alle weiteren interpolierten Profile weisen die maximale Konzentration in Tiefen von 63,8 bis 63,95 m NN (jeweils $\pm 0,1$ m) auf. Es ist kein zeitlicher Trend feststellbar. Im Rahmen der Fehler kann daher von einer unveränderten Lage des Peaks bei $63,9 \pm 0,1$ m NN während des ganzen Beobachtungszeitraumes ausgegangen werden.

Abbildung 3.12 zeigt die zeitliche Entwicklung der Maximalkonzentration. Eine lineare Interpolation ergibt zu Anfang des Beobachtungszeitraumes (bis Juli 1995) eine mittlere Abnahme des Maximalwertes von 25 ± 5 fmol/Tag, während von Juli 1995 bis Oktober

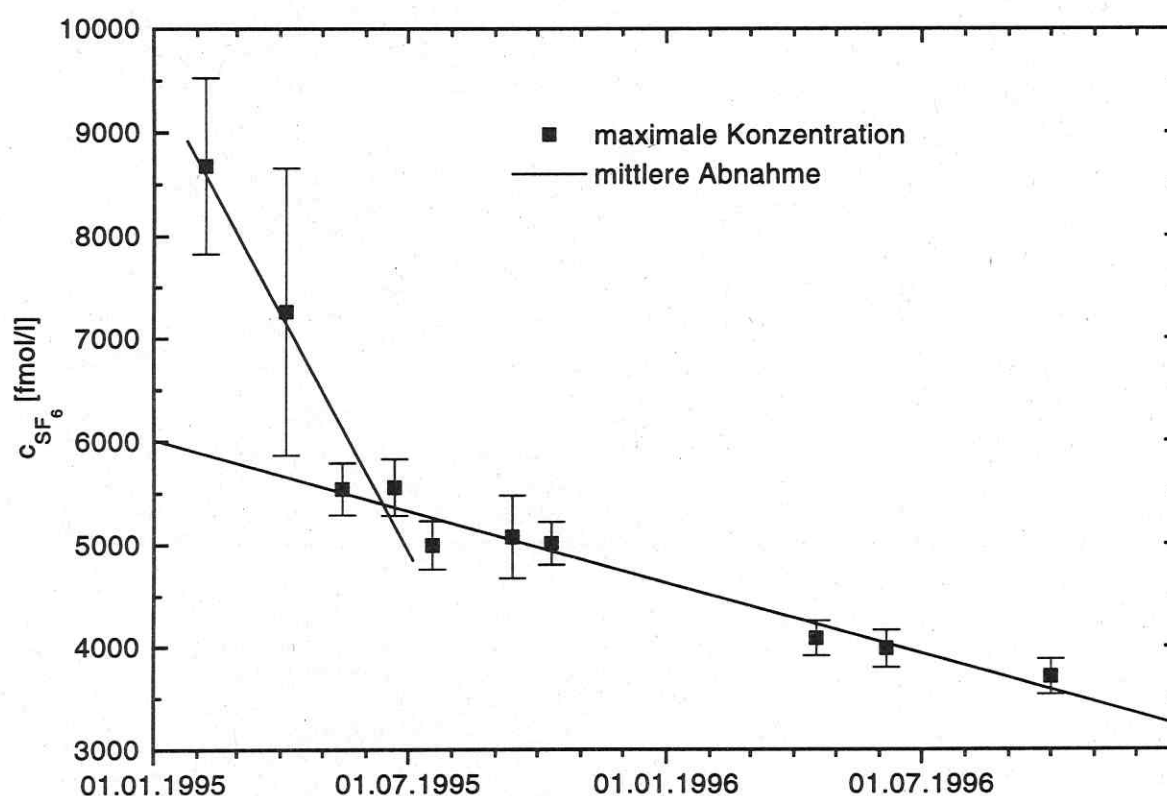


Abb. 3.12: Verhalten des Konzentrationsmaximums mit der Zeit. Die durchgezogenen Linien geben die mittlere Abnahme der maximalen Konzentration von Februar bis Juli 1995 beziehungsweise von Juli 1995 bis Oktober 1996 wieder. Die großen Unterschiede der Abnahmerate der beiden Zeiträume kommen durch die Verminderung des Vertikalgradienten mit der Zeit bei der Verbreiterung der Tracerverteilung zustande.

1996 die mittlere Abnahmerate $3,8 \pm 0,3$ fmol/Tag beträgt. Insbesondere der erste Wert kann aber nur als ungefähre Abschätzung dienen, da die benutzten Konzentrationswerte mit großen Fehlern behaftet sind. Die großen Unterschiede der Abnahmerate im Verlauf des Ausbreitungsexperimentes sind auf die Verminderung der vertikalen Konzentrationsgradienten durch die Verbreiterung des Peaks zurückzuführen. Während am 7.2.95 der Vertikalgradient in der Umgebung der maximalen Konzentration Werte von bis zu 15500 fmol/(l·m) aufweist, sind dort am 1.10.1996 Werte des Vertikalgradienten von etwa 2500 fmol/(l·m) zu finden.

3.5.5 Entwicklung oberhalb des Konzentrationsmaximums

Das Verhalten der SF_6 -Verteilung mit der Zeit zeigt in dem Tiefenbereich zwischen Chemokline und Konzentrationsmaximum das erwartete Verhalten. Während im Bereich des Maximums die Konzentration mit der Zeit abnimmt, steigt sie zur Chemokline hin an.

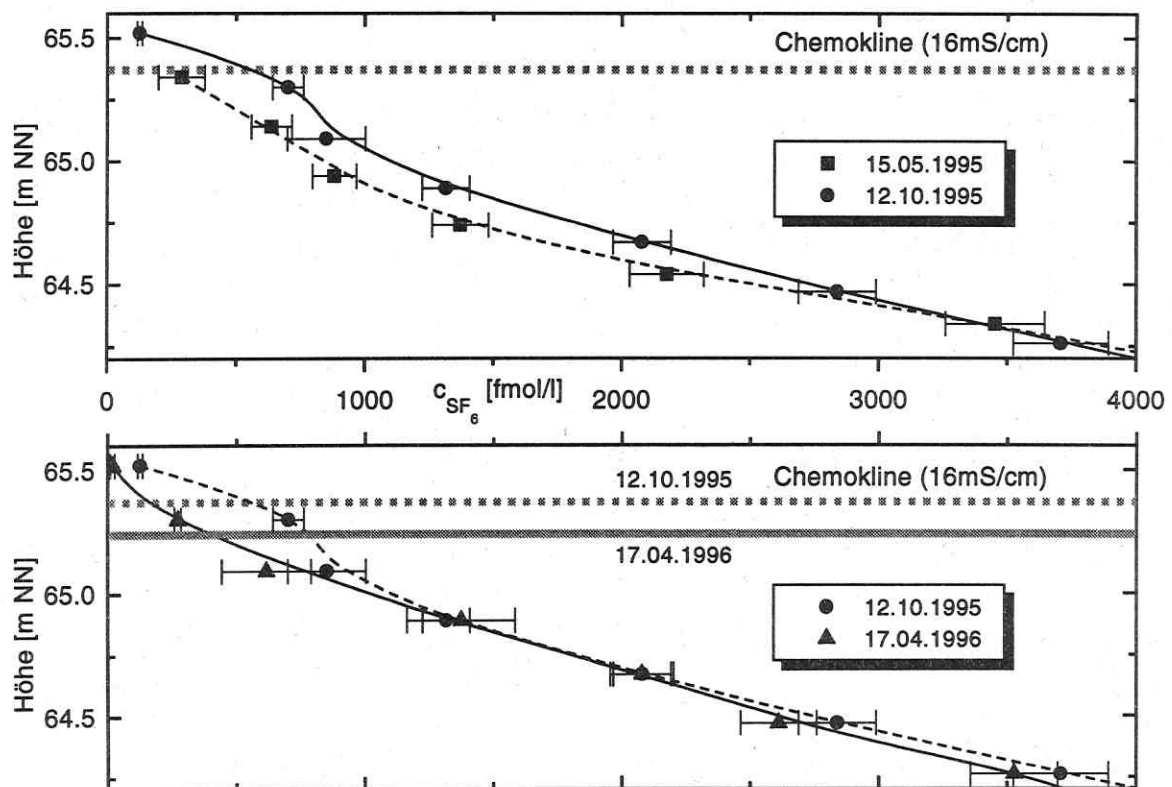


Abb. 3.13: Entwicklung der SF_6 -Konzentration oberhalb des Konzentrationsmaximums. Die Chemokline ist gestrichelt angedeutet. Oben: Über den Sommer erhöht sich die SF_6 -Konzentration dicht unter der Chemokline. Unten: Während des Winters ist die Chemokline abgesunken, die erhöhte Konzentration wurde durch die erhöhte vertikale Diffusion im Winter ausgeglichen.

Insbesondere verdient der Bereich dicht unter der Chemokline Beachtung. Der obere Teil der Abbildung 3.13 zeigt eine Situation, wie sie sich über den Zeitraum der sommerlichen Schichtung vom 15.5.1995 bis zum 12.10.1995 entwickeln konnte. Die Konzentrationen stiegen in den Tiefen zwischen 64,3m NN und 65,5m NN über den betrachteten Zeitraum hinweg durch diffusive Verbreiterung der SF₆-Verteilung an. Die erhöhte Stabilität in der Chemokline selbst und damit ein stark unterdrückter Transport in diesem Bereich bewirkt offenbar einen Aufstau der von unten durch Diffusion herantransportierten SF₆-Menge. Die Konzentration dicht unterhalb und in der Chemokline erhöht sich.

Im darauffolgenden Frühjahr (Profil vom 17.4.1996, Abbildung 3.13 unten) kann eine erhöhte Konzentration in der Chemokline nicht mehr beobachtet werden. Vielmehr liegen die gemessenen SF₆-Konzentrationen unter den im Oktober gemessenen. Dies hat zwei Ursachen. Einerseits wurde die Lage der Chemokline durch Erosion über den Winter hinweg verändert. Während sie sich im Oktober bei 65,37m NN (durch den Leitfähigkeitswert von 16mS/cm festgelegt) befand, ist sie im April auf 65,24m NN abgesunken. Mit der Erosion der Chemokline um etwa 15cm wurde auch die SF₆-Menge aus diesem Bereich weggemischt. Über den Winter ist keine Thermokline vorhanden, die den Eintrag an Windenergie schon im oberen Bereich der Wassersäule abfangen könnte. Es ist demnach eine erhöhte Diffusion im Monimolimnion zu erwarten, die auch die Konzentrationserhöhung in der Chemokline ausgleichen kann. Auch einzelne Sturmereignisse können dabei eine entscheidende Rolle spielen.

Eine Abschätzung der über den Winter 95/96 aberodierten SF₆-Menge ergibt einen Wert von $5 \cdot 10^8$ fmol.

3.5.6 SF₆-Diffusion über die Chemokline

Die Bestimmung eines SF₆-Vertikalprofils über die Chemokline hinaus kann zur Abschätzung des Transports durch die Chemokline und der Diffusionskoeffizienten in dieser Grenzschicht dienen. Da es im Wasserkörper keine natürlichen Quellen oder Senken für SF₆ gibt und eine Gleichgewichtseinstellung mit der atmosphärischen Konzentration durch die Thermokline unterdrückt wird, kann eine Veränderung der SF₆-Menge im Hypolimnion des Hufeisensees über die sommerliche Schichtungsphase hinweg nur aus einem Transport von SF₆ aus dem Monimolimnion resultieren. Mittels einer Bilanz der im Hypolimnion wiedergefundenen SF₆-Menge kann demnach der Diffusionskoeffizient in der Chemokline während der Sommerstagnation quantifiziert werden.

Für die Bilanzierung der ins Hypolimnion transportierten SF₆-Menge benötigt man ein Startprofil vom Anfang der Sommerstagnation und ein Endprofil, welches möglichst vor dem Absinken der Thermokline im Herbst aufgenommen werden sollte, um die Bilanz nicht durch Verluste von SF₆ aufgrund einer Einmischung von Epilimnionwasser zu verfälschen. Andererseits muß das Endprofil möglichst spät in der Phase der Sommerstagnation aufgenommen werden, da die Transportvorgänge durch die Chemokline langsam verlaufen und nur durch die Wahl eines langen Zeitraumes eine genaue Bilanzierung erreicht werden kann, da sich dann die SF₆-Konzentrationen im Hypolimnion signifikant von der Hintergrundkonzentration abheben. Das Startprofil wird durch die Hintergrundkonzentration bestimmt, die sich bei der letzten Volldurchmischung im Frühjahr im Mixolimnion

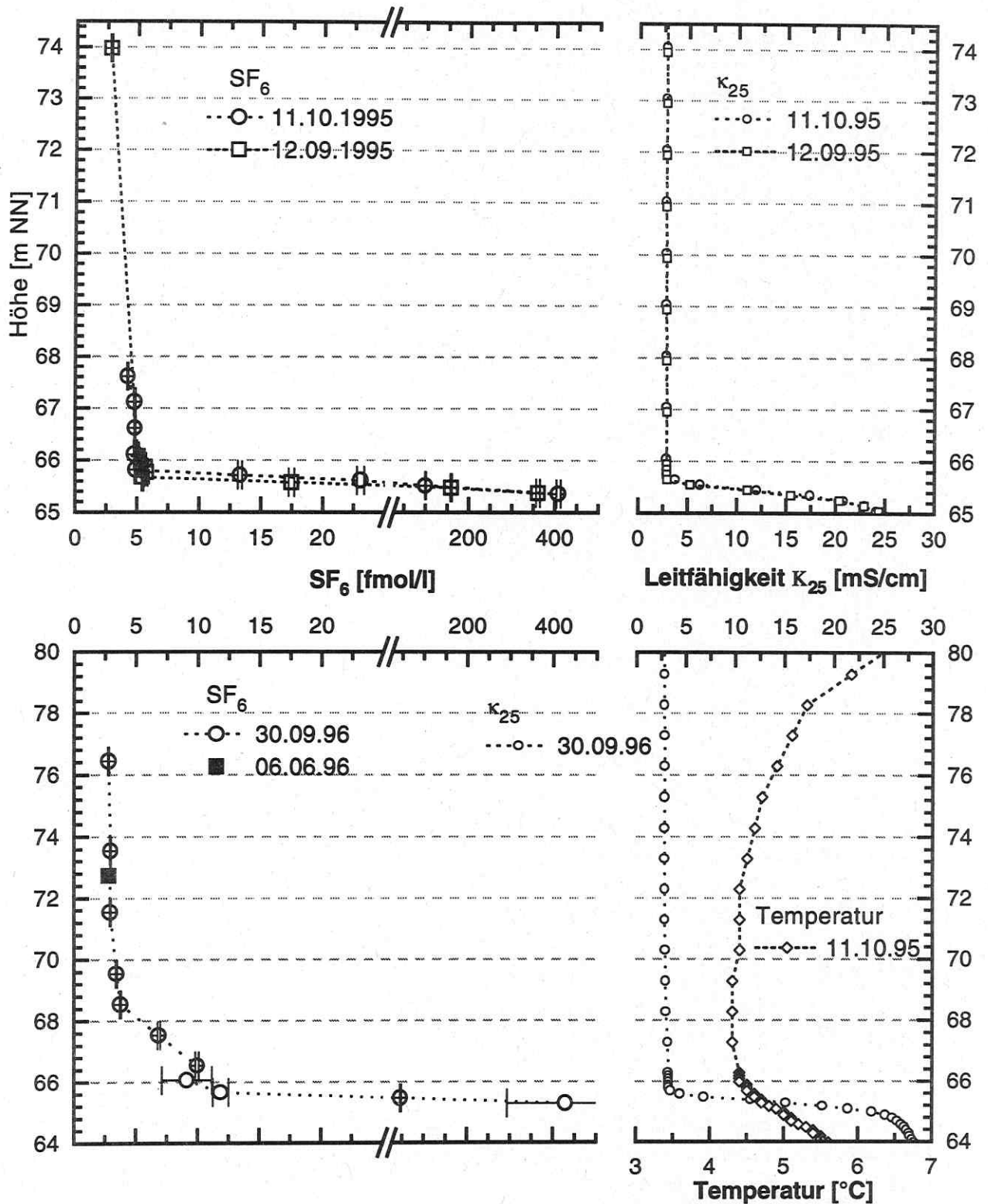


Abb. 3.14: Die im Hypolimnion gemessenen SF_6 -Konzentrationen heben sich dicht über der Chemokline am Ende des Sommers deutlich von der Hintergrundkonzentration ab. Die ebenfalls eingezeichnete Leitfähigkeit läßt die Lage der Chemokline erkennen. Oben: 12.9.1995 und 11.10.1995. An diesen Terminen wurden nur Tiefen dicht über der Chemokline beprobt. Unten: 30.9.1996, das schwarze Quadrat bezeichnet die am 6.6.96 gemessene Hintergrundkonzentration.

eingestellt hat.

Am 12.9.1995, 11.10.1995 und am 30.9.1996 wurden Probennahmen im Hypolimnion durchgeführt. Es wurden Wasserproben aus den im Abschnitt 3.3.1 aufgeführten Meßtiefen genommen, wobei dicht über der Chemokline eine höhere Tiefenauflösung gewählt wurde, da aufgrund der größeren Vertikalgradienten ein stärkerer Anstieg der Konzentration zu erwarten war. Während am 12.9.1995 und 11.10.1995 nur Tiefen bis auf etwa einen Meter beziehungsweise zwei Meter über der Chemokline und am 12.9. zusätzlich noch die Tiefe entsprechend 73,97m NN beprobt wurden, fand am 30.9.1996 die Aufnahme eines Vertikalprofils von der Chemokline bis zur Thermokline mit einer Tiefenauflösung von 0,5 - 2 Meter statt.

Abbildung 3.14 zeigt die gemessenen Vertikalprofile. Die Profile vom 12.9. und 11.10.1995 (oben) zeigen eine Erhöhung der Konzentration in den ersten Metern über der Chemokline auf einen Wert von etwa 5 fmol/l. Die bei 73,97m NN gemessenen Konzentration von 2,81 fmol/l kann demgegenüber als Hintergrundkonzentration betrachtet werden (s. auch Kapitel 3.5.1). Ein Vergleich der SF₆-Verteilung mit dem Profil der Leitfähigkeit zeigt die Ähnlichkeit der beiden Profile auf: Beide Tracer weisen eine Erhöhung der Werte dicht über der Chemokline auf, die allerdings beim SF₆ aufgrund der höheren Meßauflösung deutlicher erkennbar ist. So ist sowohl in den SF₆- als auch in den Leitfähigkeitsprofilen ein Voranschreiten der Diffusionsfront vom 12.9. auf den 11.10.1995 festzustellen. Die nahezu homogene SF₆-Konzentration in den ersten Metern über der Chemokline weist auf relativ hohe vertikale Diffusionskoeffizienten hin.

Das Profil vom 30.9.1996 (Abbildung 3.14 unten) zeigt eine ähnliche Situation wie im Jahr zuvor. Sowohl die Leitfähigkeit als auch die SF₆-Konzentrationen sind über der Chemokline erhöht. Im Vergleich zum Vorjahr wurden höhere SF₆-Konzentrationen dicht über der Chemokline gemessen. Dies ist auf die Ausbreitung der SF₆-Verteilung im Monimolimnion und die daraus resultierende Erhöhung der Konzentration direkt unter der Chemokline zurückzuführen, was zu einem größeren SF₆-Konzentrationsgradient zwischen Hypo- und Monimolimnion und somit zu einem höheren SF₆-Fluß führt. Von etwa 68 - 77m NN ist ein nahezu kontinuierlicher Abfall der gemessenen Konzentration zu finden, wobei der bei 76,44m NN gemessene Wert der am 6.6.96 bestimmten Hintergrundkonzentration von 72,74m NN entspricht. Dies legt die Vermutung nahe, daß die Diffusionsfront nur bis zu einer Tiefe von etwa 74 - 75m NN voranschreiten konnte. Der Vergleich mit dem Temperaturprofil (rechtes Teilbild) zeigt aber, daß bei 76 - 77m NN durch das Absinken der Thermokline eventuell schon eingemischtes Wasser aus dem Epilimnion eine Veränderung der Konzentration bewirkt haben könnte. Demnach ist nicht zu entscheiden, ob die Konzentration bei einer höheren Thermoklinenlage nicht schon höher war und nur durch Oberflächenwasser geringerer SF₆-Konzentration erniedrigt wurde.

Bei der Bilanzierung der aus dem Monimolimnion abdiffundierten SF₆-Menge treten folgende Probleme auf:

- **12.9.1995 und 11.10.1995** Das Startprofil basiert auf der Messung der Hintergrundkonzentration vom 12.9.1995 aus einer Höhe von 73,97m NN. Es wird davon ausgegangen, daß dieser Wert bei der letzten Volldurchmischung des Jahres 1995 zwischen dem 5.4. und 15.5. in der ganzen Wassersäule eingestellt wurde. Die gemessene Konzentration liegt an der Obergrenze der Gleichgewichtswerte mit den

möglichen atmosphärischen SF₆-Konzentrationen (s. auch Kapitel 3.5.1). Demnach könnte die gemessene Konzentration vom 12.9. aus 73,97m NN eventuell nicht dem Startwert entsprechen, sondern schon durch ins Hypolimnion diffundiertes SF₆ erhöht sein. Desweiteren wurden an den beiden Terminen Proben nur dicht über der Chemokline genommen. Daher ist nicht bekannt, bis zu welcher Tiefe die SF₆-Konzentrationserhöhung tatsächlich gereicht hat. Aus diesem Grund ist nur eine Abschätzung der im Hypolimnion befindlichen SF₆-Menge an diesen Terminen möglich.

- **30.9.1996** Das Startprofil aus dem Frühjahr 1996 ist nur unzureichend bekannt. Am 6.6.1996 wurde eine Backgroundprobe aus einer Tiefe von 72,36m NN genommen. Die Eisbedeckung des Sees im Winter und Frühjahr 1996 führte jedoch zu einer thermischen Schichtung des Sees schon unter der Eisdecke (Kapitel 4.2.2), weshalb für den 6.6.1996 nicht von einer homogenen SF₆-Verteilung im gesamten Hypolimnion ausgegangen werden kann. Die letzte Volldurchmischung, die zu einer Homogenisierung des Sees führte, fand vor der Eisbedeckung um den 31.12.1995 statt. Es muß aber davon ausgegangen werden, daß auch unter der Eisdecke bis zur Einstellung einer Temperatur entsprechend des Dichtemaximums die Wassersäule durch Erwärmung aufgrund kurzweiliger Einstrahlung zumindest teilweise durchmischt wurde (Kapitel 4.2.2). Der genaue Zeitpunkt der Homogenisierung der Wassersäule und damit der SF₆-Verteilung ist demnach nicht bekannt und liegt zwischen dem 31.12.1995 und dem Erreichen der Temperatur des Dichtemaximums am 21.3.1996. Desweiteren kann keine Aussage darüber gemacht werden, wieviel SF₆ ins Epilimnion durch die Absenkung der Thermokline und der resultierenden Einmischung von Oberflächenwasser verloren ging. Es ist zudem auch unklar, ob schon während der Sommerstagnation SF₆ über die Thermokline diffundieren und damit der Bilanz verloren gehen konnte.

Die SF₆-Profile lassen aufgrund der beschriebenen Probleme allenfalls eine Mindestabschätzung der SF₆-Menge im Hypolimnion zu. Eine genauere Bilanzierung könnte in Zukunft durch eine zeitlich feiner aufgelöste Probennahme im Hypolimnion erreicht werden. Die im Hypolimnion wiedergefundene SF₆-Menge bestimmt sich für den Sommer 1996 aus dem Profil vom 30.9.1996 zu $2,6 \cdot 10^8 \text{ fmol} \pm 2,8 \cdot 10^7 \text{ fmol}$. Aus den Profilen vom 12.9.1995 und 11.10.1995 läßt sich wie oben beschrieben nur eine grobe Abschätzung für den Sommer 1995 erstellen. Man erhält für den Zeitraum bis 12.9.1995 einen Bilanzwert von $3,1 \cdot 10^8 \pm 1,8 \cdot 10^8 \text{ fmol}$ und für den Zeitraum bis zum 11.10.1995 eine Menge von $2,2 \cdot 10^8 \pm 1,1 \cdot 10^8 \text{ fmol}$.

Zusammen mit der in Kapitel 3.5.5 zu $5 \cdot 10^8 \text{ fmol}$ abgeschätzten im Winter 95/96 abgerodierten Menge läßt sich die insgesamt über die Chemokline transportierte Menge im Zeitraum April 1995 bis Oktober zu $\text{minimal } 1,0 \cdot 10^9 \pm 3 \cdot 10^8 \text{ fmol}$ bestimmen. Dieser Wert ist kleiner als der Fehler der Bilanzen im Monimolimnion (Kapitel 3.5.3) und kann daher durch diese nicht verifiziert werden.

Aus der bilanzierten Menge läßt sich der Diffusionskoeffizient in der Chemokline berech-

nen. Die Menge, die durch die Chemokline diffundiert, läßt sich ausdrücken durch

$$M = j \cdot t \cdot A \quad [\text{fmol}] \quad (3.25)$$

- M im Hypolimnion gefundene SF₆-Menge [fmol]
j Fluß durch die Chemokline, auf die Fläche normiert [fmol/(m²s)]
A Fläche der Chemokline [m²]
t Zeitraum, während dessen der Transport ins Hypolimnion [s] stattgefunden hat

Mit dem Fick'schen Diffusionsansatz

$$j = K \frac{\partial c}{\partial z} \quad [\text{fmol/m}^2 \text{ s}] \quad (3.26)$$

- K Diffusionskoeffizient [m²/s]
 $\frac{\partial c}{\partial z}$ vertikaler Konzentrationsgradient [fmol/m]

ergibt sich

$$K = \frac{M}{t \cdot A \cdot \frac{\partial c}{\partial z}} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (3.27)$$

K setzt sich aus einem molekularen Anteil D und einem turbulenten Anteil K_t zusammen. Der Fehler läßt sich mittels des Gauß'schen Fehlerfortpflanzungsgesetzes berechnen. Die Fläche, über die die Diffusion stattfindet, wird durch Mittelung der in 10cm-Schritten von 65,1 bis 65,5m NN interpolierten Flächen bestimmt, aus der Standardabweichung ergibt sich der Fehler. Der Vertikalgradient wird aus dem Bereich von 65,1 bis 65,5m NN für den Sommer 1995 aus den 6 Profilen vom 5.4. bis zum 11.10.1995 gemittelt, für den Sommer 1996 aus dem Profil vom 6.6. und 30.9.1996. Der Fehler $\Delta \frac{\partial c}{\partial z}$ ergibt sich wiederum aus der Standardabweichung. Der Zeitraum t wird für 1995 durch das Datum der letzten Volldurchmischung im Frühjahr (s. oben) festgelegt und beträgt demnach 145 ± 20 Tage (12.9.1995) beziehungsweise 174 ± 20 Tage (11.10.1995). 1996 ist der Zeitraum wie oben beschrieben nur ungenau bekannt und beträgt 155 ± 40 Tage.

Zeitraum	Dauer	K_{gesamt}	$K_{\text{turbulent}}$	SF ₆ -Transport ins Hypolimnion	
	[Tage]	[10 ⁻⁹ m ² /s]	[10 ⁻⁹ m ² /s]	insgesamt [fmol]	pro Tag [fmol/Tag]
Sommer '95					
bis 12.9.1995	≈145	2,8 ± 1,7	2,1 ± 1,7	3,1·10 ⁸	2,1·10 ⁶
bis 11.10.1995	≈174	1,7 ± 0,9	1,0 ± 0,9	2,2·10 ⁸	1,3·10 ⁶
Sommer '96					
bis 1.10.1996	≈155	1,4 ± 0,4	0,7 ± 0,4	2,6·10 ⁸	1,7·10 ⁶
im Mittel					1,7·10 ⁶

Tab. 3.2: Diffusionskoeffizienten in der Chemokline und SF₆-Transport ins Hypolimnion.

Tabelle 3.2 gibt einen Überblick über die aus dieser Minimalabschätzung gewonnenen Werte des Diffusionskoeffizienten in der Chemokline. Der turbulente Anteil wird nach $K_{\text{turbulent}} = K_{\text{gesamt}} - D$ berechnet, wobei D der molekulare Diffusionskoeffizient von SF_6 ist, der sich in der Chemokline aufgrund der Temperaturabhängigkeit zwischen 0,61 bis $0,76 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ bewegt. Sowohl die gesamten als auch die turbulenten Diffusionskoeffizienten sind innerhalb der Fehler als gleich zu bezeichnen. Die Abschätzung aus dem Zeitraum des Sommers 1996 ist die genaueste und weist auf einen nicht verschwindenden turbulenten Diffusionskoeffizienten in der Chemokline hin, der sich in etwa der gleichen Größenordnung wie der molekulare Diffusionskoeffizient von SF_6 bewegt.

Kapitel 4

Vertikale Mischungsprozesse

Vertikale Mischungsprozesse, die durch Wind und den Wärmehaushalt eines Sees angetrieben werden, spielen eine entscheidende Rolle für die Schichtungsdynamik in Seen. Sie beeinflussen die Tiefe der Deckschicht während der thermischen Schichtungsphase und sind für den vertikalen Transport im Hypolimnion und im Monimolimnion im Fall eines meromiktischen Sees verantwortlich. Der vertikale Transport kann durch das Konzept der turbulenten Diffusion beschrieben werden (s. auch Kapitel 5.3). Die Kenntnis über die Größenordnung und Tiefenabhängigkeit der Transportprozesse ist somit nötig, um Aussagen über die Schichtungsdynamik eines Sees treffen zu können.

Im weiteren soll deshalb für den Fall des Hufeisensees zunächst eine Parametrisierung der turbulenten Diffusion im Mixolimnion erfolgen (Kapitel 4.1). Im Kapitel 4.2 wird die Temperaturentwicklung des Hufeisensees im Winter 95/96 beschrieben und daraus die Mischungsprozesse während einer Eisbedeckung abgeleitet. Die speziellen Verhältnisse im Monimolimnion werden im Kapitel 4.3 anhand der Tracer Temperatur, Leitfähigkeit und SF_6 betrachtet. Der Vergleich der Ergebnisse aus der Entwicklung der Verteilung dieser drei Tracer mit der Zeit läßt auch die Abschätzung eines maximalen Zuflusses im Monimolimnion zu.

4.1 Diffusionsansatz im Mixolimnion

In diesem Abschnitt soll eine Parametrisierung der turbulenten Diffusionskoeffizienten im Mixolimnion beschrieben werden. Maiss [1996] erstellte auf der Grundlage von Untersuchungen mehrerer Seen einen Ansatz für den vertikalen Diffusionskoeffizienten, in den die Schichtstabilität, die Windgeschwindigkeit und von der Seegeometrie abhängige Faktoren eingehen. Der Ansatz für den vertikalen Diffusionskoeffizienten basiert auf der Beobachtung, daß der turbulente Auftriebsfluß, also das Produkt aus der Schichtstabilität und dem turbulenten Diffusionskoeffizienten, mit der Tiefe exponentiell abklingt. Diese Beobachtung hält auch über die Thermokline hinweg. Mittels eines exponentiellen Fits des Auftriebsflusses kann somit unter Einbeziehung der gemessenen Schichtstabilität und theoretischen Überlegungen zum Zusammenhang zwischen Windenergieeintrag, Dissipation und Auftriebsfluß ein halbempirischer Ansatz für den Diffusionskoeffizienten gebildet werden.

Es soll im folgenden gezeigt werden, daß das exponentielle Abklingen des Auftriebsflusses mit der Tiefe auch im Mixolimnion des Hufeisensees beobachtet werden kann. Die dazu benötigten vertikalen Diffusionskoeffizienten werden mittels der Gradient-Fluß Methode bestimmt, die zunächst beschrieben werden soll. Es folgt die Ermittlung der Diffusionskoeffizienten K_v , der Stabilität N^2 und zuletzt des Auftriebsflusses. Mit der bestimmten Eindringtiefe läßt sich sodann der für das Seemodell LIMNMOD benötigte Ansatz für den Diffusionskoeffizienten (s. Kapitel 5.4.4) formulieren.

Gradient-Fluß-Methode Heinz et al. [1990] geben einen Überblick über die Gradient-Fluß-Methode. Der Fluß einer Größe im See ist nach dem Konzept der turbulenten Diffusion für eine Tiefe z

$$j(z) = -K(z) \frac{\partial C(z)}{\partial z} \quad (4.1)$$

- z vertikale Koordinate, positiv nach unten [m]
 C Konzentration der Größe
 K vertikaler Diffusionskoeffizient [m^2/s]

Dieser Fluß vergrößert die Konzentrationen in tieferen Schichten, wenn der Vertikalgradient der Konzentration negativ ist und umgekehrt. Die Veränderung des totalen Inhaltes der Größe kann durch

$$\int_z^{z_m} \frac{\partial C(\tilde{z})}{\partial t} A(\tilde{z}) d\tilde{z} = j(z) A(z) \quad (4.2)$$

- z_m maximale Tiefe des Sees [m]
 $A(z)$ Fläche in der Tiefe z [m^2]

ausgedrückt werden, falls keine Quellen oder Senken vorhanden sind.

Aus 4.1 und 4.2 erhält man eine Beziehung für den vertikalen Diffusionskoeffizienten

$$K(z) = - \frac{\int_z^{z_m} \frac{\partial C(\tilde{z})}{\partial t} A(\tilde{z}) d\tilde{z}}{\frac{\partial C(z)}{\partial z} A(z)} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (4.3)$$

Für diskrete Tiefenintervalle wird das Integral durch eine Summation ersetzt

$$K_i = - \frac{\sum_{k=1}^i a_k V_k}{G_i A_i} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (4.4)$$

- K_i Diffusionskoeffizient an der oberen Grenze der Schicht i [m^2/s]
 a_i $\frac{\partial C_i}{\partial t}$ zeitlicher Gradient der Konzentration in der Schicht i
 G_i $\frac{\Delta C_i}{\Delta z}$ vertikaler Gradient der Konzentration an der oberen Grenze der Schicht i
 Δz Höhe der Schichten [m]
 V_i Volumen der Schicht i [m^3]
 A_i Fläche der oberen Grenze der Schicht i [m^2]

Die Schichten werden von unten nach oben durchnummeriert, die Nummer der tiefsten Schicht ist 1.

Die Fehler dieser Methode können nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz bestimmt werden. Es ergibt sich

$$\left(\frac{\sigma_{K_i}}{K_{v,i}} \right) = \left(\frac{\sigma_{G_i}}{G_i} \right) + \frac{\sum_{k=1}^i (V_k \sigma_{a_k})^2}{\left(\sum_{k=1}^i V_k A_k \right)^2} \quad (4.5)$$

- σ_{K_i} Standardabweichung des Diffusionskoeffizienten
 σ_{G_i} Standardabweichung des vertikalen Konzentrationsgradienten
 σ_{a_i} Standardabweichung der zeitlichen Konzentrationsänderung

Berechnung der vertikalen Diffusionskoeffizienten Als Datenbasis zur Bestimmung der vertikalen Diffusionskoeffizienten werden die die Temperatur- und Leitfähigkeitsprofile vom 15.5.95 und 18.7.95 verwendet. Die Profile wurden auf die Höhen 91,9; 90,9; ... $\Delta z = 1$ m ... ; 63,9; 63,1 m NN interpoliert (Abbildung 4.1). Die zeitlichen Änderungen der Temperatur $\frac{dT}{dt}|_i$ in dem betrachteten Zeitraum wurden für alle Tiefen aus den Differenzen der Temperatur des Anfangsprofil vom 15.5.95 und des Endprofils vom 18.7.95 bestimmt.

Aus den interpolierten Profilen wurde die Dichte ρ_i nach Abschnitt 2.3 und die Stabilitätsfrequenz N_i^2 nach Gleichung 2.5 für jeden der beiden Termine errechnet. Die so ermittelten Dichte- und Stabilitätsprofile wurden jeweils durch arithmetische Mittelung zu einem Profil zusammengefaßt.

Der vertikale Temperaturgradient $\frac{dT}{dz}|_i$ wird aus den interpolierten Profilen bestimmt. In den in Abbildung 4.1 schraffiert unterlegten Bereichen ist der Temperaturgradient kleiner als $0,1^\circ\text{C}/\text{m}$ und damit im Bereich der Meßauflösung von der WTW - Temperatur- und Leitfähigkeitssonde ($0,1^\circ\text{C}$). Aus diesem Grund wird für diese Tiefenbereiche ein mittlerer Temperaturgradient aus der Temperatur- und Tiefendifferenz des obersten und untersten Meßwertes des jeweiligen Bereiches gebildet und für alle Tiefenwerte dazwischen ein kontinuierlicher Verlauf angenommen. Man erhält so zwei Profile des vertikalen Temperaturgradienten, die zu einem Profil arithmetisch gemittelt werden.

Damit sind alle Ausgangsdaten vorhanden, die zur Ermittlung der vertikalen Diffusionskoeffizienten $K_{ges,i}$ mit der Gradient-Fluß-Methode nach Formel 4.4 nötig sind, wenn für die Konzentration der Wärmeinhalt eingesetzt wird. Die obige Formel wird modifiziert, um den Sedimentwärmefluß als Wärmequelle berücksichtigen zu können. Es wird

$$K_{ges,i} = - \frac{\sum_{k=1}^i \left\{ V_k \frac{dT}{dt}|_k - \frac{Q_{geo}(A_k - A_{k-1})}{c_p \rho} \right\}}{A_i \frac{dT}{dz}|_i} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (4.6)$$

- Q_{geo} Sedimentwärmefluß [W/m^2]
 ρ Dichte des Wassers [kg/m^3]
 c_p Wärmekapazität des Wassers: $4,18 \cdot 10^3 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
 $\frac{dT}{dt}|_i$ zeitliche Veränderung der Temperatur in der Schicht i [K/s]
 $\frac{dT}{dz}|_i$ vertikaler Temperaturgradient an der oberen Grenze der Schicht i [K/m]

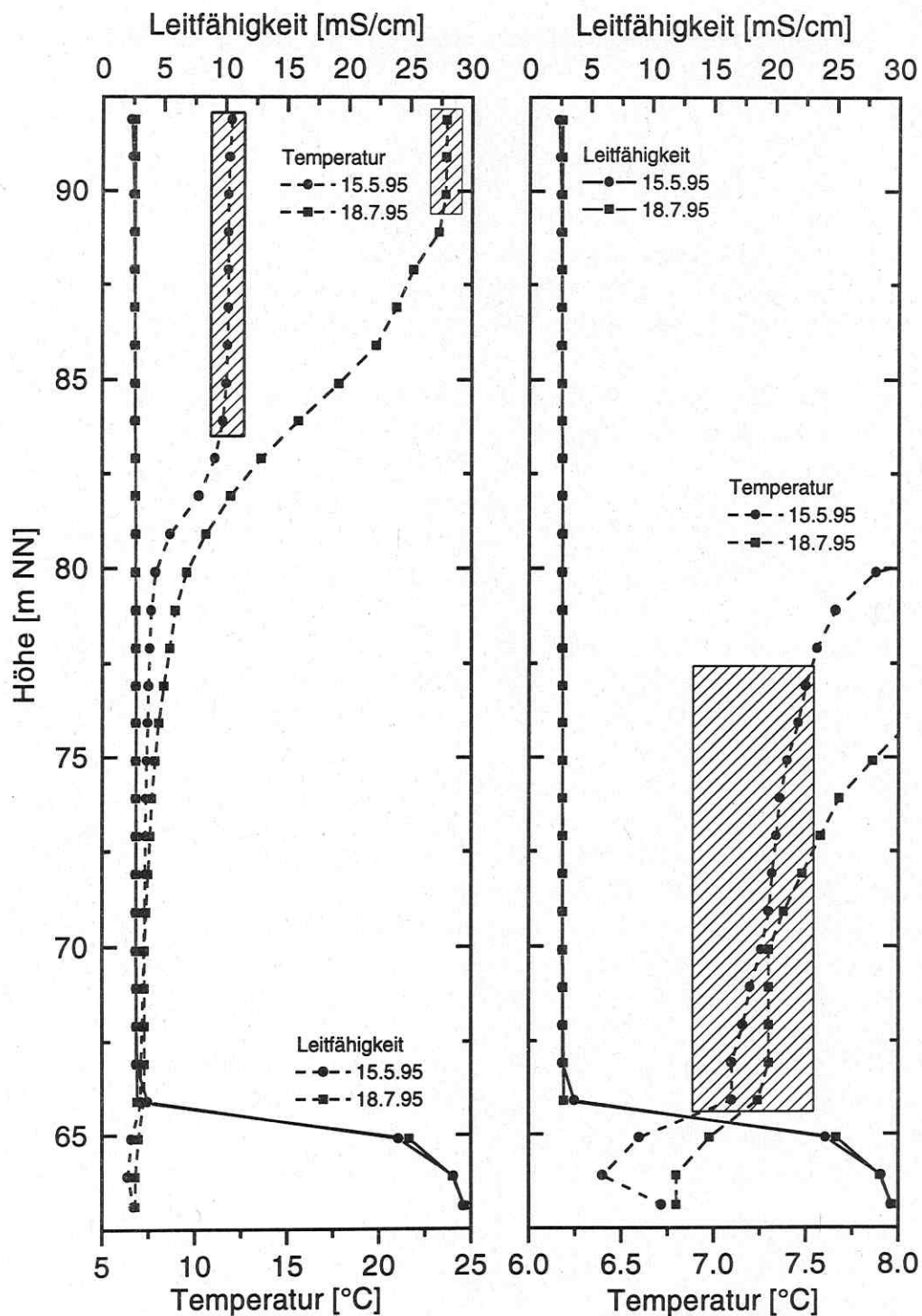


Abb. 4.1: Temperatur und Leitfähigkeit am 15.5.95 und 18.7.95. Links: Temperaturbereich 5°C bis 25°C. Rechts: Temperaturbereich 6°C bis 8°C. In den schraffiert unterlegten Kurvenabschnitten ist der Temperaturgradient kleiner als 0,1 °C/m. Dies ist im Epilimnion und im tiefen Hypolimnion dicht über der Chemokline der Fall.

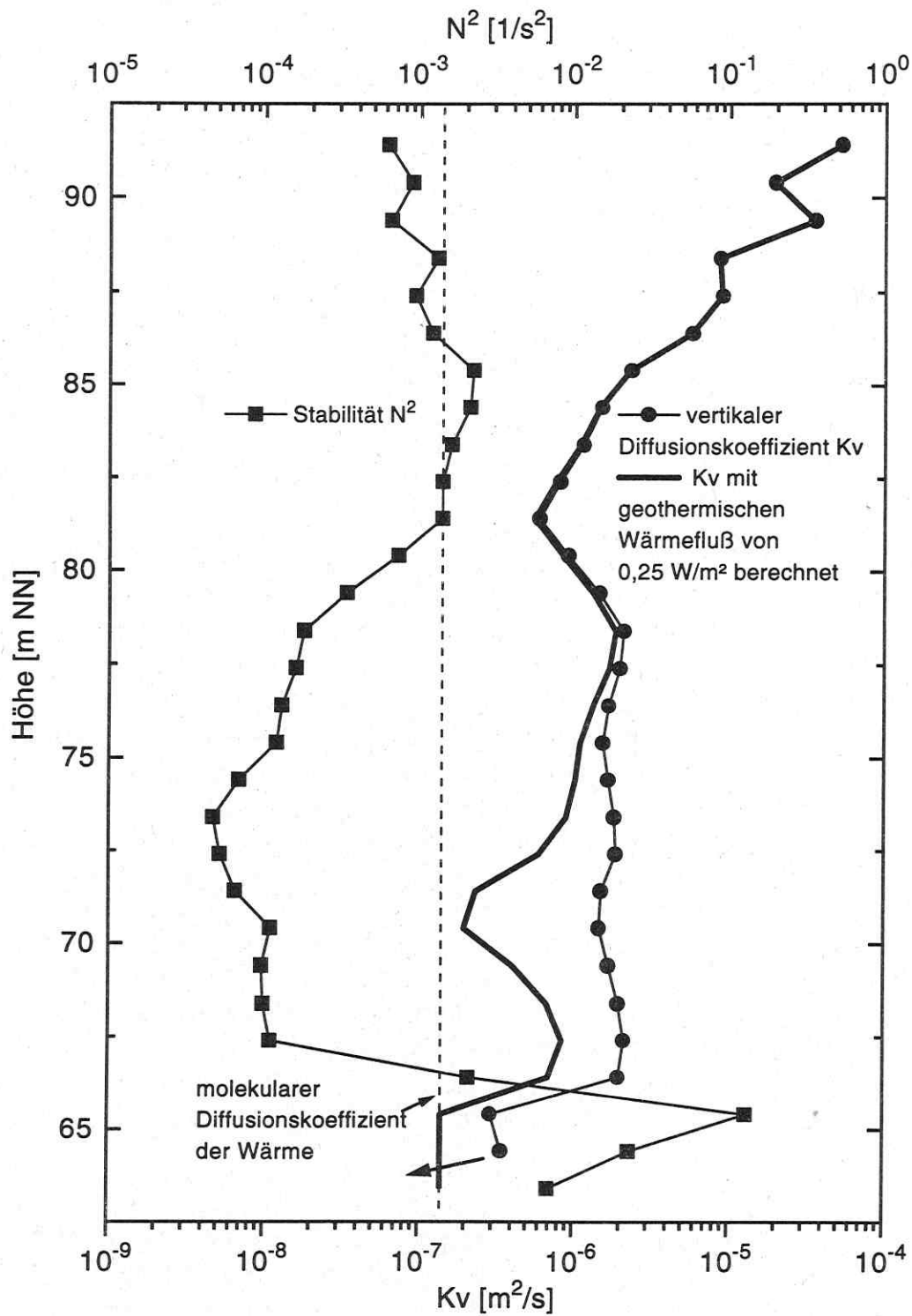


Abb. 4.2: Stabilität und vertikaler Diffusionskoeffizient aus der Temperaturentwicklung vom 15.5. - 18.7.1995. Der Pfeil deutet einen negativen Wert an, der in der logarithmischen Auftragung nicht darstellbar und das Resultat einer Temperaturinversion im Monimolimnion ist. Der Sedimentwärmefluß bewirkt nur in den tieferen Schichten große Änderungen.

Der Fehler dieser Methode wird nach dem Fehlerfortpflanzungsgesetz zu

$$\Delta K_{ges,i} = K_{ges,i} \cdot \sqrt{\frac{\Delta \left(\frac{dT}{dz} \right)_i}{\left(\frac{dT}{dz} \right)_i^2} + \frac{\sum_{k=1}^i \left\{ V_k \Delta \left(\frac{dT}{dt} \right)_k \right\}^2}{\left\{ \sum_{k=1}^i \left(V_k \frac{dT}{dt} \right)_k - \frac{Q_{geo}(A_k - A_{k-1})}{c_p \rho} \right\}^2}} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (4.7)$$

$\Delta \left(\frac{dT}{dt} \right)_i$ Fehler der zeitlichen Temperaturveränderung in der Schicht i [K/s]

$\Delta \left(\frac{dT}{dz} \right)_i$ Fehler des vertikalen Temperaturgradienten an der oberen Grenze der Schicht i [K/m]

bestimmt. Die Fehler werden zu $\Delta \left(\frac{dT}{dt} \right)_i = \frac{0,1^\circ\text{C}}{\Delta t = 64\text{d}} = 1,6 \cdot 10^{-3} \text{ }^\circ\text{C/d}$ und $\Delta \left(\frac{dT}{dz} \right)_i = 0,05 \text{ }^\circ\text{C/m}$ angenommen. Die Ergebnisse für den vertikalen Diffusionskoeffizienten und die Stabilitätsfrequenz N^2 sind in Abbildung 4.2 dargestellt. Sie stellen ein zeitliches Mittel für den betrachteten Zeitraum dar.

Es sind die Ergebnisse für K_{ges} zum einen ohne und zum anderen unter Berücksichtigung eines Sedimentwärmeflusses gezeigt, der hier zu $0,25 \text{ W/m}^2$ angenommen wurde. Die Stabilität und die vertikalen Diffusionskoeffizienten sind invers korreliert. In Bereichen hoher Stabilität wie der Thermo- und der Chemokline sind die errechneten Diffusionskoeffizienten niedrig und umgekehrt.

Die Berücksichtigung eines Sedimentwärmeflusses macht sich erst in größeren Tiefen bemerkbar. Unterhalb von etwa 80 m NN weicht der so errechnete Diffusionskoeffizient um bis zu einer Größenordnung von dem ohne Sedimentwärmefluß errechneten ab. Es läßt sich für diesen Bereich auch keine Korrelation mit der Stabilität mehr erkennen. Im Tiefenbereich des Monimolimnions ergeben die mit dem Sedimentwärmefluß berechneten Diffusionskoeffizienten im Mittel den molekularen Diffusionskoeffizienten der Wärme, während ohne die Berücksichtigung des Sedimentwärmeflusses die berechneten Diffusionskoeffizienten im oberen Monimolimnion doppelt so groß sind, im unteren Monimolimnion aber negativ werden. Die große Abweichung der beiden errechneten Diffusionskoeffizientenprofile im Bereich unter 73 m NN durch den Sedimentwärmefluß ist ein Resultat des großen Sedimentflächenanteils in diesen Tiefen (Abbildung 2.3).

Auftriebsfluß Der Auftriebsfluß J ist durch

$$J = K_v \cdot N^2 = J_{mol} + J_{turb} \quad (4.8)$$

definiert. Hier soll zwischen einem "molekularem" (J_{mol}) und einem "turbulenten" (J_{turb}) Auftriebsfluß unterschieden werden, da sich der Diffusionskoeffizient K_{ges} ebenfalls aus einem turbulenten (K_{turb}) und einem molekularen (D_{mol}) Anteil zusammensetzt:

$$K_{ges,i} = K_{turb,i} + D_{mol} \quad (4.9)$$

Der molekulare Anteil ist für jede Größe im See unterschiedlich, der turbulente Anteil für alle Größen gleich. Der gesamte Diffusionskoeffizient und damit der Auftriebsfluß wird

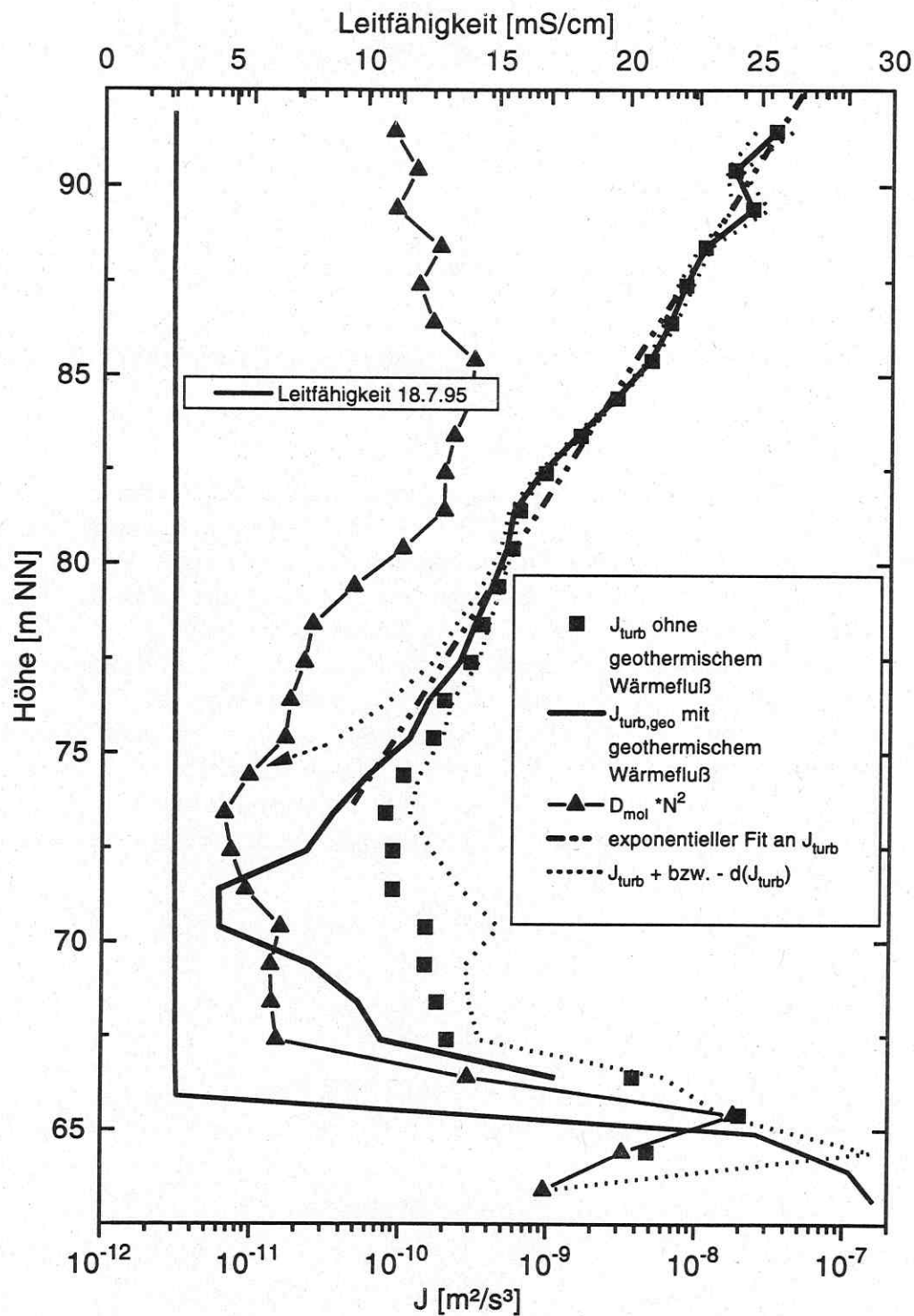


Abb. 4.3: Errechneter turbulenter Auftriebsfluß, mit und ohne Berücksichtigung des Sedimentwärmeflusses. Als unteres Schranke ist der molekulare Auftriebsfluß für die Wärme eingezeichnet. Die Lage der Chemokline ergibt sich aus dem dargestellten Leitfähigkeitsprofil.

demnach bei gleicher turbulenter Diffusion für jede Größe im See, abhängig von dem Wert der molekularen Diffusionskonstante, unterschiedlich groß. Deshalb soll bei dem Eindringverhalten des Auftriebsflusses nur der turbulente Anteil berücksichtigt werden, der für alle Größen gleich ist.

Es ist

$$K_{turb,i} = K_{ges,i} - D_{mol} \stackrel{!}{\geq} 0 \quad (4.10)$$

wobei K_{turb} und damit ebenfalls

$$J_{turb,i} = K_{turb,i} \cdot N_i^2 = (K_{ges,i} - D_{mol}) \cdot N_i^2 \stackrel{!}{\geq} 0 \quad (4.11)$$

größer Null bleiben soll.

Der Fehler ΔJ_{turb} ist durch den Fehler des vertikalen Diffusionskoeffizienten bestimmt; der Fehler der Stabilität wird nicht berücksichtigt.

$$\Delta J_{turb} = \Delta(K_{turb,i} \cdot N_i^2) = \Delta K_{ges,i} \cdot N_i^2 \quad (4.12)$$

Abbildung 4.3 gibt einen Übersicht der verschiedenen Größen. Es ist das Profil des Auftriebsflusses mit ($J_{turb,geo}$) und ohne (J_{turb}) Berücksichtigung eines Sedimentwärmeflusses von $0,25 \text{ W/m}^2$ zusammen mit den Fehlern für ersteren Fall gezeigt. Die Pfeile deuten negative Werte an. Die ermittelten Werte sind wie die bestimmten Diffusionskoeffizienten als zeitliches Mittel über den betrachteten Zeitraum zu verstehen. Desweiteren ist der "molekulare" Auftriebsfluß, errechnet aus der molekularen Diffusionskonstante der Wärme und der Stabilität, eingezeichnet. Unter 77 m NN spannen die Fehler einen weiten Bereich, der sich über mehrere Größenordnungen erstreckt, für den "turbulenten" Auftriebsfluß auf. Im tiefen Hypolimnion und im Monimnolimnion liegt der ermittelte "turbulente" Auftriebsfluß in den Grenzen der Fehler maximal in der Größe des "molekularen" Auftriebsflusses, minimal bei 0. Ein exponentielles Eindringen wurde durch die Anpassung einer Beziehung der Form

$$J_{turb,e-fit} = J_0 \cdot e^{-\frac{z}{z_0}} \quad [\text{m}^2/\text{s}^3] \quad (4.13)$$

z	Tiefe [m]
z_0	Eindringtiefe [m]
J_0	Fitparameter [m^2/s^3]

an $J_{turb,geo}$ für den Tiefenbereich von 0 - 19 m bestätigt. Durch diesen Fit wird die Eindringtiefe z_0 bestimmt, die wesentlich durch die Geometrie des Sees bestimmt scheint [Maiss, 1996]. Man erhält

$$\begin{aligned} J_0 &= 4,86 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}^3 (\pm 24\%) \\ z_0 &= 2,7 \text{ m} (\pm 3\%) \end{aligned}$$

Mit den so ermittelten Werten der Eindringtiefe und J_0 läßt sich nach Maiss [1996] der folgende Ansatz für die vertikalen Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Tiefe, der Windgeschwindigkeit und weiterer Koeffizienten formulieren (siehe auch Kapitel 5.4.3):

$$K_v = c_D \chi \frac{1}{N^2} \frac{\rho_L}{\rho_w} \frac{R_f}{z_0} u_{10}^3 e^{-\frac{z}{z_0}} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (4.14)$$

N^2	Brunt - Väisälä - Stabilitätsfrequenz (s. Gl. 2.5) [$1/s^2$]
c_D	Windschubkoeffizient [-]
ρ_L	Dichte der Luft [kg/m^3]
ρ_w	Dichte des Wassers [kg/m^3]
R_F	Flux - Richardsonzahl [-]
z_0	Eindringtiefe der turbulenten kinetischen Energie [m]
z	Tiefe [m]
u_{10}	Windgeschwindigkeit in 10m Höhe [m/s]

χ ist ein dimensionsloser Faktor, der angibt, wieviel Prozent der Windenergie ins Wasser eingetragen wird und beträgt $\approx 1 - 2\%$ [Imboden und Wüest, 1995].

Für den Tiefenbereich des Monimolimnions können die obigen Betrachtungen keine Aussage liefern, da die auftretenden Fehler durch die erreichbare Meßgenauigkeit zu groß sind und die mittleren turbulenten Diffusionskoeffizienten in die Größenordnung der molekularen Diffusion kommen. Eine genauere Betrachtung der Verhältnisse im Monimolimnion folgt in Kapitel 4.3.

4.2 Temperaturentwicklung im Winter 95/96

Von Dezember 1995 bis April 1996 wurden kontinuierliche Temperaturmessungen durchgeführt. Dabei kamen zwei verschiedenen Temperatursensoren zum Einsatz, zum einen vom 1.12.1995 bis zum 17.4.1995 ein Hugrun Seamon in 1,2m Wassertiefe mit einer absoluten Genauigkeit von $0,05^\circ C$ und einer relativen Genauigkeit von $0,025^\circ C$ und zum anderen vom 1.12.1995 bis zum 20.1.1996 eine Temperaturmeßkette von Aanderaa Instruments mit 10 Thermistoren, deren absolute Genauigkeit $0,1^\circ C$ ist, während die relative Genauigkeit $0,023^\circ C$ beträgt. Die Temperatur wurde von beiden Meßgeräten alle 20 Minuten aufgezeichnet.

4.2.1 Temperaturmeßkette im Monimolimnion

Die Meßkette wurde so in den See eingebracht, daß einige Thermistoren im Monimolimnion positioniert waren, der Rest sich aber oberhalb der Chemokline befand. Der Abstand der Thermistoren betrug jeweils 0,5 m. Ein geringerer Abstand der Sensoren und damit ein vollständiges Einbringen der Kette in das Monimolimnion war aus technischen Gründen nicht möglich. Die relative Lage der Meßkette zur Chemokline und die absoluten Tiefen der einzelnen Sensoren sind aus Abbildung 4.4 zu entnehmen. Der Tiefenfehler beträgt ± 4 cm. Ebenfalls in dieser Abbildung sind die Zeitserien der Temperatur für die untersten 3 Sensoren sowie für den 5. und 6. Sensor von unten dargestellt. Der 4. Sensor lieferte keine verwertbaren Daten. Weiterhin ist die Temperaturentwicklung in 1,2m Wassertiefe zum Vergleich abgebildet. Das eingezeichnete Tiefenprofil der Leitfähigkeit und der Temperatur wurde am Starttag, dem 1.12.1995 aufgenommen.

Deutlich ist das Temperaturprofil als ein Winterprofil zu erkennen. Das Mixolimnion ist voll durchmischt und auf eine Temperatur von $4,5^\circ C$ gestellt, während im Monimolimnion eine Temperaturinversion auftritt und die Temperatur wieder bis auf $7^\circ C$ ansteigt.

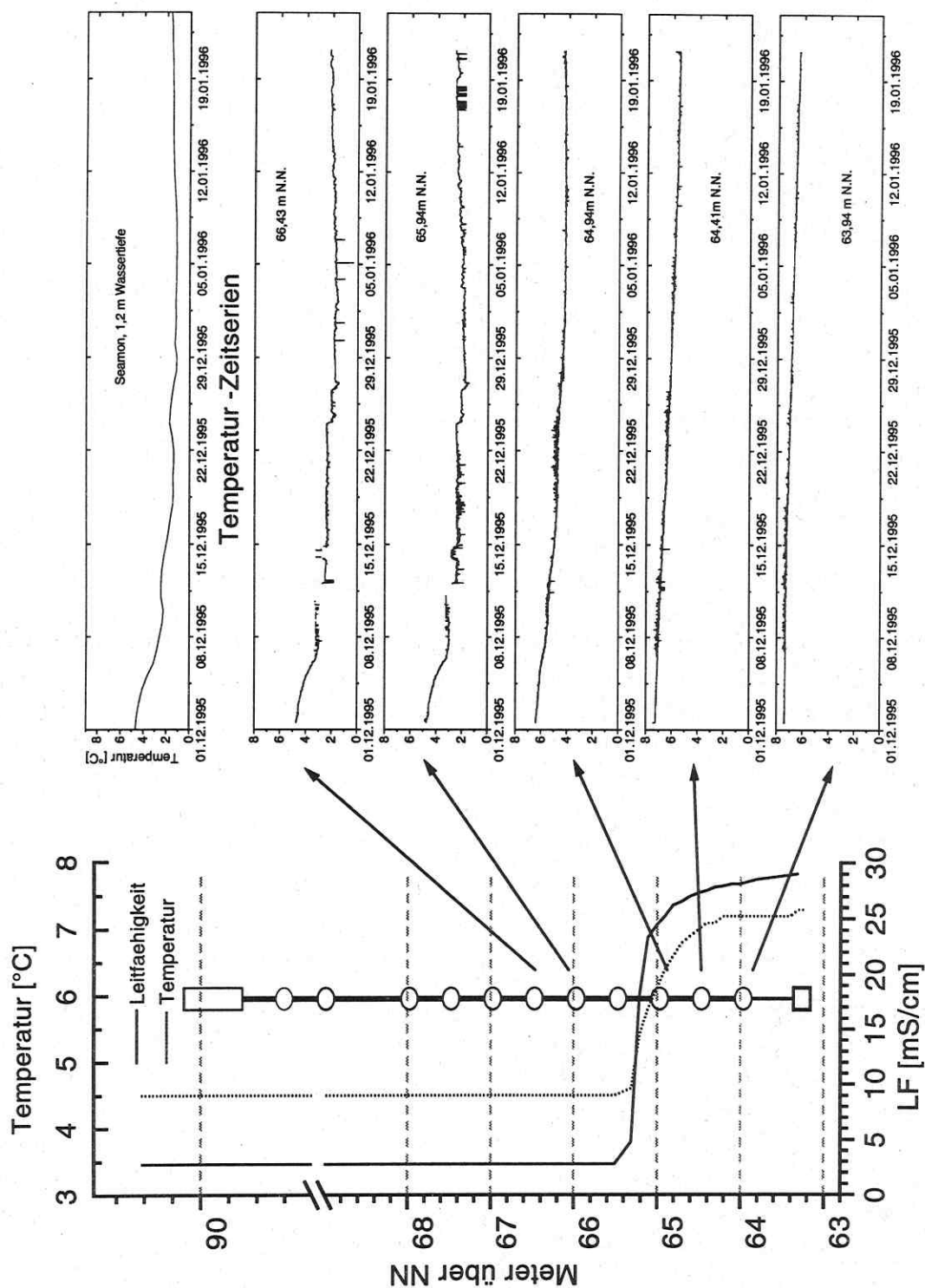


Abb. 4.4: Lage der Temperaturmeßkette. Rechts sind die Zeitserien der Temperatur für die entsprechenden Tiefen dargestellt. Zum Vergleich ist noch die Temperaturentwicklung an der Oberfläche eingezeichnet.

Auf 64,41m NN und auf 63,94m NN ist von den schnell wechselnden Temperatureinflüssen aus dem Mixolimnion nichts mehr zu sehen, es zeigt sich ein langsamer Abbau der Temperaturinversion durch Diffusion. Die Temperaturentwicklung auf 64,94m NN scheint ebenfalls hauptsächlich durch Diffusion dominiert, doch sind hier schon einige Temperaturschwankungen mit kürzerer Periode simultan zu denen des Mixolimnions zu erkennen. Um aus den Temperaturdaten der Meßkette eine Abschätzung des Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion zu gewinnen, wurde mit einem Diffusionsmodell ausgehend vom Startprofil am 1.12.1995 die Temperaturentwicklung nachmodelliert (Kapitel 4.3.1).

Aufschluß über die Temperaturentwicklung des Hufeisensees unter einer Eisdecke konnte aus der Zeitserie (Abbildung 4.5) des Temperatursensors in 1,2m Wassertiefe gewonnen werden. Für die ersten 50 Tage des Meßzeitraums stehen zusätzlich noch die Meßketten-
daten zum Vergleich zur Verfügung. Hiervon ist in der Abbildung 4.5 die Temperatur des obersten Thermistors, also der von der Chemokline am weitesten entfernte, eingezeichnet. Die ersten fünf Tage gehen beide Temperaturkurven exakt synchron, der See ist also voll durchmischt bis zum Monimolimnion. Danach trennen sich die Kurven, treffen aber ab und zu wieder zusammen, wobei die Temperatur auf 68,94m NN jeweils höher ist als an der Oberfläche und in etwa konstant bleibt. Dies läßt sich dadurch erklären, daß das Mixolimnion ab diesem Zeitpunkt nur zeitweise voll durchmischt war, da sich bei Temperaturen unterhalb des Dichtemaximums bereits eine oberflächliche inverse Temperaturschichtung aufbauen kann. Erst bei entsprechendem Windenergieeintrag und damit Zerstörung der oberflächlich inversen Temperaturschichtung wird die ganze Wassersäule oberhalb der Chemokline auf eine einheitliche Temperatur gestellt, zu diesen Zeitpunkten treffen sich die Kurven der Oberflächen- und Tiefentemperatur wieder.

- Phase 1: Vom 1.1.96 bis ca. 15.2.96 verläuft die Temperatur dicht unter Eis relativ gleichmäßig bei ca. $1,5^{\circ}\text{C}$, wie man es für eine winterliche inverse Schichtung erwarten würde.
- Phase 2: Ab etwa dem 15.2.96 bis zum 21.3.96 ändert sich dieses Bild grundlegend.

Es findet eine gleichmäßige Erwärmung statt, die erst bei Erreichen des Dichtemaximums ($3,7^{\circ}\text{C}$) am 21.3.96 eine Änderung erfährt.

- Phase 3: Vom 21.3.96 bis zum 8.4.96 setzt sich die Erwärmung fort, allerdings ist die Erwärmungsrate nach dem Überschreiten des Dichtemaximums bei exakt $3,7^{\circ}\text{C}$ wesentlich höher. Am 8.4.96 schließlich ist ein deutlicher Sprung in der Temperatur zu erkennen, an diesem Tag schmolz das Eis ab und kälteres Wasser aus der Tiefe konnte durch Wind bis an die Oberfläche gemischt werden. Das Abtauen der Eisfläche am 8. April wird auch durch direkte Beobachtung von Herrn Eckert, Wasserski-Club, bestätigt.

Offensichtlich wurde trotz der Eisdecke Wärmeenergie in den See eingetragen. Als Quellen kommen wärmeres Grundwasser und Heizung durch die Eisdecke hindurch aufgrund Absorption solarer Kurzwellenstrahlung in Frage. Die langwellige Einstrahlung aus der Atmosphäre wird in den ersten Zentimetern der Eisdecke absorbiert und kann damit nicht zur Erwärmung des Wassers beitragen. Ebenso spielt der Sedimentwärmefluß ei-

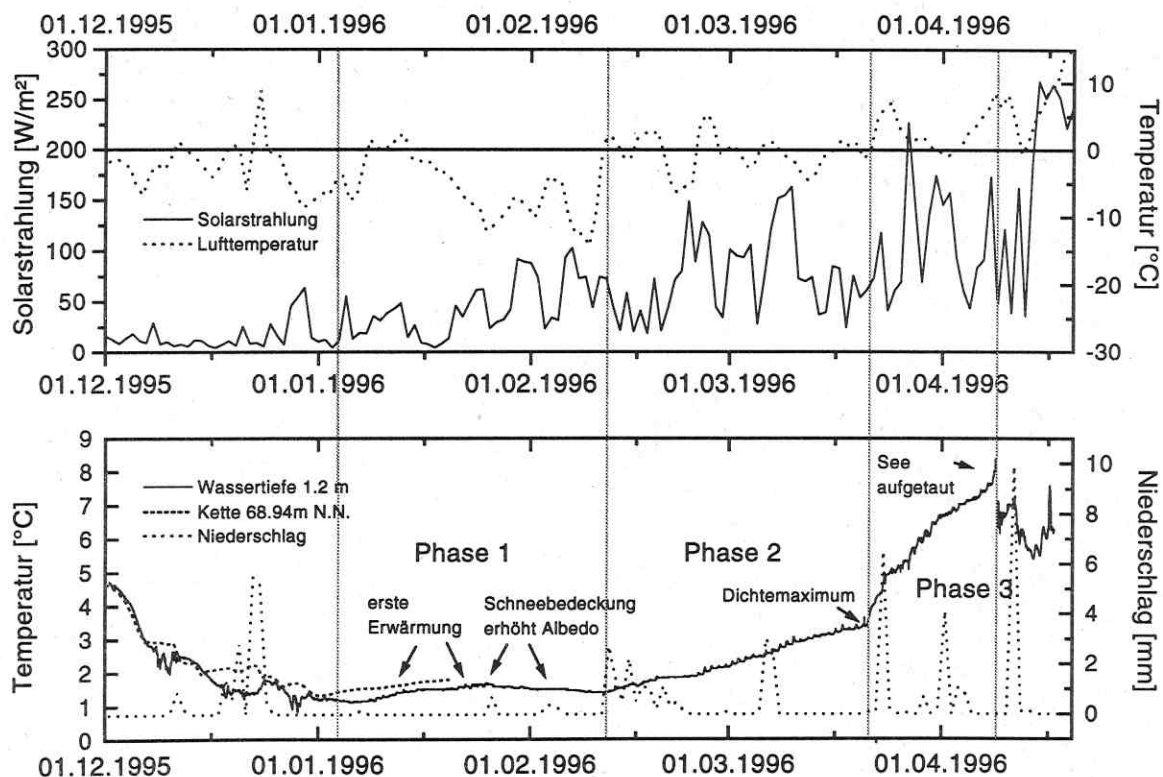


Abb. 4.5: Temperaturentwicklung in 1,2m Wassertiefe. Weiterhin ist für die ersten 50 Tage die Temperatur auf 68,48m NN, also etwa 3m über der Chemokline dargestellt. Mit der Solarstrahlung, der Lufttemperatur und dem Niederschlag lassen sich die eingezeichneten drei Phasen der Temperaturentwicklung an der Oberfläche erklären.

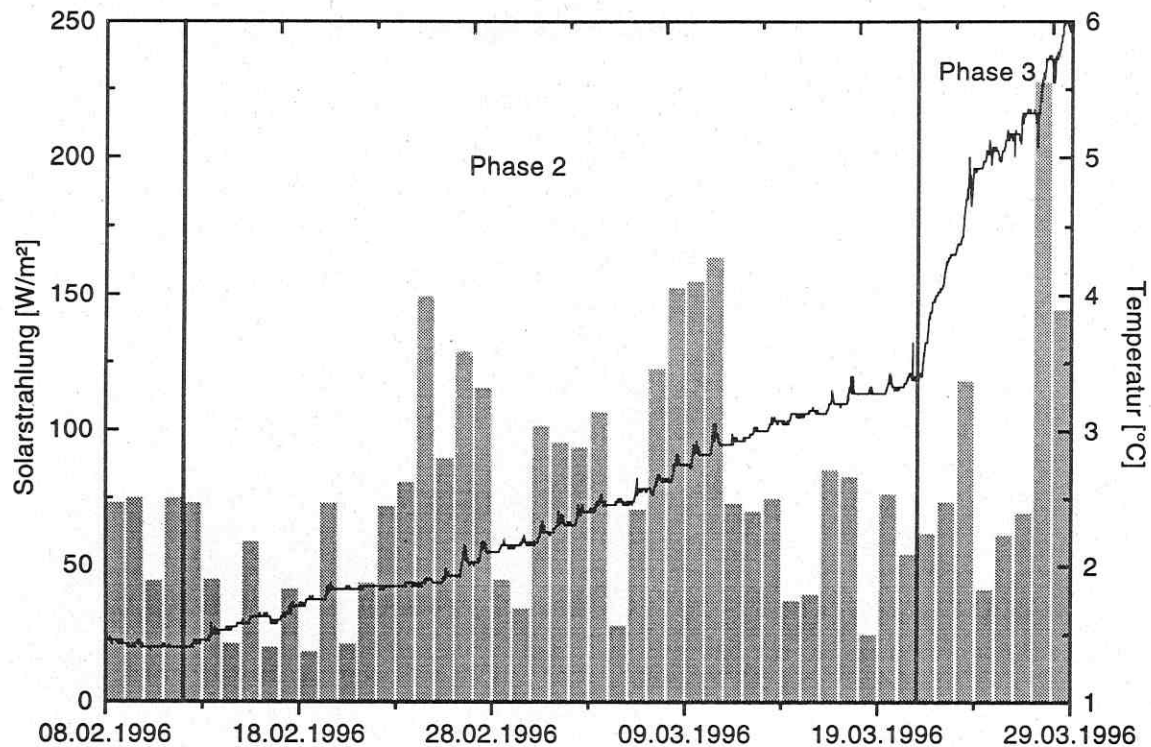


Abb. 4.6: Temperaturentwicklung in 1.2m Wassertiefe (Linie) und Tageswerte (Blockdiagramm) der Solarstrahlung. Deutlich ist ein Tagesgang der Temperaturkurve zu erkennen. In der Phase 2 findet ein Temperaturanstieg statt, der sich in der Phase 3 stark erhöht.

ne untergeordnete Rolle. Bengtsson [1996] bestätigt, daß die solare Einstrahlung für die thermische Entwicklung und Mischungsprozesse von eisbedeckten Seen verantwortlich ist, wenn das Eis schneefrei ist. Eine genauere Betrachtung der Temperaturzeitserie in Abbildung (4.6) enthüllt sowohl in Phase 2 als auch in Phase 3 einen deutlichen Tagesgang der Temperatur. Es ist ein Anstieg der Temperatur über den Tag mit einem Maximum zur Mittagszeit sowie ein Abfall über Nacht, allerdings nicht bis zum Wert des Vortages, zu erkennen. Damit wird klar, daß der wesentliche Betrag zur Aufheizung des Sees durch die solare Kurzwellenstrahlung geleistet wird.

Damit lassen sich nun auch die verschiedenen Phasen erklären:

Das Mixolimnion war zu Beginn der Phase 1 fast über die ganze Wassersäule auf eine Temperatur von 1,2°C gestellt. Die Wassertemperatur befand sich also unterhalb des Dichtemaximums von 3,7°C. Die Kurzwellenstrahlung dringt gemäß dem Lambert-Beerschen Gesetz

$$I_z = I(0)e^{-\eta z} \quad \eta = \text{Absorptionskoeffizient} \quad (4.15)$$

in Wasser ein.

Für den Hufeisensee kann ein mittler Absorptionskoeffizient von $0,7 \frac{1}{m}$ angenommen werden (siehe auch Kapitel 6.1). In 3m Tiefe sinkt die Intensität demnach auf $\approx 10\%$ und in 6m Tiefe auf $\approx 1,5\%$ der durch das Eis dringenden Strahlungsintensität ab.

Es wird somit im wesentlichen die Temperatur und damit auch die Dichte der oberen Wasserschichten erhöht, dieses Wasser sinkt ab und mischt sich dabei mit tieferliegendem kälterem Wasser. Es schichtet sich entsprechend seiner Mischtemperatur und -dichte ein. Diese konvektive Mischung durchgreift das gesamte Mixolimnion, das heißt, die Isothermen stehen senkrecht bis auf einen Bereich dicht unterhalb des Eises, wo die Temperatur bis auf 0°C an der Eis-Wasser-Grenzfläche absinkt. Dieser Vorgang hält an, bis das gesamte Mixolimnion die Temperatur des Dichtemaximums erreicht hat. Dann kann sich sowohl wärmeres als auch kälteres Wasser nur in den obersten Schichten unter dem Eis einschichten. Damit ist auch das Ende der Phase 2 erreicht.

Die Unterscheidung in Phase 1 und Phase 2 läßt sich auf eine Schneebedeckung der Eisfläche gegen Ende der Phase 1 zurückführen. Schon zu Beginn von Phase 1 sind zwei Perioden der Erwärmung, die gleichzeitig mit Maxima in der Kurzwellenstrahlung auftreten, zu erkennen (Abbildung 4.5). Am 26.1.96 und am 3. - 5.2.96, also am Ende der Phase 1, gab es geringen Niederschlag, der bei Temperaturen um -10°C als Schnee niederging. Schnee erhöht die Reflektion bis auf das dreifache (siehe auch unten). Weiterhin gibt Wetzels [1983] an, daß schon durch 0,5cm Schnee nur noch 34 Prozent der einfallenden Strahlung dringen. Insgesamt kann sich also durch Schnee eine Reduktion der durchdringenden Strahlung um bis zu 90 Prozent ergeben. Dies erklärt, warum am Ende der Phase 1 trotz hoher Kurzwellenstrahlung die Wassertemperatur sinkt. Zu Beginn der Phase 2 stiegen die Temperaturen über 0°C , die dünne Schneeschicht konnte abschmelzen, was zu einem erneuten Anstieg der Wassertemperatur führte. Im Verlauf der Phase 2 erhöhte sich auch die Solarstrahlung, was die größere Steigung der Kurve in diesem Bereich erklärt. In der Phase 3 war die Solarstrahlung nicht höher als in Phase 2 (Im Mittel 77 W/m^2 gegenüber 105 W/m^2). Die Steigung der Temperaturkurve wird jedoch unmittelbar nach Überschreiten des Dichtemaximums wesentlich größer. Die Ursache hierfür ist, daß das in den obersten Metern erwärmte Wasser nun eine geringere Dichte aufweist als das restliche Mixolimnion. Damit kann keine konvektive Mischung stattfinden, es bildet sich eine Schichtung unter dem Eis aus. Dies läßt sich auch aus Abbildung 4.7 erkennen, dort ist ein Temperaturprofil vom 17. April 96, also eine Woche nach vollständigem Abschmelzen der Eisdecke, gezeigt. Durch die Schichtung ist das zu erwärmende Wasservolumen kleiner, bei gleicher Einstrahlung steigt die oberflächennahe Temperatur schneller an.

Um eine ungefähre Vorstellung der Größenordnungen zu bekommen, wurde eine Abschätzung des Wärmeeintrags durch das Grundwasser und die solare Strahlung gemacht.

Zur Abschätzung des Wärmeenergieeintrages durch das Grundwasser wird ein Haupteintrag durch den Grundwasserleiter 15 angenommen, der im Höhenbereich 92m NN bis 88m NN in den See eintritt [Strauch et al., 1996] und etwa eine Temperatur von 10°C hat. Der See wird in dieser Abschätzung als eine Grundwassersenke (Ergebnis der Isotopenbilanz in Kapitel 6.8) mit einem Zufluß von $1500 \text{ m}^3/\text{Tag}$ angenommen (Kapitel 6.2.4).

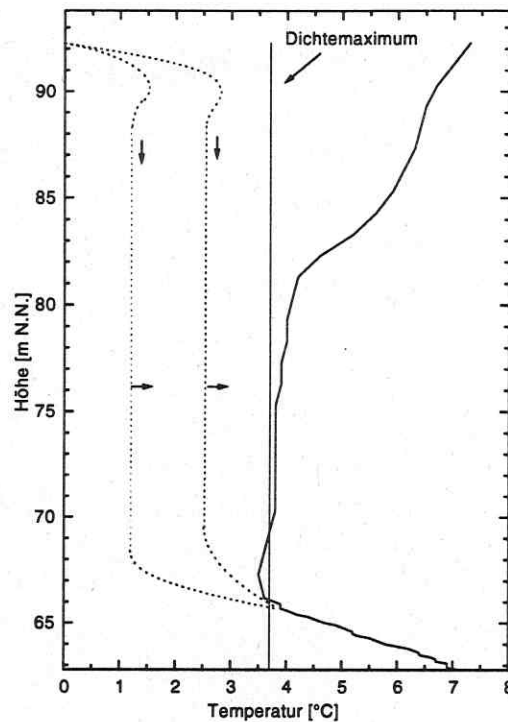


Abb. 4.7: Temperaturprofil vom 17.04.96 (durchgezogene Linie). Die links eingezeichneten Temperaturverläufe verdeutlichen die im Text beschriebene Temperaturentwicklung des Mixolimnions in der Phase 2 vor Erreichen des Dichtemaximums.

Die Temperaturänderung ergibt sich dann aus einer Mischungsrechnung

$$\Delta T = \sum_t \left(\frac{T_{GW}(t)V_{GW}(t) + T_{See}(t)V_{See}(t)}{V_{GW}(t) + V_{See}(t)} - T_{See}(t) \right) \quad [^{\circ}\text{C}] \quad (4.16)$$

wobei T_{GW} die Temperatur des einfließenden Grundwassers und T_{See} die des Sees in $^{\circ}\text{C}$, V_{See} das Volumen des Sees und V_{GW} die Grundwasserzuflußmenge in m^3 bedeuten.

Rogers et al. [1995] machen Angaben über ein Eismodell, das zwischen verschiedenen Schichten (Schnee, Schnee-Eis, Eis) unterscheidet. Zur Abschätzung der Wassertemperatur unter Eis genügt jedoch das in Abbildung 4.8 dargestellte Modell. Es wird von einer Eis-Luft-Grenzfläche und einer Eis-Wasser-Grenzfläche ausgegangen. Die Energiebilanz wird für jede Grenzfläche gesondert erstellt, da die Energieflüsse an den verschiedenen Grenzflächen unabhängig voneinander sind.

Zur Berechnung der Wassertemperatur sind die Energieflüsse an der Eis-Wasser-Grenzfläche zu betrachten. Diese sind

- q_f , der Energiefluß im Eis, der im wesentlichen von der Wärmeleitung im Eis und der im Eis absorbierten solaren Strahlung bestimmt wird.

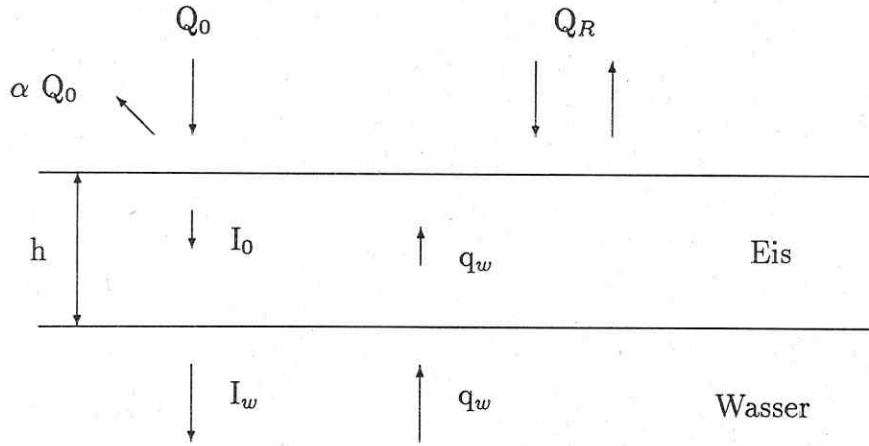


Abb. 4.8: Vereinfachtes Modell für die Energieflüsse durch Eis. Q_0 ist die einfallende solare Strahlung, αQ_0 der reflektierte Anteil, Q_R die Summe der restlichen Energieflüsse ins und aus dem Eis, I_0 und I_w die einfallende solare Strahlung ins Eis bzw. ins Wasser, q_f der Energiefluß im Eis und q_w Energiefluß im Wasser.

- q_w , der Energiefluß vom Wasser zum Eis, ist nur von den Bedingungen in der Wassersäule und nicht von q_f abhängig. Treten keine Strömungen unter dem Eis auf, so kann von rein diffusiver Wärmeleitung ausgegangen werden. Dann ist nach Rogers et al. [1995] ein linearer Temperaturabfall von T_w , der Wassertemperatur, auf $T_m = 0^\circ\text{C}$ über eine Strecke z von ca. 0,5m eine gute Näherung für den Temperaturgradient an der Eis- Wasser-Grenzfläche und damit

$$q_w = -K_w \frac{T_w - T_m}{z} \quad [\text{W/m}^2] \quad (4.17)$$

wobei die Wärmeleitfähigkeit $K_w = 0.57 \frac{\text{W}}{\text{m}^\circ\text{C}}$ ist. Hier wurde jedoch $z = 1\text{m}$ verwendet, da der Sensor ungefähr diesen Abstand zum Eis hatte.

- I_w , die durch das Eis ins Wasser eindringende solare Strahlung $[\text{W/m}^2]$.

Jedes Ungleichgewicht zwischen q_f und q_w führt zu weiterer Eisbildung oder zum Abtauen von Eis (ρ : Dichte des Wassers $[\text{kg/m}^3]$, L : Schmelzwärme des Wassers $[334 \text{ kJ/kg}]$):

$$q_f - q_w = \rho L \frac{dh}{dt} \quad [\text{W/m}^2] \quad (4.18)$$

Für die Wassertemperatur müssen jedoch nur I_w und q_w betrachtet werden. Die Temperaturänderung im Zeitabschnitt Δt ergibt sich dann aus der Differenz der Wärmeflüsse nach

$$\Delta T = \frac{(I_w - q_w)A \cdot \Delta t}{Vcp} \quad [^\circ\text{C}] \quad (4.19)$$

wobei c die Wärmekapazität des Wassers, A die Seefläche und V das Seevolumen ist. Die einfallende Solarstrahlung Q_0 wird zu einem Bruchteil α von der Oberfläche des Eises reflektiert, die ins Eis eindringende Strahlung wird hier als I_0 bezeichnet. I_w kann als

	Transmission (Annahme)	Erwärmung/Wärmeeintrag durch solare Strahlung nach (4.19)	Erwärmung durch Grundwasser nach(4.16)
Phase 1+2	21%	5,66E+10 kJ $\Delta T = 2,3^{\circ}\text{C}$	$\Delta T = 0,2^{\circ}\text{C}$
Phase 3	57%	6,30E+10 kJ $\Delta T = 3,9^{\circ}\text{C}$	$\Delta T = 0,02^{\circ}\text{C}$

Tab. 4.1: Abschätzung und Vergleich von Wärmeenergieeintrag durch Grundwasser und solare Strahlung. Die Wärmeenergiebeträge sind jeweils über die ganze Phase aufsummiert.

prozentualer Anteil von I_0 ausgedrückt werden und wird damit zu

$$I_w = \beta(1 - \alpha)Q_0 \quad [\text{W/m}^2]; \quad \alpha = \text{Albedo} \quad \beta = \frac{I_w}{I_0} \quad (4.20)$$

Patterson und Hamblin [1988] geben für Eis eine Albedo von 0,25 und für Schnee 0,6 bis 0,85 an. Wetzel [1983] und Williams [1969] machen Angaben zu β für klares Eis und blasiges Eis von 0,3 bis 0,4m Dicke, die von 40 - 75 % reichen. Insgesamt können also durch klares Eis der angegebenen Dicke noch 30 - 55 % der Solarstrahlung ins Wasser eindringen.

Rogers et al. [1996] geben für Schnee - Eis von 0,2 - 0,3m Dicke an, daß noch ca. 10 - 25 % von Q_0 ins Wasser eindringen. In Tabelle 4.1 wird eine Zusammenfassung der abgeschätzten Temperaturänderung durch Grundwasser sowie durch solare Strahlung in Abhängigkeit vom Prozentsatz der transmittierten Strahlung gegeben. Dabei wurde für die Phase 1 + 2 eine Erwärmung des ganzen Sees aufgrund obiger Überlegungen und für die Phase 3 nur der obersten 6 Meter angenommen, welche einerseits aus der Zustromhöhe des Grundwassers sowie der Abschätzung der Eindringtiefe der Solarstrahlung und zum anderen aus dem Temperaturverlauf am Ende der Eisbedeckung resultieren. Aus Abbildung 4.7 ist ersichtlich, daß nur die obersten Meter auf eine Temperatur über $3,7^{\circ}\text{C}$ erwärmt wurden.

Die Daten für die Kurzwellenstrahlung stammen von der Station Halle/Kollwitz des Deutschen Wetterdienstes.

Aus den berechneten Temperaturänderungen (Tabelle 4.1) wird deutlich, daß der Beitrag des Grundwassers alleine nicht ausreicht, die gemessenen Temperaturwerte im See zu erklären. Dies bestätigt die Annahme der Aufheizung durch solare Einstrahlung.

Der Prozentsatz der transmittierten Solarstrahlung wurde so angepaßt, daß die errechnete Temperaturänderung mit der tatsächlich beobachteten übereinstimmt. In der Phase 1 und 2 liegt der so ermittelte Transmissionskoeffizient gut in dem oben angegebenen Bereich,

insbesondere wenn man berücksichtigt, daß das Eis den größten Zeitraum dieser Periode nicht von Schnee bedeckt war und es sich damit um klares Eis gehandelt hat.

Für die Phase 3 ergibt sich ein Koeffizient, der an der oberen Grenze des angegebenen Bereiches liegt. Allerdings ist dabei zu berücksichtigen, daß die obigen Angaben sich auf 30 bis 40 cm dickes Eis beziehen, während das Eis des Hufeisensees in dieser Phase bereits abschmolz und zum Ende hin bereits wesentlich dünner war. Dementsprechend erscheint der ermittelte Wert durchaus realistisch.

4.3 Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion

Die Bestimmung der vertikalen Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion kann anhand der Tracer Temperatur, Leitfähigkeit und SF_6 erfolgen. Im weiteren soll zunächst eine Abschätzung der Diffusionskoeffizienten aus der Temperaturentwicklung im Monimolimnion im Winter 95/96 anhand einer Modellierung der Temperaturdaten versucht werden. Sodann wird auf die Bestimmung der Diffusionskoeffizienten aus der Leitfähigkeitsentwicklung und aus der SF_6 -Ausbreitung eingegangen. Ein Vergleich der Ergebnisse aus den verschiedenen Tracern wird in Abschnitt 4.3.4 gegeben.

4.3.1 Abschätzung des Sedimentwärmeflusses und der Diffusionskoeffizienten aus der Temperaturentwicklung im Winter 95/96

Wie in Abschnitt 4.2.1 dargestellt, wurde im Winter 1995/1996 vom 1.12.1995 bis zum 21.1.1996 die Temperaturentwicklung im Monimolimnion kontinuierlich aufgezeichnet. Aus dieser Temperaturentwicklung können Aussagen über den vertikalen Diffusionskoeffizienten gewonnen werden. Hierfür wurde mit einem Diffusionsmodell eine Simulation für den entsprechenden Zeitraum erstellt und mit den Meßwerten verglichen. Dabei kann auch ein Sedimentwärmefluß berücksichtigt werden. Im folgenden soll zunächst auf die Randbedingungen für die spezielle Simulation der Temperaturentwicklung im Monimolimnion eingegangen, sodann eine Abschätzung des Sedimentwärmeflusses gegeben und zuletzt die optimierte Simulation der Temperaturentwicklung beschrieben werden.

Für diese spezielle Simulationen der Daten der Temperaturmeßkette wird davon ausgegangen, daß das gesamte Mixolimnion einer winterlichen Vollzirkulation unterliegt und daher eine einheitliche Temperatur besitzt. Die Wassersäule oberhalb des Monimolimnions wird deshalb so behandelt, als hätte sie die Temperatur, die der erste Thermistor der Meßkette über der Chemokline mißt. Dieser Thermistor befindet sich in einer Höhe von $65,94 \pm 0,05$ m NN. Die Temperaturrecords dieses Thermistors werden dazu auf Tageswerte gemittelt und diese Temperatur dem gesamten Mixolimnion zugewiesen.

Beim Stellen des Mixolimnions auf diese Temperatur-Tageswerten ergibt sich ein Fehler durch die Diskretisierung des Sees in Schichten. Abbildung 4.9 zeigt den Verlauf der Leitfähigkeit am 1.12.1995 und die Schichteneinteilung in diesem Bereich. Die Chemokline

ist zu diesem Zeitpunkt sehr scharf ausgeprägt und liegt in einem Bereich von $65,3 \pm 0,05$ m NN. Sie liegt damit in der Mitte der Schicht 39. Beim Durchstellen des Mixolimnions auf die Temperatur des Thermistors auf 65,94 m NN kann bis zur Schicht 38, also bis zu einer Tiefe von 65,4m NN (Fall 1) oder aber bis zur Schicht 39, also bis zu einer Tiefe von 65,2 m NN (Fall 2) durchmischt werden. Beide Alternativen erzeugen einen nicht zu vernachlässigenden Unterschied, da entsprechend der Wahl der Sprungschicht der Temperaturgradient in dieser Tiefe und damit auch der Wärmefluß durch Diffusion verändert wird.

Die Modellierung der Temperaturentwicklung erfolgt zunächst mit einem einfachen Box-Diffusionsmodell unter Annahme rein molekularer Diffusion ($1,4 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$).

Die Ausgabe der modellierten Temperatur erfolgt in Form von Tageswerten. Es werden für jeden Tag die Temperaturen der entsprechenden Schichten in eine Datei ausgegeben und auf die genaue Tiefe der Thermistoren interpoliert.

Die Startprofile der Temperatur und der Leitfähigkeit wurden am 1.12.1995 direkt vor dem Einbringen der Temperaturmeßkette im Rahmen dieser Arbeit aufgenommen.

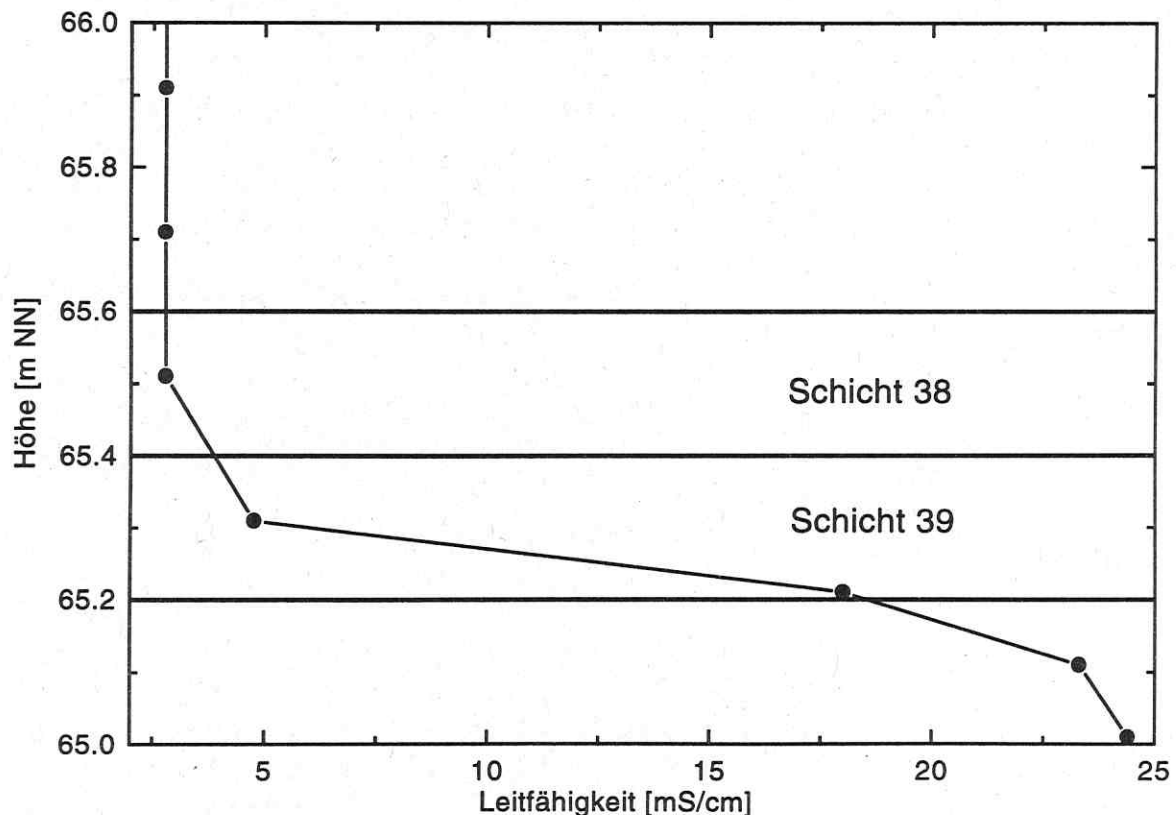


Abb. 4.9: Leitfähigkeitsprofil vom 1.12.1995 und Schichteinteilung im Bereich der Chemokline. Aufgrund der Diskretisierung ist es nicht möglich, die sehr scharf ausgeprägte Sprungschicht im Modell wiederzugeben.

Sedimentwärmefluß Bei der Simulation der Temperaturdaten wird der Sedimentwärmefluß berücksichtigt. Daraus ergibt sich die Möglichkeit, Aussagen über die Größe dieses Wärmeflusses zu gewinnen, wobei jedoch nur die ungefähre Größenordnung bestimmt werden kann. In dieser Simulation der Temperaturentwicklung im Monimolimnion werden drei verschiedene Werte für den Sedimentwärmefluß angenommen: 0,1, 0,25 und 0,4 W/m². Abbildungen 4.10 und 4.11 geben die Ergebnisse der Simulationen wieder. Abbildung 4.10 zeigt die Zeitentwicklung der Temperatur für die verschiedenen Annahmen. Die Temperaturkurve auf 65,94 m NN gibt die Temperatur des Thermistors oberhalb der Chemokline wieder und entspricht damit der angenommenen Mixolimniontemperatur. In allen Tiefen und für beide Fälle 1 und 2 der Mixolimnionstiefe bewirken die verschiedenen Annahmen für den Sedimentwärmefluß unterschiedliche Verläufe der Temperaturentwicklung. Mit einem Wärmefluß von 0,4 W/m² verläuft der Temperaturabfall generell etwas langsamer, während ein Wärmefluß von 0,1 W/m² ein schnelleres Absinken der Temperatur bewirkt. Entsprechend ist auch die zum Ende des Simulationszeitraumes erreichte Temperatur etwas höher beziehungsweise niedriger. Desweiteren läßt sich erkennen, daß sich der Sedimentwärmefluß in größeren Tiefen stärker auswirkt, die modellierten Temperaturen laufen für die verschiedenen Annahmen in einer Höhe von 63,94 m NN stärker auseinander als auf einer Höhe von 64,94 m NN. Dies ist auf das zum Grund hin ansteigende Verhältnis zwischen Sedimentfläche zu Volumen zurückzuführen. Welche der Annahmen für den Sedimentwärmefluß realistisch ist, läßt sich anhand der Temperaturprofile ersehen. In Abbildung 4.11 sind das Startprofil vom 1.12.1995, das gemessene Profil am Ende des Simulationszeitraumes und die Simulationsergebnisse im oberen Bild für Fall 1 und im unteren Bild für Fall 2 dargestellt. In beiden Fällen ist deutlich zu erkennen, daß ein Sedimentwärmefluß von 0,4 W/m² zu hoch angesetzt ist. Es treten insbesondere am Grund unrealistisch hohe Temperaturen auf, die von keiner Temperaturmessung im Hufeisensee bestätigt werden können. Dagegen liegen sowohl bei einem Wärmefluß von 0,1 W/m² als auch von 0,25 W/m² die am Grund des Monimolimnions berechneten Temperaturen in einem Bereich zwischen den beobachteten Temperaturen vom 1.12.95 und 17.4.96. Bis zum 17.4.1996 war das tiefe Mixolimnion kälter als das tiefe Monimolimnion (s. Abschnitt 4.2). Das Temperaturprofil vom 17.4. ist daher als Minimalabschätzung der am Grund des Monimolimnions auftretenden Temperaturen anzunehmen. Nach diesen Betrachtungen ist der Sedimentwärmefluß in einem Bereich zwischen 0,1 und 0,25 W/m² anzunehmen.

Sensitivität auf die Wahl der Sprungschicht Den obigen Betrachtungen folgend wird für die Simulation als optimaler Wert für den Sedimentwärmefluß $Q_{geo} = 0,25 \text{ W/m}^2$ angenommen. Als einziger offener Parameter bleibt nun noch die Wahl der Sprungschichthöhe, die wie oben ausgeführt, einen nicht zu vernachlässigenden Einfluß hat (Abbildung 4.12). Am Ende der Simulationsperiode beträgt der Unterschied der Temperatur zwischen beiden Fällen der Mixolimnions-Durchmischung (bis einschließlich Schicht 38 beziehungsweise Schicht 39) bis zu 0,5°C. Jedoch gibt weder die Simulation des Falles 1 noch die Simulation des Falles 2 die tatsächliche Temperaturentwicklung optimal wieder. Da die Chemokline sich zwischen diesen beiden Grenzfällen befindet, wurde der Mittelwert beider Simulationsergebnisse gebildet. Dieser ist in Abbildung 4.12 gestrichelt eingezeichnet.

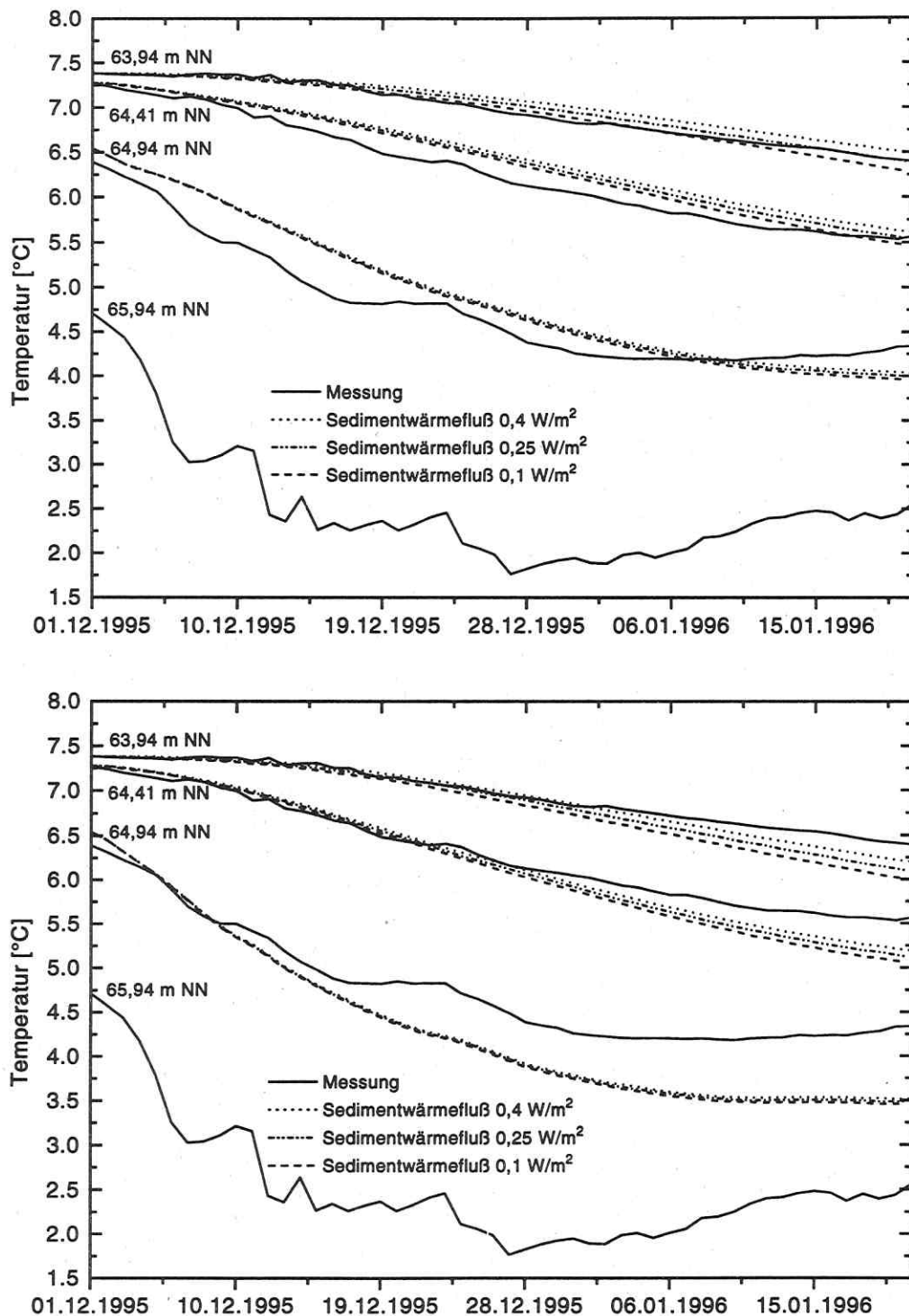


Abb. 4.10: Modellerte Temperaturentwicklung im Monimolimnion für verschiedene Annahmen des Sedimentwärmeflusses. Oben: Bis Schicht 38, unten: bis Schicht 39 auf eine Temperatur gestellt. Die unterbrochenen Linien geben die Ergebnisse der Simulation wieder. Insbesondere in größeren Tiefen hat der Sedimentwärmefluß deutliche Auswirkungen auf den Temperaturverlauf.

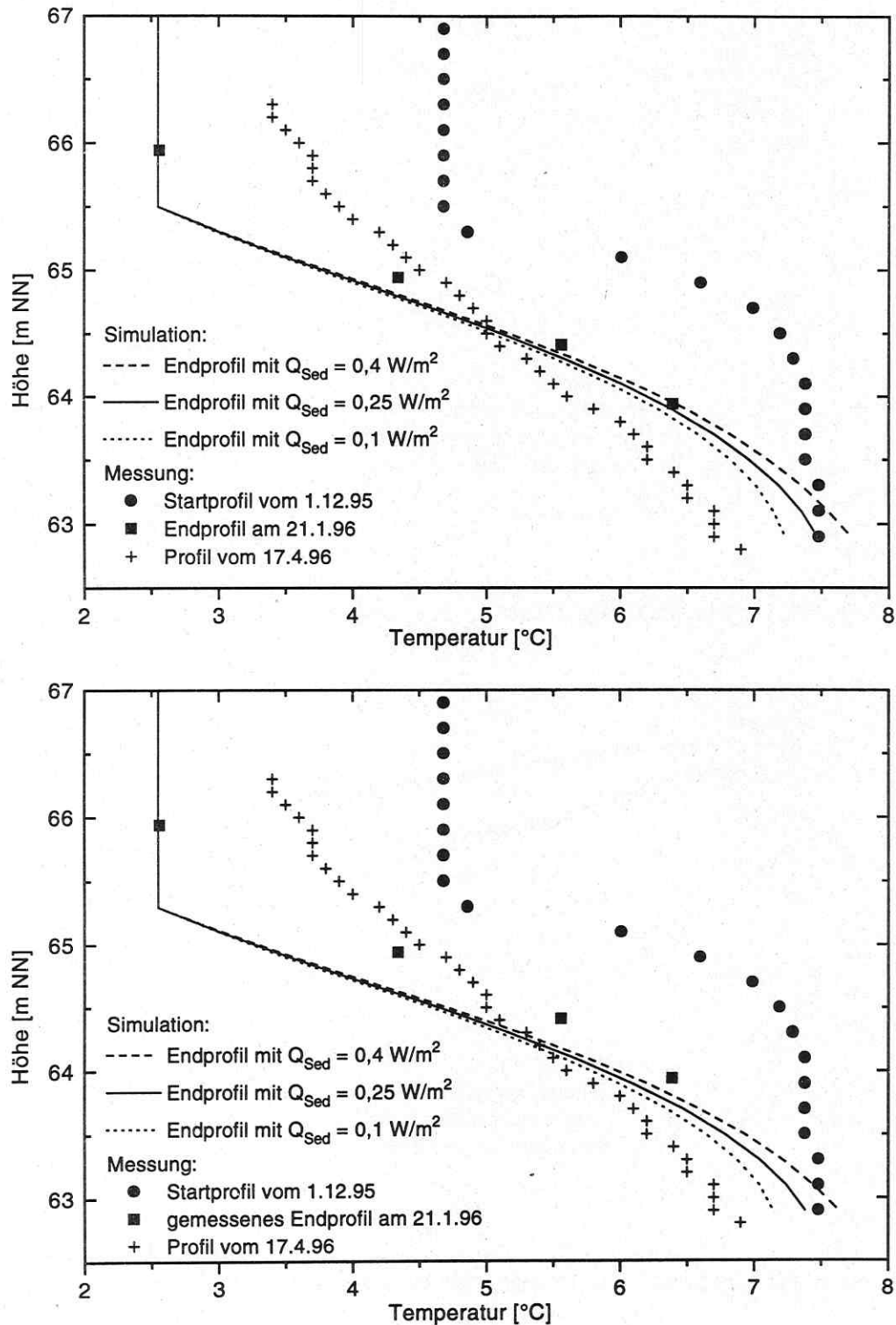


Abb. 4.11: Abschätzung des Sedimentwärmeflusses aus der Temperaturmodellierung. Oben: Bis Schicht 38, unten: bis Schicht 39 auf eine Temperatur gestellt. In beiden Fällen treten am Ende des Simulationszeitraumes bei einem Sedimentwärmefluß von $0,4 \text{ W/m}^2$ am Grund unrealistisch hohe Temperaturen auf.

net. Es sollen nun die gemittelten Temperaturverläufe in den einzelnen Tiefen beschrieben werden.

- **65,94 m NN** Die Temperatur in dieser Tiefe ist die gemessene Temperatur. Sie wird für das gesamte Mixolimnion angenommen, welches sich im Fall 1 von der Seeoberfläche bis zu einer Höhe 65,4 m NN, im Fall 2 bis 65,2 m NN erstreckt.
- **64,94 m NN** Beim Start ist die im Modell gemäß dem Startprofil errechnete Temperatur $0,15^{\circ}\text{C}$ größer als die gemessene Temperatur. Dieser Offset der Temperatur liegt innerhalb der Fehlergrenzen des durch den Tiefenfehler der Temperaturmeßkette ($\pm 5\text{ cm}$) und des Startprofils ($\pm 4\text{ cm}$) entstehenden, über den Temperaturgradienten der entsprechenden Tiefe errechneten Temperaturfehlers von $0,25^{\circ}\text{C}$. Hinzu kommt noch eine Meßungenauigkeit von $0,1^{\circ}\text{C}$ der Temperatursonde, die für das Startprofil verwendet wurde und $0,05^{\circ}\text{C}$ für die Meßkette. Im weiteren Verlauf bleibt

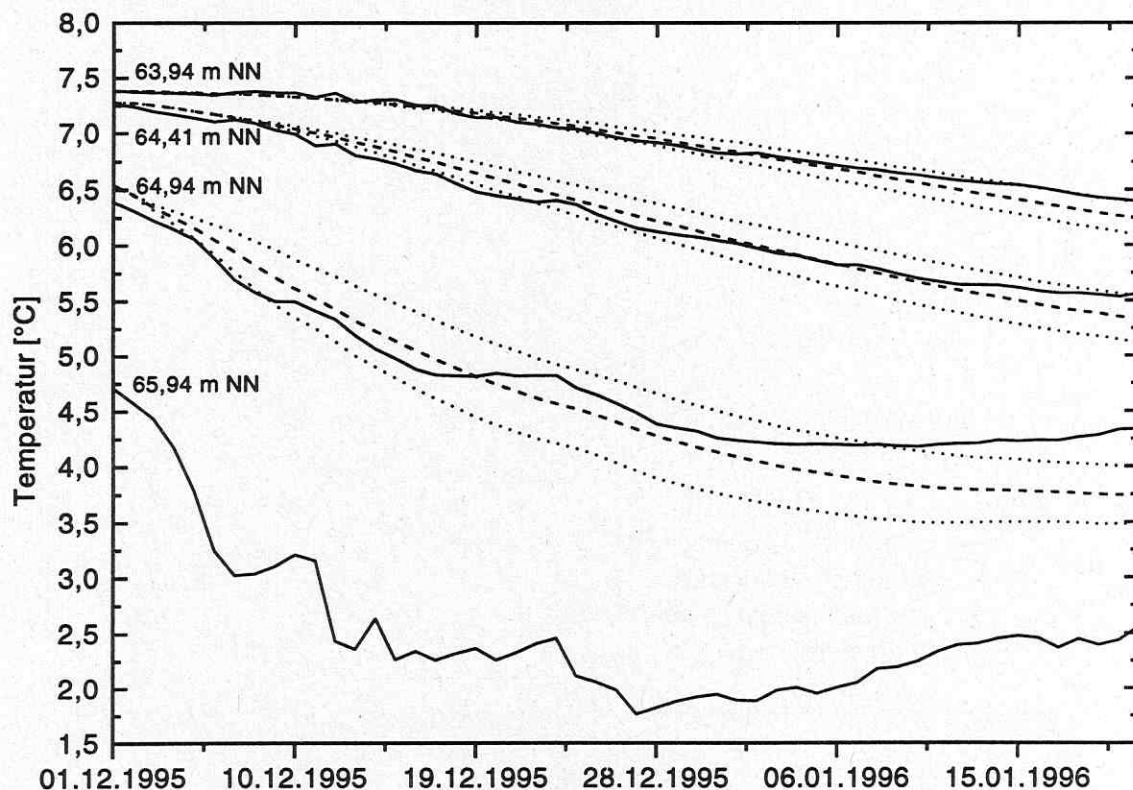


Abb. 4.12: Optimierte Simulation der Temperaturentwicklung im Monimolimnion im Winter 95/96. Zeitentwicklung der Temperatur. Die durchgezogenen Linien geben die gemessene Temperatur wieder, die punktierten Linien die Modellierungsergebnisse für Fall 1 (obere Linie) und Fall 2 (untere Linie) der Mixolimnionstiefe, die gestrichelte Linie ist der Mittelwert beider Fälle.

die modellierte Temperatur zunächst bis zum 19.12. über der gemessenen, um dann darunter abzusinken. Die gemessene Temperatur steigt zum Ende des Meßzeitraumes ab dem 10.1. leicht an, diese Entwicklung kann durch die Simulation nicht nachvollzogen werden, selbst wenn man die extremen Fälle 1 und 2 in Betracht zieht.

- **64,41 m NN** Die modellierte Temperaturentwicklung liegt zu Anfang des Beobachtungszeitraumes ebenfalls über der gemessenen. Erst ab dem 2.1. ist die gemessene Temperatur höher. Sie liegt jedoch innerhalb der für den Fall 1 und Fall 2 errechneten Temperaturverläufe.
- **63,94 m NN** Die errechnete Temperatur folgt bis zum 31.12. recht gut der gemessenen Temperatur und sinkt danach darunter ab. Die gemessene Temperatur liegt wiederum innerhalb des durch Fall 1 und Fall 2 aufgespannten Temperaturbereiches.

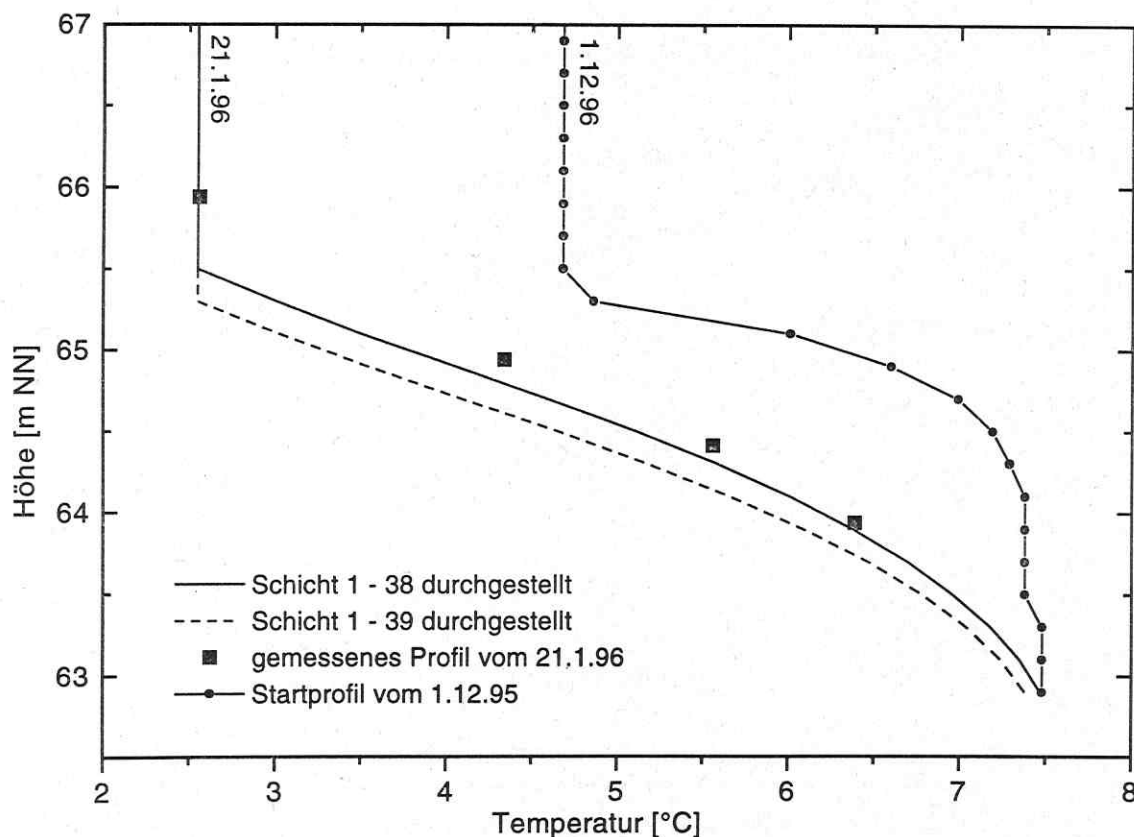


Abb. 4.13: Profile der optimierten Simulation der Temperaturentwicklung. Beide Endprofile liegen gegenüber der gemessenen Temperatur etwas zu niedrig. Eine Erklärung könnte eine diffusive Verbreiterung der Chemokline liefern, welche zum Ende des Simulationszeitraumes die Durchmischungstiefe und damit die Temperaturgradienten über die Chemokline vermindern würde.

Allen modellierten Temperaturverläufen ist gemeinsam, daß sie kurzperiodige Schwankungen der gemessenen Temperatur nicht nachvollziehen. Der Temperaturverlauf wird aber innerhalb der durch die Fälle 1 und 2 gegebenen Spanne der errechneten Temperatur für annähernd den gesamten Zeitraum recht gut wiedergegeben. Dies läßt die Aussage zu, daß der Wärmefluß im Monimolimnion allein durch die molekulare Diffusion der Wärme bestimmt wird. Eine genauere Aussage läßt sich aus der Temperaturentwicklung nicht gewinnen. Die Quantifizierung von im Vergleich zu den molekularen Diffusionskoeffizienten der Wärme wesentlich kleineren turbulenter Diffusionskoeffizienten bedingt den Einsatz anderer Tracer wie SF_6 mit niedrigeren molekularen Diffusionskoeffizienten (Anhang C).

4.3.2 Diffusionskoeffizienten aus der Leitfähigkeitsentwicklung

Auch aus der Leitfähigkeitsentwicklung mit der Zeit können Aussagen über die vertikale Diffusion im Monimolimnion gewonnen werden. Zunächst wird dabei davon ausgegangen, daß alle Quellen und Senken für die Leitfähigkeit (Salz- oder Süßwasserzufluß) vernachlässigt werden können. Eine geeignete Methode zur Bestimmung der vertikalen Diffusionskoeffizienten ist auch hier die Gradient-Fluß-Methode (Abschnitt 4.1). Im folgenden soll die Ermittlung der Diffusionskoeffizienten mit diesem Verfahren aus den Leitfähigkeitsprofilen im Monimolimnion beschrieben werden. Die Leitfähigkeit ist dabei ein Summenparameter für die Konzentration aller gelösten Salze (s. Abschnitt 2.2.1).

Grundlage für die Berechnung der vertikalen Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion sind 10 Leitfähigkeitsprofile, die in unregelmäßigen Abständen im Zeitraum vom 7.12.94 bis zum 1.12.95 aufgenommen wurden. Diese Profile besitzen für das Monimolimnion eine Tiefenauflösung von 10 cm. Jedoch sind die Meßhöhen absolut, also in Höhe über NN, nicht gleich, da jeweils von der Seeoberfläche gemessen wurde und sich so eine Pegelveränderung zwischen den einzelnen Profilaufnahmen in der Höhe über NN der Meßwerte niederschlägt. Aus diesem Grund müssen die Leitfähigkeitsprofile, wenn sie für die Gradient-Fluß-Methode verwendet werden sollen, auf fest vorgegebene NN - Höhen interpoliert werden. Die Leitfähigkeitsprofile wurden auf Höhen von 63,3 m NN bis 66m NN in 10 cm Schritten linear interpoliert. (Abbildung 4.14). Die interpolierten Profile stimmen weitgehend mit den Originalprofilen überein; im Bereich starker Gradienten sind aber geringe Abweichungen zu verzeichnen, die sich insbesondere auf den Vertikalgradienten in der Interpolationstiefe auswirken. Da die Gradienten aber im Bereich unter 64,9 m NN, wo die Gradient-Fluß-Methode angewendet werden kann (s. unten), nicht sehr groß sind, ist dieser Fehler hinnehmbar.

Für die Gradient-Fluß-Methode werden, wie oben ausgeführt, $a = \frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ und $G = \frac{\Delta \kappa_{25}}{\Delta z}$ benötigt. $\frac{\Delta \kappa_{25}}{\Delta z}$ wurde für jede Tiefe aus den zehn interpolierten Profilen bestimmt und arithmetisch gemittelt. Aus der Standardabweichung $\sigma_G = \sigma \left(G = \frac{\Delta \kappa_{25}}{\Delta z} \right)$ ergibt sich der Fehler des Vertikalgradienten in jeder Tiefe. Dieser Fehler ist wesentlich größer als der durch die Interpolation der Profile entstandene Fehler, welcher somit vernachlässigt werden kann.

Die Zeitentwicklung der Leitfähigkeit für die einzelnen interpolierten Tiefen ist in Abbildung 4.15 dargestellt. In allen Tiefen nimmt die Leitfähigkeit in dem Beobachtungs-

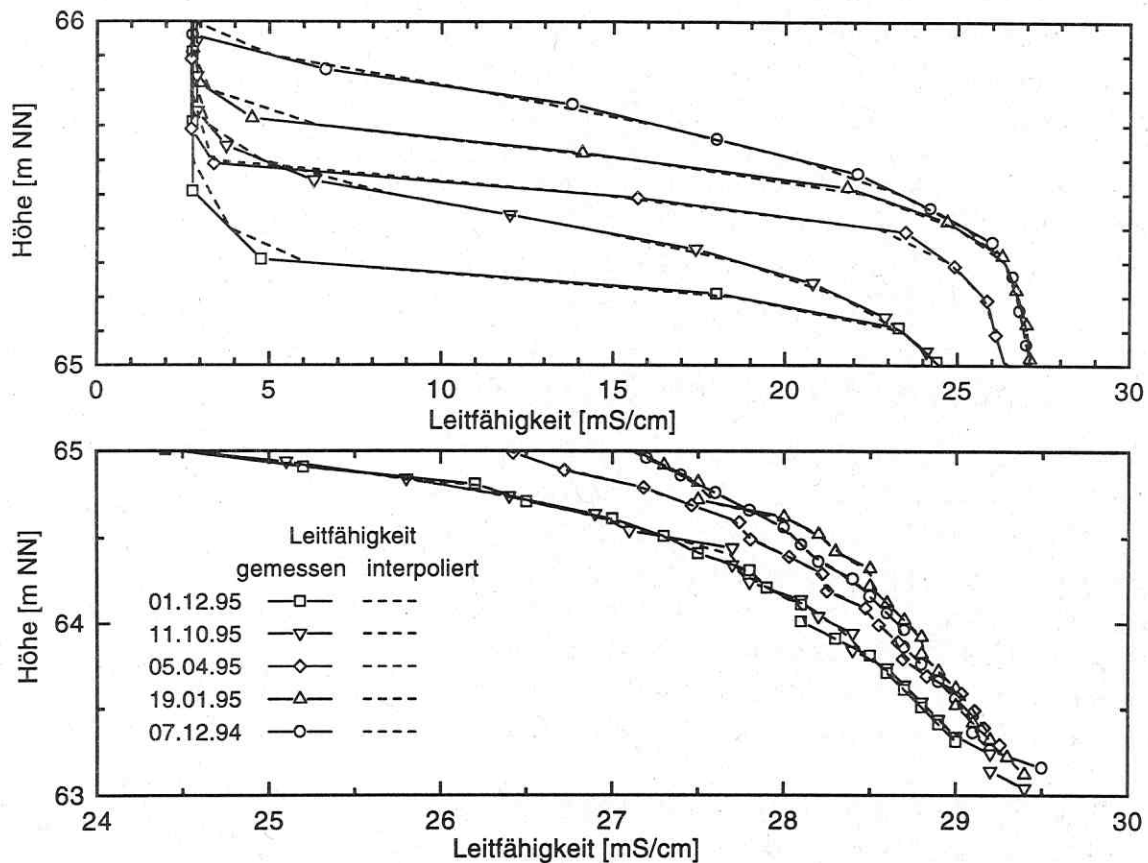


Abb. 4.14: Gemessene und interpolierte Leitfähigkeitsprofile im Monimolimnion. Die Abweichungen zwischen den gemessenen und den interpolierten Profilen sind gering. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind nicht alle zehn Profile eingezeichnet.

zeitraum eines knappen Jahres ab. In den größten Tiefen verläuft diese Abnahme relativ gleichmäßig, in Tiefen näher zur Chemokline ist der Verlauf der Zeitentwicklung unregelmäßiger und sprunghafter. Die Fehlerbalken resultieren aus einem Tiefenfehler von ± 4 cm, der über den Leitfähigkeitsgradient der entsprechenden Tiefe auf einen Fehler in der Leitfähigkeit umgerechnet wurde. $\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ wurde für jede interpolierte Tiefe durch Anpassen einer linearen Regressionsgeraden an die Zeitentwicklung der Leitfähigkeit bestimmt. Diese Näherung hat für die größten Tiefen das kleinste χ^2 , in geringeren Tiefen wird χ^2 größer und damit die Näherung durch eine lineare Regressionsgerade weniger zutreffend. (Abbildung 4.15). Aus diesem Grund wurde $\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ für Höhen über 64,9 m NN nicht bestimmt. Die Diffusionskoeffizienten konnten somit von 64,9 m NN bis 63,3 m NN in 10 cm Schritten bestimmt werden. Der Fehler der zeitlichen Leitfähigkeitsveränderung ist durch die Standardabweichung σ_a der linearen Regression gegeben.

Die Werte für $\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ und $\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial z}$ sowie die entsprechenden Standardabweichungen sind im Anhang A zu finden (Tabelle A.1).

Abbildung 4.16 zeigt das Profil der ermittelten gesamten Diffusionskoeffizienten K_v . Die

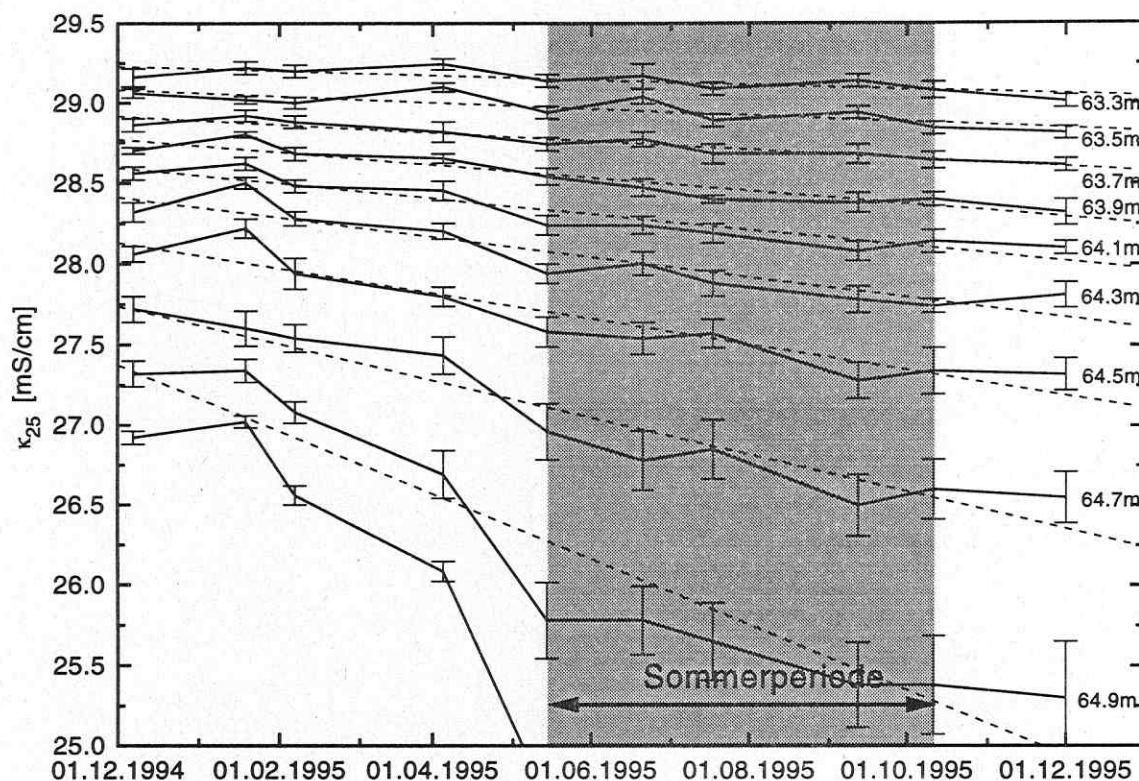


Abb. 4.15: Zeitliche Entwicklung der Leitfähigkeit im Monimolimnion. Es ist nur für jede zweite Tiefe eine Zeitreihe dargestellt. Die Fehlerbalken wurden über den Leitfähigkeitsgradienten aus einem Tiefenfehler von ± 4 cm errechnet und kennzeichnen gleichzeitig das Datum der Profilaufnahme.

Diffusionskoeffizienten der höheren Schichten liegen über dem molekularen Diffusionskoeffizienten für Ionen (Anhang C). K_v bleibt in den Höhen von 64,9 m NN bis etwa 64 m NN im Rahmen der Fehler nahezu konstant und fällt darunter zum Boden hin ab. In den tieferen Schichten sind die bestimmten Diffusionskoeffizienten in der Größenordnung der molekularen Diffusionskoeffizienten für Salze.

Die eingezeichneten Fehler ergeben sich aus Gleichung 4.5 mit den oben angeführten Standardabweichungen.

Die Berechnung der Diffusionskoeffizienten wurde für verschiedene Volumenannahmen (s. Kapitel 2.1) durchgeführt. Die Fehler, die durch verschiedene Volumenverläufe entstehen, sind kleiner als die Fehler, die durch Unsicherheiten in $\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ und $\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial z}$ verursacht werden (Abbildung 4.16). Die Diffusionskoeffizienten und Fehler sind im Anhang A in Tabelle A.3 aufgeführt.

In Abbildung 4.15 ist zu erkennen, daß in der Zeit von 15.5.95 - 11.10.95, also während der

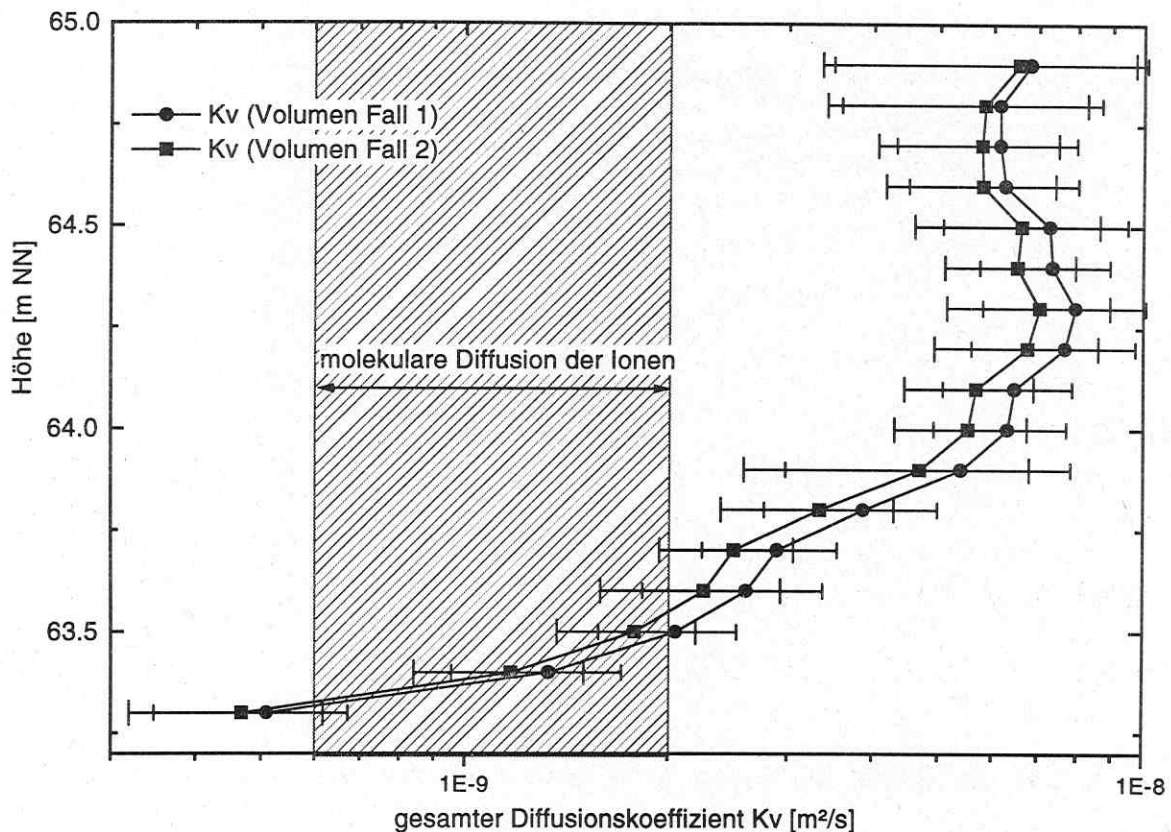


Abb. 4.16: Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion. Sie wurden aus der Zeitentwicklung der Leitfähigkeit über ein Jahr hinweg bestimmt. Der schraffierte Bereich gibt den Wert des molekularen Diffusionskoeffizienten für Salze an. Fall 1 und Fall 2 bezieht sich auf die Volumenverläufe wie in Abschnitt 2.1 beschrieben. Die Fehlerbalken mit den kleineren Enden gelten für den Fall 1.

sommerlichen Schichtungsphase, die Leitfähigkeitszeitentwicklungen etwas gleichmäßiger und flacher verlaufen. Die Abnahmerate der Leitfähigkeit ist in dieser Phase nicht so groß wie im Zeitraum davor (Winter). Für die Phase der sommerlichen Schichtung wurden deshalb in gleicher Weise wie für den Zeitraum 7.12.94 - 1.12.95 die vertikalen Diffusionskoeffizienten ermittelt (Abbildung 4.17). Sie sind in Tabelle A.4 im Anhang A aufgeführt. Dort sind ebenfalls die Werte für $\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ und $\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial z}$ sowie die entsprechenden Standardabweichungen für die Phase der sommerlichen Schichtung zu finden (Tabelle A.2)

Im Vergleich zum Diffusionskoeffizienten-Profil für das ganze Jahr liegen die Diffusionskoeffizienten im Sommer etwas niedriger. Während bei der Betrachtung über das ganze Jahr der Maximalwert bei $8 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ und der Mittelwert für die höheren Schichten zwischen 64,9 m NN und 64 m NN bei $7 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ liegt, ist im Sommer der Maximalwert $5,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ und der Mittelwert für den oben angegebenen Bereich etwa $4 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Desweiteren ist zur Chemokline hin eine Abnahme des Diffusionskoeffizi-

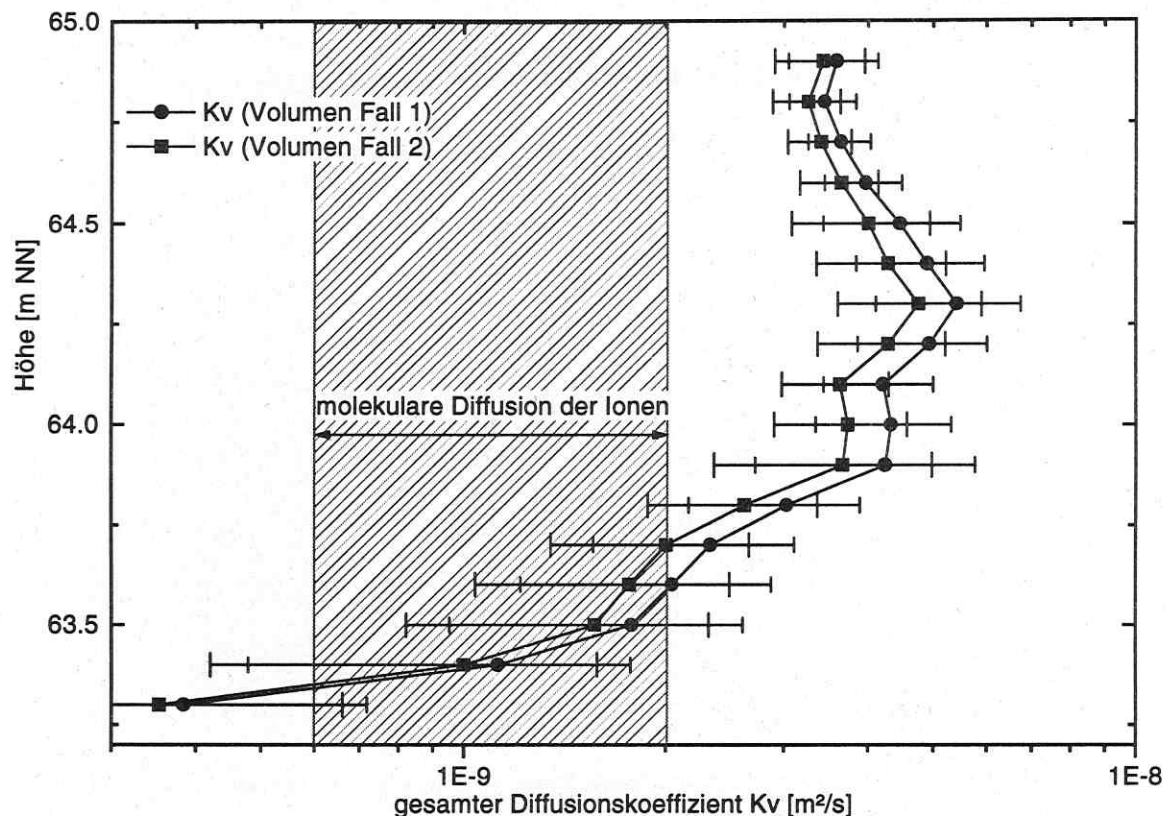


Abb. 4.17: Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion während der sommerlichen Schichtung. Der schraffierte Bereich gibt den Wert des molekularen Diffusionskoeffizienten für Salze an. Fall 1 und Fall 2 bezieht sich auf die Volumenverläufe entsprechend Abschnitt 2.1. Die Fehlerbalken mit den kleineren Enden gelten für den Fall 1.

enten festzustellen.

4.3.3 Diffusionskoeffizienten aus der SF_6 -Ausbreitung

Die Entwicklung der SF_6 -Konzentrationen mit der Zeit wurde bereits in Kapitel 3.5.2 beschrieben. Im folgenden sollen aus der Zeitentwicklung der SF_6 -Verteilung die vertikalen Diffusionskoeffizienten in den einzelnen Tiefen im Monimolimnion quantifiziert werden. Ein geeignetes Instrument ist hier wiederum die Gradient-Fluß-Methode. Sie benötigt wie in Abschnitt 4.1 beschrieben die Vertikalgradienten $G = \frac{\Delta c_{\text{SF}_6}}{\Delta z}$ und die zeitlichen Gradienten $a = \frac{\partial c_{\text{SF}_6}}{\partial t}$. In Abbildung 4.18 ist die Entwicklung der Konzentration mit der Zeit dargestellt. Die Konzentration wurde dazu aus den Akima-interpolierten Profilen in 10cm-Tiefenschritten bestimmt. Für den Zeitraum vom 15.5.1995 - 1.10.1996, also in einem Zeitraum, in dem in allen Tiefen die Konzentration im Mittel monoton steigt oder fällt, wurde der Konzentrationsverlauf durch eine Regressionsgerade angenähert. Die Steigung der Re-

gressionsgerade ist dann der benötigte zeitliche Gradient $a = \frac{\partial c_{SF_6}}{\partial t}$. Er ist als das Mittel über den genannten Zeitraum zu betrachten. Die Vertikalgradienten wurden daher ebenfalls als Mittel der Vertikalgradienten aller Profile des gewählten Zeitraumes bestimmt. Da im Gegensatz zur oben besprochenen Leitfähigkeitsentwicklung die Vertikalgradienten während des betrachteten Zeitraumes in einigen Tiefen erheblich variieren, entsteht durch diese Mittelung ein größerer Fehler. Allerdings werden durch die Beschränkung auf

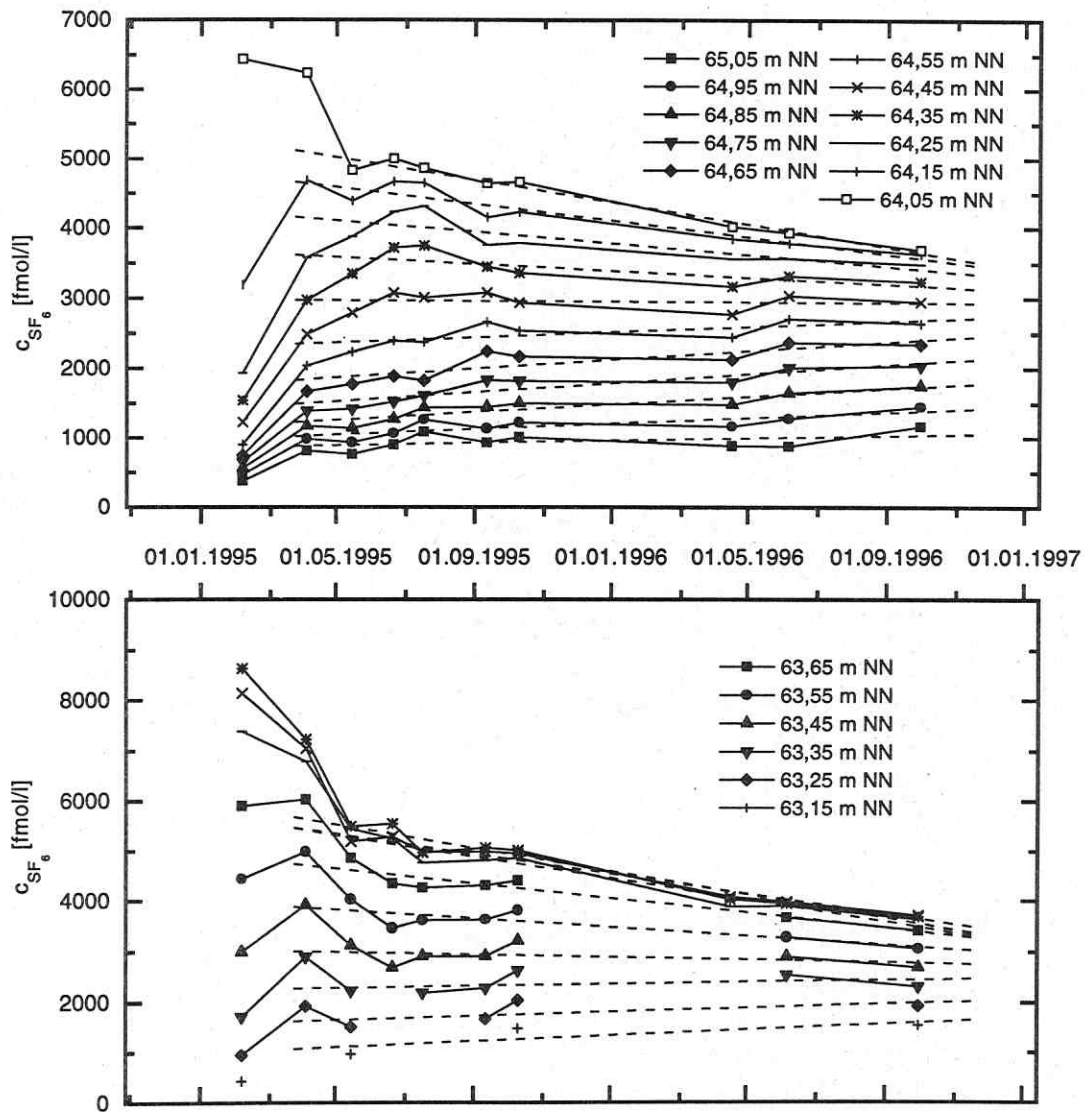


Abb. 4.18: Zeitliche Entwicklung der SF_6 -Konzentrationen in den einzelnen Tiefen. Der zeitliche Gradient der SF_6 -Konzentration $a = \frac{\partial c_{SF_6}}{\partial t}$ wurde durch eine lineare Regressionsgerade an die Daten ab dem 15.5.1995 ermittelt.

die SF_6 -Profile ab dem 15.5.1995 die Profile vom 7.2.1995 und 5.4.1995 mit den größten Vertikalgradienten, die weit über denen der restlichen Profile liegen, ausgeschlossen. Die Vertikalgradienten bestimmen auch die Wahl der Boxeinteilung für die Gradient-Fluß-Methode. Es wurden mit zwei Ausnahmen Boxen von 10cm Höhe in Tiefen von 63,2 - 65,1m NN gewählt. Im Bereich um das Konzentrationsmaximum zeigen die Vertikalgradientengroße zeitliche Variationen. Dies rührt mit daher, daß aufgrund der Meßfehler nicht bei jedem Profil das Maximum in der gleichen Tiefe zu finden ist. Es bewegt sich in einem Bereich von 63,8m NN bis 63,95m NN. Da der Vertikalgradient im Maximum das Vorzeichen wechselt und somit einen Nulldurchgang besitzt, hat die Tiefenstreuung des Maximums eine besonders starke Auswirkung. In dem oben genannten Tiefenbereich kann daher der Vertikalgradient $G = \frac{\Delta c_{\text{SF}_6}}{\Delta z}$ nicht eindeutig bestimmt werden. Aus diesem Grund wurde die Box um das Maximum dicker gewählt und auf 30cm Dicke (von 63,7 - 64m NN) festgesetzt, so daß die Maxima sämtlicher betrachteten Profile in ihr eingeschlossen sind. Die zweite Ausnahme stellt die unterste Box dar. Nicht zu allen Meßterminen konnte

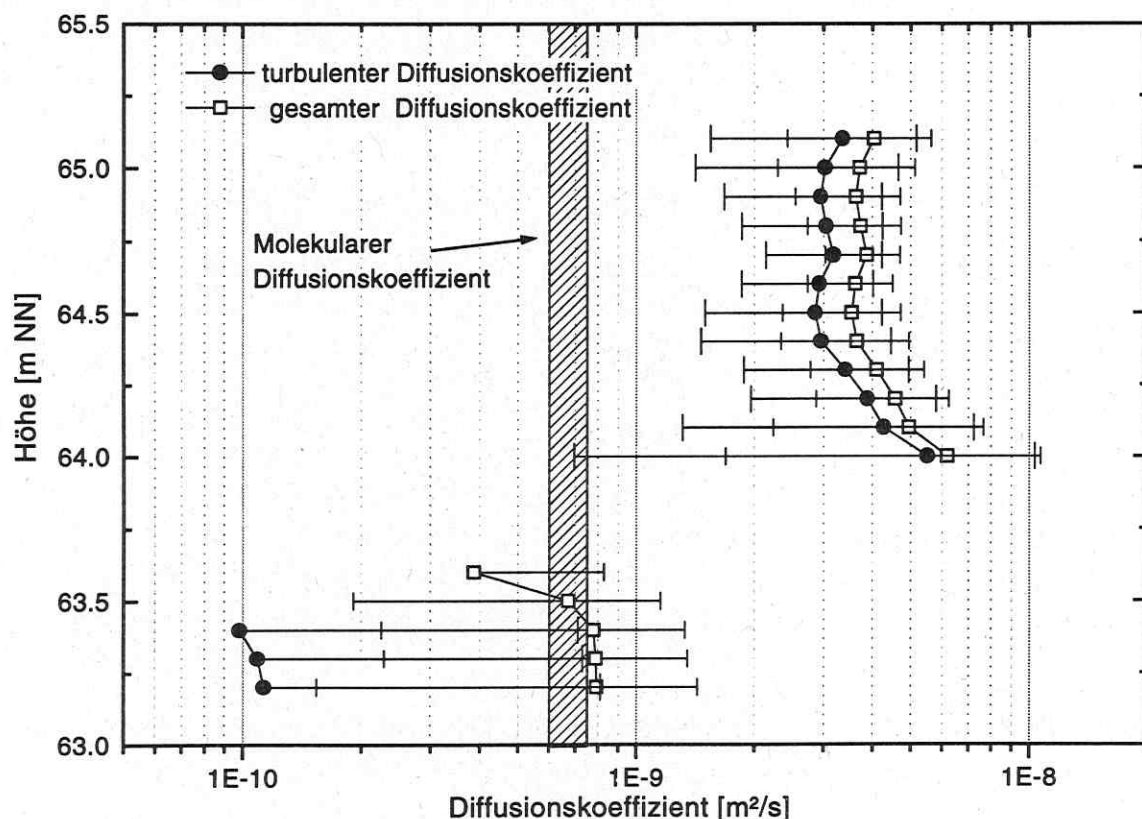


Abb. 4.19: Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion. Es sind sowohl die ermittelten gesamte Diffusionskoeffizienten als auch die turbulenten dargestellt. Die Fehlerbalken mit den längeren Enden bezeichnen die Fehler des turbulenten Diffusionskoeffizienten. Der schraffierte Bereich deutet den molekularen Diffusionskoeffizienten von SF_6 an.

die SF_6 -Konzentration in der untersten Tiefe bestimmt werden. Die unterste Box wurde deshalb von 62,8 - 63,2m NN gewählt.

Oberhalb von 65,1m NN kann die Gradient-Fluß-Methode nicht angewendet werden, da dort bereits eine Beeinflussung der SF_6 -Konzentration durch die Erosion der Chemokline im Winter zu verzeichnen ist.

Abbildung 4.19 zeigt die mit der Gradientflußmethode aus der SF_6 -Ausbreitung ermittelten Diffusionskoeffizienten. Die bei 63,7 - 63,9m NN auftretende Lücke stammt zum einen von der um das Maximum verbreiterten Box; zum anderen liefert die Gradientflußmethode in diesem Bereich negative Diffusionskoeffizienten, die nicht auftreten können. Es sind sowohl die ermittelten gesamten Diffusionskoeffizienten als auch der turbulente Anteil dargestellt, der durch Subtraktion eines mittleren molekularen Anteils von $0,68 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ berechnet wird. Dieser ergibt sich als Mittelwert der im Monimolimnion entsprechend der Temperatur auftretenden molekularen Diffusionskoeffizienten von 0,61 bis zu $0,76 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ (Gleichung 3.6). Es ist zu erkennen, daß die berechneten Diffusionskoeffizienten in den Tiefen von 63,5 - 63,6m NN unter dem molekularen liegen, und daher bei Subtraktion von D_{mol} negativ werden. Für diese Tiefen lassen sich demnach im Rahmen der Fehler keine turbulenten Diffusionskoeffizienten berechnen. Die eingezeichneten Fehler ergeben sich für die gesamten Diffusionskoeffizienten aus Gleichung 4.5, bei den turbulenten ist die Variation der molekularen Diffusion mit berücksichtigt. Die ermittelten Diffusionskoeffizienten sind der Tabelle A.5 im Anhang A zu entnehmen.

4.3.4 Vergleich der ermittelten Diffusionskoeffizienten

Abbildung 4.20 zeigt die aus der Leitfähigkeits- und SF_6 -Verteilungs-Entwicklung berechneten turbulenten Diffusionskoeffizienten im Vergleich. Es sind sowohl die aus der Leitfähigkeitsentwicklung während der sommerlichen Schichtungsphase (15.5.95 - 11.10.95) als auch die aus der Leitfähigkeitsentwicklung eines ganzen Jahres (7.12.94 - 1.12.95) errechneten Diffusionskoeffizienten dargestellt. Das mit der Gradientflußmethode ermittelte Diffusionskoeffizientenprofil stellt aufgrund des angewandten Verfahrens ein zeitliches Mittel über alle einzelnen Mischungsereignisse des betrachteten Zeitraumes dar. Daher ist die Wahl des Zeitraumes mitbestimmend für das Ergebnis. Es macht einen Unterschied, ob lediglich das Ausbreitungsverhalten während der sommerlichen Schichtungsphase oder aber während eines ganzen Jahres zugrunde gelegt wird. Ein Vergleich der aus der Leitfähigkeits- und der SF_6 -Verteilung berechneten Diffusionskoeffizienten sollte demnach für einen ähnlichen Beobachtungszeitraum angestellt werden. Da bei der Anwendung der Gradientflußmethode auf SF_6 ein Zeitraum von $1\frac{1}{2}$ Jahren zugrunde gelegt wurde, muß also ein Vergleich mit den Diffusionskoeffizienten, die aus der Leitfähigkeit für den längeren Zeitraum erhalten wurden, erfolgen.

Aus diesem Grund muß bei der Anwendung der Gradientflußmethode in der oben beschriebenen Weise ein ähnlicher Zeitraum betrachtet werden, um vergleichbare Ergebnisse zu erhalten.

Die aus der SF_6 - und Leitfähigkeitsverteilung errechneten Diffusionskoeffizienten können für die einzelnen Tiefen im Rahmen der Fehler durchweg als gleich bezeichnet werden.

In einem Tiefenbereich von 64,5m - 65,1m NN kann von einem konstanten mittleren Dif-

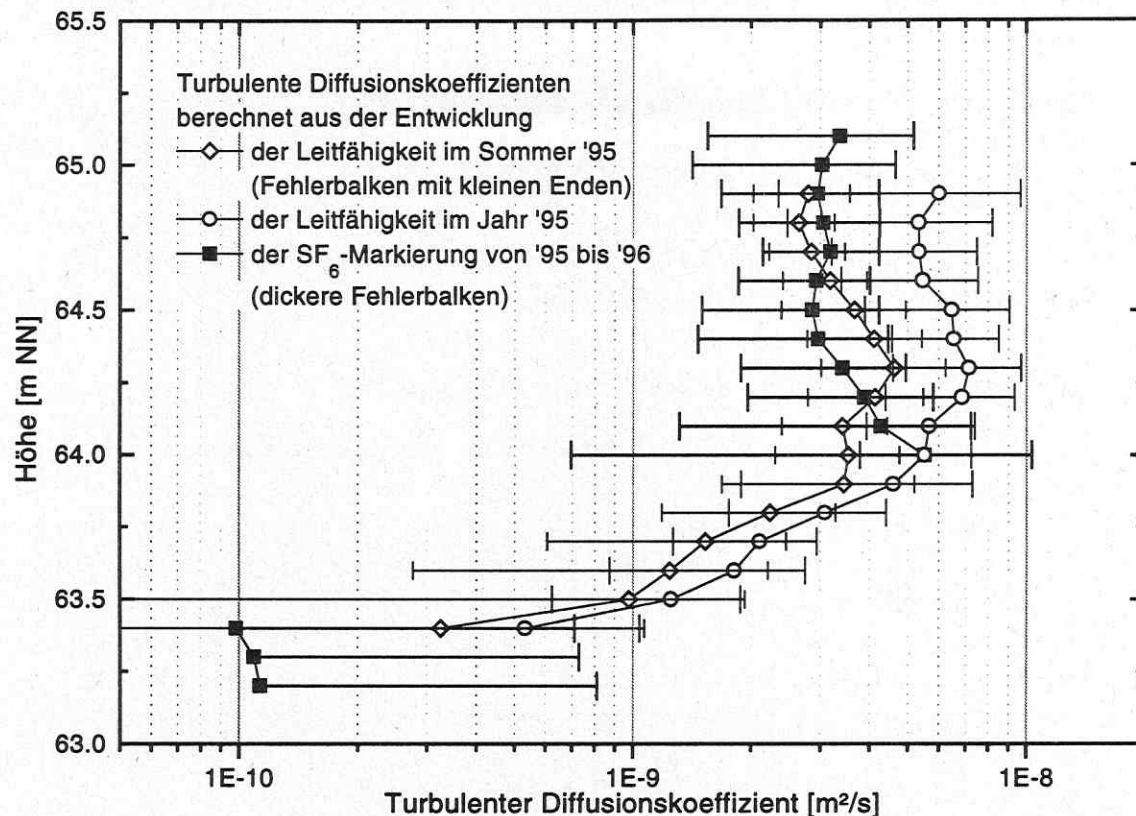


Abb. 4.20: Vergleich der aus der Leitfähigkeits- und SF_6 -Entwicklung berechneten vertikalen Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion. Die aus den beiden Tracern ermittelten Profile der vertikalen Diffusionskoeffizienten stimmen im Rahmen der Fehler überein.

fusionskoeffizienten mit einem Wert von $4 - 5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ ausgegangen werden. Darunter, in einem Tiefenbereich von 64 - 64,5m NN ist zunächst ein leichter Anstieg der Diffusionskoeffizienten bis auf einen Maximalwert von $7 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ zu beobachten. Unterhalb 64m NN ist ein exponentieller Abfall der Werte aus der Leitfähigkeitsentwicklung zum Grund hin zu beobachten, wobei dieser Verlauf durch die in größerer Tiefe anschließenden Diffusionskoeffizienten aus der SF_6 -Verteilung fortgeführt wird. Die aus der Leitfähigkeitsentwicklung des Sommers 1995 errechneten Diffusionskoeffizienten zeigen einen ähnlichen Verlauf mit der Tiefe.

Die ermittelten Diffusionskoeffizienten liegen in einer Größenordnung, für die aus der Temperaturentwicklung keine Aussage mehr getroffen werden kann. Dies hat zwei Gründe:

- Der molekulare Diffusionskoeffizient der Wärme ist temperaturabhängig. Er beträgt bei 0°C $1,338 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ und bei 10°C $1,384 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ [CRC, 1996]. Die im Monimolimnion auftretenden Temperaturen bewegen sich zwischen 1°C und 8°C und damit ungefähr in dem oben angeführten Temperaturbereich. Die Variation des molekularen Diffusionskoeffizienten allein aufgrund der Temperaturabhängigkeit beträgt also etwa $4 - 5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, ein Wert, der den beobachteten mittleren

turbulenten Diffusionskoeffizienten entspricht und diese somit eventuell schon überdecken würde.

- Wird die Gradientflußmethode auf die Temperatur angewandt, so kann nur der gesamte Diffusionskoeffizient ermittelt werden. Die beobachteten mittleren turbulenten Diffusionskoeffizienten sind aber zwei Größenordnungen kleiner als der molekulare der Wärme. Ein Fehler der aus der Gradientflußmethode errechneten Werte von wenigen Prozent ließe demnach keine Aussage über die turbulenten Diffusionskoeffizienten mehr zu. Typische Fehler liegen aber zwischen 20 - 50%.

4.3.5 Abschätzung eines maximal möglichen Zuflusses

Der obige Vergleich der aus der SF_6 - und Leitfähigkeitsentwicklung erhaltenen Diffusionskoeffizienten zeigt, daß diese im Rahmen der Fehler gut übereinstimmen. Beide Profile zeigen zum Grund hin einen exponentiellen Abfall. Dieser kann aber auch eventuell ein Effekt der Vernachlässigung eventueller Quellen oder Senken der Tracer im Wasserkörper bei der Berechnung mittels der Gradient-Fluß-Methode sein. Eine nicht berücksichtigte Spülung des Monimolimnions mit Grundwasser, welches einen höheren Salzgehalt als das Wasser des Monimolimnions besitzt, würde sowohl bei der Anwendung der Gradient-Fluß-Methode auf SF_6 wie auch auf die Leitfähigkeit zu einer Unterschätzung der Diffusionskoeffizienten unterhalb des Maximums der SF_6 -Konzentration führen. Aus diesem Grund soll im weiteren zunächst die maximal mögliche Spülrate einer eventuellen Spülung des Monimolimnions mit Grundwasser aus der SF_6 -Bilanz abgeschätzt werden. Daraufhin soll untersucht werden, ob die Auswirkungen einer solchen angenommenen Spülung mit den Beobachtungen verträglich sind.

Zuflußabschätzung aus der SF_6 -Bilanz Eine Spülung des Monimolimnions mit Grundwasser führt zu einem Verlust von SF_6 , da davon ausgegangen werden kann, daß zufließendes Grundwasser SF_6 -Konzentrationen von weniger als 2 fmol/l besitzt. Demgegenüber weist abfließendes Wasser die Konzentration des Seewassers auf. In der Bilanz müßte also eine Abnahme der wiedergefundenen Gesamtmenge durch den Verlust von SF_6 festzustellen sein. Aufgrund der großen Fehler bei der Bestimmung der Gesamtmenge kann aber lediglich eine Maximalabschätzung der Verlustmenge gemacht werden. Eine Interpolation der Bilanzwerte (siehe auch Abschnitt 3.5.3) ergibt für den 27.10.1994 eine Einbringmenge von $20 \cdot 10^9 \pm 1 \cdot 10^9$ fmol. Am 1.10.1996 wurden davon $19 \cdot 10^9 \pm 1,8 \cdot 10^9$ fmol wiedergefunden. Dies ergibt einen maximalen Verlust – wobei die Fehler miteinbezogen werden – von $4,2 \cdot 10^9$ fmol. Davon wurden etwa $1 \cdot 10^9$ fmol über die Chemokline beziehungsweise durch Erosion der Chemokline abtransportiert (Kapitel 3.5.6). Demnach bleibt als Maximalabschätzung ein Verlust von $3 \cdot 10^9$ fmol, der durch Spülung mit Grundwasser verursacht sein könnte.

Die gemessenen SF_6 -Profile (Abbildung 3.10) geben einen Hinweis, in welchen Tiefen eine eventuelle Spülung anzusetzen wäre. In den Profilen vom 15.5. - 18.7.1995, aber auch – wenn auch weniger ausgeprägt – in den restlichen Profilen scheint die Verbreiterung des Peaks unterhalb des Maximums nicht so schnell zuzunehmen wie oberhalb des Maximums.

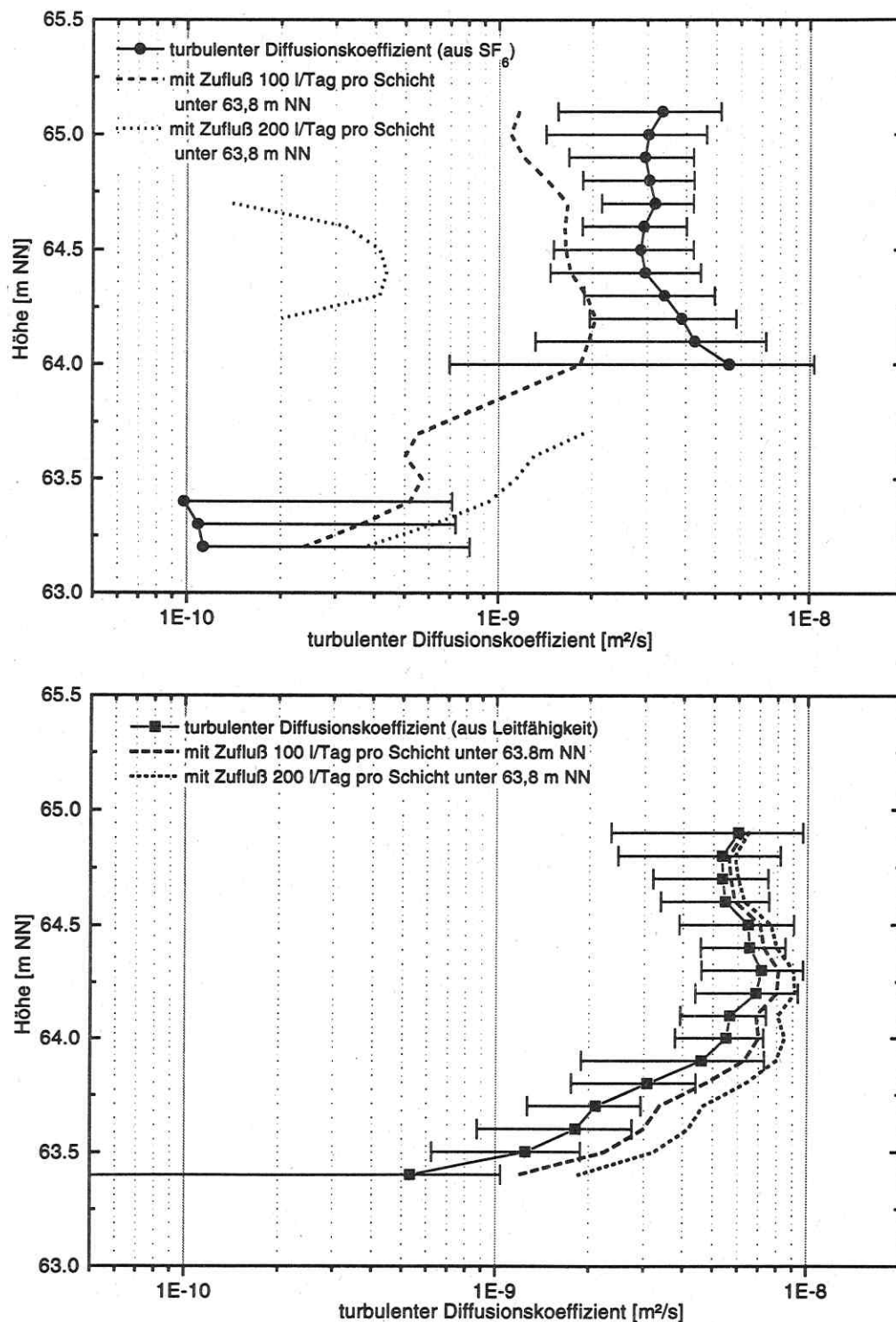


Abb. 4.21: Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion unter Berücksichtigung eines Zuflusses. Ein Vergleich der sich aus der SF₆-Verteilung (oben) und Leitfähigkeitsentwicklung (unten) ergebenden Diffusionskoeffizienten oberhalb des Maximums der SF₆-Verteilung zeigt, daß ein Zufluß von 200 l/Tag zu hoch angesetzt ist.

Dies kann auf geringere Diffusionskoeffizienten in größerer Tiefe zurückzuführen sein, aber auch auf eine eventuelle Spülung hindeuten.

Im folgenden wird deshalb die Annahme einer Spülung des Monimolimnions in Tiefen unterhalb von 63,8m NN gemacht, um die möglichen Auswirkungen auf die oben berechneten Diffusionskoeffizienten zu betrachten. Die Spülrate läßt sich aus dem Gesamtverlust an SF_6 berechnen. Die Verlustmenge an SF_6 ist:

$$\Delta M = q \cdot \sum_i \sum_j \bar{c}_{ij} \Delta t_j \quad [\text{fmol}] \quad (4.21)$$

q	Spülrate per Box i [l/s]
$\bar{c}_{ij}$	mittlere SF_6 -Konzentration in der Box i im Zeitabschnitt j [fmol/l]
Δt_j	Dauer des Zeitabschnittes j [s]

Mit dieser Gleichung, den SF_6 -Konzentrationen zu den verschiedenen Zeitabschnitten und der oben abgeschätzten maximalen Gesamtverlustmenge läßt sich als obere Grenze für die Spülrate ≈ 200 l/Tag pro 10cm-Schicht (unterhalb von 63,8m NN) angeben. Das sind insgesamt $2 \text{ m}^3/\text{Tag}$.

Die mögliche Spülrate per Box bewegt sich demnach zwischen 0 und 200 l/Tag. Im weiteren werden deshalb Betrachtungen zu Spülraten von 100l/Tag und 200l/Tag angestellt.

Verifikation Die oben abgeschätzte Zuflußrate kann als lateraler Austausch bei der Berechnung der vertikalen Diffusionskoeffizienten in der Gradient-Fluß-Methode berücksichtigt werden. Dazu muß in Gleichung 4.4 ein lateraler Austauschterm $J_{lat,i}$ eingefügt werden [Maiss, 1994b]:

$$K_{v,i} = - \frac{\left(\sum_{k=1}^i a_k V_k \right) - J_{lat,i}}{G_i A_i} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (4.22)$$

$K_{v,i}$	Diffusionskoeffizient an der oberen Grenze der Schicht i [m^2/s]
a_i	$\frac{\partial C_i}{\partial t}$ zeitlicher Gradient der Konzentration in der Schicht i
G_i	$\frac{\Delta C_i}{\Delta z}$ vertikaler Gradient der Konzentration an der oberen Grenze der Schicht i
Δz	Höhe der Schichten [m]
V_i	Volumen der Schicht i [m^3]
A_i	Fläche der oberen Grenze der Schicht i [m^2]

$J_{lat,i}$ bedeutet dabei den von unten aufsummierten lateralen Fluß, also $J_{lat,i} = \sum_{n=1}^i j_{lat,i}$, wenn $j_{lat,i}$ der laterale Austauschfluß per Box ist. Dieser errechnet sich aus der Spülrate q und der Konzentrationsdifferenz zwischen Zu- und Abfluß gemäß $j_{lat,i} = q \cdot \Delta c$.

Die Konzentrationsdifferenz läßt sich für SF_6 einfach bestimmen, da wie oben beschrieben zufließendes Wasser maximal die Hintergrundkonzentration besitzt (wobei zur Vereinfachung eine Zuflußkonzentration von 0 fmol/l angesetzt wird), während abfließendes Wasser sowohl die SF_6 -Konzentration als auch die Leitfähigkeit des Wassers der entsprechenden Tiefe im See mitführt.

Bei der Leitfähigkeit müssen aber weitergehende Annahmen für den Zufluß getroffen werden. Die hydrogeologische Situation (Abschnitt 2.5) zeigt eine Möglichkeit eines Zutrittpfades auf: Wasser höherer Leitfähigkeit könnte beispielsweise aus dem tertiären Grundwasserleiter 98 austreten und sich aufgrund seiner höheren Dichte im Monimolimnion einschichten.

In dieser Betrachtung wird die höchste im Monimolimnion gemessene Leitfähigkeit von 29,7 mS/cm als Zuflußleitfähigkeit angenommen. Abbildung 4.21 zeigt die Profile der Diffusionskoeffizienten, die sich aus der Leitfähigkeits- und SF_6 -Verteilung unter Berücksichtigung eines Zuflusses mit den angenommenen Werten ergeben. Oben sind die Profile dargestellt, die sich aus der SF_6 -Verteilung ergeben, unten die aus der Leitfähigkeit errechneten Profile des turbulenten Diffusionskoeffizienten. Ein Vergleich derjenigen Profile, die unter Berücksichtigung eines Zuflusses berechnet wurden (gestrichelt/gepunktet: 100/200 l/Tag pro Schicht unter 63,8m NN) läßt erkennen, daß der Zufluß von 200 l/Tag sicher zu hoch angesetzt ist. Unterhalb des Maximums der SF_6 -Verteilung ergeben sich bei Berücksichtigung des Zuflusses sowohl aus der Leitfähigkeit als auch aus SF_6 höhere Diffusionskoeffizienten. Oberhalb des Maximums verhalten sich die berechneten Diffusionskoeffizienten unter der Annahme eines Zuflusses aber gegenläufig: während sich aus der Leitfähigkeit höhere Diffusionskoeffizienten als ohne Zufluß ergeben, sind die aus SF_6 berechneten niedriger und sinken sogar unter den Wert der molekularen Diffusion ab. Dies läßt sich anschaulich erklären: Jegliche Menge an Ionen, die salzhaltiges Grundwasser netto ins Monimolimnion einbringt, muß zusätzlich in Richtung Chemokline transportiert werden. Dies drückt sich in höheren Diffusionskoeffizienten aus. Dieser Effekt kehrt sich beim SF_6 um, da es durch die Spülung zu einem Nettoverlust kommt. Unterhalb des Maximums führt dies ebenfalls zu höheren Diffusionskoeffizienten, da mehr SF_6 zum Grund hin transportiert werden muß. Diese Menge muß dann aber nicht mehr zur Chemokline hin geschafft werden, die Diffusionskoeffizienten oberhalb des Maximums werden demnach kleiner.

Eine angenommener Spülung von 200 l/Tag (pro Schicht unter 63,8m NN) hat eine solch große Differenz der aus den beiden Tracern berechneten Diffusionskoeffizienten zur Folge, daß ein Durchfluß dieser Größe unrealistisch erscheint. Ein Spülrate von 100 l/Tag (pro Schicht unter 63,8m NN, entspricht insgesamt 1 m³/Tag) verursacht demgegenüber keine derart große Differenz der Diffusionskoeffizienten, diese liegen vielmehr nahezu im Bereich der Fehler der ohne Zufluß berechneten. Ein Spülrate dieser Höhe kann mit dieser Betrachtung demnach nicht ausgeschlossen werden.

In Kapitel 7 wird anhand einer Simulation der SF_6 -Ausbreitung die Auswirkung eines reinen Zu- bzw. Abflusses auf die SF_6 -Verteilung untersucht. Dies läßt die Quantifizierung einer reinen Zu- bzw. Abflussmenge zu.

4.4 Bodennahe Zeitreihen der stabilen Isotope

Die Verteilung der stabilen Isotope in der Wassersäule des Monimolimnions kann ebenfalls einen Hinweis auf eine eventuelle Spülung durch Grundwasser geben. Die Isotopenwerte im Mixolimnion werden durch Verdunstung und die daraus resultierende Isotopenfrak-

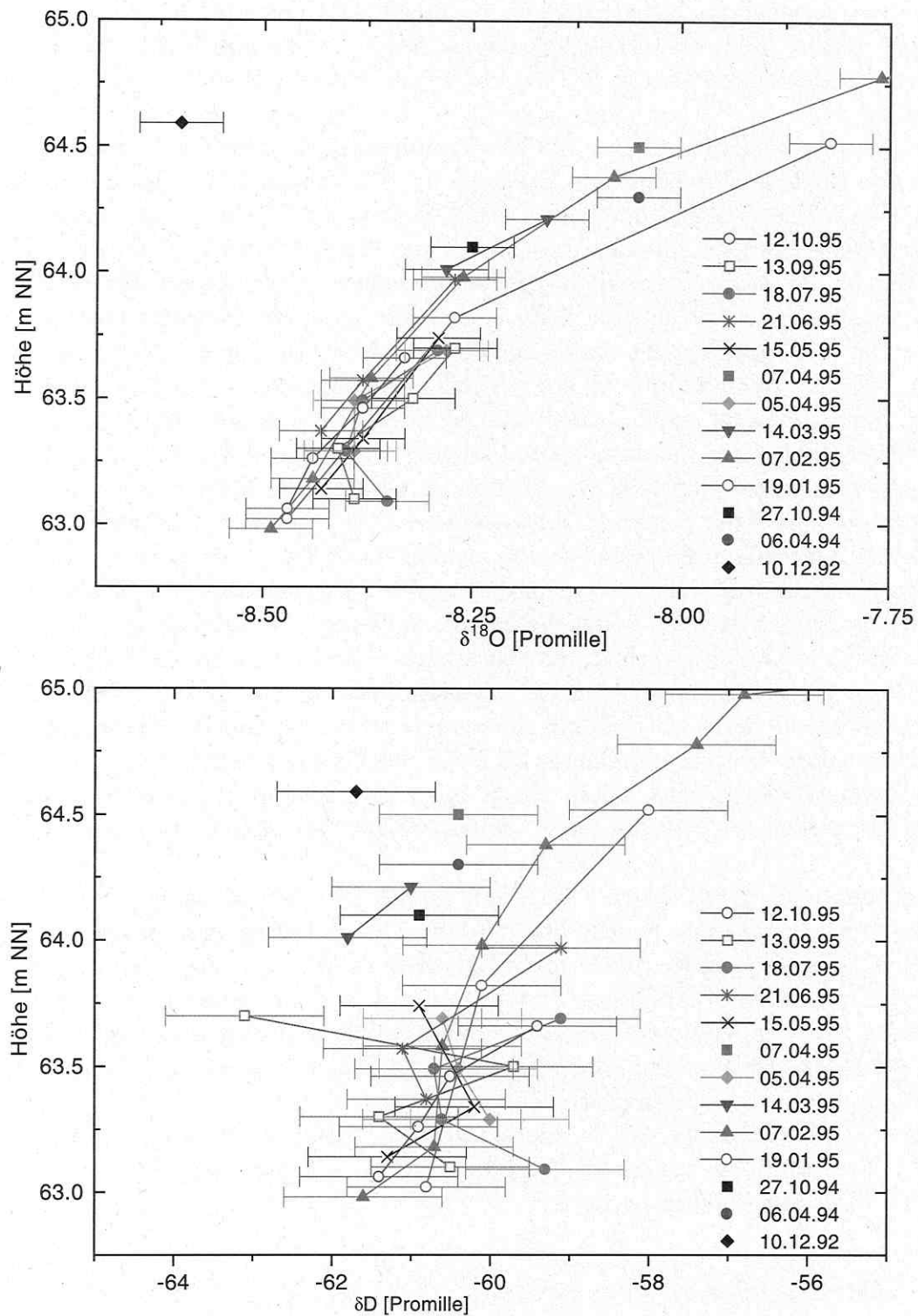


Abb. 4.22: Stabile Isotope im tiefen Monimolimnion. Oben: ^{18}O ; Unten: Deuterium. Es läßt sich kein zeitlicher Trend erkennen. (Daten: 10.12.92 UFZ, ab 6.4.94 IUP/UFZ).

tionierung beeinflusst, das Wasser des Mixolimnions wird isotopisch schwerer (siehe auch Kapitel 5.4.5). Typische Werte sind $\delta^{18}\text{O} = -3 - -5 \text{ ‰}$ und $\delta\text{D} = -32 - -38 \text{ ‰}$ (Kapitel 2.6). Das Wasser des Monimolimnions ist demgegenüber isotopisch leichter, es treten Werte zwischen $-8,5$ und $-8,0 \text{ ‰}$ ($\delta^{18}\text{O}$) beziehungsweise -63 bis -58 ‰ (δD) auf.

Die Isotopenwerte des Grundwassers liegen ebenfalls in diesem Bereich (GWL 15: $\delta^{18}\text{O} = -8,1 - -9,0 \text{ ‰}$ und $\delta\text{D} = -61,2 - -65,4 \text{ ‰}$; GWL 92: $\delta^{18}\text{O} = -8,6 - -9,0 \text{ ‰}$ und $\delta\text{D} = -62,7 - -65,3 \text{ ‰}$; GWL 98: $\delta^{18}\text{O} = -9,0 - -9,5 \text{ ‰}$ und $\delta\text{D} = -67 - -72,5 \text{ ‰}$ [Kowski, 1995]). Es existiert demnach ein Konzentrationsgradient der stabilen Isotope zwischen dem Mixolimnion und dem Monimolimnion. Da das Monimolimnion nicht an der Durchmischung des Mixolimnions teilnimmt, können nur diffusive oder turbulent diffusive Prozesse isotopisch schwereres Wasser ins Monimolimnion einbringen. Abbildung 4.22 zeigt die gemessenen Profile von ^{18}O (oben) und Deuterium (unten) im Monimolimnion. Insbesondere die Deuteriumwerte weisen eine relativ hohe Streuung auf, die Profile können aber im Rahmen der hohen Fehler sowohl für Deuterium als auch für ^{18}O als gleich bezeichnet werden. Die Isotopenwerte steigen vom Grund zur Chemokline hin an, das Wasser ist also im oberen Monimolimnion isotopisch schwerer als im unteren.

Durchmischungsprozesse oder ein Zufluß könnten einen zeitlichen Trend in den Isotopenprofilen bewirken. Ein solches Verhalten ist aber wie oben beschrieben nicht zu beobachten. Dies läßt zwei Möglichkeiten der Deutung zu:

1. Die beobachtete Verteilung könnte ein Ergebnis eines stationären Zustandes aus Zufluß von isotopisch leichterem Grundwasser und Einmischung isotopisch schwereren Mixolimnion-Wassers sein. In diesem Fall wäre die beobachtete zeitliche Konstanz der Profile reell.
2. Die zweite Interpretationsmöglichkeit ist durch die Bildung des Monimolimnions aus Grundwasser einer ähnlichen isotopischen Signatur wie das Wasser dicht über dem Grund und dem unterdrückten Transport durch die Chemokline gegeben. Die Austauschrate könnte so gering sein, daß ein eventuell existierender (minimaler) zeitlicher Trend der Profile durch die hohen Fehler und damit der großen Streuung der Daten überdeckt wird.

Aus den vorliegenden Daten läßt sich jedoch keine Aussage darüber gewinnen, welche der beiden Interpretationen zutrifft.

Kapitel 5

Physikalische Seemodellierung

5.1 Modellwahl

Das verwendete Modell soll die Transport- und Austauschprozesse für die Schichtungsverhältnisse in einem meromiktischen Restsee simulieren und Aussagen über die Schichtungsdynamik liefern können. Es muß in der Lage sein, die Einwirkung physikalischer Prozesse auf eine thermische und haline Seenschichtung nachzuvollziehen und prognostizieren zu können. Insbesondere ist dabei das Verhalten der salzbedingten Dichtesprungschicht und die Entstehung etwaiger Instabilitäten durch Windanregung von Interesse. Das Modell muß desweiteren die Berücksichtigung lateraler Zu- und Abflüsse in beliebiger Tiefe zulassen. Die Möglichkeit, einen dichtegeschichteten Grundwasserleiter oder verschiedene Grundwasserleiter mit unterschiedlichen Salzfrachten zuzulassen, muß gegeben sein. Zur Berechnung der thermischen und chemischen Dichtestruktur müssen Temperatur und Leitfähigkeit verwendet werden. Weitere konservative Tracer sollten im Modell eingeführt werden können.

Die zeitliche Auflösung des Modells muß so beschaffen sein, daß mehrjährige Simulationsrechnungen möglich sind, aber kurzfristige Ereignisse, sofern sie Einfluß auf die langjährige Entwicklung haben, nicht vernachlässigt werden. Ein maximaler Zeitschritt von einem Tag ist wünschenswert.

Da von horizontaler Homogenität des Sees ausgegangen wird, kann sich das Modell auf eine eindimensionale vertikale Modellierung beschränken.

Einen Überblick über vorhandene Seemodelle gibt Karagounis [1992] und führt ihre Vor- und Nachteile an:

DYRESM (Dynamic Reservoir Simulation Model) [Imberger und Patterson, 1981] berechnet die vertikale Temperatur- und Salzgehaltsverteilung mit einer täglichen Eingabe der meteorologischen sowie der Zu- und Abflussdaten. Es berechnet mittels verschiedener parametrisierter Prozesse die Sprungschichtabsenkung und die Wirbeldiffusion im Hypolimnion. Das Programm ist aber laut Karagounis [1992] sehr umfangreich und schwer durchschaubar. Daher gestalten sich eigene Eingriffe ins Programm schwierig.

Das MIT-Wind-Mixing Modell [Wang und Harlemann, 1982] berechnet lediglich die vertikale Temperaturverteilung, ebenso das WRE-Modell [Orlob und Selna, 1970].

Das von Karagounis [1992] entwickelte Seemodell LIMNMOD basiert auf einem modifi-

zierten MIT-Wind-Mixing Modell nach Wüest [1987] und dem Nährstoffmodell SEEMOD [Imboden und Gächter, 1978]. Es ist ein gekoppeltes physikalisch-biochemisches Modell, welches die Leitfähigkeit und die Temperatur zur korrekten Dichteberechnung verwendet. Dieses Modell wurde als Basis für die Modellierungen im Rahmen dieser Arbeit verwendet, da es den oben angesprochenen Anforderungen prinzipiell genügt. Das Programm ist in Standard-Fortran F77 geschrieben, übersichtlich aufgebaut und gut kommentiert. Nötige Modifikationen sind daher leicht möglich.

LIMNMOD ist ein Sprungschichtmodell, das die Sprungschichttiefe über eine Energiebilanz berechnet (Kapitel 5.4.3). Es erfolgt eine Unterteilung in ein volldurchmisches Epilimnion und ein Hypolimnion, in dem die Mischungsprozesse nach einem parametrisierten Ansatz für die Wirbeldiffusion berechnet werden (Kapitel 5.4.4). Die Dichteberechnung aus der Leitfähigkeit und der Temperatur läßt die Berücksichtigung von meromiktischen Schichtungsverhältnissen zu. Die örtliche Diskretisierung erfolgt in Schichten wählbarer Dicke und ist damit an die Seegeometrie und die Schichtungsverhältnisse anzupassen.

Im Rahmen dieser Arbeit wird nur der physikalischer Teil benutzt. Die für die physikalische Seemodellierung relevanten biologischer Größen sollen zum Teil aber mitbesprochen werden.

5.2 Modellgrößen

Als Modellgrößen sind in LIMNMOD vorgesehen:

Im See:

T	Temperatur [$^{\circ}\text{C}$]
κ_{25}	Leitfähigkeit für die Summe aller gelösten Stoffe [$\mu\text{S}/\text{cm}$]
GP	Gelöster Phosphor (algenverfügbarer Phosphor) [mg/m^3]
PP	Partikulärer Phosphor (Algenphosphor) [mg/m^3]
POC	Partikulärer organischer Kohlenstoff [mg/m^3]
O_2	gelöster Sauerstoff [mg/m^3]

Im Sediment:

SIP	Inorganischer Sedimentphosphor [mg/m^2]
SOP	organischer Sedimentphosphor [mg/m^2]
SLP	organischer, unter anaeroben Verhältnissen langsam abbaubarer Sedimentphosphor [mg/m^2]
SOC	organischer Sedimentkohlenstoff [mg/m^2]

Unter gelöstem Phosphor wird aller Phosphor verstanden, der durch die Algen aufgenommen werden kann. Der partikuläre Phosphor ist der Phosphor, der durch die Algen aufgenommen wurde. Die Algen selbst werden (Algenbiomasse, Phytoplankton) werden im Modell durch den partikulären organischen Kohlenstoff repräsentiert. Der gelöste Sauerstoff kann negative Werte annehmen, wenn ein Sauerstoffdefizit eintritt.

Rechnet man nur mit dem physikalischen Modellteil, treten lediglich die Modellgrößen Temperatur und Leitfähigkeit auf.

LIMNMOD läßt die Einführung weiterer Modellgrößen im See und Sediment zu, die in die Modellrechnung miteinbezogen werden. Das Modell wurde für die vorliegende Arbeit um folgende Größen erweitert:

SF ₆	Schwefelhexafluorid [fmol/l]
H ₂ ¹⁸ O	Isotopenverhältnis $R_{18O} = [H_2^{18}O]/[H_2^{16}O]$ Ein und Ausgabe in der δ -Notation [‰]
HD ¹⁶ O	Isotopenverhältnis $R_D = [HD^{16}O]/[H_2^{16}O]$ Ein und Ausgabe in der δ -Notation [‰]
HT ¹⁶ O	Tritium [TU]

5.3 Stoffbilanzgleichung

Der zeitliche Verlauf und räumliche Verlauf jeder Modellgröße im See wird gemäß Karagounis [1992] durch die eindimensionale vertikale Stoffbilanzgleichung beschrieben:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{Wirbeldiffusion} - \text{Advektion} + \text{Reaktionen} + \text{Quellen/Senken}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_v A \frac{\partial C}{\partial z} \right) - v \frac{\partial C}{\partial z} + r \cdot C + Q \quad (5.1)$$

C	Modellgröße [°C, $\mu\text{S}/\text{cm}$, fmol/l, mg/m ³ oder ‰]
A	Seequerschnittsfläche, tiefenabhängig [m ²]
K _v	Wirbeldiffusionskoeffizient [m ² /s]
v	vertikale Geschwindigkeit [m/s]
r	Reaktionsrate [1/s]
Q	Quellen/Senken [°C, $\mu\text{S}/\text{cm}$, fmol/l, mg/m ³ oder ‰]

Die Stoffbilanzgleichung basiert auf dem Konzept der Wirbeldiffusion. (Eine ausführliche Beschreibung der Theorie ist in Imboden und Wüest [1995] zu finden). Dieses Konzept, welches auch lokales Austauschmodell genannt wird, macht es möglich, das turbulente Strömungsfeld in einem See statistisch zu beschreiben. Das turbulente Strömungsfeld kann, um den turbulenten Anteil der Flußdichte zu bestimmen, nach Reynolds in einen Mittelwert und Fluktuationen um diesen Mittelwert aufgespalten werden. Es entsteht dabei ein Term, der den advektiven Transport durch die mittlere Strömung, und ein zweiter Term, der den Transport durch die Turbulenz beschreibt. Letzterer Term wird auch lokaler Fluß genannt und wird, in Analogie zur molekularen Diffusion, durch einen Gradientenansatz angenähert. Der lokale Fluß wird durch die Multiplikation des lokalen Gradienten der mittleren Konzentration mit einem Wirbeldiffusionskoeffizienten ausgedrückt und erhält dadurch die mathematische Form des 1. Fick'schen Gesetzes. Die Diffusion ist, im Gegensatz zur Advektion, nicht gerichtet. Der Massenfluß geht in Richtung abnehmender

Konzentration. Der Wirbeldiffusionskoeffizient wird zeit- und tiefenabhängig berechnet (Kapitel 5.4.4). Im Epilimnion wird der Diffusionskoeffizient gleich ∞ gesetzt, indem es nach jedem Grundzeitschritt vollständig durchmischt wird. Meist ist der Wirbeldiffusionskoeffizient um einige Größenordnungen größer als der molekulare Diffusionskoeffizient. Vertikal gerichtete Bewegungen wie Ausgleichströmungen zur Massenerhaltung bei Zu- und Abflüssen, Sedimentation partikulären Materials oder seeinterne Sanierungsmaßnahmen werden im Modell durch advektive Prozesse wiedergegeben. Die im Advektionsterm verwendete Geschwindigkeit v ergibt sich aus der Addition der einzelnen Prozessgeschwindigkeiten. Diese können sich zum Teil aufheben (z. B. Kompensationsgeschwindigkeit der Zuflüsse nach oben mit Sedimentationsgeschwindigkeit nach unten). Unter Reaktionen werden im Modell Prozesse verstanden, die direkt proportional zur vorhandenen Konzentration einer Modellgröße ablaufen. Es handelt sich dabei insbesondere um biochemische Reaktionen.

Unter die Quellen und Senken fallen die Zu- und Abflüsse sowie die internen Sanierungsmaßnahmen. Als Randbedingungen treten Prozesse wie der Wärmeaustausch mit

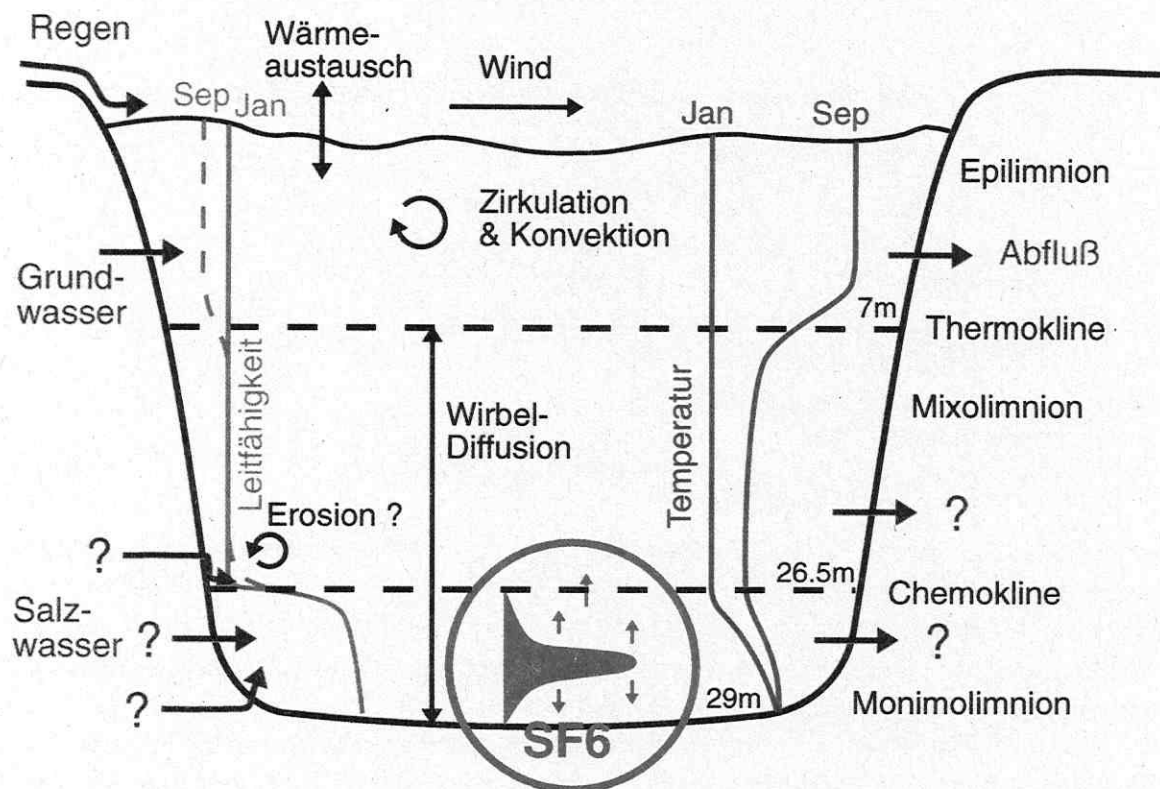


Abb. 5.1: Vom Modell berücksichtigte physikalische Prozesse im See. Es sind schematisch die Schichtung des Hufeisensees, Profile der Temperatur und der Leitfähigkeit zu verschiedenen Jahreszeiten sowie die Zu- und Abflüsse dargestellt.

der Atmosphäre, die Isotopenfraktionierung bei der Verdunstung oder der geothermische Wärmefluß auf. Sie werden als Flüsse durch die Wasseroberfläche bzw. durch die Wasser-Sedimentgrenze berechnet und im Modell den Quellen- und Senkentermen zugeordnet. Die Anfangsbedingungen zur Lösung der Differentialgleichung werden dem Modell für jede Modellgröße in Form von Startprofilen eingegeben.

5.4 Prozesse

Die Abbildung 5.1 gibt einen Überblick über die physikalischen Prozesse, die von dem Seemodell LIMNMOD erfaßt werden. Es sind zu nennen:

- Der Wärmehaushalt eines Sees wird durch den *Wärmeaustausch mit der Atmosphäre* bestimmt, welcher auch zur Ausbildung eines Epilimnions führt.
- Der Eintrag von *Windenergie* bewirkt eine Durchmischung des Epilimnions und eventuell eine Sprungschichtabsenkung sowie die Wirbeldiffusion im Hypolimnion.
- Die *Zu- und Abflüsse* führen zu advektiven Prozessen und bestimmen zusammen mit dem Niederschlag und der Verdunstung den Wasserhaushalt des Sees.
- Die Modellierung der Ausbreitung des *Tracers SF_6* im Monimolimnion erlaubt Aussagen über interne Prozesse in dieser Schicht.

Prozess	direkt betroffene Modellgrößen	Terme in der Stoffbilanzgleichung
Wärmeaustausch mit der Atmosphäre	T	J
Energiebilanz im Epilimnion, Sprungschichtabsenkung, vollständige Durchmischung des Epilimnions	alle im See	
Wirbeldiffusion im Hypolimnion	alle im See	D
molekulare Diffusion	alle im See	D
Zuflüsse, Regen	alle im See	A, J
Abflüsse	alle im See	A, J
Sedimentwärmefluß	T	J
Isotopenfraktionierung	R_{18O} , R_D	J
Gasaustausch an der Wasseroberfläche	SF_6 , O_2	J

Tab. 5.1: LIMNMOD: Berechnete physikalische Prozesse. D = Diffusionsterm, A = Advektionsterm, R = Reaktionsterm, J = Quellen- oder Senkenterm

Die Tabelle 5.1 faßt nochmals die von LIMNMOD berechneten physikalischen Prozesse, die jeweils betroffenen Modellgrößen im See sowie die Terme der Stoffbilanzgleichung, auf die diese Prozesse einwirken, zusammen.

5.4.1 Wärmeaustausch mit der Atmosphäre

Der Wärmeaustausch mit der Atmosphäre (Abbildung 5.2) setzt sich aus fünf Komponenten zusammen :

H_S	der vom Wasser absorbierte Anteil der kurzwelligen Strahlung
H_A	der vom Wasser absorbierte Anteil der langwelligen, infraroten Strahlung
H_W	die langwellige, infrarote Abstrahlung des Wassers
H_V	latenter Wärmefluß, also Wärmeaustausch an der Wasseroberfläche durch Verdunstung und Kondensation
H_K	Konvektion, d.h. Übergang fühlbarer Wärme zwischen Wasser und Luft

Diese Beiträge summieren sich zu einem totalen Wärmefluß H_{tot}

$$H_{tot} = H_S + H_A + H_W + H_V + H_K \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.2)$$

Die einzelnen Komponenten sowie H_{tot} sind speziell für den Hufeisensee in Abbildung 6.17 in Kapitel 6.4 dargestellt. Die größten Beiträge liefern die langwellige Einstrahlung H_A und die langwellige Abstrahlung H_W , gefolgt von der kurzwelligen Einstrahlung H_S und dem latenten Wärmefluß H_V .

Mit Ausnahme der kurzwelligen Strahlung H_S wirkt sich der Wärmefluß nur in den obersten Zentimetern des Wasserkörpers aus. Die einzelnen Terme sollen im folgenden beschrieben werden. Modifikationen gegenüber der ursprünglichen Formulierung in Karagounis [1992] betreffen im wesentlichen die Tiefenverteilung der kurzwelligen Strahlung, den Spezialfall der Eisbedeckung (Kapitel 5.4.2) und die Einführung einer nur teilweise windexponierten Seeoberfläche. Es bezeichnen im folgenden

r_A	Reflexionskoeffizient für langwellige Strahlung: 0,03 [-]
E_A	Emissivität der Atmosphäre (s. Gl. 5.9) [-]
E_W	Emissivität des Wassers: 0,97 [-]
S	Stefan - Boltzmann - Konstante: $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$
T_A	Absolute Temperatur der Atmosphäre [K]
T_W	Absolute Temperatur des Wassers (oberste Modellschicht) [K]
e_A	Dampfdruck der Atmosphäre [mbar]
e_S	Sättigungsdampfdruck bei Seeoberflächentemperatur [mbar] (s. Gl. 6.1)
B	Bewölkung [-]
ε	Extinktionskoeffizient des Wassers für kurzwellige Strahlung [1/m]
β	Extinktionskoeffizient für die Biomasse: 0,00033 [m ² /mg]
POC	Biomasse [mg/m ³]
u_{10}	Windgeschwindigkeit in 10m Höhe [m/s]
γ_u	Windefizienzfaktor [-] (Windrichtungs- und Seeform-abhängiger Anteil der nicht windabgeschatteten Seefläche von der Gesamtseefläche)

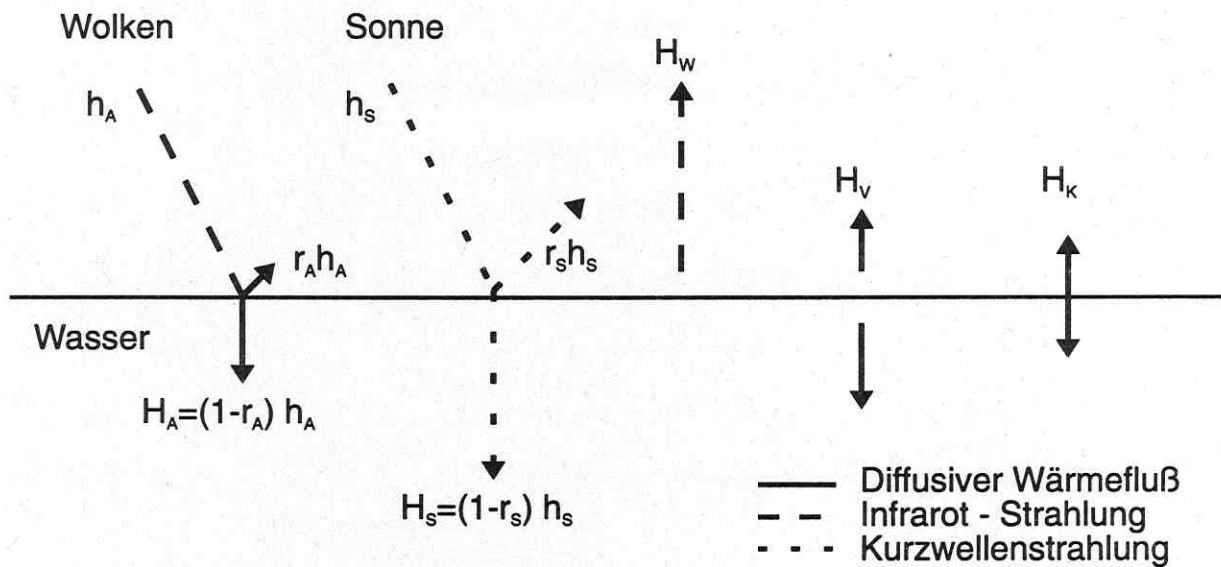


Abb. 5.2: Wärmeaustausch mit der Atmosphäre. Der gesamte Wärmeaustausch lässt sich in langwellige (H_A) und kurzwellige (H_S) Einstrahlung, langwellige Abstrahlung (H_W) sowie konvektiven (H_K) und latenten (H_V) Wärmeaustausch zerlegen. r_A und r_S bezeichnen die Reflexionskoeffizienten für die langwellige und kurzwellige Strahlung.

H_S Für die kurzwellige Strahlung wird angenommen, daß die Intensität exponentiell mit der Wassertiefe abnimmt, wobei sich der Absorptionskoeffizient η aus den Extinktionskoeffizienten des Wassers und der Biomasse zusammensetzt [Karagounis, 1992]:

$$H_S(z) = H_S e^{-\eta z} = H_S e^{-z(\epsilon + \beta \cdot POC)} \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.3)$$

Die Exponentialverteilung der kurzwelligen Strahlung im Wasser

$$E_i = e^{-z(i)(\epsilon + \beta \cdot POC)} \quad [-] \quad (5.4)$$

gilt in der obigen Form aber nur für ein Rechteckbecken. Für eine reale Seebeckenform muß noch zusätzlich die Absorption im Sediment berücksichtigt werden. So steht an der Oberfläche der zweiten Schicht (A_2) die nach Durchdringen der Schicht 1 verbleibende Strahlungsmenge $(E_1 - E_2)H_S$ nur im Verhältnis A_2/A_1 für die weitere Tiefenverteilung zur Verfügung. Der Rest der über A_1 eingefallenen Strahlung, $(1 - \frac{A_2}{A_1})E_1H_S$, fällt aufs Sediment und trägt zur Erwärmung der ersten Schicht bei. Zusammen mit der in Abbildung 5.3 beschriebenen Diskretisierung läßt sich der in Schicht 1 absorbierte Strahlungsfluß wie folgt beschreiben:

$$H_S(1) = H_S \left((E_1 - E_2) \frac{A_2}{A_1} + E_1 \left(1 - \frac{A_2}{A_1} \right) \right) \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.5)$$

beziehungsweise

$$H_S(1) = \frac{H_S}{A_1} ((E_1 - E_2)A_2 + E_1(A_1 - A_2)) \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.6)$$

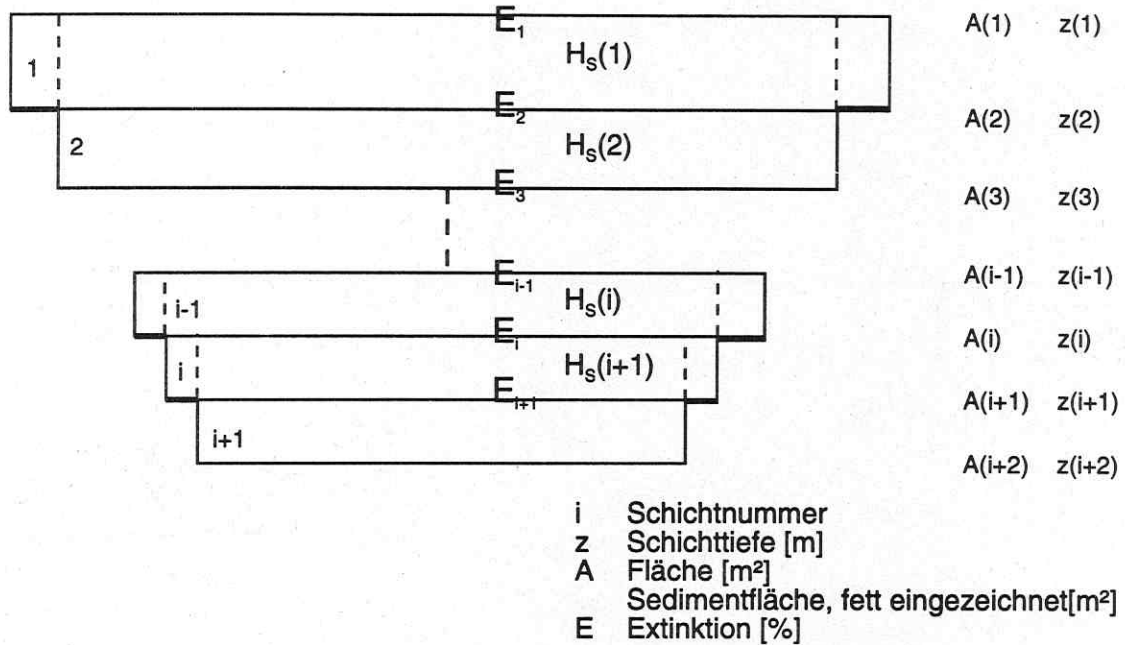


Abb. 5.3: Diskretisierung zur Tiefenverteilung der kurzwelligen Strahlung. In den Freiwasserbereichen erfolgt die Extinktion gemäß Gleichung 5.3. In den Sedimentbereichen wird von einer vollständigen Absorption der einfallenden Strahlung ausgegangen.

Analog erhält man für jede weitere Schicht i:

$$H_S(i) = \frac{H_S}{A_1} ((E_i - E_{i+1})A_{i+1} + E_i(A_i - A_{i+1})) \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.7)$$

H_A Die vom Wasser absorbierte langwellige, infrarote Strahlung der Atmosphäre wird durch das Stefan - Boltzmann'sche Gesetz, angewandt auf die Atmosphäre als Infrarot - Strahler, bestimmt. Die Strahlung geht hauptsächlich vom Wasserdampf in der Luft aus. Die Emissivität hängt daher von den meteorologischen Bedingungen ab. Insbesondere gehen der Wolkenbedeckungsgrad (B) und der Dampfdruck (e_a) in der Atmosphäre in die Formel ein.

$$H_A = (1 - r_A)E_A S T_A^4 \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.8)$$

Die Emissivität der Atmosphäre wird wie folgt berechnet [Brutsaert, 1975]

$$E_A = 1,24 \left(\frac{e_A}{T_A} \right)^{\frac{1}{7}} (1 + 0,17B^2) \quad [-] \quad (5.9)$$

H_W Die langwellige, infrarote Abstrahlung des Wassers wird ebenfalls nach dem Stefan - Boltzmann - Gesetz errechnet und lautet

$$H_W = -E_W S T_W^4 \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.10)$$

H_V Der Wärmeverlust des Wassers durch Verdunstung wird nach

$$H_V = f(u_{10})(e_S - e_A) \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.11)$$

bestimmt. Die Windfunktion $f(u_{10})$ ist nach Marti und Imboden [1986] angesetzt und nur um den Windeffizienzfaktor γ_u (s. Kap. 6.2.2) modifiziert.

$$f(u_{10}) = (3,6 + 2,5 \cdot \gamma_u u_{10}) \left(\frac{5 \cdot 10^6}{A} \right)^{0,05} \quad [-] \quad (5.12)$$

H_K Der Übergang fühlbarer Wärme zwischen Wasser und Luft ergibt sich aus

$$H_K = -Bo f(u_{10})(T_W - T_A) \quad [\text{W/m}^2] \quad (5.13)$$

Bo Bowenkoeffizient: 0,63 mbar/K

5.4.2 Eisbedeckung

In der ursprünglichen Formulierung von LIMNMOD war keine Eisbedeckung vorgesehen, da die von Karagounis [1992] vorgesehene Anwendung auf den Luganersee dies nicht notwendig machte. In der aktualisierten Fassung von LIMNMOD ist nun ein einfaches Eismodell integriert, das lediglich die Dauer der Eisbedeckung, nicht aber die Eisdicke nachvollzieht. Es dient vor allem dazu, die durch die Eisbedeckung modifizierten Terme des atmosphärischen Energieeintrags durch Strahlung und Wind sowie die turbulente Diffusion während Eisphasen richtig wiederzugeben.

Die Abfrage, ob eine Eisbedeckung vorliegt, geschieht einmal pro Modelltag in der Subroutine ATMOS. Liegt nach der Addition der atmosphärischen Temperaturänderungen die Temperatur der ersten Schicht soweit unter 0°C daß der (negative) Wärmehalt Q_1 der ersten Schicht bezogen auf 0°C für die Bildung von 5mm Eissäule ausreicht (Schmelzwärme Q_{Eis}), so wird vom Modell eine Eisbedeckung angenommen.

$$Q_1 = V_1 \cdot \rho \cdot c_W \cdot T(1) \quad [\text{J}] \quad (5.14)$$

$$Q_{Eis} = -\rho \cdot A \cdot c_S \cdot d \quad [\text{J}] \quad (5.15)$$

ρ	Dichte des Wassers [kg/m ³]
A	Seeoberfläche [m ²]
V_1	Volumen der ersten Schicht [m ³]
$T(1)$	Temperatur der ersten Schicht [°C]
c_W	spezifische Wärme von Wasser: 4186 J/(kg·K)
c_S	spezifische Schmelzwärme von Eis 334000 J/kg
d	Dicke der Eisschicht, hier 0,005 m

Die Temperaturänderung durch atmosphärischen Wärmeenergieeintrag bzw. -verlust wird auch bei Eisbedeckung weiterhin der ersten Schicht zugeschlagen, die dadurch auch negative Temperaturen annehmen kann. Sie dient dann als "Energiespeicher" für die im Eis festgelegte latente Schmelzwärme, da weiterhin täglich der Vergleich zwischen Q_1 und Q_{Eis} gemacht wird. Erst wenn $Q_1 > Q_{Eis}$ gilt, wird die Eisbedeckung zurückgenommen. Durch die Eisbedeckung werden die folgenden Terme beeinflusst:

- *Verdunstung*: Es gibt keine Verdunstung und damit auch keinen latenten Wärmefluß H_V durch Verdunstung und Kondensation. Folglich tritt keine Fraktionierung der stabilen Isotope Deuterium und ^{18}O durch Verdunstung auf.
- *Langwellige Abstrahlung*: Bei Lufttemperaturen über 0°C wird die langwellige Abstrahlung H_W mit der Temperatur der Eisoberfläche von 0°C angenommen. Liegen die Lufttemperaturen unter 0°C , wird davon ausgegangen, daß die Eisoberfläche ebenfalls diese Temperatur besitzt. H_W wird dann mit der Lufttemperatur berechnet.
- *Fühlbare Wärme*: Lufttemperaturen über 0°C bewirken einen Fluß fühlbarer Wärme ins Eis, es findet eine Wärmezufuhr statt (Gleichung 5.13). Liegt die Lufttemperatur unter 0°C , ist dieser Term gleich Null.
- *Extinktion*: Die Extinktion klaren Eises entspricht der Extinktion von Wasser.
- Der *Windenergieeintrag* wird auf Null gesetzt.
- Die *turbulente Diffusion* wird ohne Windenergieeintrag ebenfalls gleich Null.

5.4.3 Sprungschichtabsenkung

Die Absenkung der Sprungschicht (Unterkante des Mixolimnions) wird aus einer Energiebilanz von destabilisierenden und stabilisierenden Energieeinträgen errechnet. Je nach Ergebnis dieser Energiebilanz ist eine Sprungschichtabsenkung und damit Durchmischung möglich oder nicht. Es wirken destabilisierend:

- Windenergieeintrag
- Abkühlung der obersten Wasserschicht bei Temperaturen oberhalb der Temperatur des Dichtemaximums ($T_{\rho_{\max}}$), gleichbedeutend mit einem negativen Wärmefluß H_{tot} . Dies führt zu konvektiver Turbulenz.
- Den gleichen Effekt hat die stärkere Erwärmung einer Wasserschicht gegenüber der darunterliegenden Wasserschicht bei Temperaturen unterhalb von $T_{\rho_{\max}}$.

Stabilisierend sind demgegenüber:

- Erwärmung, wenn $T > T_{\rho_{\max}}$ bzw. Abkühlung, wenn $T < T_{\rho_{\max}}$
- die vorhandene Dichtestruktur, die der Windmischung entgegenwirkt

Konvektive Turbulenz Die konvektive Turbulenz soll beispielhaft für den Fall beschrieben werden, daß die Temperatur der oberen Wasserschichten über der Temperatur $T_{\rho_{\max}}$ des Dichtemaximums liegt. Durch Abkühlung der oberen Wasserschichten erhöht sich dann deren Dichte, sie mischen von oben nach unten soweit, bis die darunterliegende Schicht eine höhere Dichte als die obenliegenden durchmischten Schichten besitzt

(Abbildung 5.4). Dabei erniedrigt sich die potentielle Energie der Wassersäule, der Differenzbetrag geht als konvektive turbulente kinetische Energie in die Durchmischung. Zur Bestimmung der potentiellen Energie wird eine Schwerpunktsberechnung für die reale Seebeckenform gewählt. Dies bedeutet, daß nicht wie ursprünglich in Karagounis [1992] vorgesehen der Schwerpunkt einer Einheitswassersäule mit einem bestimmten Dichteprofil berechnet wird, es gehen vielmehr die Volumina V_i der Schichten mit ein. Die Bestimmung der Schwerpunktslage erfolgt im geschichteten und ungeschichteten Zustand unter Massenerhaltung.

Im geschichteten Zustand ist die Schwerpunktslage HSG

$$HSG_i = \frac{\sum_{j=1}^i \rho_j V_j z_j}{\sum_{j=1}^i \rho_j V_j} \quad [\text{m}] \quad (5.16)$$

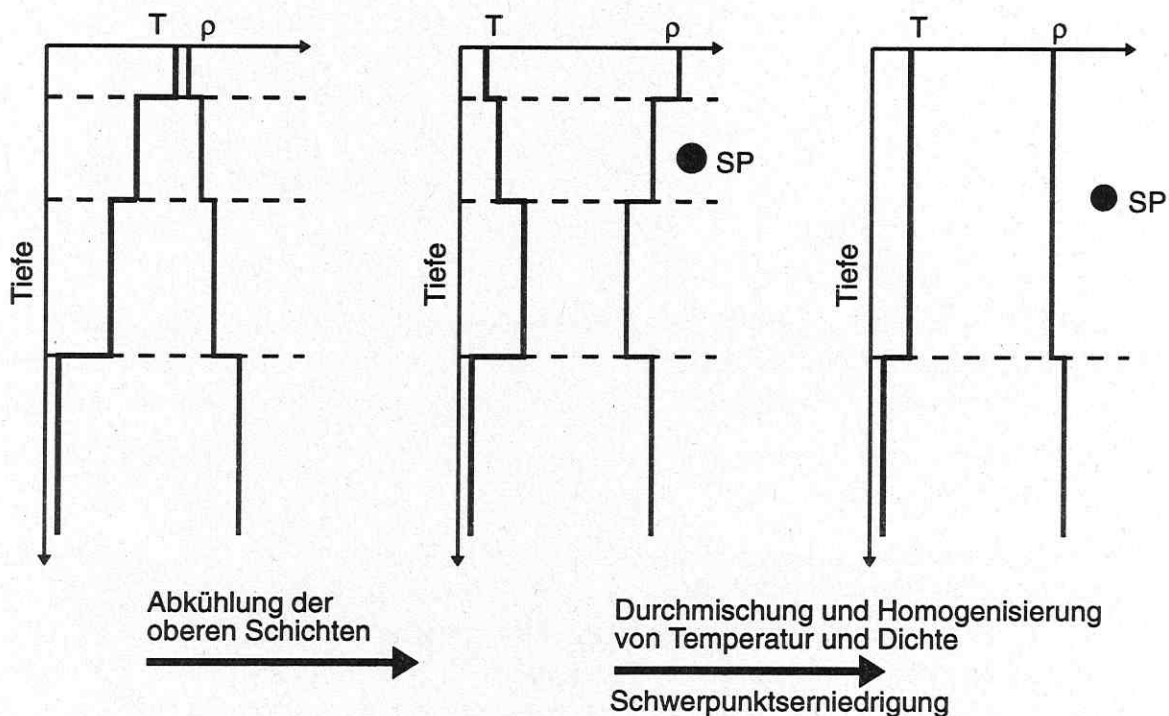


Abb. 5.4: Erniedrigung der potentiellen Energie durch konvektive Mischung. Im ersten Teilbild ist eine stabile Schichtung dargestellt (die Temperaturen sollen höher als die des Dichtemaximums sein). Durch Abkühlung würde die im zweiten Teilbild gezeigte instabile Schichtung entstehen, was zu einer instantanen Durchmischung der oberen Schichten führt, bis wieder eine stabile Situation entsteht. Dabei wird der Schwerpunkt SP erniedrigt und die freiwerdende potentielle Energie in turbulente kinetische Energie umgesetzt.

Im ungeschichteten Zustand ist die Schwerpunktslage HSU

$$HSU_i = \frac{\sum_{j=1}^i \rho_{mix,i} V_j z_j}{\sum_{j=1}^i \rho_{mix,i} V_j} \quad [\text{m}] \quad (5.17)$$

ρ_i Dichte der Schicht j [kg/m^3]

$\rho_{mix,i}$ Mischdichte der durchmischten Schichten bis zur Schicht i [kg/m^3]

V_j Volumen der Schicht j [m^3]

z_j Tiefe des Schichtschwerpunktes der Schicht j [m]

Es steht jeweils im Zähler die kumulierte tiefengewichtete Masse bis zur Schicht i und im Nenner die kumulierte Masse bis zur Schicht i. Die Dichte der durchmischten Schicht wird aus der Mischtemperatur T_{mix} und der Mischleitfähigkeit κ_{25mix} errechnet.

$$\rho_{mix,i} = \rho(T_{mix,i}, \kappa_{25mix,i}) \quad [\text{kg}/\text{m}^3] \quad (5.18)$$

$$T_{mix,i} = \frac{\sum_{j=1}^i T_j V_j}{\sum_{j=1}^i V_j} \quad [^\circ\text{C}] \quad (5.19)$$

$$\kappa_{25mix,i} = \frac{\sum_{j=1}^i \kappa_{25j} V_j}{\sum_{j=1}^i V_j} \quad [\mu\text{S}/\text{cm}] \quad (5.20)$$

Die tatsächliche konvektive Sprungschichttiefe wird im Programm durch sukzessiv tieferreichende Durchmischung ab der ersten Schicht gesucht, wobei vor jedem weiteren rechnerischen Durchmischungsschritt die folgenden Abbruchbedingungen überprüft werden:

1. Die Dichte der Schicht unter dem durchmischten Bereich ist höher als die Dichte im durchmischten Bereich.
2. Der Schwerpunkt des ungeschichteten Zustandes liegt über dem des geschichteten Zustandes, obwohl das Dichtekriterium noch nicht greift. Dies kann in der Berechnung durch numerische Ungenauigkeiten und eventuell durch Flächen- und Tiefenungenauigkeiten sowie durch die verwendete Dichteformel auftreten. Die Unterschiede zwischen der Tiefe des geschichteten und des ungeschichteten Schwerpunkts treten für diesen Fall in der 7. bis 8. Nachkommastelle auf

Trifft eines dieser Kriterien zu, ist die Tiefe der konvektiven Sprungschicht bestimmt; die letzte durchmischte Schicht ist die vorläufige **konvektiv erreichte Sprungschicht** $i_{ISPRU1} \geq 2$.

Der Energiegewinn E_{konv} ergibt sich aus der Differenz ΔE_{pot} der potentiellen Energie vor und nach der Durchmischung

$$E_{Konv}(i_{ISPRU1}) = \Delta E_{pot,i} \quad (5.21)$$

$$\Delta E_{pot,i} = -g \cdot m_{tot,i} \cdot (HSU_i - HSG_i) \quad [\text{J}] \quad (5.22)$$

- g Schwerebeschleunigung: 9,81 m/s²
 $m_{tot,i}$ Kumulierte Masse ($\sum \rho_i V_i$) des durchmischten Bereiches [kg]

Für die Einmischung tiefer liegenden Schichten steht diese Energie nur zum Bruchteil der Fluß-Richardson-Zahl Rf für den Aufbau potentieller Energie APE (= Available Potential Energy) zur Verfügung ($Rf=0,11$ [Imboden und Wüest, 1995]):

$$APE_{Konv}(i_{ISPRU1}) = Rf \cdot E_{Konv}(i_{ISPRU1}) \quad [J] \quad (5.23)$$

Interne konvektive Mischung Bei Temperaturen der Wassersäule unter $T_{\rho_{max}}$ gelten obige Ausführungen entsprechend, es muß lediglich das umgekehrte Verhalten der Dichte mit der Temperatur berücksichtigt werden. Zusätzlich kann dann aber eine weitere Situation eintreten, die zu einer internen Konvektion führt. Dies tritt dann auf, wenn die oberste Modellschicht aufgrund der Strahlungsbilanz eine geringere Temperatur und damit geringere Dichte als die zweite Schicht hat, letztere aber durch eine Erwärmung eine höhere Temperatur und damit eine größere Dichte als tieferliegende Modellschichten erhält. Die Erwärmung kann durch kurzwellige Einstrahlung oder Grundwasserzufluß erfolgen.

Es tritt dann eine interne Dichteinversion auf, die zu einer konvektiven Durchmischung erst ab einer tieferliegenden Modellschicht führt. Diese Situation kann insbesondere unter einer Eisbedeckung auftreten, da im Modell die erste Schicht den Wärmeinhalt des Eises enthält und damit auch negative Temperaturen aufweisen kann (siehe Abschnitt 5.4.2). Die kurzwellige Strahlung führt in diesem Fall, wie auch in Abschnitt 4.2 beschrieben, zu einer Konvektion und Homogenisierung der Wassersäule unter der Eisdecke, bis auf einen Temperaturgradient dicht unter der Eis-Wasser-Grenzfläche.

Die Berechnung der E_{IKonv} , und der dazugehörigen Sprungschichttiefe **IKONV** sowie von APE_{IKonv} erfolgt analog zu den Ausführungen des vorhergehenden Abschnittes und wird im Programm als erstes ermittelt.

Eine weitergehende Absenkung der Sprungschicht kann durch den Windenergieeintrag erreicht werden. Diese Größe muß zunächst bestimmt werden.

Windenergieeintrag Der Windenergiefluß P_{10} in 10m Höhe ist zur dritten Potenz der Windgeschwindigkeit proportional [Imboden und Wüest, 1995]:

$$P_{10} = c_D \rho_L u_{10}^3 \quad [J/m^2] \quad (5.24)$$

- ρ_L Dichte der Luft [kg/m³]
 u_{10} Windgeschwindigkeit in 10m Höhe [m/s]

$$c_D = (0,8 + 0,065u_{10})10^{-3} \quad \text{Windschubkoeffizient nach Wu [1980]} \quad (5.25)$$

Nur ein geringer Bruchteil $\chi \approx 1 - 2\%$ von P_{10} wird ins Wasser eingetragen [Oakey und Elliot, 1982]. Hiervon wiederum werden $(1 - Rf) \approx 89\%$ durch Reibung vernichtet und nur $Rf \approx 11\%$ stehen für den Aufbau potentieller Energie (Auftriebsfluß) zur Verfügung (APE).

Die pro Zeiteinheit Δt über die um windabgeschattete Teile reduzierte Seeoberfläche $\gamma_u \cdot A_1$ eingetragene APE ergibt sich dann zu

$$APE_{Wind}(i=1) = \Delta t \cdot \gamma_u A_1 \cdot Rf \cdot \chi \cdot c_D \rho_L u_{10}^3 \quad [J] \quad (5.26)$$

In tieferliegenden Schichten reduziert sich die APE_{Wind} in der Freiwassersäule entsprechend dem Auftriebsfluß proportional $e^{\frac{-z}{z_0}}$ (s. auch Kapitel 4.1). Zudem ergibt sich aus der Annahme der vollständigen Dissipation über Sediment eine seeflächenproportionale Reduktion des Oberflächenwertes $APE_{Wind}(1)$:

$$APE_{Wind}(i) = APE_{Wind}(1) \cdot e^{\frac{-z(i)}{z_0}} \cdot \frac{A(i)}{A(1)} \quad [J] \quad (5.27)$$

Auch die eventuell vorhandenen konvektiven Energiereste erfahren eine analoge Tiefenreduktion

$$APE_{Konv}(i) = APE_{Konv}(i_{ISPRU1}) \cdot e^{\frac{-(z(i)-z(i_{ISPRU1}))}{z_0}} \cdot \frac{A(i)}{A(i_{ISPRU1})} \quad [J] \quad (5.28)$$

falls $i \geq i_{ISPRU1}$ bzw. falls $i \geq i_{IKONV}$:

$$APE_{Konv}(i) = APE_{Konv}(i_{IKONV}) \cdot e^{\frac{-(z(i)-z(i_{IKONV}))}{z_0}} \cdot \frac{A(i)}{A(i_{IKONV})} \quad [J] \quad (5.29)$$

Die Diskretisierung in LIMNMOD macht die Einführung eines APE-Restes des Vortages notwendig. Reicht die zur Verfügung stehende APE gerade nicht aus, die Durchmischung einer weiteren Schicht zu bewirken, so bleibt eine Restenergie übrig. Bei einer feineren Diskretisierung oder einer kontinuierlichen Betrachtung wäre die Sprungschicht aber noch weiter abgesenkt worden. Der Restenergiebetrag des Vortages wird deshalb zu der APE des aktuellen Tages jeweils hinzugezählt. Allerdings muß beachtet werden, daß die Restenergie ebenfalls dissipiert werden kann. Dies führt auf eine Fallunterscheidung:

1. Die Sprungschicht ist gegenüber dem Vortag angestiegen. In diesem Fall muß der Restenergiebetrag des Vortages $APE_{Rest,alt}$ vollständig zu der APE hinzugezählt werden.

$$APE_{Rest,neu} = APE_{Rest,alt} \quad (5.30)$$

2. Die Sprungschicht ist gegenüber dem Vortag abgesunken. In der neuen Sprungschichttiefe steht nur die um die Dissipation verringerte Restenergie $APE_{Rest,neu}$ zur Verfügung:

$$APE_{Rest,neu} = APE_{Rest,alt} \cdot e^{\frac{z_{ISPRU,neu} - z_{ISPRU,alt}}{z_0}} \cdot \frac{A_{ISPRU,neu}}{A_{ISPRU,alt}} \quad [J] \quad (5.31)$$

Als totale APE ergibt sich für $i \geq i_{ISPRU1}$ damit

$$APE_{tot}(i) = APE_{Wind}(i) + APE_{Konv}(i) + APE_{IKONV}(i) + APE_{Rest,neu}(i) \quad (5.32)$$

Das Programm prüft nun mit einem fortgesetzten Schwerpunktsvergleich, bis zu welcher Tiefe weiter gemischt werden kann, d.h. $APE_{tot} > \Delta E_{pot}$ (nach Gleichung 5.21).

Zusammengefaßt läuft die Berechnung der Sprungschichttiefe im Modell also wie folgt ab:

- Berechnung des Wärmeeintrags H_{tot}
- Berechnung des von der Temperatur und Leitfähigkeit abhängigen Dichteverlaufs unter Berücksichtigung des erfolgten Wärmeeintrags
- Berechnung von $APE_{IKONV}(i_{IKONV})$
- Eventuell Durchführung der internen konvektiven Mischung und erneute Berechnung der resultierenden Temperatur-, Leitfähigkeits- und Dichteprofile
- Berechnung von $APE_{konv}(i_{ISPRU1})$
- Berechnung von APE_{Wind}
- Hinzurechnen von APE_{Rest} des Vortages
- Absenkung der Sprungschicht über die konvektive Sprungschicht hinaus, falls genügend APE_{tot} vorhanden ist. Entscheidung durch Vergleich der potentiellen Energie vor und nach der Durchmischung

Die Sprungschicht teilt den See in das vollständig durchmischte Epilimnion und das Hypolimnion, oder - falls das gesamte Mixolimnion durchmischt wird - in das Mixolimnion und das Monimolimnion.

5.4.4 Mischungsprozesse im Hypolimnion

Im Epilimnion herrschen nichtlokale Austauschprozesse vor. Diese können nicht durch einen Diffusionsansatz beschrieben werden. Das Epilimnion wird im Modell einmal pro Tag durchmischt.

Die Mischung im Hypolimnion wird nach dem Konzept der Wirbeldiffusion berechnet. Der vertikale Wirbeldiffusionskoeffizient K_t wird nach Maiss [1996] unter Berücksichtigung der Schichtstabilität, der Windgeschwindigkeit, einem Windeffizienzfaktor (s. Kap. 6.2.2) und der Tiefe wie folgt angesetzt

$$K_t = c_D \chi \frac{1}{N^2} \frac{\rho_L}{\rho_w} \frac{R_f}{z_0} u_w^3 \gamma_u e^{\frac{-z}{z_0}} \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (5.33)$$

Diese Beziehung basiert auf dem exponentiellen Eindringen des Auftriebsflusses J . Die Eindringtiefe der TKE z_0 hängt stark von der Seegeometrie ab. Sie ist identisch der Eindringtiefe von J und muß empirisch bestimmt werden. Im Hufeisensee ist der Exponentialansatz für den Auftriebsfluß bis in eine Tiefe von etwa 20m eine gute Näherung (siehe Kapitel 4.1). Dementsprechend ist Gleichung 5.33 bis in diese Tiefe gültig.

Für den Bereich zwischen einer Tiefe von 20m und der Chemokline wird ein konstanter Wert der Diffusionskoeffizienten als zeitliches Mittel angesetzt, der auf den Betrachtungen gemäß Abschnitt 4.1 beruht und einen Wert von $\approx 0,5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ hat.

Die Beziehung 5.33 hält nicht über die Chemokline hinweg. Im Monimolimnion werden daher die in Abschnitt 4.3.4 ermittelten Diffusionskoeffizienten als zeitliches Mittel verwendet. Abbildung 5.5 zeigt das Profil der im Modell verwendeten turbulenten Diffusionskoeffizienten sowie zum Vergleich ein exemplarisches Leitfähigkeitsprofil vom 1.10.1995

Chemokline erfolgt über die Stabilität N^2 . Der Wert von $K_t = 0,45 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ wird allen Schichten zugewiesen, in denen $N^2 \geq 0,1 \text{ 1/s}^2$ gilt.

Die molekulare Diffusion kann im Hypolimnion während windstillen Perioden eine Rolle spielen. Im Monimolimnion des Hufeisensees ist die molekulare Diffusion maßgeblich an der gesamten Diffusion beteiligt. Die molekularen Diffusionskoeffizienten K_{mol} können für jede Größe im See ins Modell eingegeben werden und werden zum Wirbeldiffusionskoeffizienten K_t addiert.

$$K_v = K_{mol} + K_t \quad (5.34)$$

5.4.5 Isotopenfraktionierung an der Wasseroberfläche

Bei der Verdunstung von einer Wasseroberfläche wird der entstehende Wasserdampf bezüglich der isotopisch schweren Molekülspezies $^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}$ und $^1\text{H}_2^{18}\text{O}$ gegenüber der flüssigen Phase abgereichert, da die schweren Wasserspezies im Vergleich zum "normalen" Wassermolekül $^1\text{H}_2^{16}\text{O}$ leicht verschiedene Dampfdrucke und Diffusionsgeschwindigkeiten besitzen. Andererseits findet eine Rückdiffusion von atmosphärischem Wasserdampf statt. Beide Prozesse führen zu einer Anreicherung der schwereren Molekülspezies im Wasserkörper. Der See wird im Lauf der Zeit isotopisch schwerer. Verschiedene Parameter wie Temperatur und Luftfeuchte beeinflussen den Grad der Verschiebung der Isotopenhäufigkeiten. Die physikalischen Prozesse, die für die Isotopenfraktionierung verantwortlich sind, können besser verstanden werden, wenn sie in einzelne Schritte unterteilt werden.

Nach Gonfiantini [1986] sind dies die

1. *Gleichgewichtstrennung*: Der freigesetzte Wasserdampf steht zunächst in einem isotopischen Gleichgewicht mit der flüssigen Phase an der Wasseroberfläche. An der Wasser-Luft Grenzfläche ist der Wasserdampf demnach entsprechend einem Gleichgewichtstrennfaktor an schweren Isotopen abgereichert.
2. *Kinetische Trennung* Oberhalb der Wasser-Luft Grenzfläche schließt die laminarviskose Grenzschicht an, in welcher der Transport ausschließlich durch die molekulare Diffusion beherrscht wird. In Luft sind die molekularen Diffusionskoeffizienten der schweren Molekülspezies $^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}$ und $^1\text{H}_2^{18}\text{O}$ geringer als derjenige von $^1\text{H}_2^{16}\text{O}$. Dies führt zu einer weiteren Abreicherung der schweren Isotope im freigesetzten Wasserdampf, welche durch einen kinetischen Trennfaktor beschrieben werden kann.
3. Der Wasserdampf erreicht dann eine durch turbulenten Transport bestimmte Zone, in welcher keine Isotopenfraktionierung mehr durch Transportprozesse auftritt. Der durch Verdunstung freigesetzte Wasserdampf mischt sich in diesem Bereich mit dem atmosphärischen Wasserdampf.
4. Der Wasserdampf der turbulenten Zone tritt andererseits ebenfalls in die laminarviskose Grenzschicht ein und kann auf der Wasseroberfläche kondensieren. Dies wird als molekularer Austausch der Flüssigkeit mit dem atmosphärischen Wasserdampf bezeichnet.

Im folgenden werden zunächst die gebräuchlichen Bezeichnungen eingeführt, dann entsprechend obiger Zerlegung der Isotopenfraktionierung die Gleichgewichtstrennung und kinetische Trennung besprochen und zuletzt eine Differentialgleichung für die Isotopenvariation, die durch die Eindunstung eines Wasserkörpers unter der Rückwirkung atmosphärischen Wasserdampfes entsteht, aufgestellt.

Isotopenverhältnis Die Isotopenverhältnisse im Wasser werden durch das Verhältnis R der Konzentrationen der Molekülspezies Isotope $^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}$ bzw. $^1\text{H}_2\text{ }^{18}\text{O}$ zu der Konzentration der leichten Spezies $^1\text{H}_2\text{ }^{16}\text{O}$ ausgedrückt. Es ist also

$$R_{2H} = \frac{[^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}]}{[\text{H}_2\text{O}]} \quad R_{18O} = \frac{[^1\text{H}_2^{18}\text{O}]}{[\text{H}_2\text{O}]} \quad (5.35)$$

Da die Gehalte natürlicher Wässer an schweren Isotopen aber gering sind und die Verhältniszahlen R damit sehr klein werden, ist es üblich, nicht die Verhältnisse selbst, sondern die Abweichungen von einem Standard zu betrachten. Der international vereinbarte Standard ist als mittleres Ozeanwasser definiert und wird als SMOW bezeichnet (Standard Mean Ocean Water). Die relative Abweichung in Promille wird durch die sogenannten δ -Werte ausgedrückt:

$$\delta = 1000 \cdot \frac{R_{\text{Probe}} - R_{\text{Standard}}}{R_{\text{Standard}}} = 1000 \cdot \left(\frac{R_{\text{Probe}}}{R_{\text{Standard}}} - 1 \right) \quad [\text{‰}] \quad (5.36)$$

Bei multiplikativen Rechenoperationen sollte aber das Verhältnis R verwendet werden und erst am Schluß das Ergebnis in der δ -Notation ausgedrückt werden. Auch in LIMNMOD wird bis auf die Ein- und Ausgabe nur mit Isotopenverhältnissen gerechnet.

Isotopentrennung In einem abgeschlossenen System aus flüssigem Wasser und Wasserdampf tritt eine Isotopenfraktionierung durch *Gleichgewichtstrennung* ein. Der Dampfdruck der isotopisch schwereren Moleküle ist etwas geringer als der der leichteren [Roedel, 1992]. Der im Gleichgewicht mit flüssigem Wasser stehende Wasserdampf hat daher einen geringeren Gehalt an schweren Isotopen als das Wasser. Die Gleichgewichts-Isotopentrennung kann durch den Gleichgewichtstrennfaktor α_e beschrieben werden. Er ist als Verhältnis der Isotopenverhältnisse R in der flüssigen und dampfförmigen Phase definiert und entspricht dem Verhältnis der temperaturabhängigen Sättigungsdampfdrucke p_0 über reinem $^1\text{H}_2\text{ }^{16}\text{O}$, reinem $^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}$ bzw. reinem $^1\text{H}_2\text{ }^{18}\text{O}$:

$$\alpha_e(^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}) = \frac{R_D(\text{fluessig})}{R_D(\text{Dampf})} = \frac{p_0(\text{H}_2\text{O})}{p_0(^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O})} \quad (5.37)$$

$$\alpha_e(^1\text{H}_2^{18}\text{O}) = \frac{R_{18O}(\text{fluessig})}{R_{18O}(\text{Dampf})} = \frac{p_0(\text{H}_2\text{O})}{p_0(^1\text{H}_2^{18}\text{O})} \quad (5.38)$$

Die Gleichgewichtstrennfaktoren sind temperaturabhängig und lassen sich durch die halbempirische Formel von Majoube [1971] ausdrücken:

$$\ln \alpha_e(^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}) = \frac{24844}{T^2} - \frac{76,248}{T} + 0,052612 \quad (5.39)$$

$$\ln \alpha_e(^1\text{H}_2^{18}\text{O}) = \frac{1137}{T^2} - \frac{0,4156}{T} - 0,0020667 \quad (5.40)$$

T ist hier die absolute Temperatur in Kelvin.

Der Transport durch die oben angesprochene laminar-viskose Grenzschicht zwischen Wasseroberfläche und turbulent durchmischten Atmosphäre führt zu einer weiteren Abreicherung der schweren Isotope im Wasserdampf, wenn über die Grenzschicht hinweg ein Luftfeuchtegradient, das bedeutet ein Feuchtedefizit der unteren Luftschichten gegenüber der wasserdampf-gesättigten Luft direkt an der Wasseroberfläche, besteht. Dies wird als *kinetische Trennung* bezeichnet. Sie wird durch die Transferwiderstände der verschiedenen Molekülsorten und das Feuchtedefizit bestimmt. Der diffusive Fluß j einer Beimengung durch eine Schicht läßt sich durch die Differenz der Konzentrationen auf beiden Seiten der Schicht ($c_2 - c_1$) und einen Transferwiderstand ρ ausdrücken [Roedel, 1992]:

$$j = \frac{c_2 - c_1}{\rho} \quad (5.41)$$

In Luft sind die Diffusionskoeffizienten der schwereren Molekülspezies geringer als für $^1\text{H}_2^{16}\text{O}$, entsprechend ist der Transferwiderstand für die isotopisch schwereren Wasserarten größer. Der kinetische Trennfaktor läßt sich unter Berücksichtigung der relativen Feuchte h durch das Verhältnis der Transferwiderstände ρ_i der isotopisch schwereren Moleküle zum Transferwiderstand ρ des leichteren Wassers nach Roedel [1992] wie folgt ausdrücken:

$$\alpha_k = h + (1 - h) \cdot \frac{\rho_i}{\rho} \quad [-] \quad (5.42)$$

Das Verhältnis der Transferwiderstände ist auch als das umgekehrte Verhältnis der entsprechenden Diffusionskoeffizienten D und D_i formulierbar:

$$\frac{\rho_i}{\rho} = \left(\frac{D}{D_i} \right)^n \quad (5.43)$$

Damit ergibt sich:

$$\alpha_k = h + (1 - h) \cdot \left(\frac{D}{D_i} \right)^n \quad [-] \quad (5.44)$$

Der Exponent n liegt zwischen 0,5 und 1. Für die Verdunstung von einer freien Wasseroberfläche kann ein Wert von 0,5 verwendet werden [Gonfiantini, 1986]. Nach Merlivat [1978] sind die Verhältnisse der Diffusionskoeffizienten der verschiedenen Molekülspezies von Wasserdampf in Luft bei 21°C für $D(^1\text{H}_2^{16}\text{O})/D(^1\text{H}_2^{18}\text{O})$ $1,0285 \pm 0,0008$ und für $D(^1\text{H}_2^{16}\text{O})/D(^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O})$ $1,0251 \pm 0,001$. Dies führt mit einem n von 0,5 und einer Luftfeuchte von beispielsweise 70% auf Werte von $\alpha_k = 1,0042$ für $^1\text{H}_2^{18}\text{O}$ und $\alpha_k = 1,0037$ für $^1\text{H}^2\text{H}^{16}\text{O}$.

Isotopenvariation in einer eindunstenden Wassermasse Die Isotopenvariation eines Wasserkörpers bei der Verdunstung ist wie oben erwähnt auch von den Isotopenverhältnissen in der Luftfeuchte abhängig und kann nach Sonntag [1996] wie folgt beschrieben werden:

Eine gut durchmischte Wassermasse $M = M(t)$ nimmt durch Verdunstung $E = -dM/dt$ von ihrem ursprünglichen Wert $M(0) = M_0$ ab. Dabei ändert sich ihr Isotopengehalt $R = R(t)$. Zunächst kann die Änderung der Wassermasse durch die Verdunstung mittels einer

Bilanz des von der Wasseroberfläche weg gerichteten Wasserdampf-Molekülstroms und einer Zufuhr von Wasserdampfmolekülen durch molekularen Austausch atmosphärischen Wasserdampfes bestimmt werden (h ist die relative Luftfeuchte der unteren Atmosphäre):

$$-\frac{dM}{dt} = -\frac{dM_0}{dt} + h \cdot \frac{dM_0}{dt} = -\frac{dM_0}{dt} \cdot (1 - h) \quad (5.45)$$

Eine ähnliche Beziehung läßt sich auch für die schweren Isotope aufstellen, es müssen lediglich die Massenänderungen mit den Isotopenverhältnissen multipliziert werden, um die Konzentrationen der schweren Isotope in den Wasserdampfströmen zu berücksichtigen. Die Änderung des Gehalts an schweren Isotopen läßt sich unter Einbeziehung der Gleichgewichtstrennung und der kinetischen Trennung wie folgt beschreiben (es braucht nur die Massenänderung betrachtet zu werden, die Zeit spielt in diesem Fall keine Rolle):

$$-dM_i = -\frac{R}{\alpha_k \alpha_e} \cdot dM_0 + \frac{R_a}{\alpha_k} \cdot h \cdot dM_0 \quad (5.46)$$

Die einzelnen Terme werden anhand von Abbildung 5.6 klar. R_a ist das Isotopenverhältnis der Luftfeuchte; dieses unterscheidet sich von dem Isotopenverhältnis R_{ca} kondensierter Luftfeuchte nur um den Gleichgewichtstrennfaktor und läßt sich daher durch $R_a = \frac{R_{ca}}{\alpha_e}$ ausdrücken. Das Isotopenverhältnis kondensierter Luftfeuchte entspricht dem mittleren Isotopenverhältnis der örtlichen Niederschläge. Berücksichtigt man noch, daß eine Änderung des Gehalts an schweren Isotopen sowohl durch eine Massenänderung dM des Wasserkörpers als auch durch eine Änderung des Isotopenverhältnisses dR im Wasser bewirkt werden kann ($dM_i = R \cdot dM + M \cdot dR$), so ergibt sich aus den Gleichungen 5.45 und 5.46

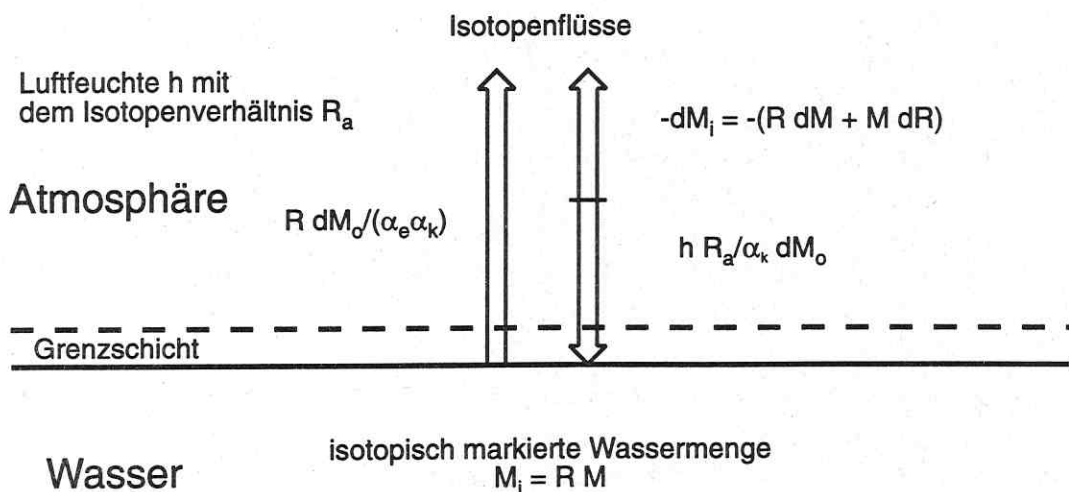


Abb. 5.6: Isotopenfraktionierung bei der Verdunstung (nach Sonntag [1996])

letztendlich

$$dR = \left(-R + \frac{1}{\alpha_e \cdot \alpha_k} (R - R_{ca}h) \frac{1}{1-h} \right) \frac{dM}{M} \quad (5.47)$$

Die Isotopenfraktionierung wird in der Subroutine ATMOS berechnet. Ein Ansatz für das Isotopenverhältnis im Niederschlag wird in Abschnitt 6.2.3 beschrieben.

5.4.6 Zu- und Abflüsse

Im Modell können grundsätzlich beliebig viele Zu- und Abflüsse definiert werden, in der vorliegenden Form ist die Anzahl auf fünf beschränkt, da bei einer Erhöhung einzelne Subroutinen verändert werden müssen [VWA, 1992]. Die Zuflußdaten mit den Stofffrachten werden mittels den Zuflussdateien (siehe Abschnitt 5.6) eingelesen, in denen auch eine Kennung für die Art der Einschichtung stehen muß:

- 1 Einschichtung entsprechend der aus der Leitfähigkeit und Temperatur des Zuflusses berechneten Dichte
- 2 Einschichtung in die Sprungschicht
- 3 Einschichtung in die oberste Schicht (Niederschlag)
- n Einschichtung auf eine feste Tiefe, Angabe in m NN

Die Einschichtung des Grundwasserleiters 15 wird gesondert behandelt und im Kapitel 6.2.4 beschrieben.

Ein Abfluss an der Wasseroberfläche kann im File KANENA.INI festgelegt werden. Der Abfluß erfolgt dann gleichmäßig verteilt in einem Tiefenbereich, der durch die einzugebende Abflußtiefe bestimmt wird. Weiterhin ist die Simulation einer Tiefenwasserableitung möglich. Dies läßt die Einführung weiterer frei wählbarer Abflüsse in beliebigen Tiefenbereichen zu. Die Einschichtung von Zuflüssen führt zu einer vertikalen Kompensationsströmung von unten nach oben, während alle Abflüsse, die nicht in der obersten Schicht liegen eine Kompensationsströmung nach unten zur Folge haben. Aus der Summe aller Zu- und Abflüsse, dem Niederschlag, den Bewässerungsentnahmen und der Verdunstung wird die Volumenvariation dV gemäß

$$dV = \text{Summe aller Zu- und Abflüsse} + \text{Niederschlag} - \text{Bewässerungsentnahmen} - \text{Verdunstung}$$

berechnet (Subroutine EKREO). Aus ihr ergibt sich dann die Seespiegelvariation (s. auch Abschnitt 5.4.7).

Verdunstung Die Menge des verdunstenden Wassers Q_V wird aus der Verdunstungswärme H_V (Gleichung 5.11) berechnet [Karagounis, 1992] und ist

$$Q_V = \frac{H_V}{\lambda \cdot \rho} \cdot A(1) \quad [\text{m}^3/\text{s}] \quad (5.48)$$

HV	Latenter Wärmefluß durch Verdunstung und Kondensation [W/m ²]
λ	Verdampfungswärme des Wassers: $2,3 \cdot 10^6$ J/kg
ρ	Wasserdichte [kg/m ³]
A(1)	Seeoberfläche [m ²]

Bei der Berechnung der Stoffentnahmen pro Schicht (Subroutine REFMA) durch sämtliche Zu- und Abflüsse (mit Niederschlag, Verdunstung, etc.) wird bezüglich der Oberflächenschicht zwischen zwei Spezies von Stoffen unterschieden:

1. Stoffe, die bei der Verdunstung einfach mitgenommen werden. Die Verdunstung ist in diesem Fall einem Abfluß äquivalent und braucht bei der Berechnung der Stoffentnahme nicht gesondert behandelt zu werden. Beispiele hierfür sind:
 - Temperatur, bis auf die Verdampfungskühlung, die in der Subroutine ATMOS berechnet wird
 - stabile Isotope (¹⁸O und Deuterium), bis auf die Fraktionierungsprozesse, die in der Subroutine ATMOS berechnet werden
 - gelöste Gase, bis auf die Gasaustauschprozesse, die ebenfalls in der Subroutine ATMOS berechnet werden.
2. Stoffe, die bei der Verdunstung im Wasser zurückbleiben und dadurch angereichert werden:
 - alle Salze
 - GP, PP, POC

Niederschlag Der Niederschlag erhält in der vorliegenden Formulierung ebenfalls Stofffrachten (Subroutine POTAMI). Insbesondere wird dem Regen die Temperatur der Luft und ein Isotopenverhältnis (R_{18O} und R_D) zugeordnet (s. auch Abschnitt 6.2.3).

Bewässerungsentnahmen Die Bewässerungsentnahmen werden dem Hauptabfluss zugeschlagen und somit ebenfalls der obersten Schicht entnommen. Eine Darstellung der Mengen der Wasserentnahme folgt in Kapitel 6.2.4.

5.4.7 Variabler Seespiegel

In der bisherigen Formulierung von LIMNMOD wurde der Seespiegel konstant gehalten. Dies trifft aber auf den Hufeisensee nicht zu, da er nicht durch einen Abfluß auf konstanter Höhe gehalten wird. Der Seespiegel stieg während des Simulationszeitraumes von 90,56m NN auf über 92,30m NN an. Dies hat Auswirkungen auf den Inhalt und die Konzentration aller Größen im See und vor allem auf die Wasserbilanz. Aus diesem Grund wurde ein variabler Seespiegel neu in LIMNMOD eingeführt. In der Eingabedatei KANENA.INI kann die Schichtwahl durch die Angabe, welche Schichtdicken bis in welche Tiefen gelten sollen, festgelegt werden. Diese Tiefen beziehen sich in der neuen Formulierung der

Schichtwahl mit variablem Seespiegel auf eine Referenzhöhe ASLREF, für die ein virtueller, nie erreichter maximaler Seespiegel von 92,8m NN eingesetzt wird. Beim erstmaligen Definieren der Schichten und Berechnen der Geometrie werden somit durch den Bezug der Tiefen auf eine Referenzhöhe die Schichtgrenzen auf bestimmte Höhen über NN festgelegt (Abbildung 5.7). Nur die oberste Schicht variiert zeitlich bezüglich der Dicke und Lage der Schichtobergrenze und beschreibt dabei die Seespiegelvariationen.

Die Seequerschnittsflächen auf den Schichtoberkanten werden aus den Daten der Geometrie-Eingabedatei TIEFE_NN.DAT in der Subroutine STROMA interpoliert. In dem Geometrie-File sind außer den Geometriedaten für einen Tiefenbereich von 0 - 30m (bezogen auf 92,8m NN) die Festlegung der Referenzhöhe ASLREF selbst enthalten.

Während die Höhen über NN der Schichtgrenzen im weiteren festgelegt sind, müssen die relativen Tiefen in Bezug auf den realen, veränderlichen Seespiegel für jeden Modelltag neu berechnet werden. Aus KANENA.INI wird der Startseespiegel HOEHE in LIMN-MOD eingelesen. Dieser wird dazu verwendet, aus der Schichtwahl die richtigen relativen Starttiefen zu bestimmen. Im folgenden bezeichnet $Tiefe_0(i)$ die Tiefe der Schichtwahl bezogen auf ASLREF und $Tiefe(i)$ die auf den realen Seespiegel bezogene Tiefe. Für alle Schichten ab der Schichtnummer $i \geq 2$ (Schichtfläche 1 ist die virtuelle Seeoberfläche) gilt

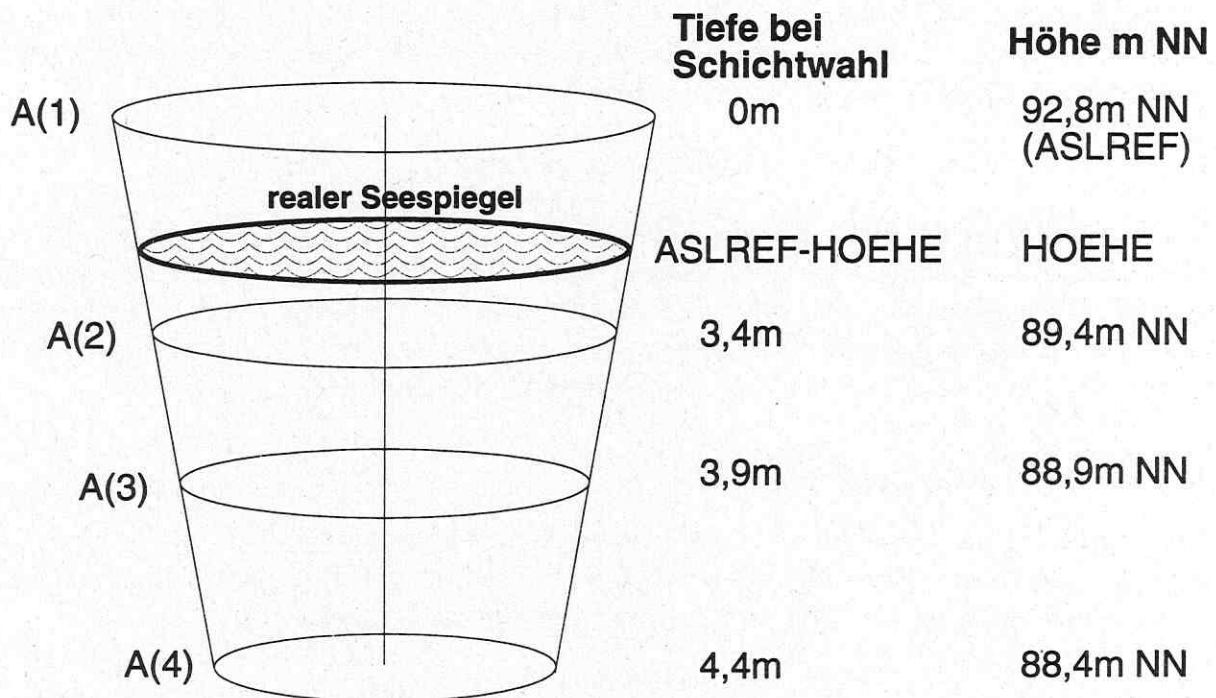


Abb. 5.7: Berechnung der Tiefen für einen variablen Seespiegel. HOEHE ist die Höhe des realen Seespiegels, ASLREF bezeichnet die Referenzhöhe für die Schichtwahl. A(i) sind die Flächen der Schichtoberflächen. Die angegebenen Tiefen entsprechen der Schichtwahl und können verändert werden.

für die reale Tiefe:

$$\text{Tiefe}(i \geq 2) = \text{Tiefe}_0(i) - (\text{ASLREF} - \text{HOEHE}) \quad [m] \quad (5.49)$$

ASLREF Referenzhöhe [m NN]

HOEHE Seespiegelhöhe zu Beginn des Simulationszeitraumes [m NN]

Dementsprechend ändern sich für alle Schichten bei einer Veränderung des Seepiegels die Tiefe(i) und die Schwerpunktstiefe ZS(i). Speziell für die erste Schicht ändern sich die Dicke DZ(1), das Volumen DV(1), die Fläche A(1) (Schichtoberfläche = Seeoberfläche), die Sedimentfläche DA(1). Weiterhin ändert sich das gesamte Seevolumen V_{ges} .

Die Einführung des variablen Seespiegels hat Auswirkungen auf einige Subroutinen. Für das ganze Programm wurde die Variable HOEHE aus dem COMMON -Block PHYSIK entfernt und wie die neu eingeführte Referenzhöhe ASLREF in den COMMON-Block GEOMETRIE aller Subroutinen eingetragen, in der sie verwendet wird.

In der Subroutine ENTOS1, die die Eingabewerte für interne Sanierungsmaßnahmen einliest, werden Tiefenangaben bezüglich HOEHE verlangt, kontrolliert und eine entsprechende Maske erstellt. Daraus ergibt sich jedoch kein Problem, da alle Maßnahmen auf der Basis von Schichtnummern ablaufen.

Die Subroutine ARCHI liest mit Hilfe von ENARXIS die Startprofile, deren Tiefen in m NN angegeben sind, ein. In ENARXIS wird dann die in m NN angegebene Tiefe auf die reale, auf den Startsepiegel bezogene Tiefe umgerechnet:

$$\text{Tiefe}(I) = \text{HOEHE} - \text{Tiefe in m NN} \quad [m] \quad (5.50)$$

In der Subroutine EKREO wird die Wasserbilanz geschlossen. Es ergibt sich eine Volumenvariation und damit eine Seespiegelvariation ZVAR. Am Ende jeder Tagesschleife wird ZVAR in einer neu eingeführten Subroutine SURFACE dazu benutzt, die Geometrie (Schichtdickenänderung) der obersten Schicht zu bestimmen. Daraus ergeben sich die neuen relativen Tiefen und Schichtschwerpunkte für alle Schichten.

5.4.8 Sedimentwärmefluß

Die Temperaturzunahme durch den geothermischen Wärmefluß wird für jede Schicht berechnet, indem ein Wärmefluß mit der Sedimentfläche eines Tiefenbereiches multipliziert und auf das Volumen des betrachteten Tiefeninkrements bezogen wird:

$$\frac{\Delta T}{\Delta t} = \frac{Q_{geo}}{A(z)} \cdot \frac{dA(z)}{dz} \cdot \frac{1}{c_W \cdot \rho} \quad [^\circ\text{C}/s] \quad (5.51)$$

A Seefläche in einer Tiefe z [m²]

Q_{geo} geothermischer Wärmefluß [W/m²]

c_W spezifische Wärme des Wassers: 4186 J/kg °C

ρ Dichte des Wassers [kg/m³]

5.4.9 SF₆-Hintergrundkonzentration

Die durchmischte Wassersäule eines Sees steht bezüglich der SF₆-Konzentration mit der atmosphärischen Konzentration im Gleichgewicht (s. auch Kapitel 3.1.1 bzw. 3.5.1). Das Lösungsgleichgewicht zwischen der Gas- und Wasserphase ist temperaturabhängig und kann mit den Gleichungen 3.1 und 3.4 beschrieben werden. Die Gleichgewichtseinstellung erfolgt in der gut durchmischten Deckschicht kontinuierlich. Die SF₆-Hintergrundkonzentration wird in LIMNMOD mittels einer neu eingeführten Subroutine SF6BACKGROUND einmal pro Tag bei der Durchmischung des Epilimnions mit der Epilimniontemperatur neu berechnet und der durchmischten Wassersäule zugewiesen. Es wird dabei von einer mittleren atmosphärischen SF₆-Konzentration von 5ppt ausgegangen, die für industrielle Ballungsgebiete realistisch ist (siehe auch Abschnitt 3.5.1).

5.5 Lösungsverfahren und Programmaufbau

Karagounis [1992] entschied sich bei der Entwicklung von LIMNMOD für die explizite Differenzenmethode. Im Modell wird der See in Schichten wählbarer Dicke eingeteilt (Abbildung 5.8). Das Volumen wird entsprechend einem Kegelstumpf aus der Schichtdicke

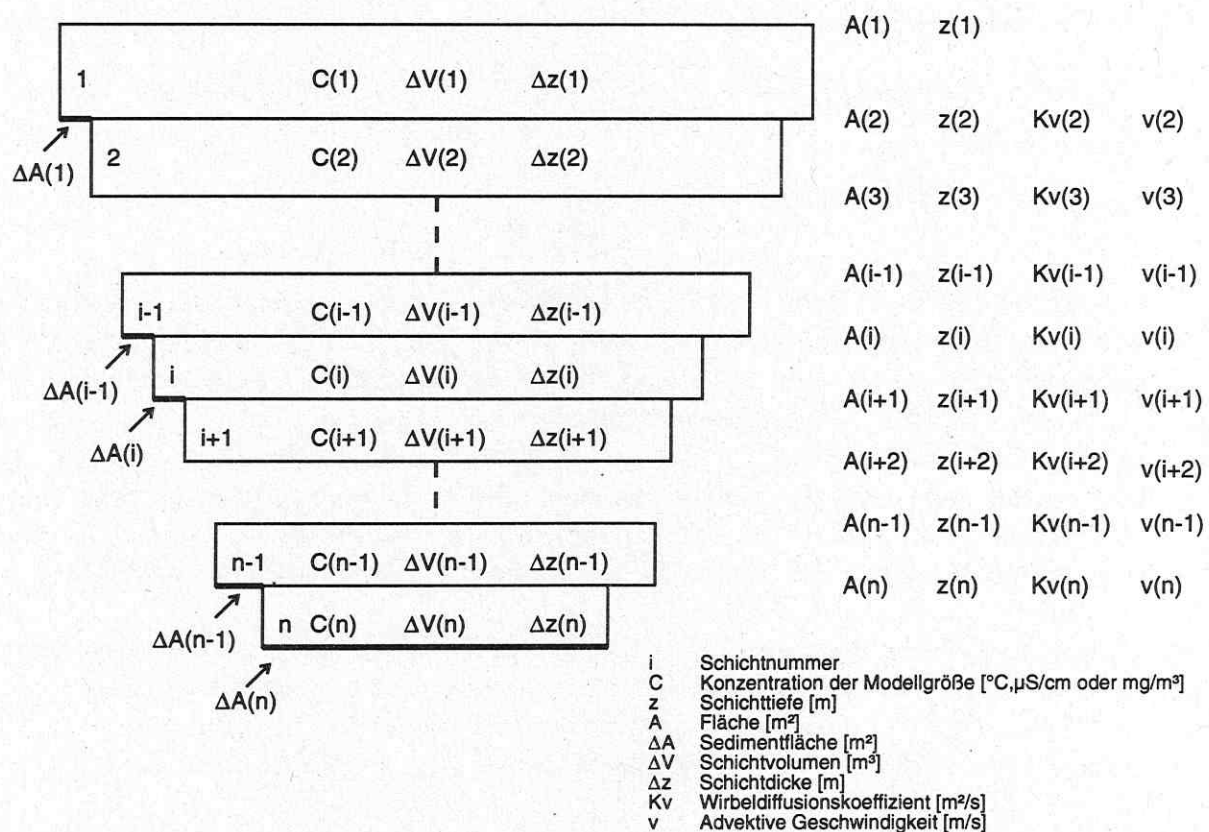


Abb. 5.8: LIMNMOD: Schichteinteilung und Benennung der Parameter [Karagounis, 1992]

und der Schichtober- beziehungsweise Schichtunterfläche berechnet. Die Differenzenbildung und die Berechnung der neuen Konzentration (in [°C, $\mu\text{S}/\text{cm}$, fmol/l , mg/m^3 oder ‰]) wird in LIMNMOD wie folgt vorgenommen, wobei die Benennungen denen in Abbildung 5.8 entsprechen:

Konzentrationsänderung durch die Diffusion $\Delta C_{iD}(\Delta t)$:

$$\Delta C_{iD}(\Delta t) = \frac{\Delta t}{\Delta V_i} \cdot \left(\underbrace{\frac{A_{i+1} K_{v_{i+1}} (C_{i+1} - C_i)}{\frac{\Delta z_i + \Delta z_{i+1}}{2}}}_{\text{Fluss von/in untere Schicht}} - \underbrace{\frac{A_i K_{v_i} (C_i - C_{i-1})}{\frac{\Delta z_{i-1} + \Delta z_i}{2}}}_{\text{obere Schicht}} \right) \quad (5.52)$$

Konzentrationsänderung durch die Advektion $\Delta C_{iA}(\Delta t)$:

Die Ausformulierung hängt vom Vorzeichen der Geschwindigkeit ab. In LIMNMOD ist v bei einem advektiven Transport von oben nach unten positiv.

Fluß durch die obere Schichtfläche:

$$v_i > 0 : C_1 = v_i C_{i-1} A_i \quad v_i < 0 : C_1 = v_i C_i A_i$$

Fluß durch die untere Schichtfläche:

$$v_{i+1} > 0 : C_2 = v_{i+1} C_i A_{i+1} \quad v_{i+1} < 0 : C_2 = v_{i+1} C_{i+1} A_{i+1}$$

Konzentrationsänderung:

$$\Delta C_{iA}(\Delta t) = -\frac{\Delta t}{\Delta V_i} \cdot (C_2 - C_1) \quad (5.53)$$

Die Unterscheidung nach dem Vorzeichen ist notwendig, da eine explizite Lösung der Differentialgleichung nur dann stabil ist, wenn die örtliche Differenzierung entgegen der Strömungsrichtung erfolgt. Würde der Fluss durch die Schichtfläche für positive und negative Geschwindigkeiten durch Einsetzen der mittleren Konzentration $(C_i + C_{i-1})/2$ auf der Schichtgrenze, also $C_1 = v_i(C_i + C_{i-1}) \cdot A_i/2$ in beiden Fällen, errechnet, ergäben sich bei einem großen Konzentrationsgefälle ($C_i \ll C_{i-1}$) und einer Geschwindigkeit in Richtung der großen Konzentration ($v_i < 0$) zu numerischen Problemen. Es käme zu Schichtenleerungen und zu negativen Werten für C_i , da die transportierte Konzentration $(C_i + C_{i-1})/2$ viel grösser als C_i ist.

Die Reaktions-, Quellen, und Senkenterme $\Delta C_{iR/J}(\Delta t)$ werden entsprechend der Einheit, in der sie auftreten, mit den Schichtflächen und -volumina auf Konzentrationsänderungen (in [°C, $\mu\text{S}/\text{cm}$, fmol/l , mg/m^3 oder ‰]) in den Schichten umgerechnet und mit dem Zeitschritt Δt multipliziert. Die neue Konzentration $C_{i,t+\Delta t}$ ergibt sich somit zu:

$$C_{i,t+\Delta t} = \Delta C_{iD}(\Delta t) + \Delta C_{iA}(\Delta t) + \Delta C_{iR/J}(\Delta t) \quad (5.54)$$

Damit das Lösungsverfahren stabil ist, muß für den Diffusionsterm das "von Neumann-Kriterium" und für den Advektionsterm die "Courant-Bedingung" erfüllt sein. Dies führt

bei gegebener Schichtdicke Δz zu zwei Bedingungen für den verwendeten Zeitschritt Δt . Jeweils die strengere muß erfüllt sein.

$$\Delta t < \frac{1}{2} \frac{\Delta z^2}{K_v(z)} \quad (5.55)$$

$$\Delta t < \frac{\Delta z}{v(z)} \quad (5.56)$$

Δt	Zeitschritt [s]
Δz	Schichtdicke [m]
$K_v(z)$	Wirbeldiffusionskoeffizient [m^2/s]
$v(z)$	Geschwindigkeit im Advektionsterm [m/s]

Große Änderungen in den Reaktions-, Quellen- und Senkentermen werden durch diese Bedingungen nicht erfaßt. Sie können die Lösung ebenfalls stark verfälschen, da bei der Differenzenmethode die Lösungskurve durch Tangenten angenähert wird. Fallen die gewählten Zeitschritte zu groß aus, so entfernen sich die Tangentenlösungen immer weiter von den tatsächlichen Lösungen. Für den Zeitschritt wird deshalb eine zusätzliche Begrenzung dadurch eingeführt, daß für jeden Parameter C in jeder Schicht

$$\Delta C < \text{Relmax} \cdot C \quad (5.57)$$

erfüllt sein muß. Die maximal zugelassene Abweichung Relmax liegt üblicherweise bei 0,1 bis 0,2 und kann in das Modell eingegeben werden.

Flußdiagramm 5.9 zeigt den Rechenablauf in LIMNMOD. Der maximale Zeitschritt und damit Grundzeitschritt des Modells ist auf einen Tag festgelegt. Der Zeitschritt wird, falls es die oben angeführten Kriterien 5.55 und 5.56 erfordern, bis auf minimal 60 Sekunden verringert.

Die Reaktionsterme sowie Quellen- und Senkenterme, deren Änderung proportional zur Konzentration einer Modellgröße abläuft (z.B. Abflüsse), werden für jeden Zeitschritt in der Integrationsschleife neu berechnet. Quellen- und Senkenterme, die nicht oder nur schwach mit den Modellgrößen gekoppelt sind, (z.B. die Zuflüsse, geothermischer Wärme- fluß, Wärmeaustausch mit der Atmosphäre, Isotopenfraktionierung) werden nur einmal pro Tag in der Tagesschleife erneuert.

Die Dateneingabe (Meteorologiedaten) erfolgt entsprechend der täglichen Berechnung der Atmosphärenterme ebenfalls im Tagesrhythmus. Die Termine der Datenausgabe können frei gewählt werden (z.B. Tage, für welche Meßdaten vorliegen, oder aber Zeitserien mit festen Ausgabeintervallen).

Karagounis [1992] hat das Modell so aufgebaut, daß die notwendigen Erweiterungen (neue Prozesse) relativ problemlos in die bestehende Programmstruktur eingefügt werden können. Die Quellen- und Senkenterme, die Reaktionskoeffizienten, die Diffusionskoeffizienten und die Advektionsgeschwindigkeiten werden im Hauptprogramm bis zur Lösung der Differentialgleichungen mitgeführt. Die Ergebnisse der einzelnen Prozesse werden nach und nach zu diesen Termen hinzugezählt. Soll ein neuer Prozeß hinzugefügt wer-

den, so kann er in einer neu eingeführten Subroutine berechnet und zu den bestehenden Reaktions- oder Quellen- und Senkentermen addiert werden.

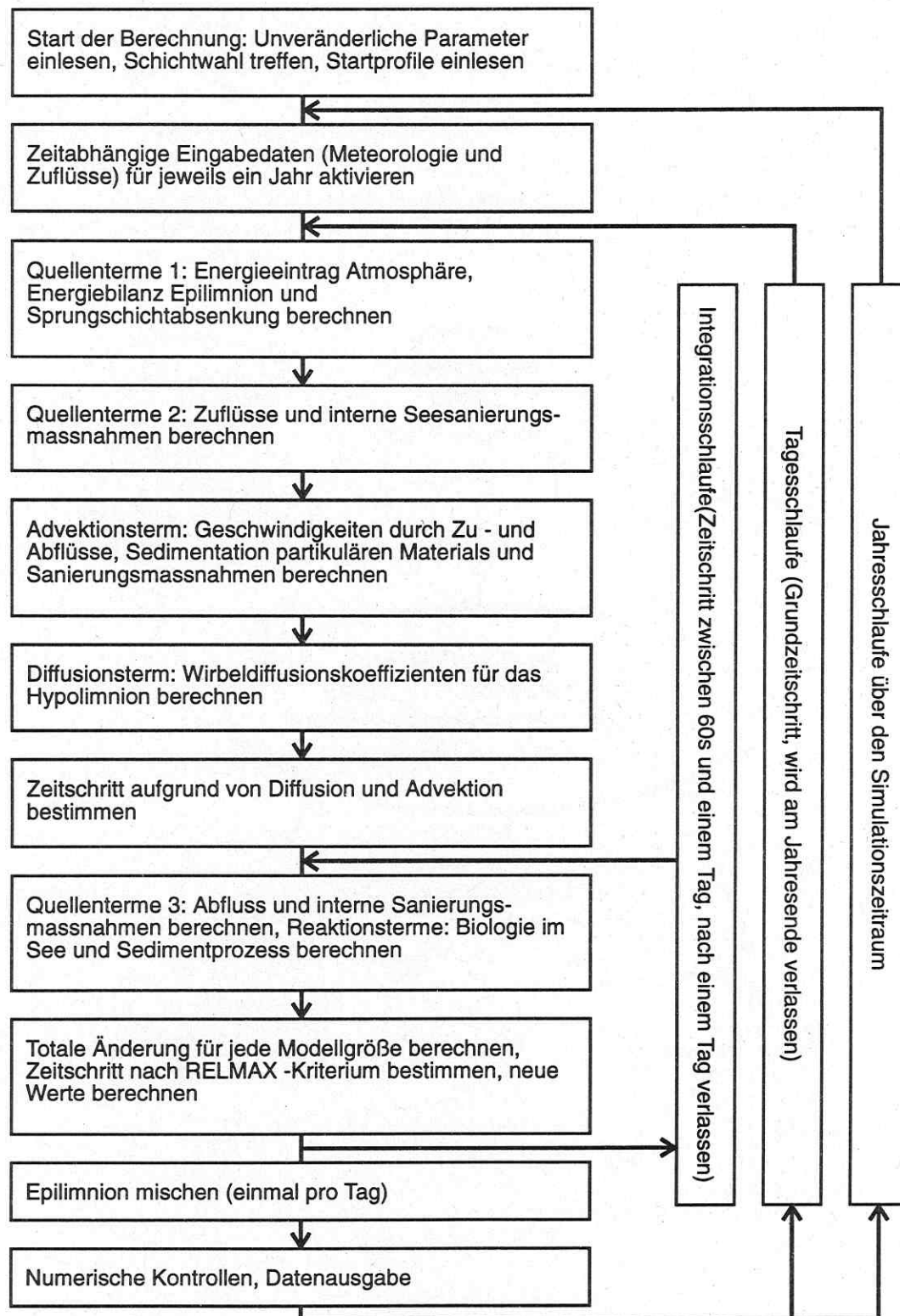


Abb. 5.9: Programmablauf [Karagounis, 1992]

5.6 Dateneingabe

Abbildung 5.10 gibt einen Überblick über die vom Modell benötigten Eingabedaten. Die Punkte "Biochemie/Nährstoffkreislauf" und "Prozesse im Sediment" sind eingeklammert, da sie nur den biochemischen Teil des Modells betreffen, welcher, wie oben ausgeführt, in dieser Arbeit nicht berücksichtigt wird. In Tabelle 5.2 sind nochmals die einzelnen Datenarten, Meßgrößen sowie die nötige Form und Häufigkeit der Eingabedaten zusammengestellt, wobei wiederum auf die Eingabedaten für den biochemischen Teil des Modells verzichtet wurde. Bezüglich dieser Eingabedaten wird auf Karagounis [1992] verwiesen.

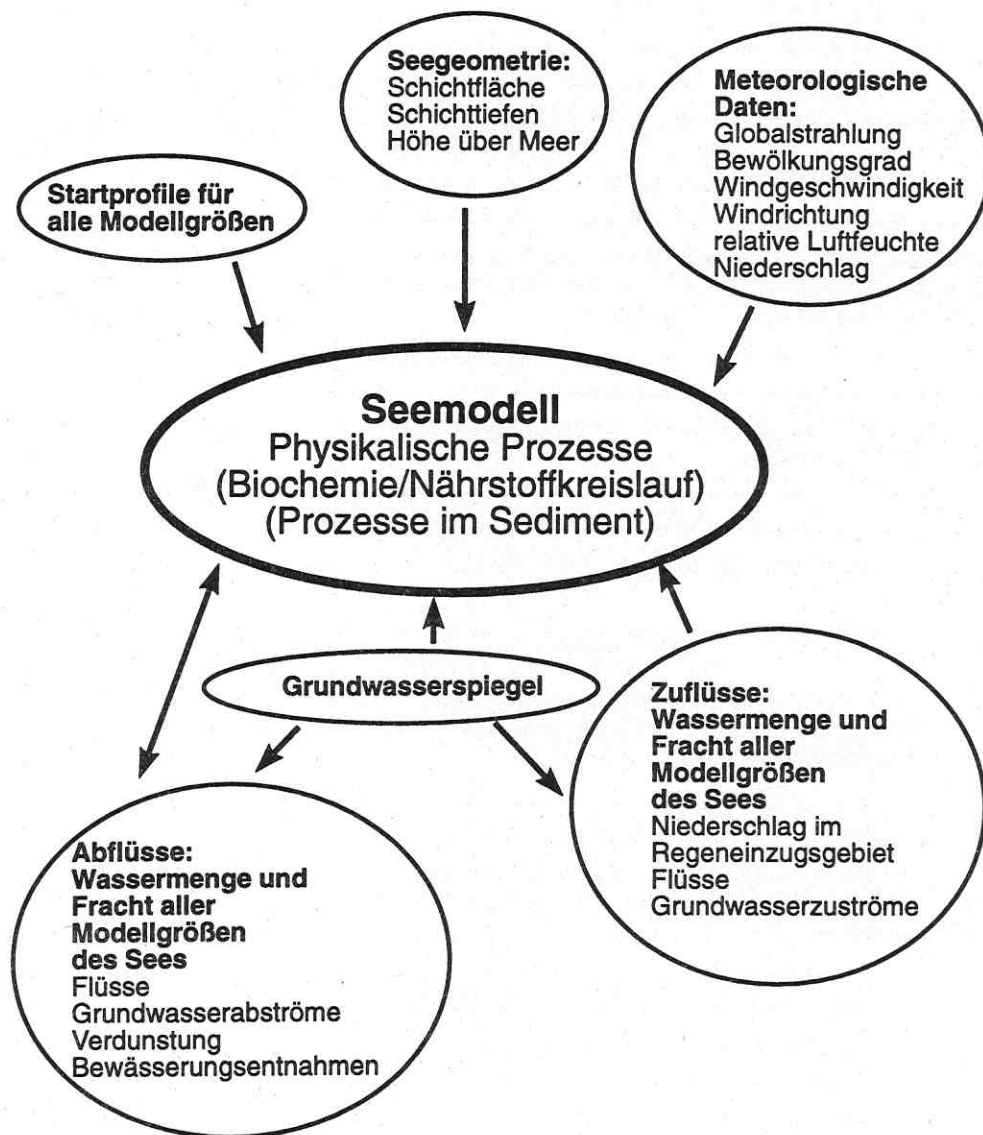


Abb. 5.10: Eingabedaten für das Seemodell

Alle Eingabedaten werden mittels Eingabedateien in das Modell eingelesen. Diese Dateien sind im ASCII-Format und besitzen einen Aufbau, der durch die Einleseroutine des Modells vorgegeben ist und nicht verändert werden darf. Der genaue Aufbau der Dateien ist dem Handbuch zu LIMNMOD [VWA, 1992] zu entnehmen. Die für das Hufeisenseemodell verwendeten Dateien können über die Autoren dieses Berichtes bezogen werden. Folgende Dateien sind nötig, wenn nur mit dem physikalischen Teil des Modells gerechnet wird:

TIEFE.NN.DAT	Daten zur Seegeometrie
GWL.OUT	Eingabemaske für interne Sanierungsmaßnahmen
HUFEISEN.TEM	Startprofil der Temperatur
HUFEISEN.C25	Startprofil der Leitfähigkeit
HUFEISEN.TRI	Startprofil für Tritium
HUFEISEN.O18	Startprofil für ^{18}O
HUFEISEN.DEU	Startprofil für Deuterium
HUFEISEN.SF6	Startprofil für Schwefelhexafluorid
METEOKAN.XX	Meteorologische Daten. XX bezeichnet die Jahreszahl
REGEN.IN	Stoffkonzentrationen im Niederschlag (Leitfähigkeit, O_2 , TU, SF_6 , die restlichen Modellgrößen werden im Programm selbst berechnet)
GWL.15.XX	Zuflussdaten und Pegelstände des Grundwasserleiters 15. XX bezeichnet wiederum die Jahreszahl
GWL.92.IN	Zuflussdaten des Grundwasserleiters 92 (ohne Jahresdifferenzierung)
GWL.98.IN	Zuflussdaten des Grundwasserleiters 98 (ohne Jahresdifferenzierung)

Die Namen dieser Dateien können verändert werden. Ihre Pfadangabe und Bedeutung werden in der Datei KANENA.I.O festgelegt, welche nicht umbenannt werden darf.

Datenart	Einzelne Meßgrößen	Form und Häufigkeit
Seegeometrie	Schichttiefen, Schichtflächen, Höhe über Meer	einmal als Startvorgabe
Startprofile (= Anfangsbedingungen)	für alle Modellgrößen	Profile in beliebigen Tiefenintervallen (lineare Interpolation im Modell)
Meteorologische Daten	Globalstrahlung, Bewölkung, Lufttemperatur, Dampfdruck, Windgeschwindigkeit, Windrichtung, Niederschlag	täglich
Zuflußdaten	für jeden Zufluß: Wassermenge und Frachten aller Modellgrößen des Sees	beliebiges Zeitintervall für die einzelnen Zuflüsse (lineare Interpolation für jeden Tag im Modell)

Tab. 5.2: Übersicht über die von LIMNMOD benötigten Eingabedaten

5.7 Datenausgabe und Postprocessing

Das Programm erzeugt die folgenden, in drei Gruppen gegliederten Ausgaben:

- Ausgabe tiefenabhängiger Werte in PROFIL.1.PRN, PROFIL.2.PRN und PRO.PRN
- Ausgabe weiterer, nicht tiefenabhängiger Größen, die zur Eichung und Kontrolle nötig sind in SUMMEN.OUT und BILANZ.OUT
- Ausgabe von Eingabewerten und Dateinamen, von denen die Daten eingelesen wurden in KANENA.OUT

Folgende Größen werden ausgegeben:

Tiefenabhängige Größen	– alle Modellgrößen in PROFIL.1.PRN und PRO.PRN – Dichte, Wirbeldiffusionskoeffizient, Vertikalgeschwindigkeit (Advektionsterm), Vertikalgeschwindigkeit der partikulären Größen, Sauerstoffzehrung, Sedimentation von PP und POC, Phosphorrückfluss aus dem Sediment in PROFIL.2.PRN und PRO.PRN
Seebilanz	Wärmeinhalt, mittlere Temperatur, Leitfähigkeit und Sauerstoff, Bilanz des Totalphosphors, P im Sediment und See, P im See, P im Sediment, P-Import, P-Export, P-Export durch Sedimentüberdeckung (SUMMEN.OUT)
Energieeintrag durch die Atmosphäre	Die Terme des Wärmeenergieeintrags H_{tot} , H_S , H_A , H_W , H_V und H_K sowie der Windenergieeintrag, der Sauerstoffaustausch, Regen und Verdunstung (SUMMEN.OUT)
Energiebilanz Epilimnion, Sprungschichtabsenkung	E_{konv} , E_{wind} , APE, die Tiefe konvektiver Turbulenz, Sprungschichttiefe, Epi- und Hypolimnionvolumen (SUMMEN.OUT)
Nährstoffkreislauf	Mittelwerte GP, PP, POC; Mittelwerte GP und PP in Epi- und Hypolimnion; Inhaltswerte von SIP, SOP, SLP, SOC; Biomasseproduktion, Sedimentation von POC, u.a. (SUMMEN.OUT)
Zu- und Abflüsse	Einschichtungstiefe der einzelnen Zuflüsse, totaler Abfluß, Fracht und Export der Modellgrößen (SUMMEN.OUT)
numerische Kontrollen	Anzahl der Integrationsschritte, Bilanzierungsfehler (mittlere Temperatur, Phosphorbilanz, Zu- und Abflussbilanz) (SUMMEN.OUT)

In die Datei BILANZ.OUT werden acht für die Eichung des biologischen Modellteils hauptsächlich benutzten Bilanzgrößen geschrieben. Diese Datei wird nur auf Wunsch und wenn mit dem gekoppelten Modell gerechnet wird ausgegeben.

Die Datenausgabe erfolgt in tabellarischer Form, alle Dateien sind im ASCII-Format. Die Ausgabe der Werte wird in der Datei KANENA.INI gesteuert und ist zu beliebig wählbaren Terminen oder in festen Intervallen möglich.

Als Postprocessor dient die Datei KANENA.WK4. Sie ist eine LOTUS 1-2-3 Arbeitsblatt, in das die Ergebnisdatei PRO.PRN eingelesen werden kann. Die Aufarbeitung – rechnerisch wie graphisch – erfolgt dann automatisch. Die Postprocessor - Datei kann von den Autoren dieses Berichtes bezogen werden.

Kapitel 6

Modelleichung Gesamtsee

Das Ziel einer Modellierung der Prozesse im See ist es, die Entwicklung des Seezustandes über mehrere Jahre hinweg richtig nachzuvollziehen, um mit diesem optimierten Modell dann Prognose- beziehungsweise Simulationsrechnungen durchführen zu können. Es muß also einerseits die Seedynamik im Verlauf eines Jahres richtig wiedergegeben werden, zum anderen aber auch die langjährige Entwicklung zufriedenstellend beschrieben werden. Im Falle eines meromiktischen Sees sind insbesondere die Prozesse im Monimolimnion und die Entwicklung der Chemokline über die Jahre hinweg interessant. Dies erfordert die richtige Beschreibung der Prozesse im Mixolimnion und eine mehrjährige Eichung des Modells. Demgegenüber ist die korrekte Wiedergabe von Einzelereignissen von untergeordneter Bedeutung.

Die benötigten Eingabedaten zur Eichung des Seemodells sind für den Zeitraum von September 1992 bis zum April 1996 vorhanden. Der Spezialfall einer langandauernden Eisbedeckung (Dezember 1995 bis Anfang April 1996) kann aber von dem Modell nicht genügend gut wiedergegeben werden. Dies reduziert den Zeitraum für eine Eichung bis auf den letzten Meßtermin vor der Eisbedeckung. Die Eichung des Seemodells wird daher für den dreijährigen Zeitraum vom 17.9.1992 bis zum 12.10.1995 durchgeführt. Im folgenden werden die zur Eichung verwendeten Parameter, sodann die Eingabedaten und Vergleichsmessungen beschrieben. In diesem Rahmen wird auch ein Ansatz für die Wasserbilanz des Hufeisensees gesucht. Schließlich sollen die Modellierungsergebnisse des geeichten Modells vorgestellt und diskutiert werden. Die Bilanz der stabilen Isotope ermöglicht am Ende des Kapitels genauere Aussagen über das hydrologische Regime des Hufeisensees.

Eine spezielle Betrachtung der Situation im Monimolimnion anhand der SF_6 -Ausbreitung und der Einbeziehung von Zu- bzw. Abflüssen von Grundwasser erfolgt separat in Kapitel 7.

6.1 Eichparameter

Die Eichung des Modells erfolgt über einige anzupassende Parameter. Diese Eichgrößen sind stets physikalisch begründet. In Abschnitt 5.6 sind anhand von Abbildung 5.10 die auf das Modell einwirkenden Eingabegrößen erläutert. Einige dieser Einflüsse wie die Seegeometrie oder die Meteorologie sowie die Startprofile sind fest vorgegeben. Andere Größen

Optimierungsgröße	Eichgröße	behandelt in Abschnitt	optimierter Wert
Wärmeinhalt	Infraroteinstrahlung H_A $H'_A = f_{H_A} \cdot H_A$	6.4	$f_{H_A} = 1,11$
Sprungschichtverlauf Winter	Fluß-Richardson-Zahl Rf Windeffizienzfaktor γ_u	5.4.3 6.2.2	Rf= 0,11
Sommer	Absorptionskoeffizient η	5.4.1	$\eta = 0,7$
Seespiegelentwicklung	Netto- Wassermengenbilanz, Regeneinzugsgebiet	6.2.4	
Bilanz der stabilen Isotope	Brutto-Grundwasser- Zufluß	6.8	
Temperaturentwicklung im Hypolimnion	Fluß-Richardson-Zahl Rf Eindringtiefe z_0	4.1	Rf =0,11 $z_0 = 2,7\text{m}$
Temperaturentwicklung im Monimolimnion	Sedimentwärmefluß Q_{Sed}	6.6	$0,275 \text{ W/m}^2$

Tab. 6.1: Eich- und Optimierungsgrößen

wie beispielsweise die Netto-Wassermengenbilanz müssen erst noch bestimmt werden. Die Tabelle 6.1 zeigt eine Übersicht der Eichfaktoren und der von ihnen abhängigen Optimierungsgrößen. Einige Eichfaktoren wie z.B. z_0 wirken auf mehrere Optimierungsgrößen ein, andere sind entkoppelt und können unabhängig voneinander optimiert werden. So wirkt sich die Eichung des Wärmehaushalts über f_{H_A} nur wenig auf den Sprungschichtverlauf aus. Ebenso hat die Optimierung der Sprungschichttiefe über den Windeffizienzfaktor γ_u und die Fluß-Richardson-Zahl nur wenig Einfluß auf den Wärmehaushalt.

Verschiedene Eichfaktoren sind bereits durch Messungen an anderen Seen oder im Rahmen dieser Arbeit festgelegt. Im speziellen sind dies die Fluß-Richardson-Zahl, die von Imboden und Wüest [1995] zu **Rf = 0,11** angegeben wird und die Eindringtiefe z_0 , die in Kapitel 4.1 zu **$z_0 = 2,7\text{m}$** bestimmt wurde.

Die restlichen Eichgrößen wie f_{H_A} , γ_u , η , Q_{Sed} und die **Wassermengenbilanz** werden erst durch die Modelleichung bestimmt beziehungsweise überprüft. Sie liegen ausnahmslos in Bereichen, wie sie durch Vergleichswerte anderer Seen vorgegeben sind. Als Beispiel sei der Absorptionskoeffizient genannt, dessen Anpassung im wesentlichen über die optimale modellmäßige Reproduktion der sommerlichen Sprungschichttiefe erfolgt:

Der Absorptionskoeffizient η für die kurzwellige Strahlung setzt sich nach Gleichung 5.3 aus den Extinktionskoeffizienten des Wassers und der Biomasse zusammen. Bei Berechnungen mit dem physikalischen Modellteil kann der Absorptionskoeffizient für einen mitt-

leren Wert der Biomasse angenommen werden [Karagounis, 1992]. Da keine Messungen des POC im Hufeisensee vorliegen, wurde zunächst auf typische Werte des Luganersees von 500 bis 1500 mg/m³ zurückgegriffen, mit denen sich Werte von $\eta = 0,5 - 0,8$ ergeben. Für den Hufeisensee ergibt ein $\eta = 0,7$ die beste Übereinstimmung zwischen modellierter und beobachteter thermischer Sprungschichttiefe. Dieser Wert entspricht den in anderen Seen wie dem Baldegger- und Sempachersee gemessenen Werten von η [Karagounis, 1992].

6.2 Eingabedaten

6.2.1 Seegeometrie und Schichtenwahl

Die Seegeometrie geht wie in Kapitel 2.1 beschrieben ins Modell ein.

Die oberste Schicht ist variabel, nur ihre Unterkante ist auf 89,4m NN festgelegt. Ihre Dicke hängt vom Seespiegel ab. Bei einem minimalen Seespiegel von 90,5m NN ist ihre Dicke 1,1m, beim maximalen Seespiegel von 92,3m NN ist sie 2,9m dick.

Unterhalb von 89,4m NN wurden die Schichten folgendermaßen festgelegt:

0,5 m	dicke Schichten bis in	88,4m NN
1 m	dicke Schichten bis in	68,4 m NN
0,2 m	dicke Schichten bis in	62,8 m NN

Die geringere Schichtdicke unterhalb von 68,4m NN wird eingeführt, um die Prozesse im Monimolimnion exakter modellieren zu können.

6.2.2 Meteorologische Daten, Windeffizienzfaktor

Für den Hufeisensee steht keine eigene Wetterstation zur Verfügung. Es konnten Daten vom Deutschen Wetterdienst für den Flughafen Leipzig-Schkeuditz (etwa 15km südöstlich von Kanena) beziehungsweise für eine Station in Halle-Kollwitz bezogen werden. Von dem Institut für Agrarökonomie und Agrarraumgestaltung der Martin-Luther-Universität

	Schkeuditz 1.1.92-31.5.95	Halle/Kollwitz 1.1.92-30.4.96	Zöberitz 1.1.92-19.6.95	Seeben 20.6.95-30.4.96
Strahlung		X	X	X
Bewölkung	1.1.92-30.4.96			
Lufttemperatur	X		X	X
Rel. Feuchte	X		X	X
Wind	X		X	X
Windrichtung	15.9.92-31.12.94		ab 1.1.93	X
Niederschlag	X		X	X

Tab. 6.2: Vorhandene meteorologische Daten.

Halle-Wittenberg wurden freundlicherweise Daten einer meteorologischen Station in Halle-Zöberitz (etwa 4 km nördlich von Kanena) zur Verfügung gestellt. Am 19.6.95 wurde diese Station nach Halle-Seeben (etwa 6 km nordwestlich von Kanena) verlegt. In Tabelle 6.2 ist die verfügbare Datenbasis angegeben.

Es stellt sich die Frage, welche der Stationen die Verhältnisse am Hufeisensee besser wiedergibt. Nach der subjektiven Auskunft von Pendlern zwischen Leipzig und Halle soll das Wetter von Halle, insbesondere die Niederschläge, dem Wetter am Hufeisensee mehr entsprechen als das Wetter an der Flugwetterwarte Leipzig. Ein Vergleich der einzelnen meteorologischen Daten soll dies objektiv prüfen, wobei für die Bewölkung keine Vergleichsmöglichkeit gegeben ist, da sie nur von der Station Leipzig-Schkeuditz vorliegt.

Globalstrahlung Es stehen jeweils Tagesmittelwerte der Stationen Kollwitz und Zöberitz bzw. ab dem 20.6.95 von der Station Seeben zur Verfügung. Abbildung 6.1a läßt deutlich den Jahresgang der Globalstrahlung und zudem eine Gleichverteilung der Absolutwerte für die verschiedenen Stationen erkennen. In Abbildung 6.1b ist zur genaueren Analyse die absolute Abweichung der gemessenen Globalstrahlung (Kollwitz-Zöberitz/Seeben) gezeigt. Die Daten der Station Kollwitz weichen im Mittel um $-2,4 \pm 14$ [W/m²] von denen der Station Zöberitz ab. Insbesondere im Sommer ist eine größere Streuung der Abweichungen erkennbar. Es zeigt sich zudem eine leichte Saisonalität der Abweichungen, im Sommer ist die Globalstrahlung in Kollwitz etwas höher als in Zöberitz. Die Angaben der Station Kollwitz sind für den betrachteten Zeitraum im Mittel um 2,8 % höher gegenüber Zöberitz und um 0,5 % gegenüber Seeben niedriger.

Temperatur Die Lufttemperatur kann für die Stationen Schkeuditz und Zöberitz verglichen werden. Abbildung 6.2a zeigt den Jahresgang der Temperatur, der für beide Stationen annähernd gleich verläuft. Im Mittel ist eine Abweichung von $0,09 \pm 0,82$ °C auf der Basis von Tagesmittelwerten festzustellen (Abbildung 6.2b). Allerdings können für einzelne Tage Unterschiede von bis zu 3°C auftreten. Die Differenzen der Monatsmittelwerte zeigen eine leichte Saisonalität, im Frühjahr sind die Temperaturen in Schkeuditz etwas höher, während sie im Herbst in Zöberitz höher liegen. Da die Abweichungen zwischen diesen Stationen im Mittel aber sehr gering sind, kann davon ausgegangen werden, daß beide die Temperaturverhältnisse am Hufeisensee repräsentativ wiedergeben können.

Dampfdruck Der Dampfdruck wird aus der relativen Feuchte berechnet. Der aktuelle Dampfdruck ist

$$\text{Dampfdruck [hPa]} = \text{Sättigungsdampfdruck [hPa]} * \text{Relative Feuchte [\%]}$$

Der Sättigungsdampfdruck ist eine Funktion der Lufttemperatur und errechnet sich nach Karagounis [1992]

$$\text{Sättigungsdampfdruck} = 10^{9,28603523 - \frac{2322,37865}{T}} \quad [\text{hPa}] \quad (6.1)$$

T Absolute Lufttemperatur [K]

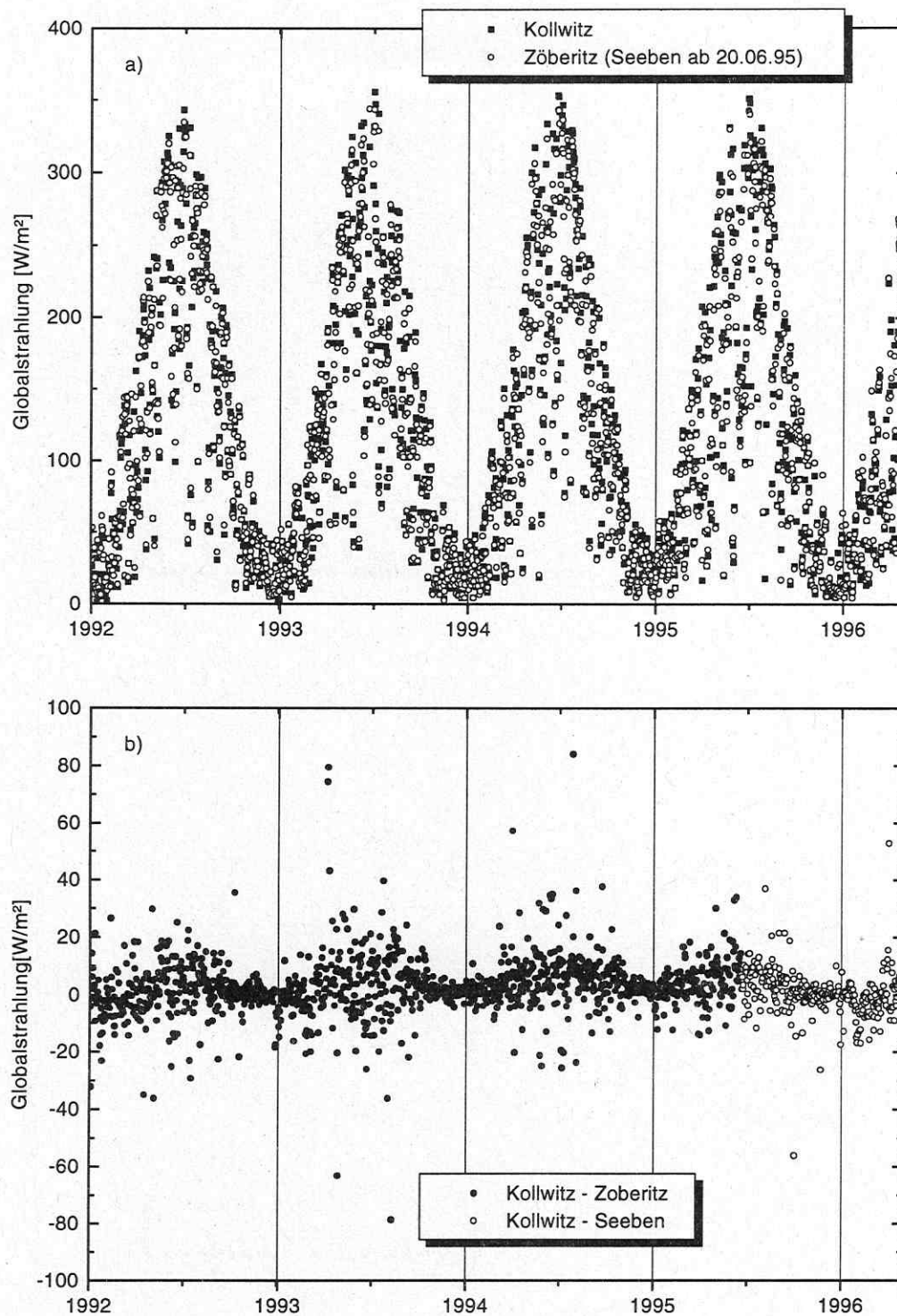


Abb. 6.1: Globalstrahlung. Es werden die Stationen Kollwitz und Zöberitz bzw. Seeben für den Zeitraum 1.1.92 bis 30.4.96 verglichen: (a) Jahresgang der Solarstrahlung, (b) absolute Abweichung der Stationen

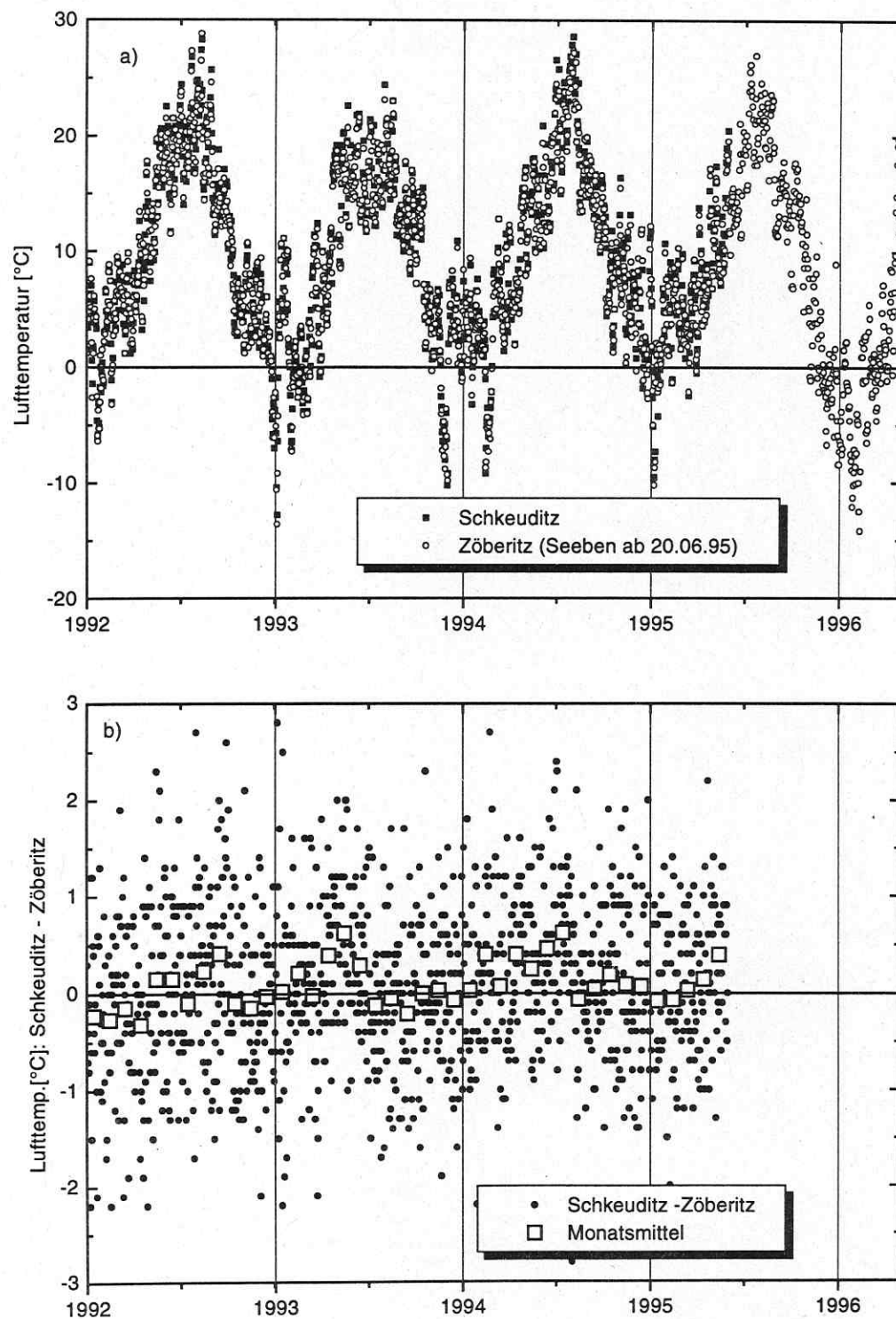


Abb. 6.2: Vergleich der Lufttemperatur für die Stationen Schkeuditz und Zöberitz für den Zeitraum 1.1.92 bis 31.5.95: (a) Jahresgang für beide Stationen, (b) absolute Differenz

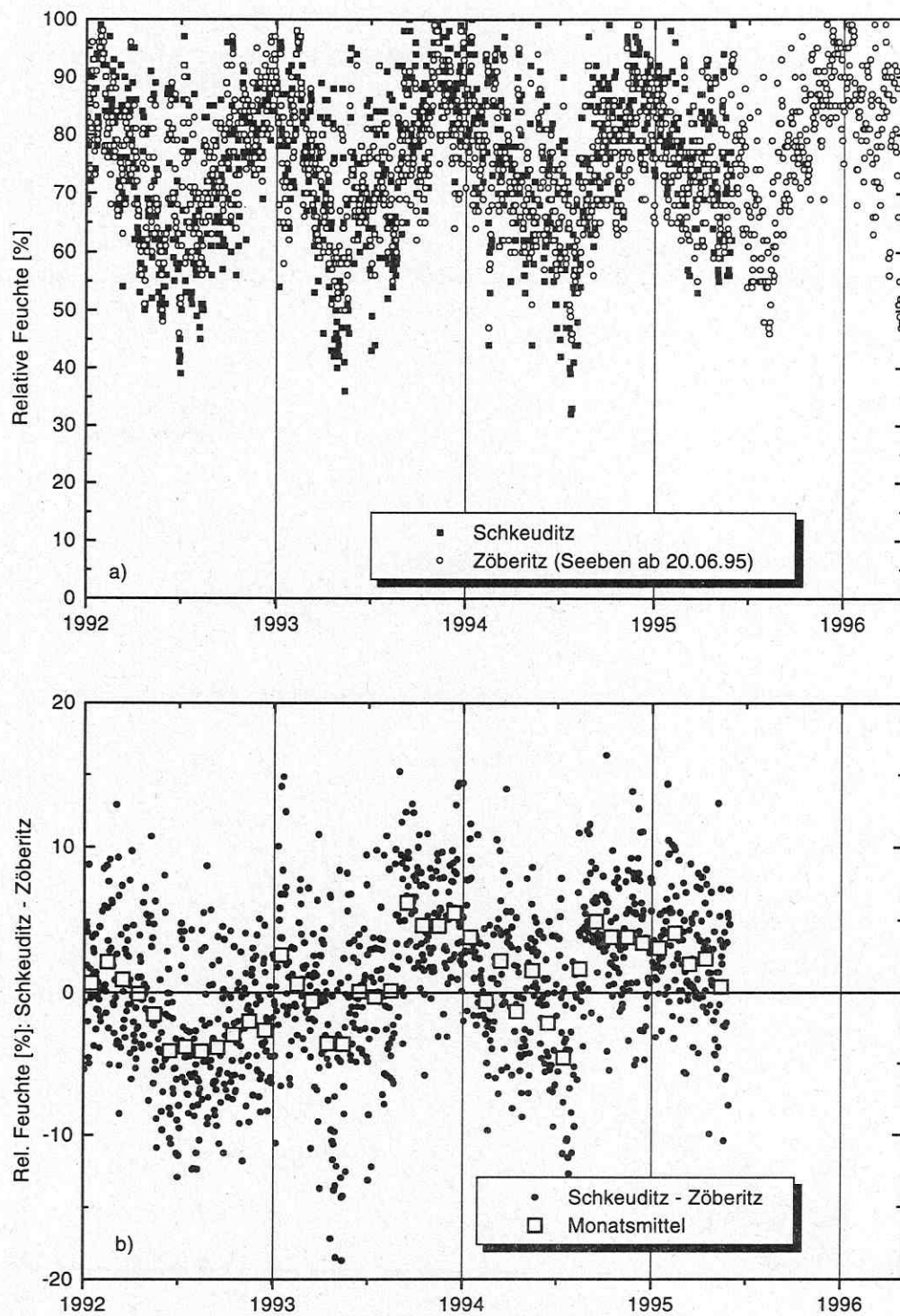


Abb. 6.3: Vergleich der relativen Feuchte für die Stationen Schkeuditz und Zöberitz. (a) Jahresgang (b) Absolute Differenz

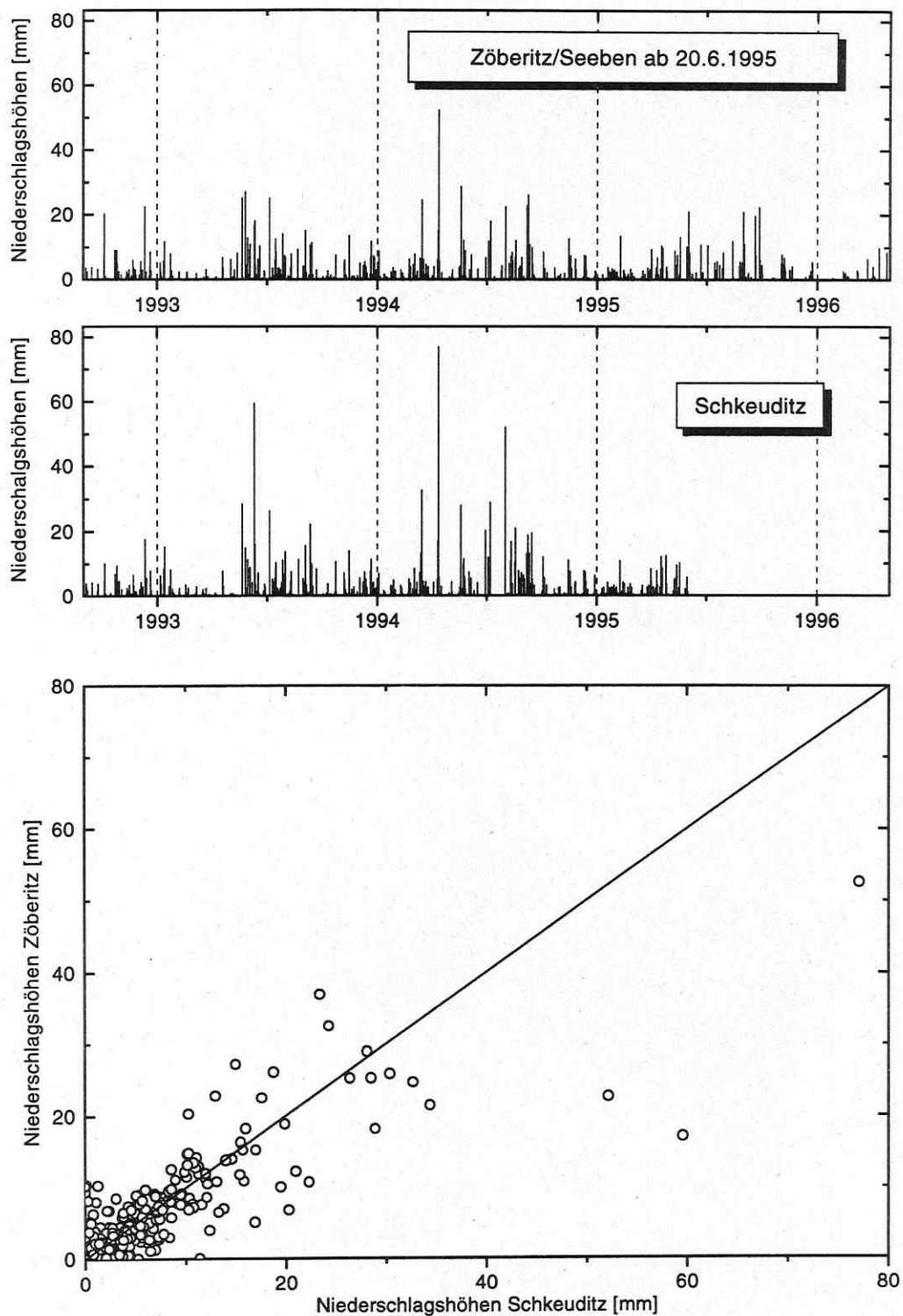


Abb. 6.4: Vergleich der Niederschläge für die Stationen Schkeuditz und Zöberitz. Die Zeitserien (oben) zeigen höhere Einzelniederschläge bei der Station Schkeuditz im Sommer. Die Abweichung ist in der Auftragung der Niederschläge gegeneinander zu erkennen.

Sowohl von der Station Schkeuditz als auch von der Station Zöberitz/Seeben liegen Tagesmittelwerte der relativen Feuchte vor (Abbildung 6.3a). Hierbei ist bereits zu erkennen, daß im Sommerhalbjahr die Werte der relativen Feuchte in Schkeuditz niedriger sind als in Zöberitz. Abbildung 6.3b enthüllt eine deutliche Saisonalität der Abweichung der beiden Stationen gegeneinander; im Sommer ist die relative Feuchte in Schkeuditz um bis zu 10 % niedriger als in Zöberitz, während sie im Winter bis zu 10% höher liegt. Im Mittel ist in Schkeuditz in dem Beobachtungszeitraum die Luftfeuchtigkeit um $0,55 \pm 5,41$ % höher.

Niederschlag Die Niederschläge liegen ebenfalls als Tageswerte von den Stationen Schkeuditz und Zöberitz vor. Abbildung 6.4 zeigt, daß die Niederschlagswerte der beiden Stationen voneinander abweichen. Die Zeitserie läßt erkennen, daß insbesondere im Sommer starke Niederschlagsereignisse auftreten, die an der Station Schkeuditz größere Niederschlagsmengen aufweisen. Dabei handelt es sich häufig um lokale Ereignisse. Eine Auftragung der Niederschlagsmengen der beiden Stationen gegeneinander bestätigt dies (Abbildung 6.4 unten). Die Abweichungen sind bei den hohen Niederschlagsmengen am größten und können dann bis über 40 mm betragen. Besser wird der Unterschied in der Jahresniederschlagssumme ersichtlich (Tabelle 6.3). Diese ist im Jahr 1992 in Zöberitz um 38mm , in den Jahren 1993 und 1994 in Schkeuditz um 59mm bzw. 115mm höher.

	1992	1993	1994	1995
Schkeuditz	559	628	755	-
Zöberitz/Seeben	597	569	640	520

Tab. 6.3: Jahresniederschläge in mm. In Schkeuditz ist die Jahresniederschlagssumme in zwei der drei vergleichbaren Jahre höher als in Zöberitz.

Bewölkung Die Wolkenbedeckung wird nur von der Station Leipzig-Schkeuditz aufgezeichnet. Der Bedeckungsgrad wird um 7, 13 und 21 Uhr ermittelt. Er wird als n/8 der Vollbedeckung angegeben. Die drei Angaben werden zu einem Tageswert gemittelt. (Abbildung 6.8)

Windgeschwindigkeit Es stehen Stundenwerte der Windgeschwindigkeit von der Station Schkeuditz und lineare Tagesmittel der Station Zöberitz bzw. Seeben zur Verfügung. Die Werte der Station Zöberitz bzw. Seeben liegen für den ganzen Zeitraum vor, die der Station Schkeuditz nur bis zum 31.5.1995. Aus diesem Grund sollen vorzugsweise die Windgeschwindigkeiten der Station Zöberitz/Seeben in die Modellierung eingehen. Dazu muß aber untersucht werden, ob die lineare Mittelung auf einen Tageswert einen zu großen Fehler verursacht. Da die Windgeschwindigkeit kubisch in den Windenergieeintrag in den See eingeht, sollte die Mittelung auf Tageswerte ebenfalls kubisch erfolgen. Um die Abweichungen quantifizieren zu können, die durch eine lineare Mittelung entstehen, wurde mit den Stundenwerten von Schkeuditz für den Zeitraum vom Januar'92 bis Oktober'94

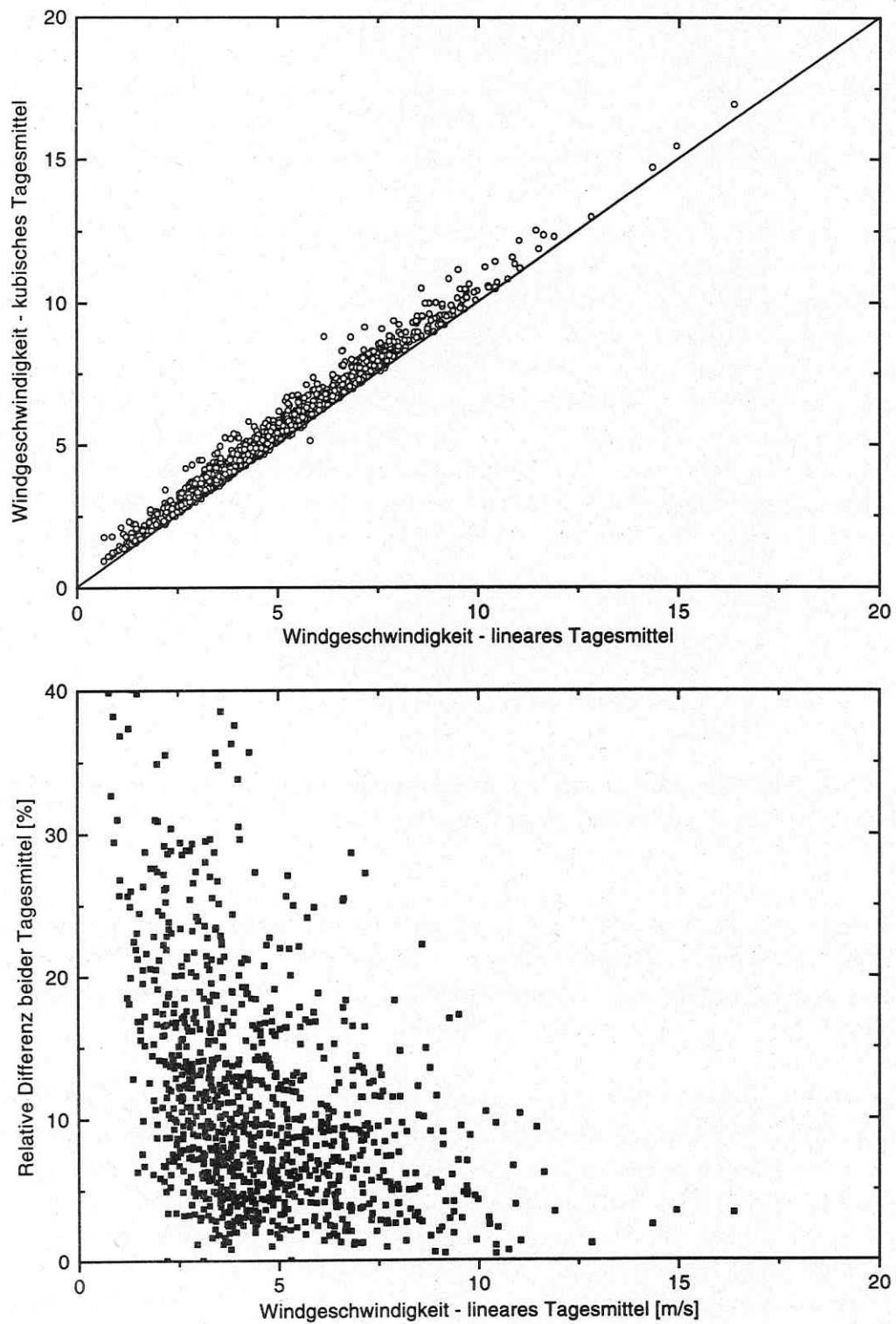


Abb. 6.5: Vergleich zwischen linearem und kubischen Tagesmittelwert der Windgeschwindigkeit. Oben: Auftragung der Mittel gegeneinander; unten: Relative Differenz [%]

ein Vergleich zwischen kubischem und linearem Mittel erstellt. In der Auftragung des kubischen gegen das lineare Tagesmittel sollte sich bei Identität der beiden Werte eine Winkelhalbierende ergeben. Tatsächlich tritt aber eine Verschiebung in Richtung des kubischen Mittels auf. Wie Abbildung 6.5 zeigt, machen sich die unterschiedlichen Methoden der Mittelwertsbildung insbesondere bei kleinen Tagesmittelwerten bemerkbar, bei denen die prozentuale Abweichung bis zu 40 % reicht. Bei kubischer Mittelung erhalten kurze Perioden starken Windes ein höheres Gewicht als bei linearer Mittelung. Da die absoluten Abweichungen aber lediglich $0,5 - 1 \frac{m}{s}$ betragen und in einem Geschwindigkeitsbereich liegen, in dem nicht der hauptsächliche Windenergieeintrag stattfindet, können die Unterschiede vernachlässigt werden. Bei höheren Tagesmittelwerten liegen die Abweichungen unter 10 %. Zugunsten der geringeren Entfernung vom Hufeisensee werden die Daten der Station Zöberitz verwendet und damit die Fehler des linearen Mittels in Kauf genommen. Für das Jahr 1992 sind nur Daten der Station Schkeuditz verfügbar. Letztendlich wird folgende Datenbasis verwendet:

- 1.1.92 - 31.12.92 Stundenwerte der Station Schkeuditz, durch lineare Mittelung zu einem Tageswert umgeformt und mit einem Eichfaktor von 0,78 auf Zöberitzer Meßverhältnisse umgerechnet (s. unten)
- 1.1.93 - 19.6.95 Lineare Tagesmittel der Station Zöberitz
- 20.6.95 - 30.4.96 Lineare Tagesmittel der Station Seeben, mit einem Eichfaktor von 1,1 auf Zöberitzer Meßverhältnisse umgerechnet

Der Windmesser in Schkeuditz war bis 19.1.94 in 14m Höhe angebracht, während er in Zöberitz auf 10m Höhe installiert war. Die Station Seeben liegt auf einer leichten Kuppe, der Windmesser ist ebenfalls in 10m Höhe angebracht. Die Unterschiede in der Windgeschwindigkeitsmessung erfordern eine Eichung der verschiedenen Stationen gegeneinander. Dazu wurde die Jahressumme der Windgeschwindigkeiten für 1993 in Zöberitz und in Schkeuditz gebildet und ein Eichfaktor ermittelt:

$$\text{Eichfaktor} = \frac{\text{Jahressumme Zöberitz}}{\text{Jahressumme Schkeuditz}}$$

Es ergibt sich ein Faktor von 0,78, mit dem die 92'er Winddaten aus Schkeuditz multipliziert werden. Zur Eichung der Station Seeben gegen Zöberitz wurde analog für den Zeitraum 20.6.93 - 30.4.94 vorgegangen, woraus sich ein Eichfaktor von 1,1 für die Seebener Winddaten ergibt.

Windrichtung Es steht für die Jahre 1993 und 1994 eine 12-teilige Windfeldstatistik für Schkeuditz und für den Zeitraum vom 1.1.1993 bis zum 30.4.1996 eine 16-teilige Windfeldstatistik für Zöberitz beziehungsweise Seeben zur Verfügung. Zur Veranschaulichung wurde eine graphische Darstellung in Windrosenform gewählt, die die Häufigkeit der Richtungen in flächenproportionalen Kreissektoren wiedergibt, die zugleich die Anteile der Geschwindigkeitsstufen je Sektor enthalten. Die Einteilung der Windgeschwindigkeit erfolgt in

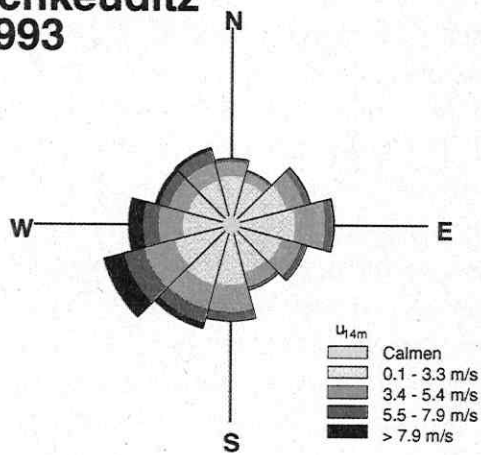
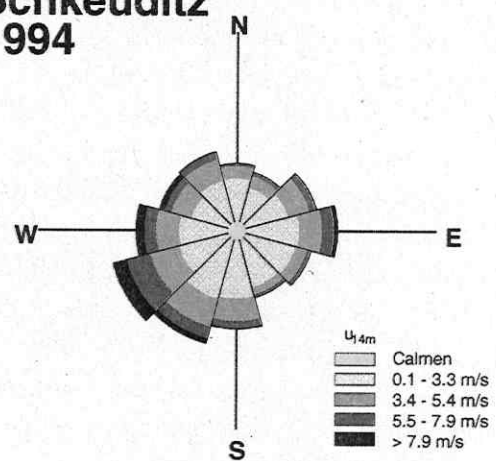
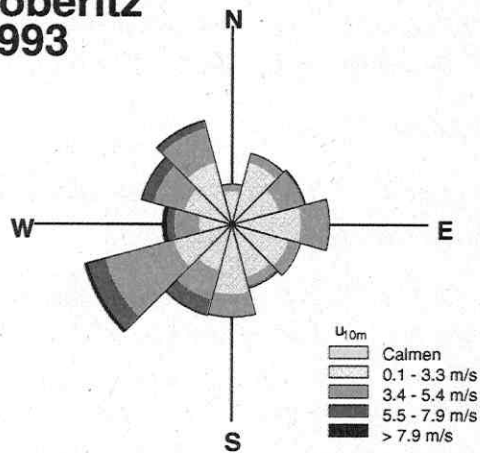
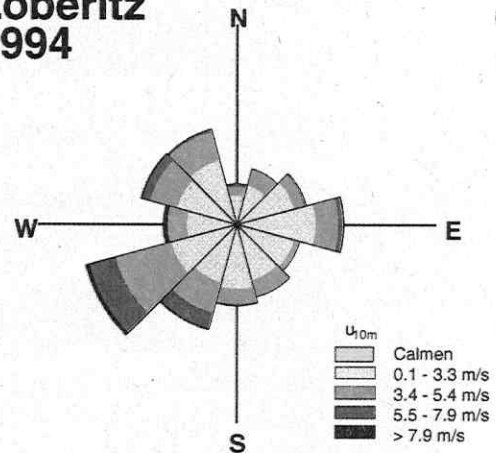
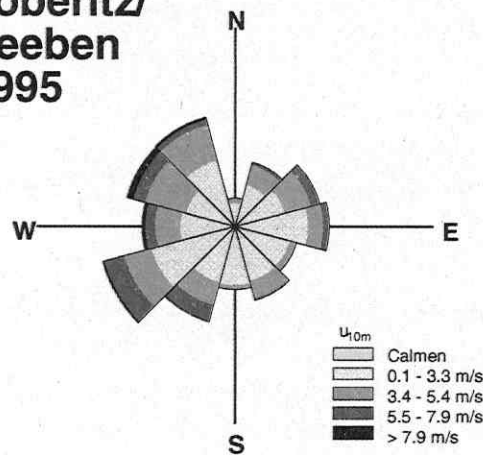
**Schkeuditz
1993****Schkeuditz
1994****Zöberitz
1993****Zöberitz
1994****Zöberitz/
Seeben
1995**

Abb. 6.6: Flächentreue Windrose. Die Fläche der Kreissektoren ist proportional zur Häufigkeit des Auftretens der jeweiligen Windrichtung und Windgeschwindigkeitsstufe.

Stufe 1	Schwellenwert	(bis 0,1 m/s)
Stufe 2	0,1	bis 3,3 m/s
Stufe 3	3,4	bis 5,4 m/s
Stufe 4	5,5	bis 7,9 m/s
Stufe 5	>7,9 m/s	

wobei obige Eichfaktoren für die Windgeschwindigkeit nicht einfließen. Beide Stationen zeigen die Hauptwindrichtungen (Abbildung 6.6) Ost und Westsüdwest an. Insbesondere die stärksten Winde über 7,9 m/s kommen hauptsächlich aus westsüdwestlicher bis westlicher Richtung. In Zöberitz sind die Hauptwindrichtungen stärker von den anderen Windrichtungen abgesetzt als in Schkeuditz. Desweiteren ist an den Zöberitzer Windrosen noch eine dritte Hauptwindrichtung Nordnordwest erkennbar, während Winde aus Norden die geringste Häufigkeit besitzen. Die Hauptwindrichtungen zeichnen sich in allen dargestellten Jahren deutlich ab.

Der Windenergieeintrag in einen See hängt besonders bei kleinen Seen von lokalen Einflüssen in der Uferzone ab. Abdeckung durch Bäume oder topographische Erhebungen verändern das lokale Windfeld. Durch Einführung eines Windeffizienzfaktors wird versucht, diesen Umstand zu berücksichtigen. Die in Abbildung 6.7 fett eingezeichnete Uferlinie wird als abdeckend angenommen, da der innere Bereich der Hufeisenform als leichter

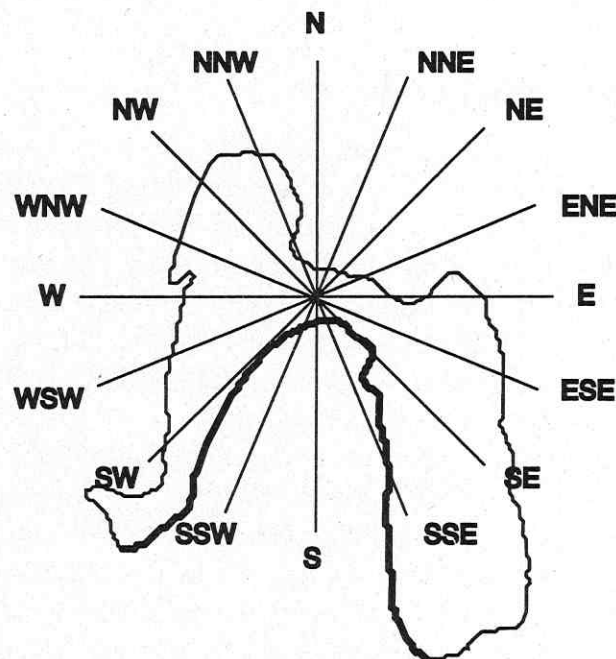


Abb. 6.7: Effizienzfaktor für die Windgeschwindigkeit. Die fett eingezeichnete Uferlinie wird als abdeckend angenommen und je nach Windrichtung eine Abschattung von Seeteilen berücksichtigt.

Hügel ausgebildet und mit Bäumen bestanden ist. Entsprechend der Windrichtung wird das nicht abgedeckte Seearéal als windüberstrichen angenommen. Durch Division der in Abdeckung befindlichen Seefläche durch die Gesamtfläche des Sees erhält man einen von der Windrichtung abhängigen Windeffizienzfaktor. Es ergeben sich die folgenden Faktoren:

Windrichtung	Effizienzfaktor	Windrichtung	Effizienzfaktor
N	1,00	S	0,60
NNE	1,00	SSW	0,44
NE	1,00	SW	0,46
ENE	0,94	WSW	0,46
E	0,90	W	0,54
ESE	0,82	WNW	0,60
SE	0,74	NW	0,74
SSE	0,56	NNW	0,92

Meteorologische Daten für das Seemodell

Die Abbildung 6.8 gibt eine Übersicht über die letztendlich für das Seemodell verwendeten meteorologischen Eingangsdaten. Soweit vorhanden, werden die Daten der Station Zöberitz beziehungsweise ab 20.6.95 der Station Seeben verwendet, da diese näher am Hufeisensee liegen. Fehlende Angaben über die Wolkenbedeckung (gesamter Zeitraum) und die Windgeschwindigkeit und -richtung (1992) werden durch Daten der Station Leipzig - Schkeuditz ersetzt.

6.2.3 Stabile Isotope im Regen

In Kapitel 5.4.5 wurde beschrieben, daß zur Berechnung der Isotopenfraktionierung durch die Verdunstung das Isotopenverhältnis der stabilen Isotope im Niederschlag bekannt sein muß. Entsprechende Daten liegen aber für den erforderlichen Zeitraum nicht oder nicht in der erforderlichen zeitlichen Auflösung vor. Aus diesem Grund wurde ein Ansatz zur Parametrisierung des Gehalts der stabilen Isotope im Niederschlag gesucht. Abbildung 6.9 zeigt Zeitreihen der Isotopenwerte im Niederschlag in Leipzig und den umliegenden Stationen Berlin, Braunschweig und Hof für die Jahre 1982 - 1991 [IAEA, 1986; IAEA, 1990; IAEA, 1994]. Es sind die monatlichen Mittelwerte dargestellt. Neuere Werte liegen für keine der Stationen vor, für Leipzig waren nur Werte für die Jahre 1982 - 1987 (Deuterium) beziehungsweise 1986 - 1987 (^{18}O) erhältlich. Die Werte der Stationen weisen im Vergleich untereinander eine relativ hohe Streuung auf. Die Deuteriumwerte aller dargestellten Stationen liegen in einem Bereich von -8,8‰ bis -167,5‰, die Streuung zwischen den einzelnen Stationen beträgt im Mittel 8,6‰ und geht bis zu 26‰. Die ^{18}O -Werte weisen ein ähnliches Verhalten auf: Sie liegen in einem Bereich von -1,82‰ bis -21,83‰ und streuen im Mittel um 1,1‰ bzw. bis zu 3,4‰. Im Rahmen der Schwankungen liegen die Isotopenwerte der Station Leipzig somit im Bereich der Werte der umliegenden Stationen und passen sich gut in deren zeitliche Variation ein. Es kann von einem prinzipiell ähnlichen Verhalten ausgegangen werden.

Meteorologische Daten

1) Zöberitz & Seeben / Halle (MLU)

2) Flughafen Leipzig-Schkeuditz (DWD)

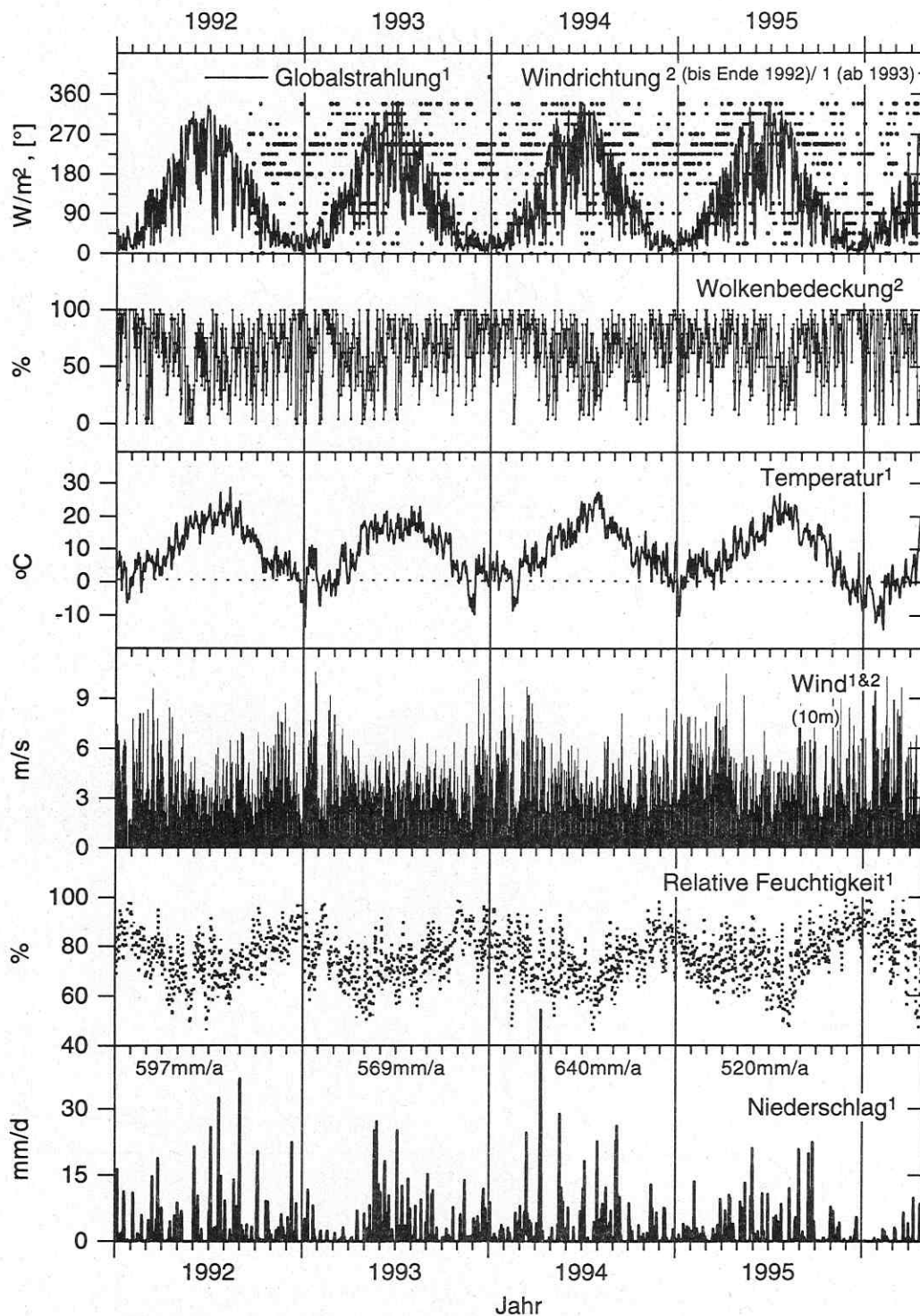


Abb. 6.8: Übersicht über die verwendeten meteorologischen Daten

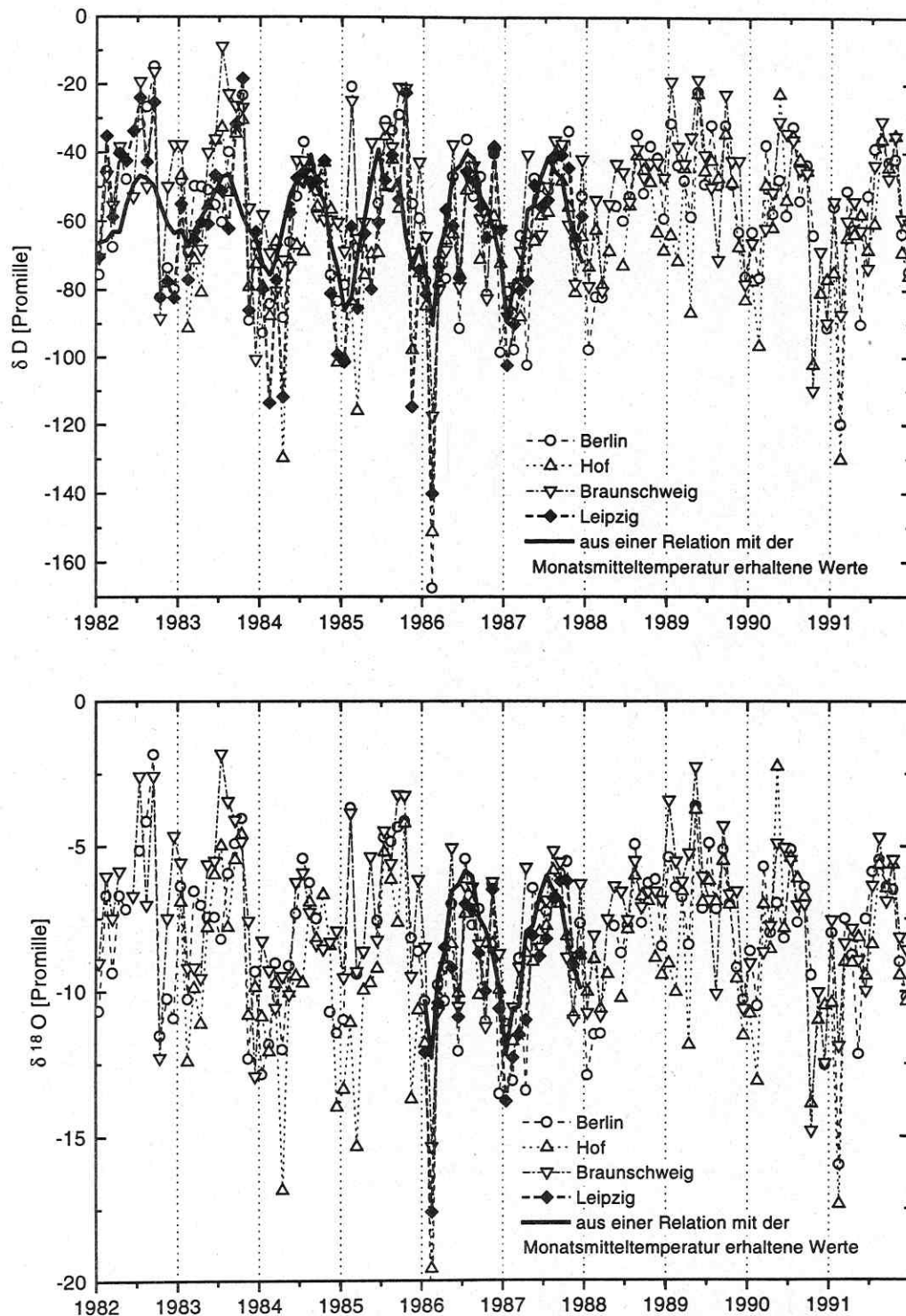


Abb. 6.9: Die Zeitserien der Isotopenwerte im Niederschlag zeigen eine hohe Streuung der Werte für verschiedene Stationen auf. Im Rahmen dieser Streuung stimmen die Isotopenwerte der Station Leipzig gut mit den umliegenden Stationen überein. Oben: Deuterium. Unten: ^{18}O

Die dargestellten Zeitreihen zeigen (bis auf die Station Leipzig) einen Zeitraum von 10 Jahren. Sie lassen ein periodisches Verhalten der Isotopenwerte im Niederschlag erkennen. Im Winter ist der Niederschlag am stärksten bezüglich der stabilen Isotope abgereichert, während er im Sommer weniger stark abgereichert ist. Dies kann aber nur als ein charakteristischer Jahresgang im langjährigen Mittel verstanden werden. Tatsächlich unterscheiden sich die einzelnen Jahresgänge beträchtlich voneinander und können der mittleren jahreszeitlichen Entwicklung entgegenlaufen.

Eine Parametrisierung der Isotopenwerte im Niederschlag kann nach Yurtsever und Gat [1981] durch die Monatsmitteltemperatur (T [°C]) am Niederschlagsort erfolgen. Sie schlagen eine Beziehung der Form

$$\delta^{18}\text{O} = -12 + 0,34 \cdot T \quad [\text{‰}] \quad (6.2)$$

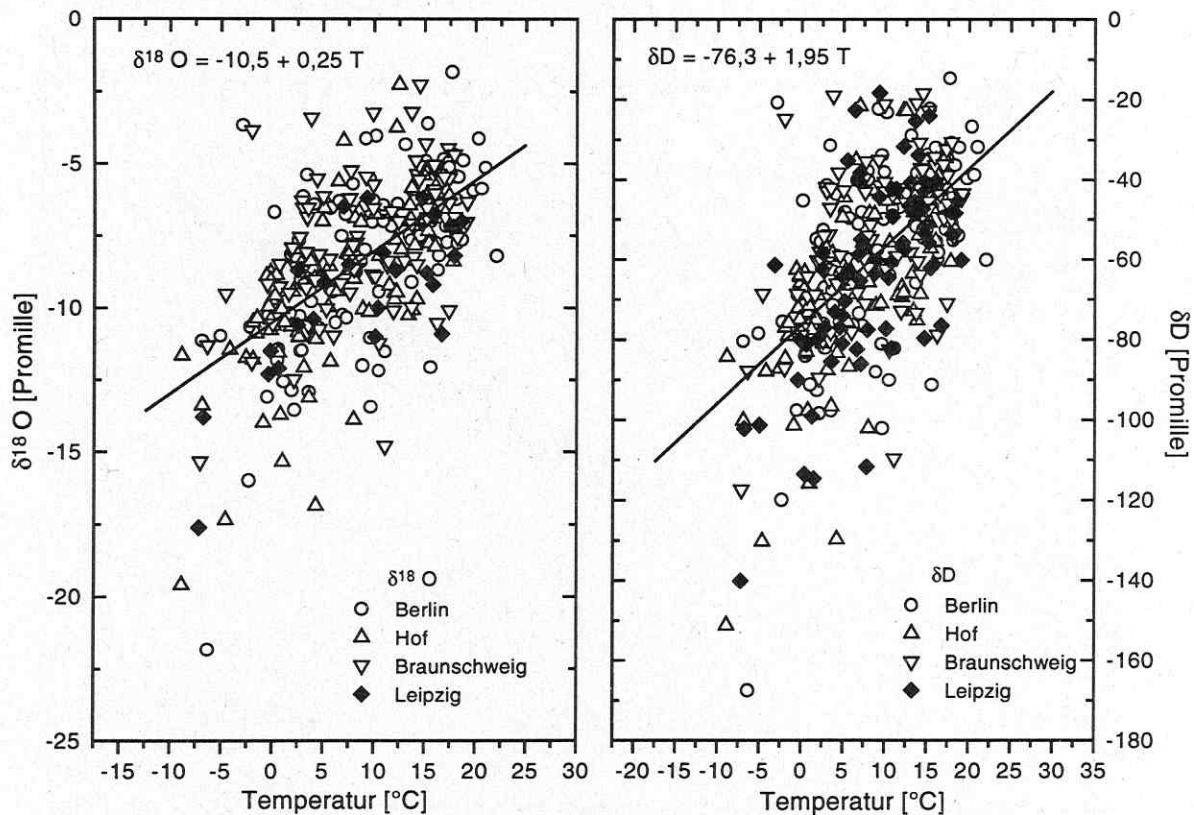


Abb. 6.10: Beziehung zwischen den Isotopenwerten im Niederschlag und der Lufttemperatur. Die Daten weisen eine hohe Streuung auf, können aber für die in LIMNMOD benötigte Genauigkeit durch eine Regressionsgerade angefitet werden.

vor, die durch Auswertung umfangreichen globalen Datenmaterials entstand. Allerdings kann diese Beziehung nicht die recht hohe Streuung der einzelnen Jahre erfassen, sie muß deshalb als grobe Näherung betrachtet werden. Eine solche Beziehung kann auch für die vorliegende Datenbasis erstellt werden. Abbildung 6.10 zeigt die Isotopenwerte der einzelnen Stationen gegen die entsprechenden Monatsmittelwerte der Temperatur aufgetragen. Ein linearer Fit ergibt für Deuterium die Beziehung

$$\delta D = -76,3 + 1,95 \cdot T \quad [‰] \quad (T \text{ in } ^\circ\text{C}) \quad (6.3)$$

und für ^{18}O

$$\delta^{18}\text{O} = -10,5 + 0,25 \cdot T \quad [‰] \quad (T \text{ in } ^\circ\text{C}) \quad (6.4)$$

Die Daten weisen eine hohe Streuung auf. Dies schlägt sich in einem geringen Bestimmtheitsmaß der Regressionsgeraden nieder ($R = 0,6$ für beide stabile Isotope). Wie oben angesprochen, können die Beziehungen 6.3 und 6.4 nur eine grobe Näherung darstellen.

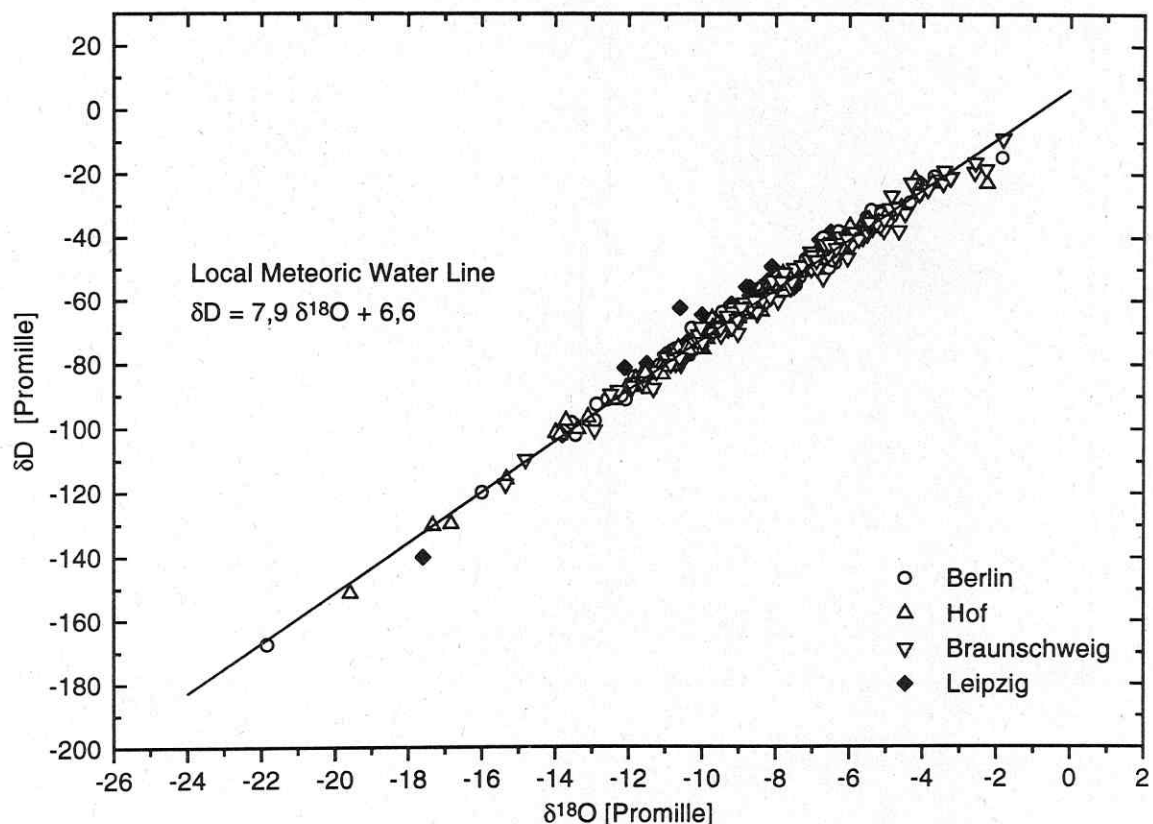


Abb. 6.11: Die Werte der stabilen Isotope, wie sie an den Stationen Leipzig, Berlin, Hof und Braunschweig gemessen wurden, können zur Bestimmung der Local Meteoric Water Line herangezogen werden. Eine lineare Regression ergibt die im Bild angegebene Beziehung zwischen $\delta^{18}\text{O}$ und δD .

Insbesondere die höchsten und die niedrigsten Werte werden nicht reproduziert. Die Abweichungen vom periodischen Jahresgang können ebenfalls nicht wiedergegeben werden, da die Temperatur im Gegensatz zu den Isotopenwerten eine relativ gleichmäßige Periodizität des Jahresganges zeigt. In Abbildung 6.9 sind auch die aus der Monatsmitteltemperatur von Leipzig errechneten Isotopenwerte dargestellt. Sie weichen zwar teilweise von den in Leipzig gemessenen Isotopenwerten im Niederschlag ab, liegen aber innerhalb der Streuung der Werte aller betrachteten Stationen.

Für die von LIMNMOD erwartete bzw. benötigte Genauigkeit sind die Gleichungen 6.3 und 6.4 somit ausreichend und können daher zur Parametrisierung des Isotopengehaltes des Niederschlags verwendet werden.

Aus den Datensätzen der ^{18}O - und Deuteriumwerte der genannten Stationen kann die *local meteoric waterline* bestimmt werden (Abbildung 6.11). Eine Auftragung von δD über $\delta^{18}\text{O}$ ergibt einen sehr guten linearen Zusammenhang, der durch eine Regressionsgerade mit einem Bestimmtheitsmaß von $R = 0,996$ beschrieben werden kann. Es ergibt sich

$$\delta\text{D} = 7,9 \cdot \delta^{18}\text{O} + 6,6 \quad (6.5)$$

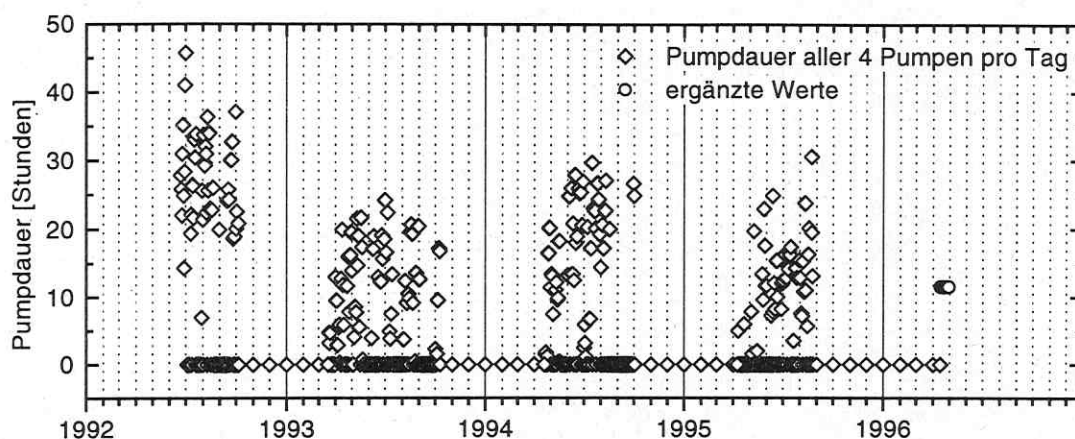
Es ist in dieser Auftragung keine signifikante Streuung zwischen den Stationen Leipzig, Berlin, Braunschweig und Hof festzustellen.

6.2.4 Zu- und Abflüsse, Wasserbilanzmodell

Bewässerungsentnahmen Die Agrargenossenschaft Reideburg betreibt zu Bewässerungszwecken eine Pumpstation, die mit vier Pumpen Wasser aus dem östlichen Seitenarm des Hufeisensees entnimmt. Die Daten der Betriebszeiten der Pumpen in dem Zeitraum vom 21.6.1992 bis zum 30.4.1996 wurden von der Agrargenossenschaft Reideburg freundlicherweise zur Verfügung gestellt (Abbildung 6.12). Es sind die Betriebsstunden aller vier Pumpen zusammen pro Tag dargestellt. Die Entnahmemenge ist außer durch die Betriebsdauer auch durch die tatsächliche Pumpleistung bestimmt. Für 1994 gibt Fischer [1997] eine Entnahmemenge von 151650 m^3 bei einer Betriebsdauer von 1345h an, was einer Pumpenleistung von $113 \text{ m}^3/\text{h}$ entspricht. Die Pumpenleistung in den restlichen Jahren ist nicht bekannt und wird ebenfalls zu $113 \text{ m}^3/\text{Betriebsstunde}$ angenommen. Die tatsächliche Entnahmerate kann letztlich nicht genau bestimmt werden. Die Tabelle zu Abbildung 6.12 gibt einen Überblick über die jährlichen Betriebszeiten, die durchschnittliche Betriebsdauer pro Tag und die tatsächliche Entnahmemenge bei einer Pumpleistung von $113 \text{ m}^3/\text{h}$.

Für die Jahre 1992 und 1995 liegen die Pumpzeiten nicht für den gesamten Zeitraum der Bewässerung vor. 1996 wurde nicht die tägliche Betriebsdauer der Pumpen aufgezeichnet, sondern nur die Betriebsstunden während des ganzen Jahres. Auf der Basis der durchschnittlichen monatlichen Pumpzeiten der anderen Jahre wurde versucht, einen für den Monat April benötigten Wert abzuschätzen (s. Abbildung 6.12).

Wasserbilanzmodell Die Wasserbilanz für einen See und damit die Seespiegelvariation kann geschlossen berechnet werden, wenn alle Zu- und Abflüsse bekannt sind. Da dies



Jahr	Betriebszeitraum	Betriebsdauer		Entnahmemenge bei 113m ³ /h Pumpleistung [m ³ /Jahr]
		insgesamt [h]	Durchschnitt/Tag [h]	
1992	vor dem 21.6	keine Daten	—	
	21.6.-5.10.	1814	17,11	>204982
1993	20.3.-9.10.	1123	5,53	126899
1994	21.4.-1.10.	1345	8,25	151650
1995	9.4.-24.8.	780	5,69	88140
	Nach dem 24.8. keine Daten (bzw. vernachlässigt)			
1996	insgesamt	1644		185772
	Annahme für 15.4.-30.4.		11,51	

Abb. 6.12: Bewässerungsentnahmen aus dem Hufeisensee durch die Agrargenossenschaft Reideburg: Pumpzeiten. Für das Jahr 1996 ist nur die *insgesamte Betriebsdauer* bekannt, für dieses Jahr wurden auf der Grundlage der mittleren monatlichen Pumpzeiten der anderen Jahre versucht, einen möglichst realen Wert für April 1996 anzusetzen, welcher später noch benötigt wird.

im allgemeinen nicht der Fall ist, kann auch umgekehrt vorgegangen werden und aus der beobachteten Seespiegeländerung und den bekannten Zu- und Abflüssen der restliche unbekannten Nettozu- oder Abfluß berechnet werden.

Im Fall des Hufeisensees existieren folgende Zu- und Abflüsse:

- **Niederschlag:** Die Niederschlagsmenge ist aus den Wetterdaten der Station Zöberitz bzw. Seeben bekannt (siehe auch Abschnitt 6.2.2). Es muß aber davon ausgegangen werden, daß nicht nur der Niederschlag auf die Seeoberfläche zu einem "Zufluß" führt, sondern auch der Oberflächenwasserablauf in den See. Dieser Umstand kann durch Einführung eines Regeneinzugsgebiets berücksichtigt werden. Dieses wird gemäß $\text{Regeneinzugsgebiet} = g \cdot \text{Seefläche}$ angesetzt.

- *Verdunstung*: Die Verdunstung führt zu einem Wasserverlust, der in LIMNMOD nach Gleichung 5.4.6 angesetzt ist. Die Verdunstungshöhen können also mit LIMNMOD aus den Wetterdaten der Station Zöberitz bzw. Seeben (Abschnitt 6.2.2) bei einer zufriedenstellenden Simulation der Oberflächentemperatur berechnet werden.
- *Pumpmengen*: Die zu Bewässerungszwecken entnommene Wassermenge muß ebenfalls bilanziert werden. Die Entnahmemengen sind wie oben ausgeführt bekannt.
- *Netto-Grundwasser-Zufluß*: Der Grundwasserzufluß ist nicht exakt bekannt. Christoph [1995] gibt für den Zufluß einen Wert von 2100 m³/d bzw. 3800 m³/d und für den Abfluß 610 m³/d bzw. 2310 m³/d an, was einem Nettogrundwasserzufluß von 1490 m³/d entspricht. Für eine Bilanzierung des Grundwasserzuflusses kann der Einfachheit halber, das Darcy-Gesetz verwendet werden (eine bessere Beschreibung könnte eventuell mit der Dupuit-Forchheimer Abfluß-Gleichung erreicht werden [Bear, 1972], die von einer parabolischen Grundwasseroberfläche ausgeht, während die hier ausgeführte Lösung eine lineare Näherung darstellt):

$$Q = A_{GW} \cdot k_f \frac{dh}{dx} \quad [\text{m}^3/\text{s}] \quad (6.6)$$

Q	Zu- bzw. Abfluß [m ³ /s]
$\frac{dh}{dx}$	Gradient der Piezometerhöhe [-]
A_{GW}	Eintrittsquerschnitt des Grundwassers [m ²]
k_f	Durchlässigkeitsbeiwert [m/s]

In der nachfolgend aufzustellenden Bilanzgleichung werden die Zu- und Abflüsse als Seepegeländerungen ausgedrückt, also als $\frac{dS}{dt} = \frac{Q}{A_{See}} \cdot 8,64 \cdot 10^7$ [mm/d] (dS: Seepegeländerung durch Grundwasserzufluß Q , A_{See} = Seeoberfläche, dt: Zeitabschnitt). Man erhält bei der Einführung einer linearen Näherung folgenden Ausdruck für die Seepegeländerung

$$\frac{dS}{dt} = \frac{A_{GW}}{A_{See}} \cdot k_f \frac{\Delta h}{\Delta x} \cdot 8,64 \cdot 10^7 \quad [\text{mm/d}] \quad (6.7)$$

Δh	Differenz der Piezometerhöhen [m]
Δx	Wegstrecke durch den Grundwasserleiter [m]
A_{See}	Seeoberfläche [m ²]

In dieser Gleichung sind die Faktoren A_{GW} , k_f und Δx nicht oder nicht genau bekannt. Die Piezometerhöhendifferenz entspricht der Differenz zwischen dem Grundwasserpegel in Seenähe und dem Seespiegel. Aus diesen Gründen wird ein Ansatz der folgenden Form gewählt

$$\frac{dS}{dt} = \frac{GW(t) - S(t)}{\tau} \quad [\text{mm/d}] \quad (6.8)$$

$S(t)$	Seepiegelstand, Stand über Wert zum Zeitpunkt t_0 [mm]
$GW(t)$	Pegelstand im Anstrom, Stand über Wert zum Zeitpunkt t_0 [mm]
τ	Optimierungsfaktor [d]

Die als Optimierungsfaktor zu verwendende Größe τ enthält alle in Gleichung 6.7 auftretenden Vorfaktoren und erhält damit die Einheit einer Zeit. In diesem Ansatz für den Nettozufluß ist die Grundwasserhöhe enthalten. Wird nur der Pegelstand eines Pegels verwendet, so muß der Pegelstand in eine effektive Grundwasserhöhe umgerechnet werden, da die Pegelwerte zwar das zeitliche Verhalten des gesamten Grundwasseranstroms, nicht aber den mittleren effektiven Gradienten des gesamten Grundwasser-Zustromfeldes repräsentativ wiedergeben. Dies wird durch den folgenden Ansatz für die mittlere effektive Grundwasserhöhe GW_{eff} des Grundwasserzustroms berücksichtigt:

$$GW_{eff} = GW(t) + \Delta z \quad (6.9)$$

Δz ist ein noch zu bestimmender Optimierungsparameter.

Die oben aufgeführten Größen führen auf eine Differentialgleichung für die Pegeländerung dS des Hufeisensees, in der alle Zu- und Abflüsse bereits als Seespiegeländerung in mm/d ausgedrückt eingehen:

$$\frac{dS}{dt} = g \cdot R(t) + \frac{GW(t) + \Delta z - S(t)}{\tau} - E(t) - \text{Pump}(t) \quad [\text{mm/d}] \quad (6.10)$$

g	Faktor zur Berücksichtigung des Regeneinzugsgebietes [-]
$R(t)$	Niederschlagsmenge [mm/d]
t	Zeit [d]
$E(t)$	Seespiegeländerung durch Verdunstung [mm/d]
$\text{Pump}(t)$	Seespiegeländerung durch Wasserentnahme [mm/d]

Eine Lösung dieser Gleichung ist gegeben durch

$$S(t) = e^{-\frac{t}{\tau}} \int e^{\frac{t}{\tau}} \left(g \cdot R(t) + \frac{GW(t) + \Delta z}{\tau} - E(t) - \text{Pump}(t) \right) dt \quad [\text{mm}] \quad (6.11)$$

Zur diskreten Rechnung kann diese Gleichung auch durch eine Summe angenähert werden:

$$S(t) = e^{-\frac{t}{\tau}} \sum e^{\frac{t}{\tau}} \left(g \cdot R(t) + \frac{GW(t) + \Delta z}{\tau} - E(t) - \text{Pump}(t) \right) \quad [\text{mm}] \quad (6.12)$$

Mit den oben aufgeführten Zu- und Abflüssen kann demnach der Seespiegel $S(t)$ aus diesem Wasserbilanz-Modell berechnet werden. Eine Optimierung der Wasserbilanz kann über die drei Parameter τ , g und Δz erfolgen, indem die Summe $\sum (S_{mod}(t_i) - S_{beob}(t_i))^2$ minimiert wird. Die Variation der Parameter τ und Δz läßt eine Optimierung auf den Grundwasserzufluß zu, während die Optimierung von g eine Bestimmung der Größe des Regeneinzugsgebietes erlaubt. Die Verdunstung und die Pumpmenge sind wie oben ausgeführt bekannt und werden zur Optimierung unverändert verwendet.

Für die Optimierung wird der Pegel 3979o verwendet, da für ihn eine lange Zeitreihe des Pegelstandes vorliegt. Abbildung 6.13 zeigt die zeitliche Entwicklung des Pegelstandes des Pegels 3979o und des Seepegels. Es ist eine Korrelation zwischen dem Grundwasserpegel und dem Seewasserstand zu erkennen. Beide weisen denselben Trend auf. Kurzskalige Variationen der Pegelstände gegeneinander sind auf eine Beeinflussung des Seepegels durch die Verdunstung, Bewässerungsentnahme und die Niederschläge sowie auf eine Retardierung der Variation des Seespiegels gegenüber dem Grundwassersignal zurückzuführen. 1994 wies der Pegel eine ungewöhnlich starke Reaktion auf. Fischer [1997] führt dies auf einen Übergang des Aquifers vom freien in den gespannten Zustand zurück. Die Überspannung rührt von einer vorübergehend ausgesetzten Wasserhaltung im Bereich der Braunkohle Bruckdorf, 600m südöstlich der Deponie an der F6 nach Leipzig her. Ein dem starken Pegelanstieg proportionaler Einfluß auf die Wasserbilanz ist nicht anzunehmen. So zeigen die Seespiegelwerte dieses Zeitabschnittes keine außergewöhnliche Variation. Wasserbilanz-Modellierungen unter Einbeziehung der Überspannung führen zu unrealistischen Ergebnissen für den Seespiegel. Deshalb wird die Überspannung im Referenzpegel 3979 ignoriert und durch eine lineare Interpolation des Langzeittrends ersetzt (Abbildung 6.13). Die Ergebnisse der Wasserbilanz-Optimierung sind in Abbildung 6.14 dargestellt.

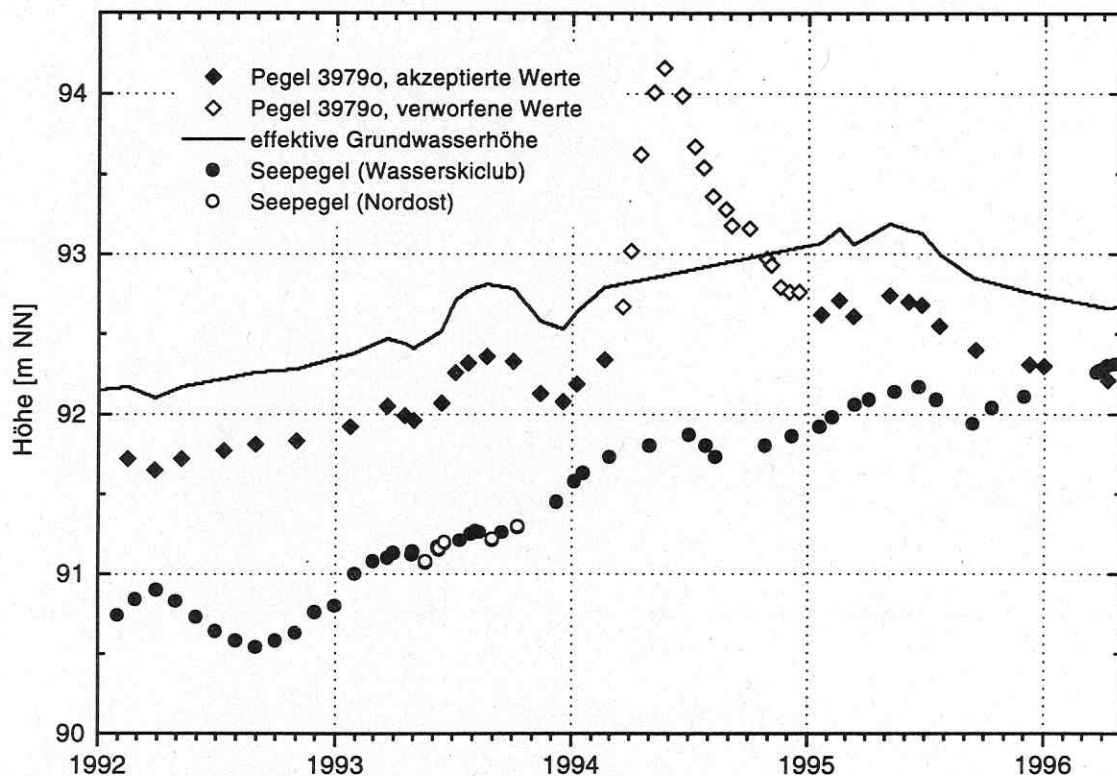


Abb. 6.13: Pegelstände des Pegels 3979o und des Seepegels

Die Optimierung basiert auf dem Zeitraum vom 21.6.92 bis zum 30.4.1996. Es werden die im östlichen Seitenarm des Hufeisensees beobachteten (Wasserski-club) und 6 ausgewählte weiter nordöstlich (LPG Seepiegel Ost) von der Agrargenossenschaft Reideburg gemessenen Seespiegelwerte zugrundegelegt. In der Abbildung sind die Zu- und Abflüsse als die von ihnen verursachte Seespiegeländerung aufgetragen (positiv: in den See, negativ: aus dem See). Sie lassen im Vergleich zu den beobachteten Seespiegeländerungen erkennen, daß zur Optimierung alle drei Größen τ , Δz und g notwendig sind. In niederschlagsarmen Phasen (beispielsweise Februar bis April 1993) ist trotz des geringen Niederschlags ein Anstieg des Seespiegels zu beobachten, der durch einen Grundwasser-Netto-Zustrom verursacht sein muß. Dies läßt eine Bestimmung des Grundwasser-Zuflusses zu. In niederschlagsreichen Phasen dominiert der Zufluß durch Regen die Seespiegeländerung. Das ist besonders gut an dem außergewöhnlich hohen Niederschlagsereignis im April 1994 zu erkennen, wo entsprechend des hohen Niederschlagswertes auch eine starke Pegeländerung stattfindet. Die Optimierung von g und damit des Regeneinzugsgebietes wird somit durch

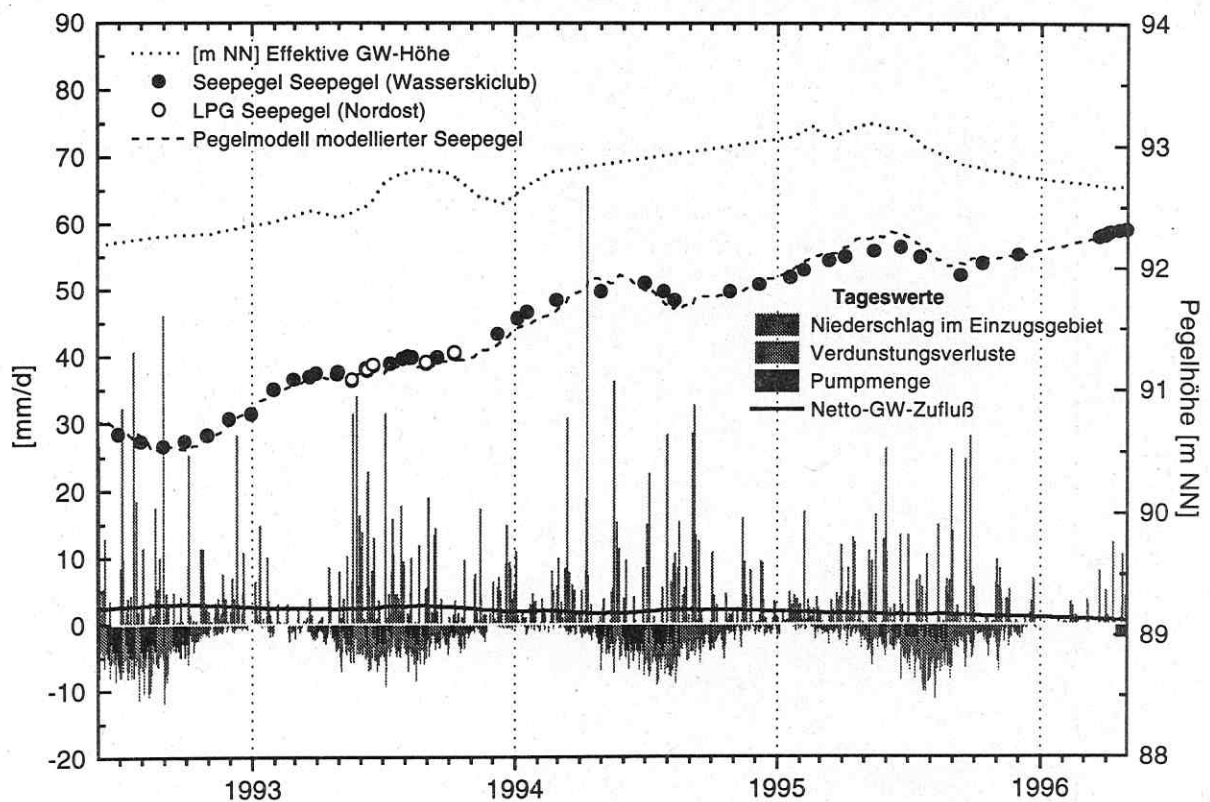


Abb. 6.14: Optimierte Wasserbilanz für den Zeitraum vom 21.6.1992 bis zum 30.4.1996. Die aufgetragenen Zu- und Abflüsse sind auf die durch sie verursachte Seespiegeländerung umgerechnet und somit direkt vergleichbar. Die Entwicklung und die Variationen des beobachteten Seespiegels können gut nachvollzogen werden.

die Phasen bestimmt, in denen die Wasserbilanz durch den Niederschlag beherrscht wird. Abbildung 6.15 zeigt nochmals die Entwicklung des modellierten und gemessenen Seepegels. Anhand der außerdem dargestellten kumulativ aufgetragenen Niederschläge im Einzugsgebiet, den Verdunstungsverlusten, den Bewässerungsentnahmen und dem Grundwasser-Nettozufluß läßt sich das Zusammenspiel dieser vier Größen aufzeigen. Die vier markierten Phasen der Wasserstandsentwicklung lassen das unterschiedliche Verhalten in den einzelnen Jahren und die Ursachen dafür erkennen:

- 1: Der Seepegel sinkt über den Sommer 1992 stark ab. In diesem Zeitraum sind die Verdunstungsverluste wesentlich höher als die Niederschlagsmenge. Zudem ist die zu Bewässerungszwecken entnommene Wassermenge in diesem Jahr am höchsten. Zusammen erklärt dies die Absenkung des Wasserstandes.
- 2: Im Sommer 1993 steigt der Seepegel leicht an, während er in den anderen Jahren im Sommer abfällt. Eine Betrachtung der Verdunstung und der Niederschlagsmenge gibt eine Erklärung: Die aufsummierte Niederschlagsmenge entspricht in diesem

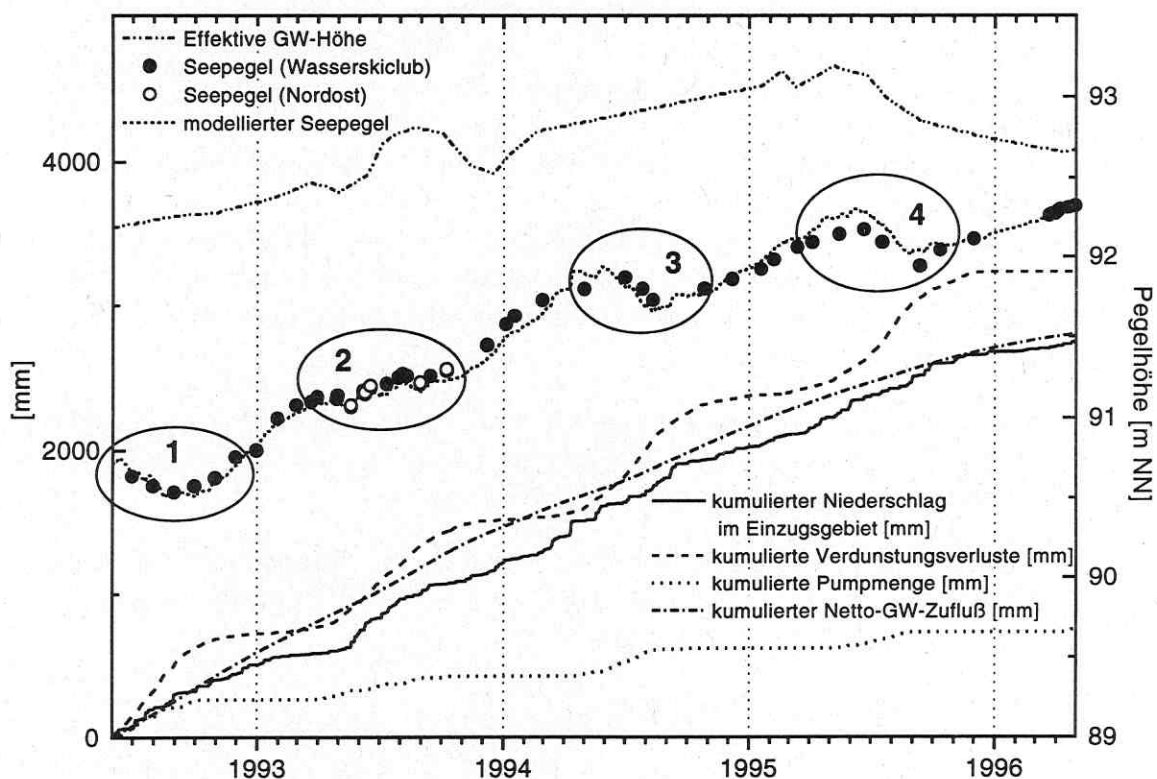


Abb. 6.15: Ein kumulativer Auftrag der einzelnen Terme der Wasserbilanz läßt gut die Seespiegelvariationen als ein Resultat des Zusammenspiels aus Verdunstung, Niederschlag, Grundwasserzufluß und Bewässerungsentnahmen erkennen.

Jahr nahezu der Verdunstung, während der aufsummierte Grundwasser-Nettozufluß größer als die Bewässerungsentnahmen ist, die im Sommer 1993 den geringsten Wert in den drei betrachteten Jahren haben.

- 3: Über das ganze Jahr gesehen steigt der Seespiegel 1994 an. Dies läßt sich auf die für das gesamte Jahr gegenüber dem Niederschlag geringere Verdunstung zurückführen. Während des Sommers ist aber ein starker Abfall des Seespiegels zu beobachten, der vom Modell gut nachvollzogen wird. Er läßt sich im wesentlichen durch die im Sommer größere Verdunstung, die auch den Niederschlag während dieses Zeitraums überwiegt, und durch die Bewässerungsentnahmen begründen. Der Netto-Grundwasserzufluß ist in diesem Jahr geringer als in den anderen Jahren.
- 4: Im Sommer 1995 ist wiederum ein Abfall des Seespiegels zu beobachten. Die Verdunstung liegt ähnlich hoch wie in den anderen Jahren, die Bewässerungsentnahmen sind geringer. Die Niederschlagsmenge ist 1995 ebenfalls geringer. Entscheidend ist aber der Abfall des Grundwasserpegels, der zu einem niedrigeren Grundwasserzustrom führt.

Die Optimierung des Grundwasser-Zuflusses kann durch die zwei Größen Δz und τ erfolgen. Der Parameter τ wirkt dabei auf den insgesamt mittleren Grundwasser-Zufluß ein. Durch ihn wird also das langjährige Mittel des Zuflusses bestimmt. Demgegenüber beschreibt der Parameter Δz die Kopplung des Zuflusses an die Pegeldifferenz zwischen dem Pegel 3979o und dem Seepegel. Durch eine Änderung von Δz kann eine Anpassung der modellierten kurzskaligen Pegelvariationen durch Grundwasser-Zufluß an die Beobachtungen erfolgen.

Durch die Optimierung aller drei Parameter kann die beobachtete Seespiegeländerung in befriedigender Weise nachvollzogen werden. Aus der Wasserbilanz ergibt sich bei einer Minimierung der quadratisch gemittelten Abweichung der beobachteten gegen den modellierten Seepegel (s. oben):

- Der Faktor g für das Regeneinzugsgebiet wird zu $1,25 \pm 0,25$ bestimmt. Die für den oberflächlichen Abfluß in den See relevante Fläche beträgt demnach lediglich 25% der Seefläche, also etwa $2 \cdot 10^5 \text{ m}^2$.
- Die Wasserentnahmen liegen, wie oben erwähnt, als Pumpenbetriebsstunden vor. Die besten Optimierungsergebnisse erhält man mit einer Pumpleistung von $115 \pm 10 \text{ m}^3/\text{h}$. Das entspricht den Angaben.
- τ wird zu $\tau = 590 \pm 30 \text{ [d]}$ bestimmt.
- Δz hat eine untere und eine obere Schranke. Wird Δz größer als 1m gewählt, so wird der Regeneinzugsgebietsfaktor g kleiner als 1, was nicht vorkommen darf. Andererseits muß Δz größer als 0,2m gewählt werden, damit der effektive Grundwasserpegel nicht unter den Seespiegel abfällt. Im Mittel ergibt sich $\Delta z = 0,45 \pm 0,25 \text{ m}$.
- Mit der Eingrenzung von Δz läßt sich auch eine Minimal- bzw. Maximalabschätzung des mittleren Grundwasserzuflusses erstellen. Es ergeben sich maximal $1850 \text{ m}^3/\text{d}$

($\Delta z=1\text{m}$) und minimal $1400\text{ m}^3/\text{d}$ ($\Delta z=0,2\text{m}$) für den mittleren Zufluß in dem betrachteten Zeitraum.

- Der über die Zeit integrierte Netto-Grundwasserzufluß ist im betrachteten Zeitraum etwa gleich groß wie die aufsummierte Niederschlagsmenge.

Mit diesen Werten kann die Entwicklung des Seespiegels im Zeitraum von Juni 1992 bis Ende April 1996 in befriedigender Weise nachvollzogen werden. Für den betrachteten Zeitraum ergibt sich eine mittlere Abweichung des beobachteten gegen den berechneten Seespiegel von etwa 60 mm.

Frachten der Grundwasserzuflüsse Temperatur, Leitfähigkeit und die Isotopenwerte in den einzelnen Grundwasserleitern werden aus den Messungen der Pegelwerte [Kowski, 1995] gemittelt. Tabelle 6.2.4 gibt einen Überblick der verwendeten Mittelwerte für die Grundwasserleiter 15, 92 und 98 und der Pegel, die zur Ermittlung der Werte dienten.

	Pegel	T [°C]	κ_{25} [mS/cm]	$\delta^{18}\text{O}$ [‰]	δD [‰]	SF_6 [fmol/l]	Tritium TU
GWL 15	3979o, ZG4o, 1851	$10,3\pm 0,8$	$2,6\pm 0,5$	$-8,8\pm 0,1$	$-65,7\pm 0,8$	2,0	35
GWL 92	3979u	$11,3\pm 0,5$	$2,3\pm 0,1$	$-8,8\pm 0,2$	$-64,8\pm 1$	0,0	<1
GWL 98	ZG4u, ZG1u, 2u	$11,8\pm 0,9$	27 ± 13	$-9,3\pm 0,2$	$-68,9\pm 0,6$	0,0	< 1

Einschichtung des Grundwasserleiters 15 Der Grundwasserleiter 15 tritt im nord-westlichen, durch den Kiesabbau entstandenen flachen Teil des Sees ein (siehe Kapitel 2.5). Wie oben ausgeführt, wird seine mittlere Temperatur mit $10,3^\circ\text{C}$ und seine Leitfähigkeit mit $2,6\text{mS/cm}$ abgeschätzt. Wird das zufließende Wasser im Modell entsprechend der Dichte eingeschichtet, so wird bei Seetemperaturen unter $10,3^\circ\text{C}$ die Einschichtung in die oberste Schicht erfolgen. Nach der Ausbildung einer Thermokline im Frühjahr und Epilimniontemperaturen über $10,3^\circ\text{C}$ würde sich der Grundwasserzufluß in die Temperatursprungschicht einschichten und deren Lage und Form mitprägen. Dies wird aber nicht beobachtet.

Aus diesem Grund wird die Einschichtungsart für den Grundwasserleiter 15 modifiziert. Existiert eine thermische Sprungschicht, so erfolgt im Modell die Einschichtung entsprechend der Dichte, maximal aber bis zur fünften Schicht (86,9m NN). Dies trägt dem Umstand Rechnung, daß der Eintritt des Grundwasserleiters 15 zwischen 92m NN und 88m NN erfolgt und daher während der thermischen Schichtungsphase das Grundwasser vollständig ins Epilimnion zufließt. Dort findet eine Vermischung mit dem warmen Oberflächenwasser statt, was ein Absinken des Grundwassers in die Thermokline verhindert.

Niederschlag Die Niederschlagsmenge wird den Messungen der Station Zöberitz entnommen (Abschnitt 6.2.2). Die $\delta^{18}\text{O}$ - und δD -Werte im Niederschlag werden entsprechend den Beziehungen 6.3 und 6.4 angesetzt. Dem Niederschlag wird die Temperatur der Luft zugewiesen. Die SF_6 -Konzentration im Regen wird zu konstant 2,0 fmol/l angenommen.

6.3 Meßdaten zur Modelleichung

Außer den Temperatur- und Leitfähigkeitsprofilen wurden zu verschiedenen Terminen Messungen des Sauerstoffgehaltes, pH-Wertes, Tritium-, Deuterium, und ^{18}O -Gehaltes, der Sichttiefe und der SF_6 -Konzentration durchgeführt. Die Tabelle 6.4 gibt einen Überblick über die vorhandenen Meßdatenbasis und die ausführenden Institute. Die Meßdaten selbst sind den Abbildungen in den Kapiteln 6.6 - 6.9 zu entnehmen bzw. im Fall von SF_6 den Kapiteln 3.5 und dem Anhang E. Temperatur- und Leitfähigkeitsprofile wurden in unregelmäßigen Abständen in Kooperation mit der Sektion Hydrogeologie des Umweltforschungszentrums Halle-Leipzig (UFZ) aufgenommen. Dabei kam die Sonde Tetracon 96/T mit dem Meßgerät Lf196 (WTW-Wissenschaftliche Technische Werkstätten) zum Einsatz. Für den Zeitraum vor 1995 konnte zusätzlich auf eine Reihe vorangegangener Messungen des UFZ zurückgegriffen werden. Auch Meßdaten seitens des ehemaligen GKSS-Magdeburg [Schulze, 1993] wurden freundlicherweise zur Verfügung gestellt.

Temperaturprofile Die Temperaturprofile können neben dem direkten Vergleich mit der modellierten Temperaturentwicklung auch zur Bestimmung der Thermoklintentiefe und des Wärmeinhalts als Vergleichsgrößen verwendet werden. Der Wärmeinhalt wird dazu nicht explizit ausgerechnet, sondern lediglich eine Mischtemperatur im Epilimnion und Hypolimnion bzw. im Winter im Mixolimnion für bestimmte Tiefenbereiche gebildet. Mit den modellierten Temperaturprofilen wird analog verfahren; dies läßt einen Vergleich ohne die aufwendigere Wärmeinhaltsberechnung zu (s. auch Abschnitt 6.4).

Leitfähigkeitsprofile Die Leitfähigkeitsprofile mußten nachgeeicht werden, da sie mit verschiedenen Sonden aufgenommen wurden. An den neueren Leitfähigkeitsprofilen ab dem 27.10.1994 kann eine nahezu konstante Leitfähigkeit von 29,7 mS/cm am tiefsten Meßpunkt von 62,8m NN beobachtet werden. Dies dient als Grundlage für eine Nacheichung der Profile. Im letzten Meter über Grund läßt sich die Leitfähigkeit als eine lineare Funktion $Lf_{mess} = a \cdot z + b$ der Tiefe z (in m NN) ausdrücken. Schreibt man weiterhin die nachgeeichte Leitfähigkeit als $Lf^* = Lf_{mess} \cdot f$, so gilt bei $z = 62,8\text{m NN}$

$$\left. \frac{Lf_{mess} \cdot f}{29,7\text{mS/cm}} \right|_{62,8\text{m NN}} = 1 \quad (6.13)$$

und somit

$$f = \frac{29,7\text{mS/cm}}{a \cdot 62,8\text{m} + b} \quad (6.14)$$

Datum	Insti- tution	Meßgrößen (Vertikalprofile)									
			Normierungs- faktor f			Sicht- tiefe [m]	Isotope			SF ₆	
17. Sep 92	UFZ	T	κ_{25}	1.09929	-	-	-	-	-	-	-
06. Okt 92	UFZ	T	κ_{25}	1.09289	O ₂	-	-	-	DEU	¹⁸ O	-
10. Dez 92	UFZ	T	κ_{25}	1.09239	O ₂	-	-	-	DEU	¹⁸ O	-
05. Jan 93	UFZ	T	κ_{25}	1.09656	O ₂	-	-	-	DEU	¹⁸ O	-
28. Jan 93	GKSS	T	κ_{25}	1.015	O ₂	pH	3.8	-	-	-	-
17. Mär 93	GKSS	T	κ_{25}	1.015	O ₂	pH	3.5	-	-	-	-
23. Apr 93	UFZ	T	κ_{25}	0.99	O ₂	-	-	TRI	-	¹⁸ O	-
06. Mai 93	GKSS	T	κ_{25}	-	O ₂	pH	3.6	-	-	-	-
10. Jun 93	GKSS	T	κ_{25}	1.01523	O ₂	pH	3.6	-	-	-	-
16. Jun 93	UFZ	T	κ_{25}	0.99322	O ₂	-	-	-	-	-	-
05. Aug 93	UFZ	T	κ_{25}	0.99725	O ₂	-	-	-	-	-	-
11. Aug 93	UFZ	T	κ_{25}	0.98909	-	-	-	-	-	-	-
11. Aug 93	GKSS	T	κ_{25}	1.01441	O ₂	pH	5.1	-	-	-	-
21. Okt 93	GKSS	T	κ_{25}	1.01115	O ₂	pH	7.5	-	-	-	-
08. Dez 93	UFZ	T	κ_{25}	-	O ₂	-	-	-	-	-	-
09. Dez 93	GKSS	T	κ_{25}	1.0094	-	-	-	-	-	-	-
27. Jan 94	GKSS	T	κ_{25}	1.00853	-	-	-	-	-	-	-
24. Feb 94	GKSS	T	κ_{25}	1.01243	-	-	-	-	-	-	-
22. Mär 94	GKSS	T	κ_{25}	1.01277	-	-	-	-	-	-	-
06. Apr 94	IUP/UFZ	T	κ_{25}	0.99377	-	-	-	TRI	DEU	¹⁸ O	-
03. Mai 94	GKSS	T	κ_{25}	-	-	-	-	-	-	-	-
21. Jun 94	UFZ	T	κ_{25}	-	O ₂	-	-	-	-	¹⁸ O	-
21. Jun 94	GKSS	T	κ_{25}	1.03583	O ₂	-	-	-	-	-	-
12. Aug 94	UFZ	T	κ_{25}	0.99991	-	-	-	-	-	¹⁸ O	-
23. Aug 94	GKSS	T	κ_{25}	-	O ₂	-	-	-	-	-	-
14. Sep 94	GKSS	T	κ_{25}	-	O ₂	-	-	-	-	-	-
27. Okt 94	IUP/UFZ	T	κ_{25}	0.99896	-	-	-	TRI	DEU	¹⁸ O	SF ₆
07. Dez 94	IUP/UFZ	T	κ_{25}	1.00429	-	-	-	-	-	¹⁸ O	SF ₆
13. Dez 94	GKSS	T	κ_{25}	1.00626	O ₂	pH	4.1	-	-	-	-
19. Jan 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	1.00262	-	-	-	-	DEU	¹⁸ O	SF ₆
07. Feb 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	1.00022	-	-	-	TRI	DEU	¹⁸ O	SF ₆
14. Mär 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	0.99004	-	-	-	TRI	DEU	¹⁸ O	SF ₆
05. Apr 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	0.99406	-	-	-	-	DEU	¹⁸ O	SF ₆
15. Mai 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	1.00202	-	-	-	-	DEU	¹⁸ O	SF ₆
21. Jun 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	0.99827	-	-	-	-	DEU	¹⁸ O	SF ₆
18. Jul 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	1.00372	-	-	-	-	DEU	¹⁸ O	SF ₆
12. Sep 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	0.99813	-	-	-	TRI	DEU	¹⁸ O	SF ₆
12. Okt 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	1.00105	-	-	-	-	DEU	¹⁸ O	SF ₆
01. Dez 95	IUP/UFZ	T	κ_{25}	1.00644	-	-	-	-	-	-	SF ₆
15. Apr 96	IUP/UFZ	T	κ_{25}	-	-	-	4.5	-	-	-	SF ₆
06. Jun 96	IUP/UFZ	T	κ_{25}	0.99895	-	-	-	-	-	-	SF ₆
30. Sep 96	IUP/UFZ	T	κ_{25}	-	-	-	5.7	-	-	-	SF ₆
01. Okt 96	IUP/UFZ	T	κ_{25}	-	-	-	5.7	-	-	-	SF ₆

Tab. 6.4: Übersicht über die Meßdatenbasis. T - Temperatur; κ_{25} - Leitfähigkeit; DEU - Deuterium; TRI - Tritium

Der Korrekturfaktor f kann also durch die Bestimmung einer Regressionsgeraden an die Leitfähigkeit im Bereich von 63,8 bis 62,8m NN und Einsetzen der Fitparameter in Gleichung 6.14 erhalten werden. Es ergeben sich Korrekturfaktoren von 0,98 bis 1,1. Die Korrekturfaktoren der einzelnen Leitfähigkeitsprofile sind der Tabelle 6.4 zu entnehmen.

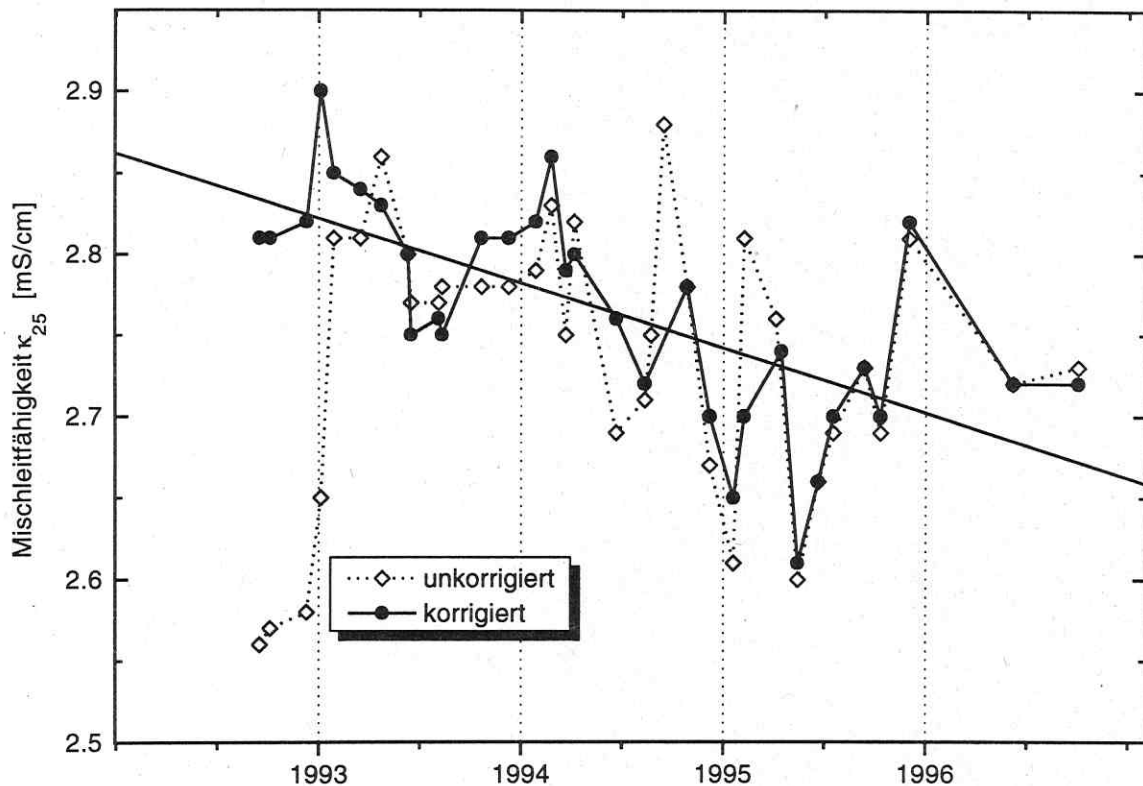


Abb. 6.16: Leitfähigkeitsbilanz. Die gemessenen Leitfähigkeitsprofile wurden interpoliert, mit dem Volumen der einzelnen Schichten multipliziert und durch das Gesamtvolumen geteilt. Es ergibt sich eine Mischleitfähigkeit, die sowohl für die ungeeichten als auch für die nachgeeichten Profile um einen Wert von $2,75 \pm 0,15$ mS/cm schwankt.

Die Leitfähigkeitsprofile weisen trotz Nacheichung untereinander zum Teil erhebliche Abweichungen der gemessenen Leitfähigkeit im Hypolimnion auf. Eine Bilanz der Leitfähigkeit als Maß für die Salinität gibt Aufschluß über das zeitliche Verhalten des Salzgehaltes im Hufeisensee. Zu diesem Zweck wurden die Leitfähigkeitsprofile vom 17.09.1992 bis zum 1.10.1996 auf Tiefen von 92m NN bis 66m NN in 1-Meter-Schritten und von 66m NN bis 62,8m NN in 10cm-Schritten interpoliert und mit den Volumina der entsprechenden Schichten multipliziert. Der Bezug auf das Gesamtvolumen ergibt dann eine Mischleitfähigkeit (Abbildung 6.16). Sowohl die ungeeichten als auch die nachgeeichten Profile wurden auf diese Weise untersucht. Für beide ergibt sich eine Mischleitfähigkeit, die um $2,75 \pm 0,15$ mS/cm schwankt und starke kurzskalige Variationen aufweist. Saisonale Pe-

riodizitäten sind nicht erkennbar. Die Nacheichung glättet die starken Schwankungen der ungeeichten Leitfähigkeit teilweise erheblich. Eine Regressionsgerade läßt eine Abnahme von $0,044 \pm 0,007$ mS/a erkennen. Eine Ursache für diesen Trend ist in einem Überschuß des Niederschlags und des Grundwasserzuflusses gegenüber den Verdunstungsverlusten zu suchen. Es lassen sich jedoch keine quantitativen Aussagen beispielsweise über die Größe des Bruttogrundwasserzuflusses gewinnen, da die Leitfähigkeit des Grundwasserzuflusses zu ungenau bekannt ist ($2,5 \pm 0,5$ mS/cm, s. Kapitel 6.2.4).

Aus den Leitfähigkeitsprofilen läßt sich die Chemoklinentiefe, die bei einem Wert von 16 mS/cm definiert wird, als Vergleichsgröße feststellen. Die Tabelle 6.5 gibt einen Überblick der angesprochenen abgeleiteten Größen.

Datum	Beob. See- spiegel [mNN]	Thermo- kline [mNN]	Thermo- kline [m]	Chemo- kline = 16mS/cm [mNN]	Mixolimnion Temp. [°C]	Tiefen- bereich [m]	Hypolimnion Temp. [°C]	Tiefen- bereich [m]
17. Sep 92	90.56	80.06	10.5	66.37	16.5	0-9	8.6	13-22
06. Okt 92	90.59	78.19	12.5	66.44	14.0	0-11	8.6	14-22
10. Dez 92	90.77	—	—	66.46	4.5	0-22	—	—
05. Jan 93	90.80	—	—	66.43	1.7	0-22	—	—
28. Jan 93	91.00	—	—	66.36	3.4	0-22	—	—
17. Mär 93	91.10	—	—	—	3.7	0-23	—	—
23. Apr 93	91.12	—	—	66.22	11.0	0-5	7.1	6-23
06. Mai 93	91.14	85.14	6	—	14.7	0-5	7.2	8-22
10. Jun 93	91.18	84.18	7	66.12	21.1	0-6	7.9	9-22
16. Jun 93	91.19	84.19	7	66	19.3	0-5	7.3	9-22
05. Aug 93	91.27	82.27	7	66.04	20.4	0-6	7.6	11-22
11. Aug 93	91.26	83.26	8	66.03	—	—	—	—
11. Aug 93	91.26	83.26	8	65.98	19.7	0-7	7.7	10.5-23
21. Okt 93	91.33	76.83	14.5	66.12	11.1	0-13	7.4	15-23
08. Dez 93	91.45	—	—	—	—	—	—	—
09. Dez 93	91.45	—	—	66.17	2.5	0-23	—	—
27. Jan 94	91.66	—	—	66.18	2.4	0-23	—	—
24. Feb 94	91.73	—	—	65.96	0.7	0-23	—	—
22. Mär 94	91.76	—	—	65.85	4.1	0-23	—	—
06. Apr 94	91.80	—	—	65.82	6.6	0-23	—	—
03. Mai 94	91.80	87.80	4	—	13.5	0-3	7.7	7-23
21. Jun 94	91.87	83.87	8	—	—	—	—	—
21. Jun 94	91.87	83.37	8.5	65.58	18.2	0-7	7.6	10-23.5
12. Aug 94	91.73	83.73	8	—	24.1	0-5	7.7	11-23
23. Aug 94	91.73	82.73	9	—	19.2	0-7	7.7	11-23
14. Sep 94	91.73	81.73	10	—	16.9	0-8	7.8	11-23
27. Okt 94	91.80	—	—	65.69	9.6	0-12.5	8.1	13-23.5
07. Dez 94	91.86	—	—	65.71	6.7	0-23	—	—
13. Dez 94	91.88	—	—	65.84	6.5	0-23	—	—
19. Jan 95	91.92	—	—	65.6	1.5	0-23	—	—
07. Feb 95	91.98	—	—	65.52	2.9	0-23	—	—
14. Mär 95	92.06	—	—	65.54	4.4	0-23	—	—
05. Apr 95	92.09	—	—	65.49	6.1	0-23	—	—
15. Mai 95	92.14	81.29	11	65.37	11.8	0-8	7.6	11-23
21. Jun 95	92.17	85.17	7	65.41	18.0	0-6.5	8.1	11.5-23
18. Jul 95	92.09	85.09	7	65.41	22.5	0-6	8.1	12-23
12. Sep 95	91.94	80.94	11	65.33	16.5	0-10.5	8.3	12.5-23
12. Okt 95	92.04	79.04	13	65.37	14.5	0-12	8.1	14-23
01. Dez 95	92.11	—	—	65.23	4.5	0-23	—	—
15. Apr 96	92.30	—	—	65.24	6.2	0-7	3.7	10-23
06. Jun 96	92.36	84.36	8	65.17	15.9	0-7	4.0	12-23
30. Sep 96	92.28	81.28	11	65.26	12.6	0-10	4.5	16-23
01. Okt 96	92.28	81.28	11	65.26	12.6	0-10	4.5	16-23

Tab. 6.5: Übersicht über die Seepiegelwerte, sowie die abgeleiteten Vergleichsgrößen Thermoklinen- und Chemoklinentiefe, Mixolimnion- und Hypolimniontemperatur

6.4 Wärmeinhalt

Abbildung 6.17 zeigt die Werte der in Kapitel 5.4.1 beschriebenen atmosphärischen Wärmeaustauschterme. Die dargestellten Werte basieren auf den in Kapitel 6.2.2 vorgestellten meteorologischen Eingangsdaten. Sie geben damit die Verhältnisse am Hufeisensee wieder, der Betrag und das Zeitverhalten der einzelnen Terme ist aber vergleichbar mit dem anderer Seen. Der besseren Übersichtlichkeit halber wurde das Mittel über 30 Tage gebildet.

Es wird ersichtlich, daß die langwellige Einstrahlung aus der Atmosphäre den größten Anteil am atmosphärischen Energieeintrag hat. Sie hat Werte zwischen 300 - 400 W/m². Demgegenüber ist der Energieeintrag durch die kurzwellige Strahlung geringer (0 - 300 W/m²). Der Übergang fühlbarer Wärme kann sowohl positiv als auch negativ sein und bewegt sich im Bereich von 0 - 100 W/m². Der latente Wärmefluß ist hauptsächlich negativ (aus dem See heraus) und hat eine Größe von 0 - 300 W/m², liegt also in der Größenordnung der kurzwelligen Einstrahlung. Die langwellige Abstrahlung liefert mit 300 - 400 W/m² den größten Beitrag zum Wärmeverlust des Sees.

Die dargestellten Wärmeaustauschterme wurden im Modell zur Berechnung der Wärmebilanz des Sees benutzt. Abbildung 6.18 zeigt den Vergleich der gemittelten gemessenen

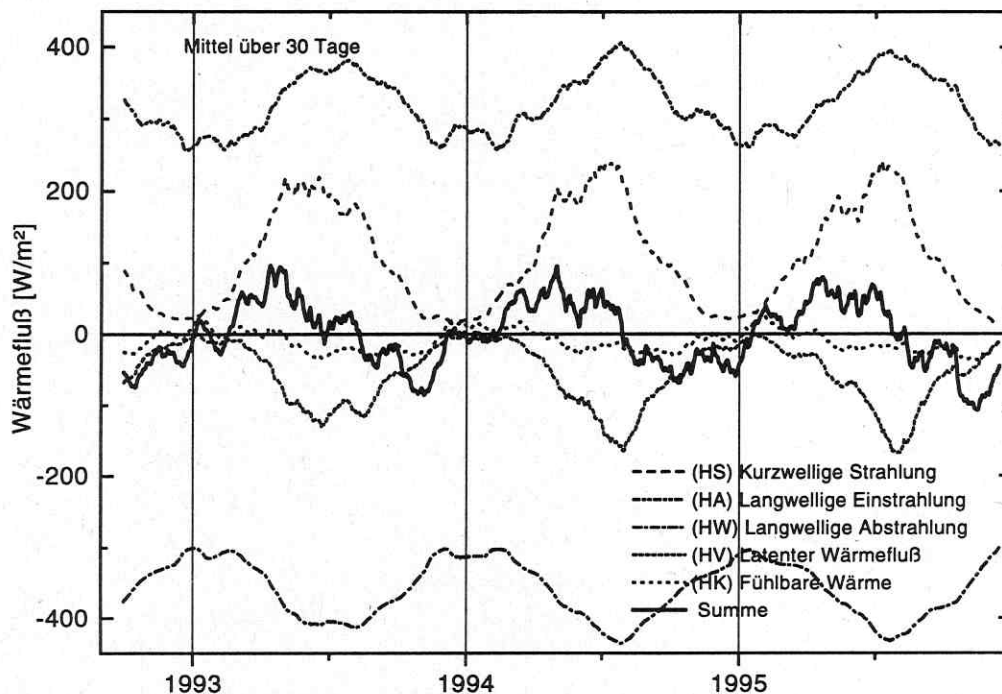


Abb. 6.17: Atmosphärische Wärmeaustauschterme nach Kapitel 5.4.1. Die langwellige Einstrahlung liefert den größten Beitrag zum Wärmeeintrag, die langwellige Abstrahlung des Wassers den größten Beitrag zum Wärmeverlust.

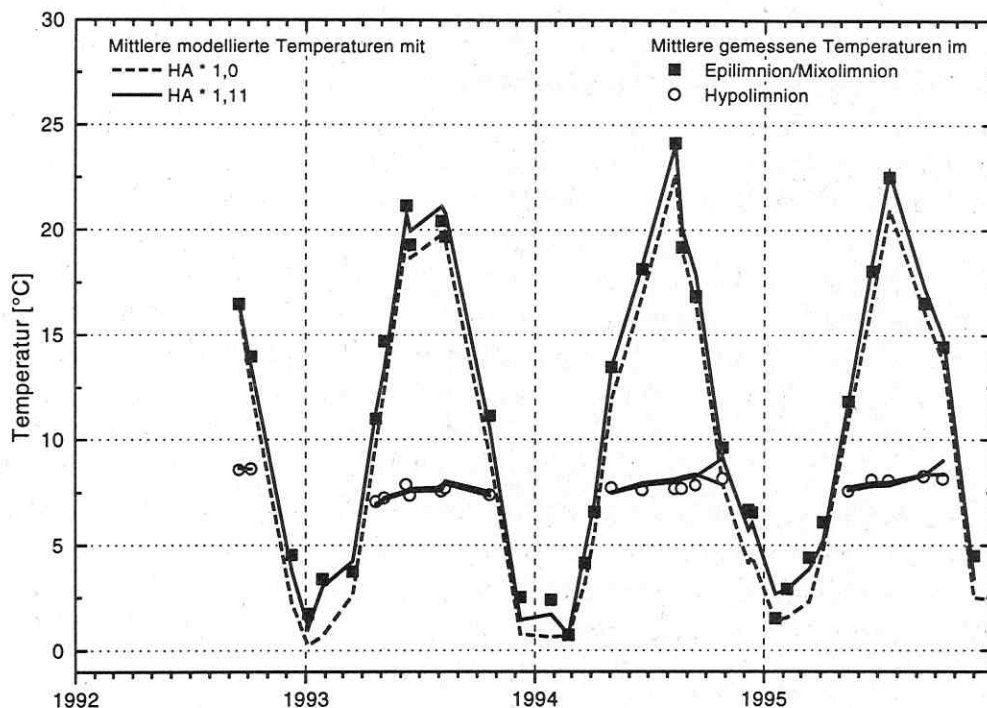


Abb. 6.18: Mittlere gemessene und modellierte Temperaturen im Epi- und Hypolimnion. Die langwellige Einstrahlung H_A muß im Modell mit einem Eichfaktor von 1,11 multipliziert werden, um die beobachteten mittleren Temperaturen richtig nachvollziehen zu können.

Temperaturen im Mixolimnion bzw. Hypolimnion mit den modellierten gemittelten Temperaturen. Die mittleren Temperaturen wurden wie im vorigen Abschnitt beschrieben bestimmt. Es zeigt sich, daß mit den verwendeten Formeln für den Wärmeenergieeintrag aus der Atmosphäre die mittleren Temperaturen im Mixolimnion generell etwas zu niedrig berechnet werden (Die Linien mit dem Eichfaktor 1,0 in Abbildung 6.18). Dieser Effekt wird auch von Karagounis [1992] bei der Anwendung von LIMNMOD auf den Luganersee erwähnt und auf eine Unterschätzung des Wärmeenergieeintrags durch die langwellige Strahlung zurückgeführt [Marti und Imboden, 1986].

Da die langwellige Einstrahlung keine übermäßig starke jahreszeitliche Variation aufweist, kann ein übers Jahr gleichmäßiger Ausgleich des Wärmedefizits durch Multiplikation der langwelligen Strahlung H_A mit einem Eichfaktor erreicht werden. Abbildung 6.18 zeigt im Vergleich zu den unmodifizierten diejenigen mittleren modellierten Temperaturen, die bei Verwendung eines Faktors von 1,11 erreicht werden. Der Verlauf der mittleren Temperaturentwicklung kann mit diesem Wert befriedigend nachvollzogen werden. Karagounis [1992] erhält den gleichen Wert dieses Eichfaktors für den Luganersee bei der Eichung des physikalischen Modellteils.

6.5 Sprungschichtverlauf und Chemoklinenabsenkung

Der vom Modell berechnete Sprungschichtverlauf und die modellierte sowie die gemessene Chemoklinenlage (definiert als 16mS/cm) sind in Abbildung 6.19 dargestellt. Als modellierte Chemoklintiefe wird die Oberkante derjenigen Box betrachtet, die einen Leitfähigkeitswert von größer als 16mS/cm aufweist. Die Chemoklinenabsenkung kann im Rahmen der Diskretisierung befriedigend nachvollzogen werden. Die Absenkung erfolgt durch das Zusammenwirken diffusiver Prozesse und einer konvektiv- und windinduzierten Erosion der Chemokline. Sie läßt sich im Modell durch die Veränderung der Diffusionskoeffizienten in und oberhalb der Chemokline beeinflussen (im Bereich der durch die Messung festgelegten Grenzen, siehe Kapitel 4 und 3.5.6).

Während des Sommers wird die Chemokline diffusiv verbreitert, was sich an den Leitfähigkeitsprofilen erkennen läßt (Abschnitt 6.7). Dies führt dazu, daß die Durchmischung des Mixolimnions nur bis an die obere Grenze der Chemokline reicht (beispielsweise in Abbildung 6.19 im Winter 1994). Die Stabilisierung der Wassersäule dicht über der Chemokline schützt diesselbe also bei mäßig starken Mischungsereignissen vor einer Erosion.

Stärkere konvektive Durchmischung im Herbst in Verbindung mit größeren Windereig-

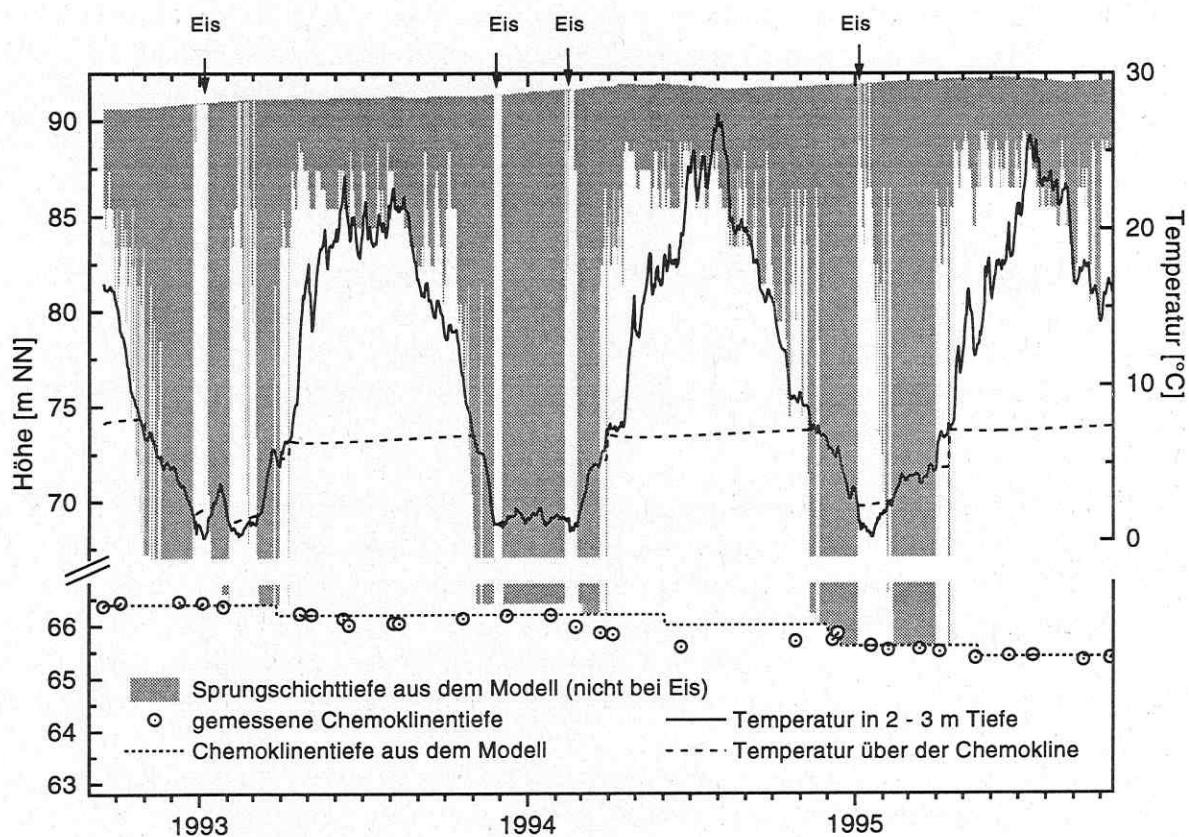


Abb. 6.19: Modellierter Sprungschichtverlauf und Chemoklinenabsenkung. Die Phasen der Eisbedeckung sind durch eine nicht vorhandene Sprungschichttiefe gut zu erkennen.

nissen können aber diese stabile Schichtung direkt über der Chemokline zerstören. Im Modell werden dann tieferliegende Schichten in das Mixolimnion eingemischt (Abbildung 6.19: November 1994). Dies führt zu einer Schärfung der Chemokline.

Die Absenkung der Chemokline im Modell während der thermischen Schichtungsphase (Mai 1994; Mai 1995) läßt sich auf die diffusive Verbreiterung zurückführen. Dadurch sinken die Leitfähigkeitswerte ab; die Schicht mit einer Leitfähigkeit von $> 16 \text{ mS/cm}$ ist dann in einer größeren Tiefe zu finden.

Der Temperaturverlauf in der zweiten Modellschicht ($\approx 2 - 3 \text{ m}$ Wassertiefe) und in der 28. Schicht (oberhalb der Chemokline) spiegeln auch die Lage thermischen Sprungschicht wieder:

Während der Phasen der Volldurchmischung des Mixolimnions fallen beide Temperaturen zusammen und verlaufen synchron. Im Frühjahr wird die Hypolimniontemperatur durch die letzte Volldurchmischung gestellt und bleibt dann über den Sommer nahezu konstant. Die Sprungschichttiefe nimmt mit der zunehmenden Temperatur dicht unter der Oberfläche ab. Erst bei einer Abnahme der oberflächennahen Wassertemperaturen im Herbst wird die Thermokline wieder abgesenkt.

Fällt die Temperatur der zweiten Schicht und der tieferen Schichten unter die Temperatur des Dichtemaximums, so kann eine Temperaturinversion entstehen. Die Temperatur der zweiten Schicht kann dann unter die der tieferen fallen, es entsteht eine stabile Schichtung. Die Sprungschichttiefe ist dann entsprechend gering (Abbildung 6.19). Eine Temperaturinversion tritt auch während der Phasen der Eisbedeckung auf, die durch eine nicht vorhandene Sprungschichttiefe gekennzeichnet sind.

6.6 Vertikale Temperaturverteilung

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse des modellierten Temperaturverlaufs anhand eines Vergleichs der modellierten mit gemessenen Temperaturprofilen vorgestellt (Abbildung 6.20 - 6.22).

Temperaturverlauf im Mixolimnion Der modellierte Temperaturverlauf im Mixolimnion zeigt eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den beobachteten Profilen. Im Winter liegt die berechnete Temperatur in allen Jahren etwa $0,5\text{-}1,5^\circ\text{C}$ zu niedrig, was sich besonders in den Profilen im Dezember und Januar zeigt. Die Profile vom Februar und März zeigen in den Jahren 1993 und 1994 im Modell eine zu schnelle Erwärmung der Wassersäule, während 1995 die berechneten Temperaturen in diesen Monaten zu niedrig liegen.

Im Frühjahr und Herbst kann ein eindimensionales Modell die in diesem Zeitraum auftretenden nichtlokalen Austauschprozesse im See nur unzureichend beschreiben. Daher treten in diesen Zeiträumen die größten Abweichungen des Modells von den Beobachtungen auf. Insbesondere kann der Zeitpunkt der letzten Volldurchmischung im Frühjahr, die die Temperatur des sich bildenden Hypolimnions bestimmt, nicht immer wiedergegeben werden. Aus diesem Grund wird im Modell eine Zwangsdurchmischung des Mixolimnions

zu dem Frühjahr - Zeitpunkt durchgeführt, an dem sich durch Homogenisierung der Wassersäule die später beobachtete Hypolimnionstemperatur ergibt.

Nach der Zwangsdurchmischung wird die Temperaturentwicklung sowohl des Hypolimnions als auch des Epilimnions für den Sommer aller betrachteten Jahre gut nachvollzogen. Die Eichung der Thermoklinentiefe erfolgt mittels des Absorptionskoeffizienten η . Ein Wert von $\eta = 0,7$ [1/m] liefert die besten Ergebnisse.

In den modellierten Profilen treten zum Teil Stufen auf. Diese entstehen aufgrund einer Durchmischung der Wassersäule bis in eine bestimmte Tiefe und eine darauffolgende weniger tiefreichende Durchmischung, wobei auch die Diskretisierung eine Rolle spielt. Diese Stufen können offenbar durch die vertikale Diffusion nicht schnell genug geglättet werden und bleiben stehen.

Der Windeffizienzfaktor γ_u beeinflusst ebenfalls die vertikale Temperaturverteilung im Mixolimnion. Wird bei der Modellierung der windrichtungsabhängige Effizienzfaktor für alle Windrichtungen auf $\gamma_u = 1$ gesetzt, so treten zu niedrige Epilimnions- und zu hohe Hypolimnionstemperaturen auf. Der eingeführte Windeffizienzfaktor ist damit aufgrund der speziellen Form und Lage des Hufeisensees nötig, wenn die anderen Eichfaktoren wie χ , f_{HA} und die Fluß-Richardson-Zahl bei Werten belassen werden sollen, wie sie von anderen Seen bekannt sind.

Temperaturverlauf im Monimolimnion Der Temperaturverlauf im Monimolimnion ist durch den unterdrückten Transport (molekulare Diffusion der Wärme) gekennzeichnet. Die auftretenden Temperaturinversionen können vom Modell nachvollzogen werden. Weitere Einflussgrößen auf den berechneten Temperaturverlauf im Monimolimnion sind die berechneten Temperaturen im Hypolimnion und die Chemoklinentiefe. Dies läßt sich beispielsweise am Profil vom 14.3.1995 erkennen, an dem die Temperaturen im Monimolimnion aufgrund der zu tiefen Hypolimnionstemperatur generell zu niedrig berechnet werden.

Der geothermische Wärmefluß hat einen Einfluß auf die Temperaturverteilung dicht über dem Seeboden, da das Verhältnis von Sedimentflächen zu Volumen im Monimolimnion groß ist (siehe auch Abschnitt 2.1). Dies kann zum Test des gewählten Sedimentwärmeflusses $Q_{Sed} = 0,275$ W/m² benutzt werden. Vergleichsgrundlage bilden die bodennahen Temperaturen im August und September. Mit $Q_{Sed} = 0,25$ W/m² stimmen die modellierten bodennahen Temperaturen 1993 gut mit den beobachteten überein, sind aber 1995 zu niedrig. Hingegen läßt sich mit einem $Q_{Sed} = 0,3$ W/m² eine optimale Modellierung im Jahr 1995 erzeugen, was jedoch auf zu niedrige Temperaturen im Jahr 1993 führt. Es wird daher ein mittlerer Wert von $Q_{geo} = 0,275$ W/m² verwendet.

Der im Modell verwendete Sedimentwärmefluß darf nicht als rein durch den geothermischen Wärmefluß verursacht betrachtet werden. Er ist vielmehr ein Summenparameter für alle im Sediment auftretenden Wärmequellen. Heinz [1990] schätzt den durch biologische Abbauprozesse entstehenden Wärmefluß als ungefähr gleich groß ab wie den z.B. in alpinen Seen beobachteten reinen geothermischen Wärmefluß von $\approx 0,1$ W/m².

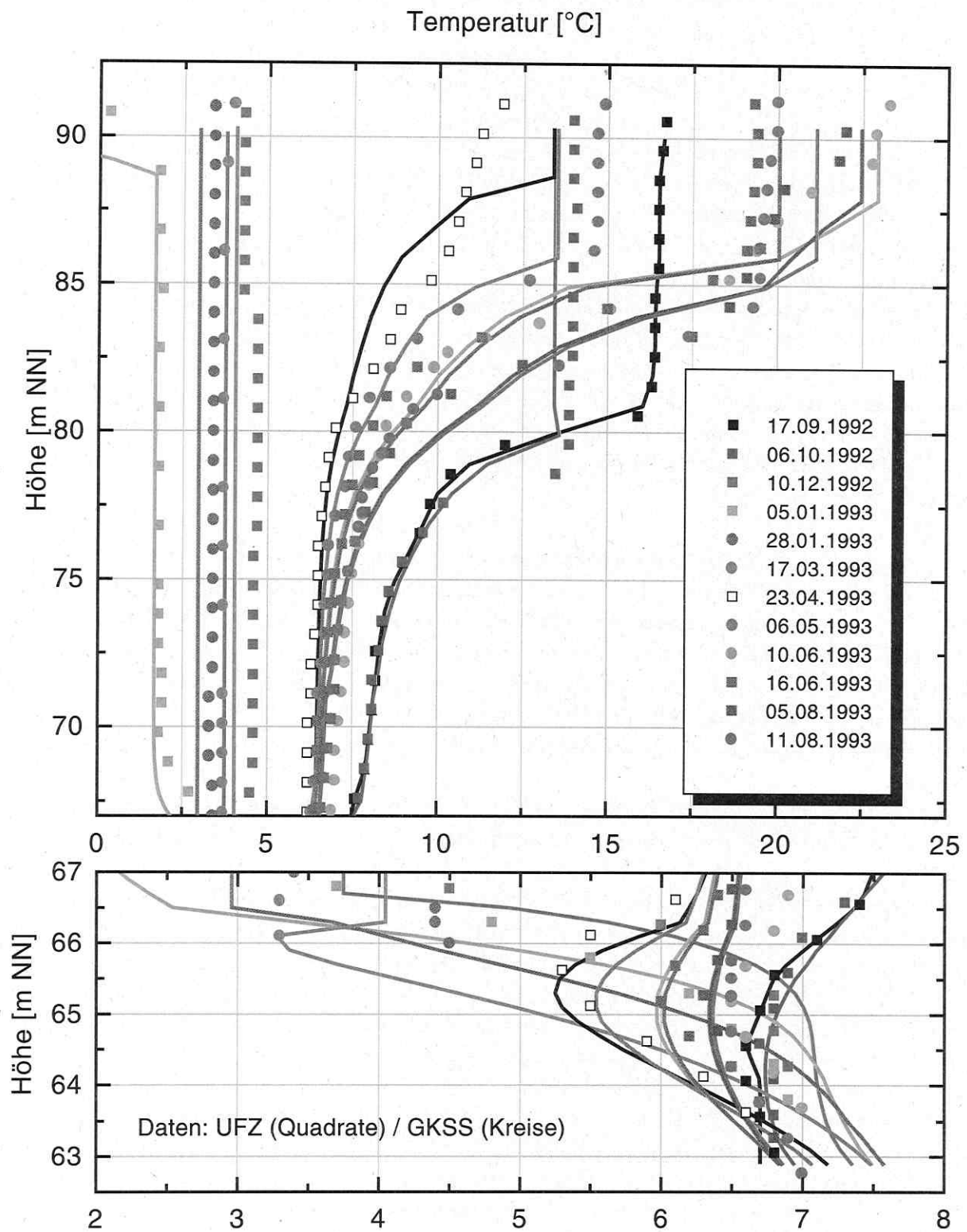


Abb. 6.20: Modellerte und beobachtete Temperaturprofile 1992/93

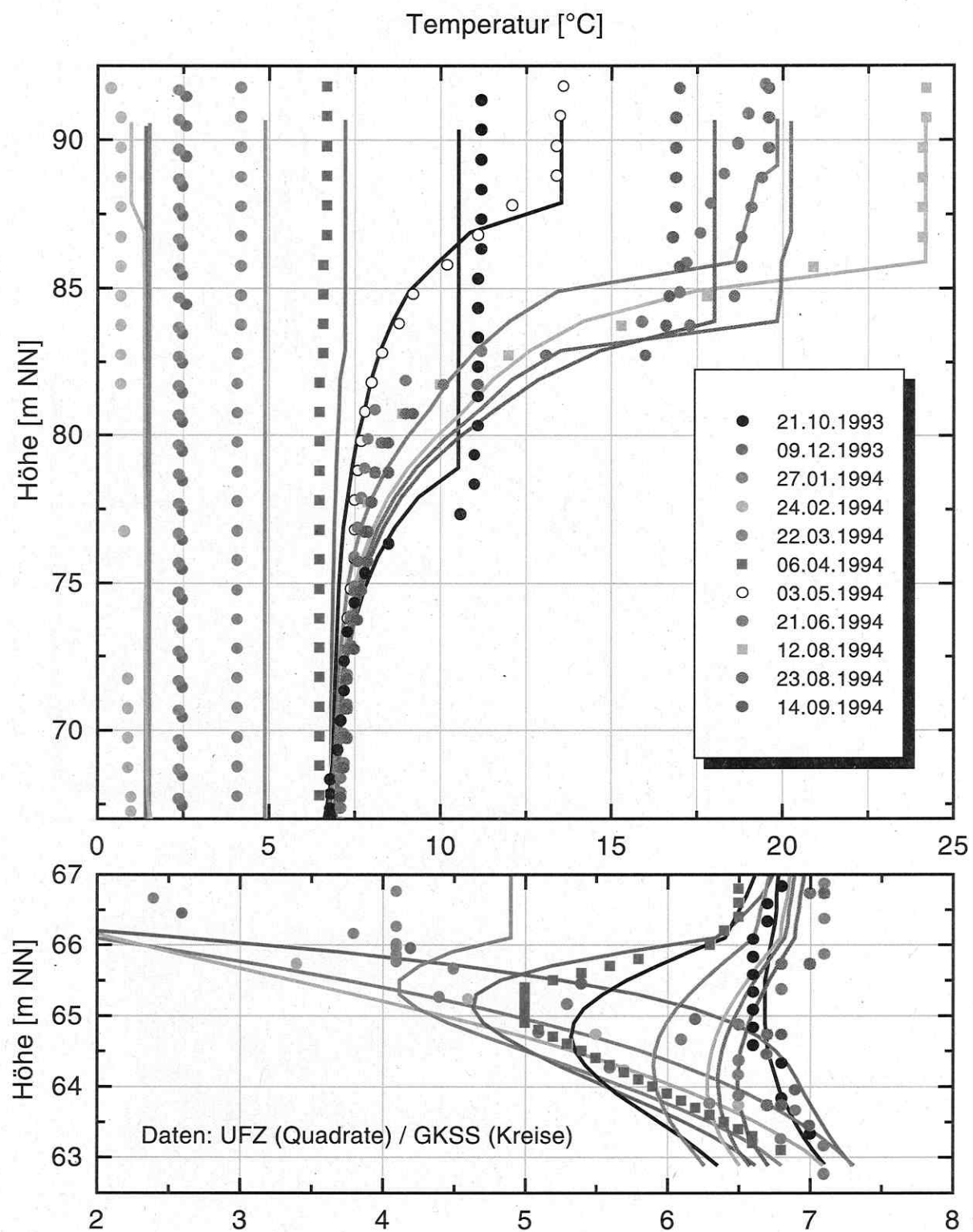


Abb. 6.21: Modellierte Temperaturprofile 1993/94

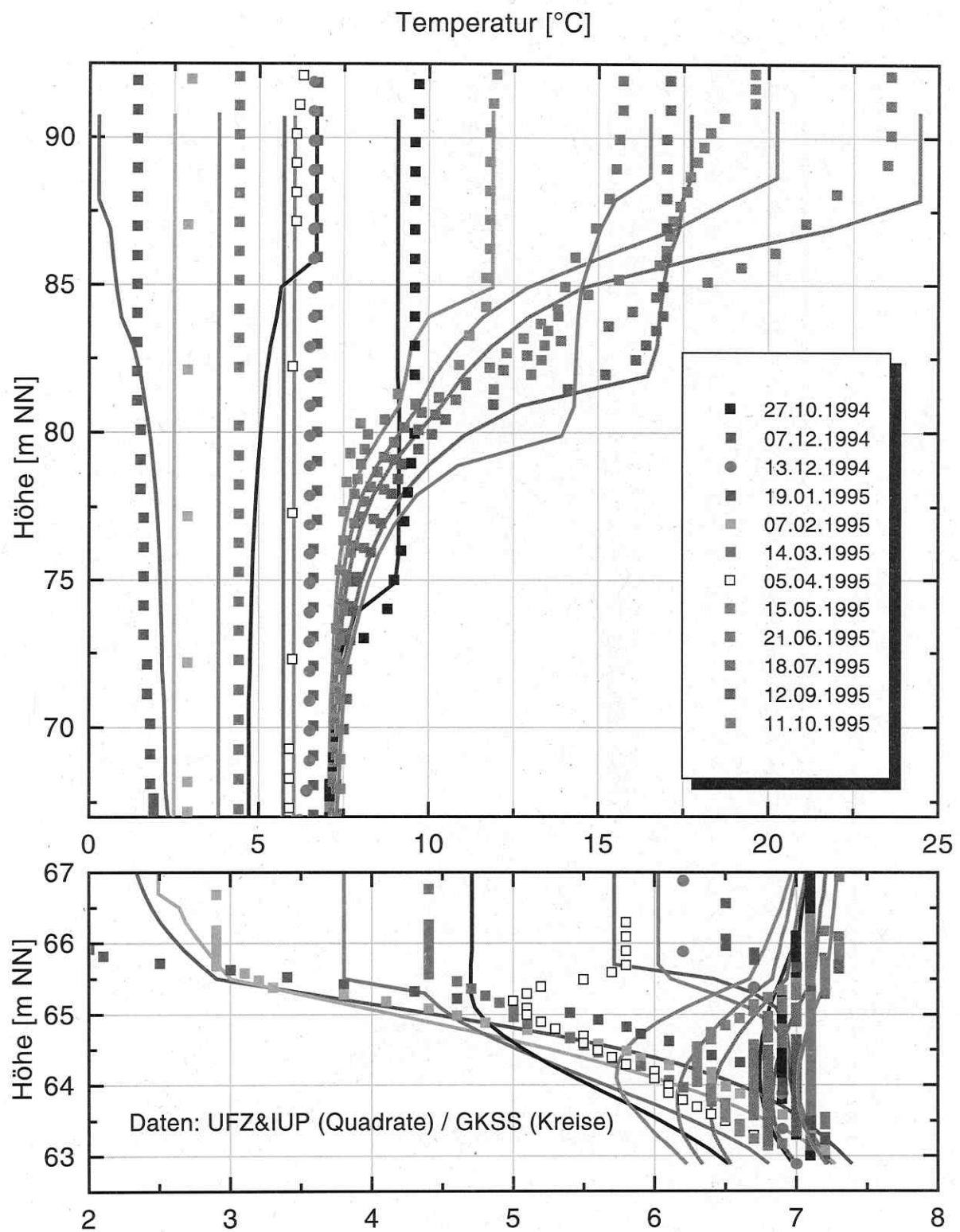


Abb. 6.22: Modellerte und beobachtete Temperaturprofile 1994/95

6.7 Vertikale Leitfähigkeitsverteilung

Die Leitfähigkeitsentwicklung im Mixolimnion kann ohne die Einbeziehung biologischer Prozesse nicht korrekt modelliert werden. Biologische Prozesse führen im See über Sommer zu einer Erniedrigung der Leitfähigkeit. Ohne sie treten im Epilimnion überhöhte Werte auf, die ein reiner Effekt der Verdunstungsanreicherung sind. Da biologische Prozesse in dem verwendeten physikalischen Modell nicht berücksichtigt werden, müssen sie durch wiederholte Anpassungen an die Beobachtungen ersetzt werden.

Die während der Volldurchmischung im Winter auftretenden Leitfähigkeitswerte im homogenisierten Mixolimnion können im Modellierungszeitraum auch ohne Biologie nachvollzogen werden, wenn der Grundwasserzufluß wie in Abschnitt 6.2.4 ausgeführt angesetzt und eine Zuflußleitfähigkeit von $2,6 \pm 0,3$ mS/cm angenommen wird. Der Niederschlag wird mit einer Leitfähigkeit von 0 mS/cm angenommen.

Der verwendete Wert für die Zuflußleitfähigkeit des Grundwassers darf aber aufgrund der Vernachlässigung der biologischen Prozesse im See nicht als eine Eingrenzung des tatsächlichen Leitfähigkeitswertes im Grundwasser verstanden werden. Es handelt sich lediglich um einen im Modell verwendeten Wert, der angesetzt wird, um die Leitfähigkeitsverteilung, die auch für die Dichteberechnung entscheidend ist, annähernd richtig wiederzugeben.

Die vom physikalischen Modell am Ende des Sommers zu hoch berechnete Leitfähigkeit im Epilimnion (reine Verdunstungsanreicherung) würde eine Dichtezunahme bewirken. Dies würde am Ende der Sommerstagnation bei der Abkühlung der oberen Wasserschichten zu einer übermäßigen konvektiven Thermoklinenabsenkung führen. Um dies zu vermeiden, werden während der sommerlichen Schichtungsphase die Leitfähigkeitswerte im Mixolimnion immer wieder auf die gemessenen Vergleichsprofile zurückgestellt. Konsequenz dieser notwendigen Hilfskonstruktion ist, daß keine allzu verlässliche Information über einen mittleren Leitfähigkeitswert des Zuflusses gewonnen werden kann.

Die Leitfähigkeitsentwicklung im tiefen Hypolimnion und im Monimolimnion wird hingegen nur wenig von der Biologie beeinflusst. Sie ist entscheidend für die Absenkung der Chemokline und sollte von der rein physikalischen Modellierung korrekt wiedergegeben werden. In den Abbildungen 6.23 bis 6.25 sind im Mixolimnion lediglich die gemessenen Vergleichsprofile eingezeichnet, ab dem tiefen Hypolimnion – daß nicht den Beobachtungen angeglichen wurde – aber auch die modellierten Profile.

Die Profile der Leitfähigkeit zeigen die Absenkung der Chemokline. Die Chemoklinenlage wird im Rahmen der Diskretisierung richtig wiedergegeben werden. Während der Sommerstagnation zeigt sich oberhalb der Chemokline eine diffusive Erhöhung der Leitfähigkeit in einem Tiefenbereich von etwa 66 - 73 m NN. Sie kann mit dem dort angesetzten mittleren turbulenten Diffusionskoeffizienten von $0,5 \cdot 10^{-6}$ m²/s gut nachvollzogen werden.

Die diffusive Verbreiterung der Chemokline im Sommer bewirkt eine Stabilisierung der Wassersäule in diesem Tiefenbereich. Die erhöhte Stabilität kann im Herbst bei einer Absenkung der Thermokline zunächst eine konvektive oder windinduzierte Erosion der Chemokline verhindern. Stärkere Windereignisse führen aber zu einer Absenkung und Schärfung der Chemokline.

Auch im Monimolimnion kann die Entwicklung mit den in Abschnitt 5.4.4 angesetzten Diffusionskoeffizienten gut wiedergegeben werden.

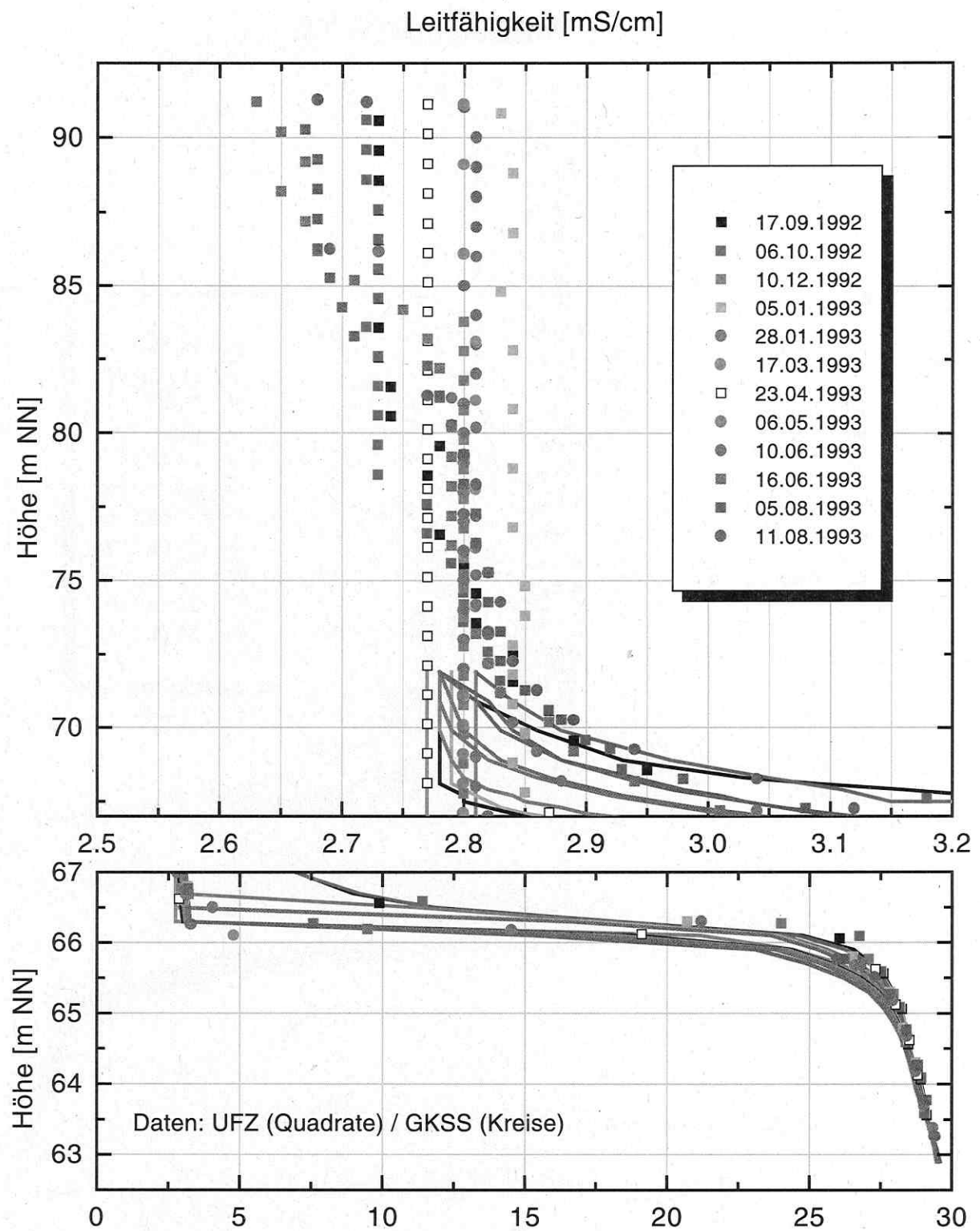


Abb. 6.23: Modellierte und beobachtete Leitfähigkeitsprofile 1992/93

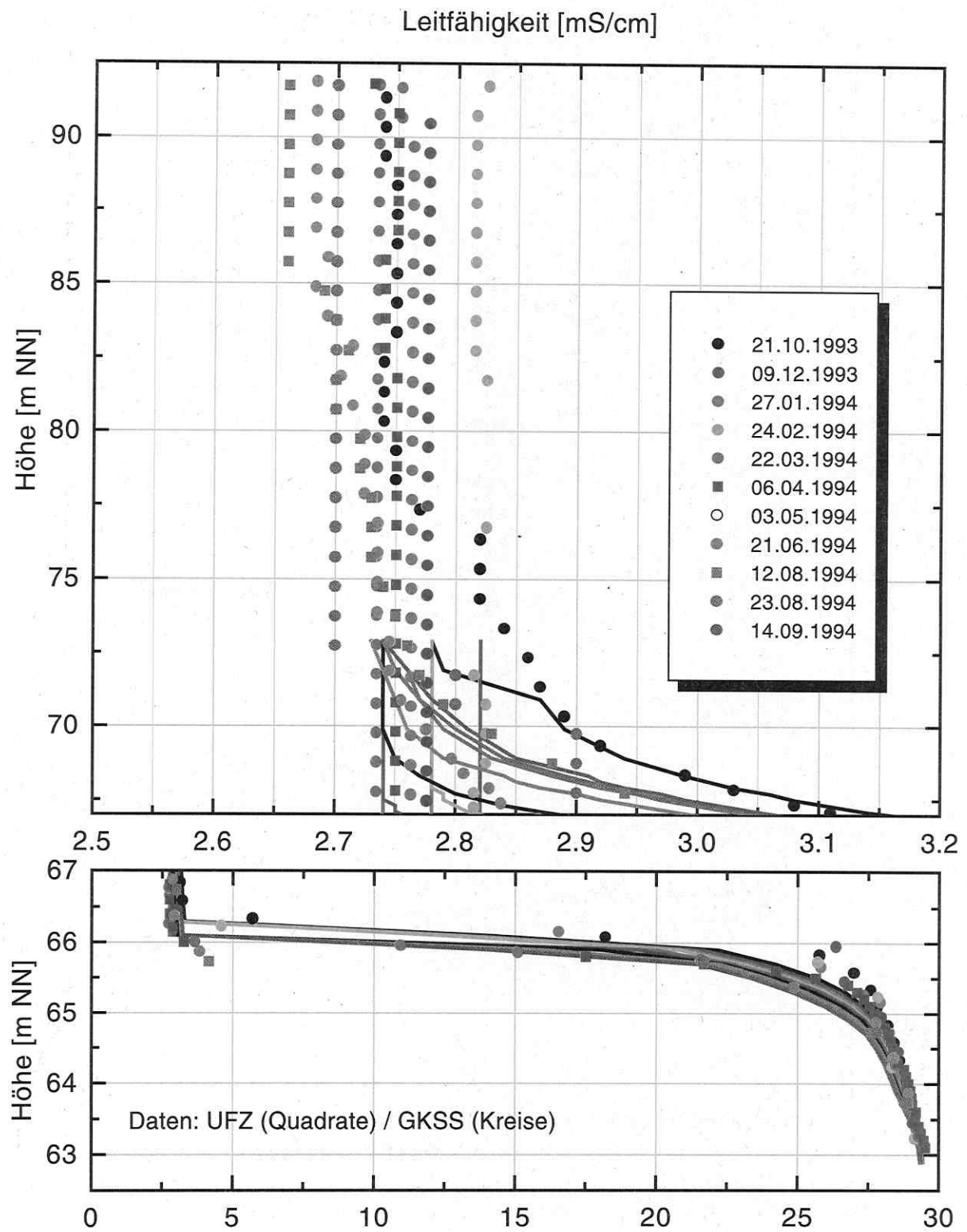


Abb. 6.24: Modellerte und beobachtete Leitfähigkeitprofile 1993/94

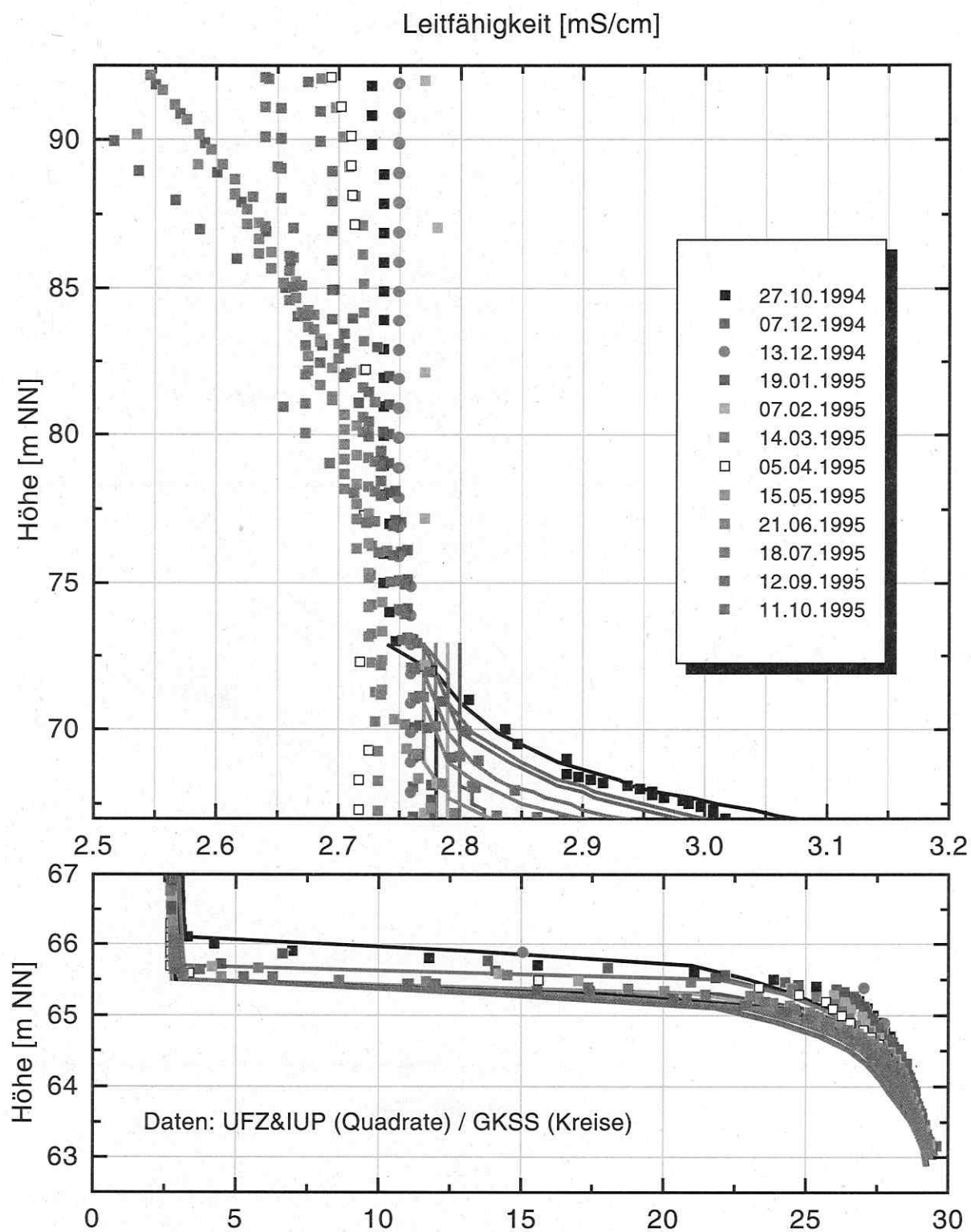


Abb. 6.25: Modellerte und beobachtete Leitfähigkeitsprofile 1994/95

6.8 Stabile Isotope

Die Isotopenfraktionierung durch Verdunstung, wie sie in Abschnitt 5.4.5 beschrieben wurde, führt zu einer Anreicherung der stabilen Isotope im Wasserkörper. Dieser Effekt lässt sich zur Bestimmung der Wasserbilanz eines Sees ausnutzen [Gat, 1995]. Die Isotopenvariation im See wird durch die Fraktionierung bei der Verdunstung, dem Isotopengehalt aller Zuflüsse inklusive des Regens und durch die Zu- bzw. Abflussmengen bestimmt. Dabei treten saisonale Unterschiede auf, die in dem sich veränderten Schichtungszustand des Sees im Jahreslauf, dem variierenden Isotopengehalt der Luftfeuchte, des Regens und der Zuflüsse und der jahreszeitlichen Abhängigkeit der Verdunstung von der Wasseroberfläche begründet liegen. Die Isotopenzusammensetzung des Seewassers ist stark von diesen Randbedingungen abhängig und kann daher als Werkzeug zur Bestimmung des Grundwasserzu- und abflusses benutzt werden, wenn die anderen Randbedingungen bekannt sind.

Abbildung 6.26 zeigt alle im See gemessenen Werte von δD aufgetragen gegen $\delta^{18}O$ im Vergleich zur Meteoric Water Line (MWL) bzw. zur Local Meteoric Water Line (LMWL).

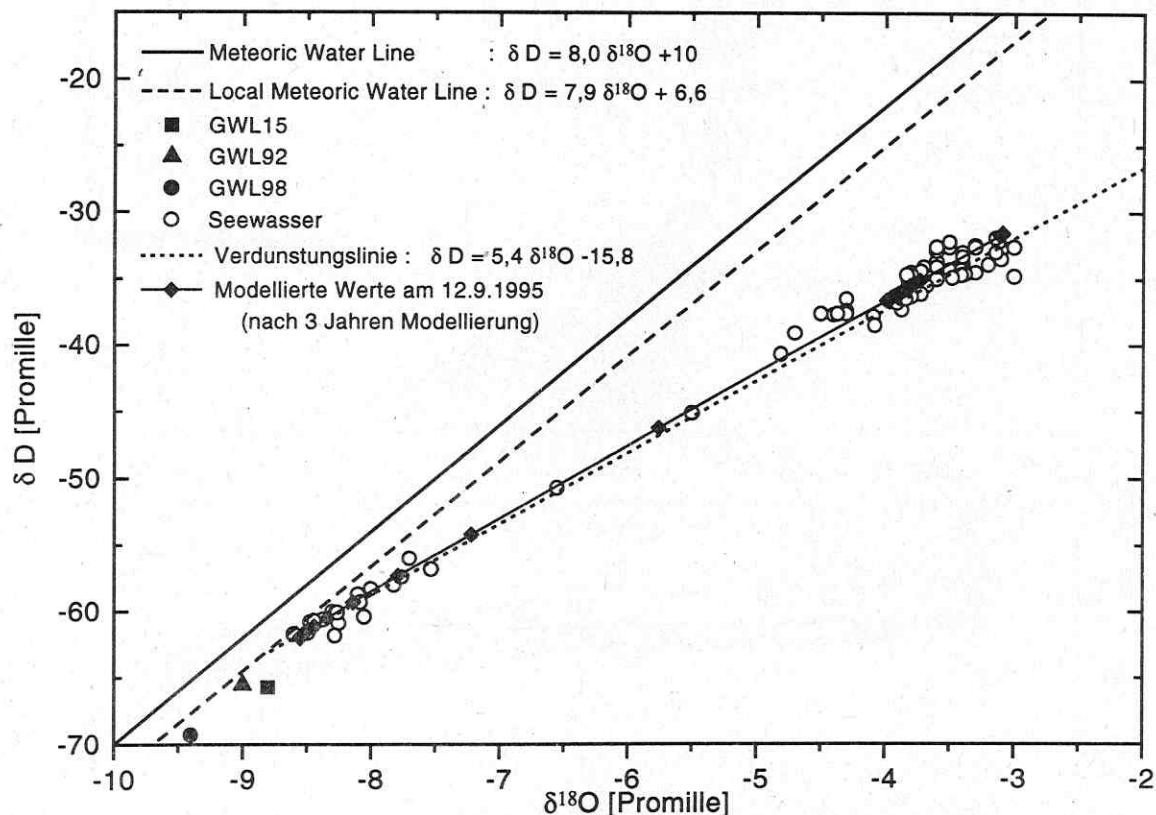


Abb. 6.26: Verdunstungslinie der stabilen Isotope im Vergleich zur MWL. Die Steigung der Verdunstungslinie ist durch die Verdunstungsfraktionierung geringer als die der MWL. Die Isotopengehalte der Grundwässer liegen nahe der Local Meteoric Water Line, welche auf der Datenbasis der Stationen Leipzig, Berlin, Braunschweig und Hof ermittelt wurde.

Die Steigung der MWL ist durch das Verhältnis der Gleichgewichtstrennfaktoren gegeben [Roedel, 1992] und variiert zwischen 7,54 und 8,64 für den Temperaturbereich zwischen 0 und 35 °C [Majoube, 1971].

Die im See gemessenen Isotopenwerte liegen ebenfalls auf einer Geraden, der Verdunstungslinie. Dabei sind die auf der Verdunstungslinie links unten gehäuften Werte dem Monimolimnion zuzuordnen. Das Isotopenverhältnis im Wasser des Monimolimnions wird nur durch Zumischung von Hypolimnionwasser mit einem anderen Isotopengehalt verändert. Aufgrund der langsamen Transportprozesse in der Chemokline sind die Isotopenverhältnisse im Monimolimnion gegenüber den Grundwässern noch wenig verändert. Die gehäuft am oberen Ende der Verdunstungslinie auftretenden Werte – also mit einem stark angereicherten Isotopenverhältnis – stammen aus dem Mixolimnion.

Die saisonalen Variationen bewirken einen Jahresgang der Isotopenwerte im See. Im Verlauf des Sommers erfolgt im Epilimnion eine Anreicherung, die im September und Oktober ihr Maximum erreicht und im Winter und Frühjahr wieder durch die Grundwasserbeimischung kompensiert wird. Die Steigung der Verdunstungslinie wird bestimmt durch jahreszeitliche Änderungen der relativen Luftfeuchte, des Isotopenverhältnisses der atmosphärischen Luftfeuchte und der Zuflüsse sowie durch Änderungen der Zufluss- und Verdunstungsmengen [Gat, 1995]. Für den Hufeisensee wurde eine Steigung der Verdunstungslinie von $\approx 5,4$ bestimmt.

Die Isotopenverhältnisse im Grundwasser liegen nahe der LMWL und sind niedriger als alle im See auftretenden Werte.

Im Abschnitt 6.2.4 wurde ein Wasserbilanzmodell beschrieben, das den Netto-Grundwasserzufluß bestimmt, also diejenige zufließende Grundwassermenge, die im See verbleibt und nicht wieder abfließt. Mit Hilfe der Isotopenbilanz soll nun unter Einbeziehung der in Kapitel 5.4.5 beschriebenen Isotopenfraktionierung bei der Verdunstung untersucht werden, ob der Brutto-Grundwasserzufluß größer als der Netto-Zufluß ist, d.h. ob es auch einen Grundwasserdurchfluß gibt. Im Modell ist der Grundwasserfluß so angesetzt, daß der Nettogrundwasserzufluß durch die anhand der Optimierung der Wasserbilanz bestimmten Parameter τ , Δz festgelegt ist. Durch eine Variation des Brutto-Grundwasserzuflusses (und damit des Abflusses, da $GW_{Brutto} = \text{Grundwasserabfluß} + GW_{Netto}$) wird demnach die durch den See fließende Grundwassermenge verändert.

Die Größe der Durchflußmenge beeinflusst die Isotopenbilanz, da die Kompensation der Evaporationsanreicherung um so stärker ausfällt, je größer der Durchfluß (d.h. die Spülung) durch isotopisch leichteres Grundwasser ausfällt.

Eine Optimierung der Isotopenbilanz erlaubt demnach die Bestimmung des Brutto-Grundwasserzuflusses.

Abbildung 6.27 zeigt die optimierten Ergebnisse der Modellierung. Das Isotopenverhältnis im Wasser des Grundwasserleiters 15 ist ebenfalls eingezeichnet. Die Optimierung führt zu den besten Ergebnissen, wenn der Bruttozufluß gleich dem Nettozufluß gesetzt wird, also kein Durch- bzw. Abfluß angenommen wird.

Die modellierten δ^{18} -Profile zeigen eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Profilen. Die jahreszeitlichen Unterschiede sind deutlich zu erkennen. Der Start erfolgt mit einem der thermischen Schichtungsphase entsprechenden Isotopenprofil. Das gut durchmischte Epilimnion wird über den Sommer aufgrund der hohen Verdunstung an schwe-

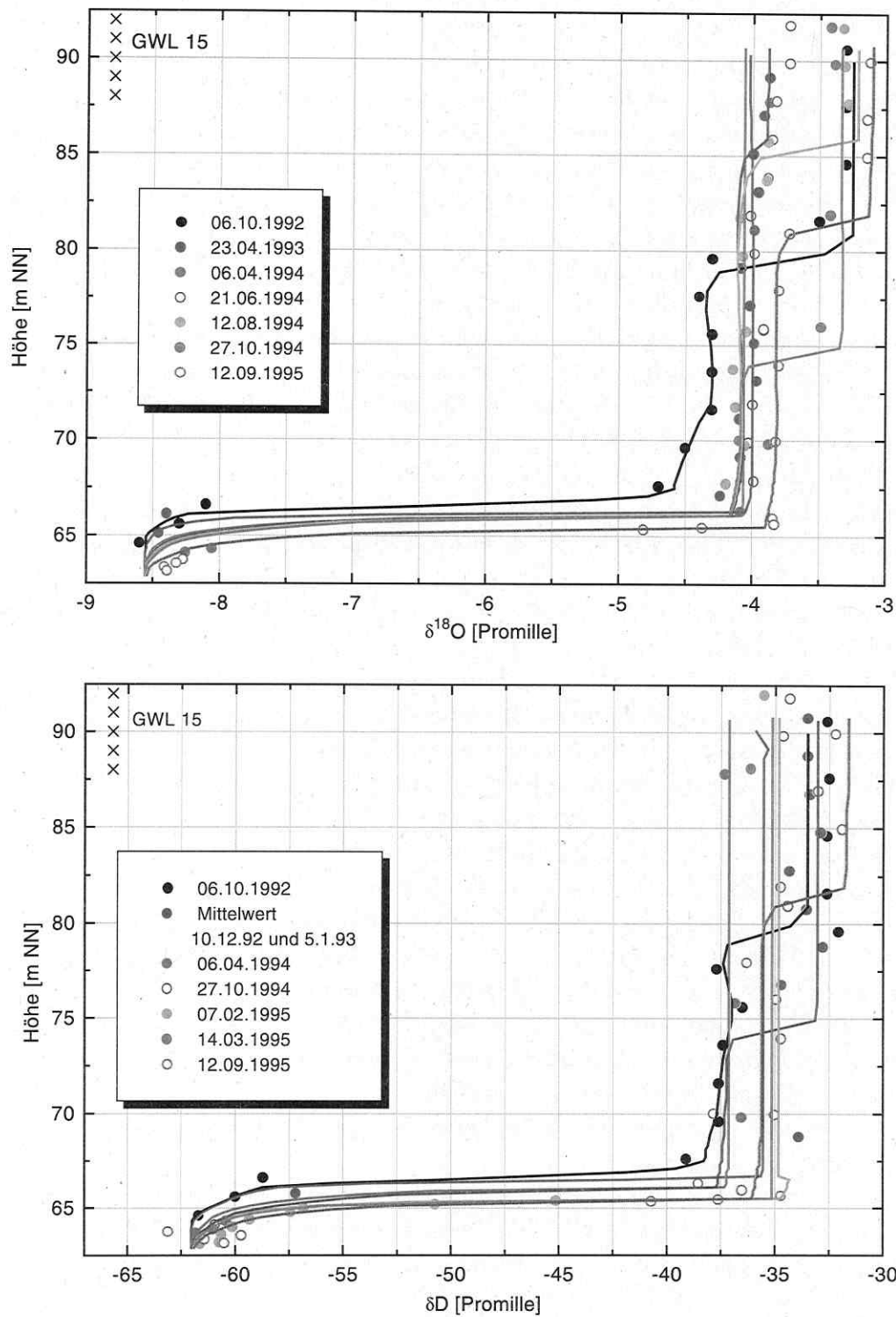


Abb. 6.27: Modellerte $\delta^{18}\text{O}$ - und δD -Profile im Vergleich zur Messung. Es zeigt sich die beste Übereinstimmung, wenn der See als reine Grundwassersenke, also ohne Abfluß angenommen wird.

ren Isotopen angereichert. Die Vollzirkulation im Winter führt zu einer Homogenisierung der Isotopenwerte im Mixolimnion. Nach drei Jahren Modellierungszeitraum kann diese Entwicklung immer noch sehr gut nachvollzogen werden, wie das modellierte Profil vom 12.9.1995 zeigt. Die unterschiedlichen Isotopenwerte im Mixolimnion und Monimolimnion lassen auch die Absenkung der Chemokline über die drei Jahre hinweg gut erkennen.

Die Deuteriumwerte zeigen ein ähnliches Verhalten, wobei die gemessenen Profile aber eine höhere Streuung aufweisen und damit den Vergleich mit der Modellierung erschweren. Daher wird ein Vergleich der im Epilimnion gemittelten Werten angestellt. Abbildung 6.28 zeigt die gemittelten gemessenen und modellierten Werte von $\delta^{18}\text{O}$ (oben) und δD (Mitte) im Epilimnion. An den Terminen mit besonders hohen Abweichungen der Modellierung gegen die Messung zeigt sich, daß die Standardabweichung des gebildeten Mittelwerts besonders groß ist und somit die Modellierung im Rahmen der Fehler noch mit der Messung übereinstimmt.

Weiterhin sind die relativen Abweichungen gegen die Messung dargestellt. An ihnen läßt

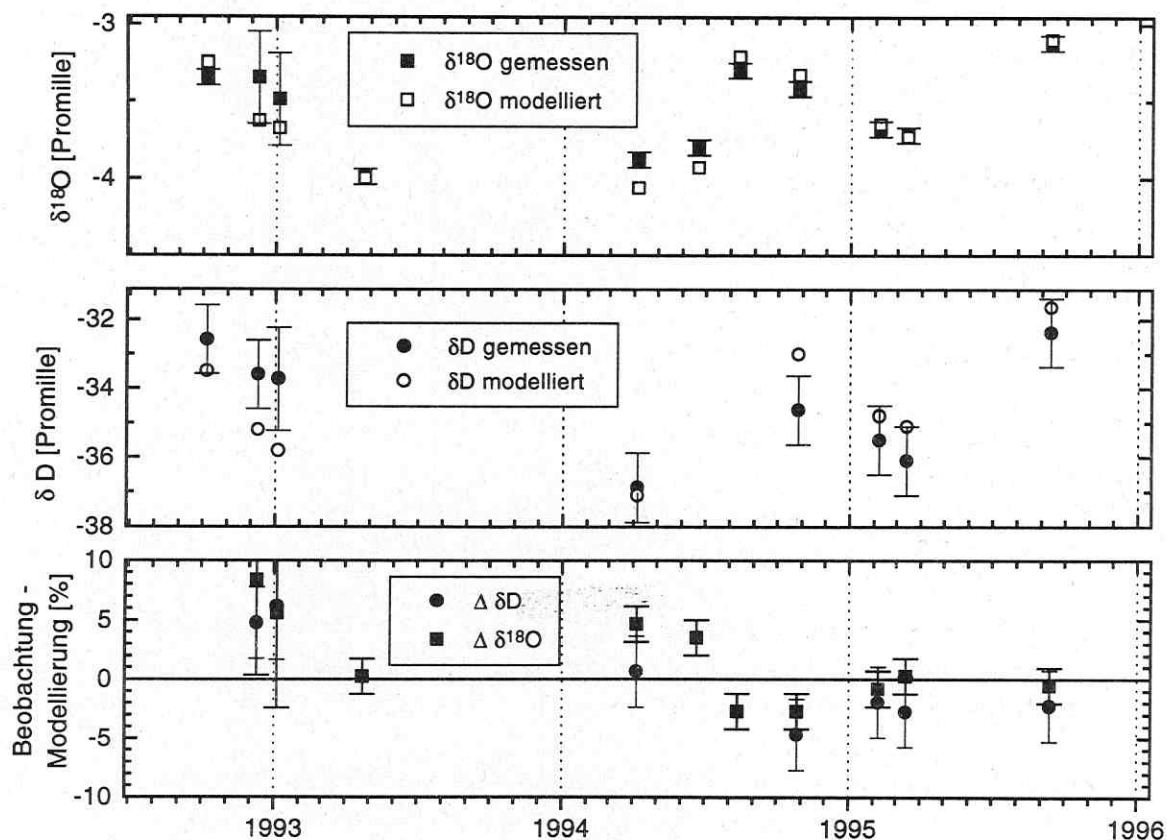


Abb. 6.28: Gemittelte gemessene und modellierte Werte der stabilen Isotope im Epilimnion. Vor Mitte 1994 ergeben sich eher zu niedrige Isotopenverhältnisse, danach eine zu hohe Anreicherung.

sich die Optimierung des Brutto-Grundwasserzuflusses zeigen. Vor dem Jahr 1994 sind die Abweichungen der Beobachtung gegen die Modellierung sowohl positiv als auch negativ, wobei die $\delta^{18}\text{O}$ - wie auch die δD -Werte eher zu niedrig berechnet werden. In diesem Zeitabschnitt überwiegt also die Auswirkung des Grundwasserzuflusses diejenige der Evaporation. Ab der zweiten Hälfte des Jahres 1994 liegen die relativen Abweichungen der Messung gegen die Modellierung im negativen Bereich. Die Modellwerte zeigen eine zu starke Anreicherung, also einen zu starken Einfluß der Evaporation. Dem könnte durch einen höheren Grundwasser-Durchfluß begegnet werden, was aber wiederum im Zeitraum vor Mitte 1994 größere Abweichungen gegenüber den Messungen erzielen würde. Die Isotopenbilanz reagiert empfindlich auf einen höheren Durchflußwert. Schon ein Brutto-Grundwasserzufluß, der 10% größer als der Nettozufluß ist und damit einen Abfluß von etwa $150\text{m}^3/\text{Tag}$ bedingt, führt zu einer insgesamt größeren Abweichung von den beobachteten Werten. Es ist demnach mit den Beobachtungen verträglich, den Brutto- gleich dem Nettogrundwasserzufluß anzusetzen und den See somit als reine Grundwassersenke anzunehmen.

Die Einbeziehung einer Isotopenbilanz in das Seemodell erlaubt also eine Präzisierung der von Christoph [1995] errechneten Zuflußwerte. Das in Kapitel 6.2.4 dargestellte Wasserbilanzmodell liefert zunächst einen ähnlichen mittleren Nettogrundwasserzuflußwert ($1400 - 1850 \text{ m}^3/\text{d}$) wie der von Christoph [1995] ermittelte ($1490 \text{ m}^3/\text{d}$). Erst der zusätzliche Informationsgewinn aus der Isotopenbilanz läßt aber die Aussage zu, daß der Nettozufluß gleich dem Bruttozufluß ist und somit kein Grundwasserabfluß stattfindet.

Die vom Modell errechneten Isotopenwerte führen zu einer Verdunstungslinie, die sehr gut mit der gemessenen übereinstimmt. In Abbildung 6.26 ist exemplarisch die durch das Profil vom 12.9.1995 (nach 3 Jahren Modellierungszeitraum) gegebene Verdunstungslinie eingezeichnet.

6.9 Tritium

Abbildung 6.29 zeigt die vertikale Tritiumverteilung im See. Es ist der in Abschnitt 2.6 angesprochene Unterschied zwischen den Tritiumgehalten des Wassers im Monimolimnion und im Mixolimnion zu erkennen. Das Monimolimnionwasser weist entsprechend seines angenommenen Bildungszeitraumes und der Herkunft der Wässer einen niedrigen Tritiumgehalt von im Mittel etwa 4,5 TU auf. Das Mixolimnion besitzt einen Tritiumwert von etwa 20 TU. Dieser scheint ein Mischwert aus dem Tritiumgehalt des Grundwasserleiters 15 von ≈ 35 TU und dem Tritiumgehalt des Regens zu sein, der seit 1992 im Mittel etwa bei 13 - 15 TU mit einem saisonal bedingten Schwankungsbereich von 10 - 20 TU liegt [IUP, 1997].

Es ist auffällig, daß die gemessenen Profile eine unsystematische Streuung der Meßwerte aufweisen. Beispielsweise zeigt das Profil vom 6.4.1994 einen Wertebereich von 18 - 23 TU, obwohl die Wassersäule des Mixolimnions noch voll durchmischt ist (vergleiche auch das Temperaturprofil dieses Datums, Abbildung 6.21). Ebenso streut das Profil vom 27.10.1994, also am Ende der Sommerstagnation, in einem Wertebereich von 16 - 23 TU im Mixolimnion. Die Streuung ist in keiner Weise mit dem Schichtungszustand korreliert. Die Modellierung erfolgt mit einem Startprofil, das einen mittleren Wert im Mixolim-

nion repräsentiert. Die Startwerte im Monimolimnion sind nur aus späteren Meßwerten extrapoliert. Die Ergebnisse der Modellierung zeigen, daß ein Tritiumgehalt des Grundwasserleiters 15 von 35 TU mit den Messungen im See verträglich ist. Weitere Schlußfolgerungen, etwa über die Größe des Grundwasserzu- bzw. abstroms sind aufgrund der großen Schwankungsbreite der Meßwerte nicht möglich.

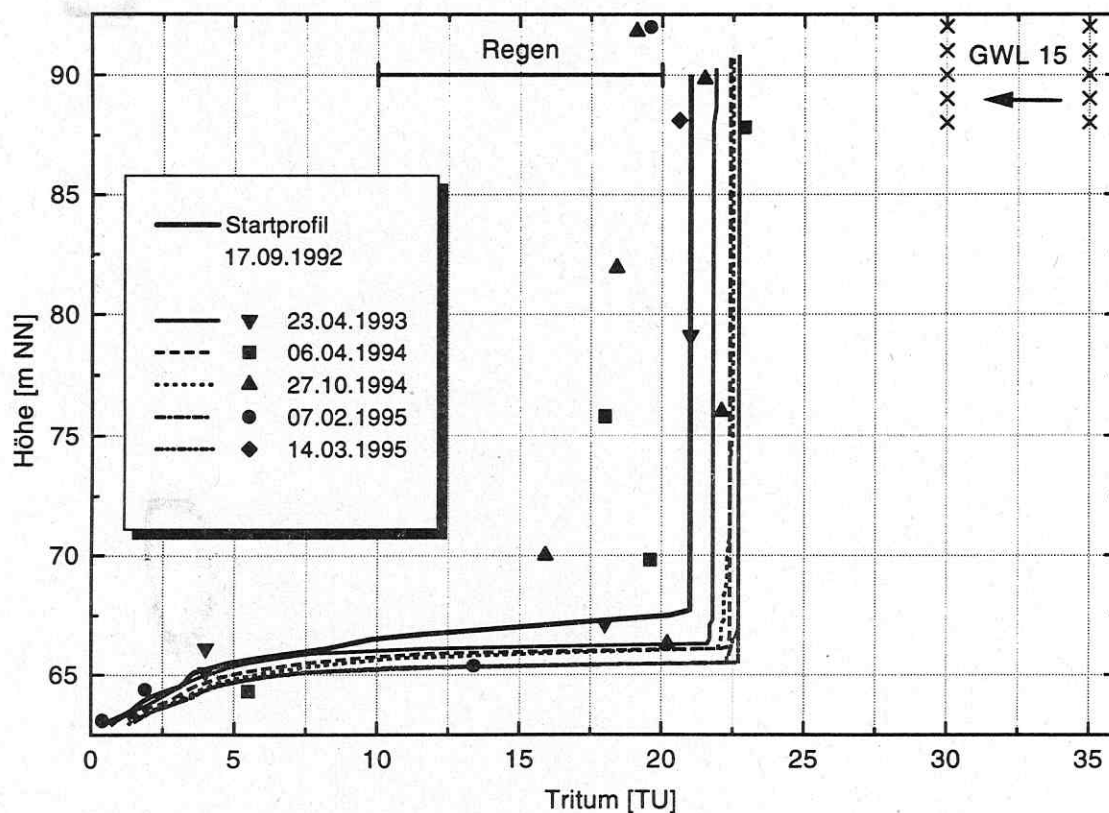


Abb. 6.29: Tritiumverteilung im See. Die gemessenen Profile zeigen eine starke Streuung der Meßwerte. Ein Vergleich mit der Modellierung läßt allenfalls die Aussage zu, daß der angesetzte Tritiumgehalt des Grundwassers von 35 TU mit den Beobachtungen verträglich ist. Weitere Schlußfolgerungen sind nicht möglich.

Kapitel 7

Simulation der SF₆-Ausbreitung im Monimolimnion

Der Transport im See kann durch diffusive und advective Prozesse erfolgen. Für das Monimolimnion des Hufeisensees wurden bei der im vorigen Kapitel beschriebenen Modellierung rein diffusive Prozesse angenommen. In diesem Kapitel soll nun die Auswirkung vertikaler advectiver Prozesse auf die SF₆-Verteilung untersucht werden. Ein advectiver Transport ist durch vertikale Ausgleichsströmungen bei der Einschichtung von Zuflüssen oder durch Abflüsse möglich. In diesem Abschnitt wird zunächst versucht, die SF₆-Verteilung im Monimolimnion mit rein diffusiven Prozessen mittels einer Modellierung mit den in Abschnitt 4.3 ermittelten Diffusionskoeffizienten nachzuvollziehen (siehe auch Abschnitt 5.4.4). Die Annahme von SF₆-freien Zu- bzw. Abflüssen in unterschiedlichen Höhen und mit verschiedenen Schüttungsraten bzw. Abflußmengen soll daraufhin die Auswirkung auf die SF₆-Verteilung aufzeigen und die Abschätzung einer maximalen Zu- bzw. Abflußmenge ermöglichen. Die Annahme eines SF₆-freien Zuflusses ist gerechtfertigt, da eintretendes Grundwasser maximal die Hintergrundkonzentration von 0 - 2 fmol/l aufweist, welche gegenüber den erzeugten Konzentrationen im Monimolimnion vernachlässigbar ist.

Die Abschätzung des Effekts einer horizontalen Spülung des Monimolimnions mit Grundwasser wurde bereits in Kapitel 4.3.5 versucht, wobei dort indirekt über die Auswirkung einer Spülung auf die ermittelten Diffusionskoeffizienten vorgegangen wurde. Mit der Einführung eines Zu- bzw. Abflusses im Monimolimnion in LIMNMOD läßt sich direkt die Auswirkung auf die SF₆-Verteilung zeigen.

7.1 Modellierung der SF₆-Ausbreitung

Für die Modellierung der SF₆-Ausbreitung wurde der Zeitraum vom 5.4.1995 - 1.10.1996 gewählt. Abbildung 7.1 zeigt das gemessene Startprofil vom 5.4.1995 sowie ein Profil nach etwa einem halben Jahr (12.10.1995) und nach 1½ Jahren. Die gemessene Chemoklinenlage (über die Leitfähigkeit von 16 mS/cm definiert) ist als Balken eingezeichnet. Zudem sind die Ergebnisse der Modellierung mit reiner Diffusion dargestellt. Zunächst soll auf die Modellierung ohne Zufluß eingegangen werden.

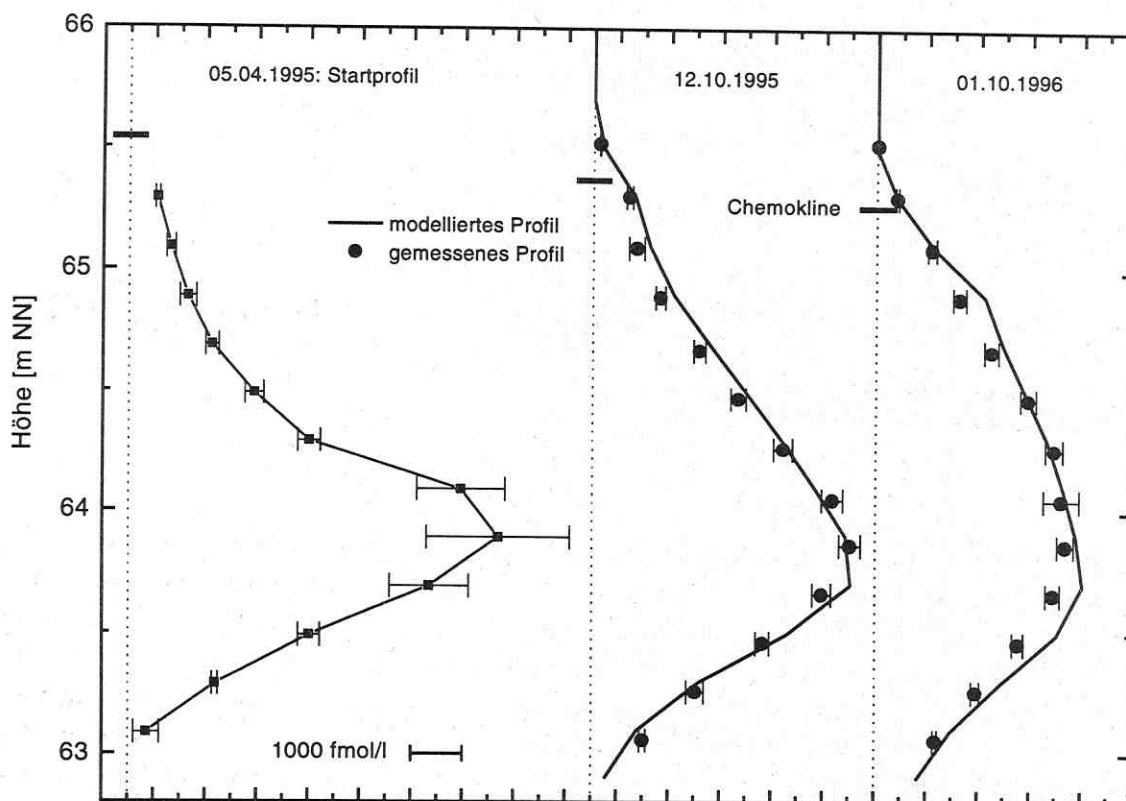


Abb. 7.1: Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion. Das Profil vom 12.10.1995 wird durch die Modellierung mit einem Startprofil vom 5.4.1995 gut wiedergegeben. Die Entwicklung bis zum 1.10.1996 kann nicht optimal nachvollzogen werden.

Die Beschränkung des Modellierungszeitraumes auf den Zeitabschnitt vom 5.4.1995 bis zum 1.10.1996 statt der Modellierung des gesamten Zeitraumes vom Einbringen am 27.10.1994 bis zum letzten aufgenommenen Profil am 1.10.1996 hat folgende Gründe:

- die SF_6 -Verteilung kurz nach dem Einbringen am 27.10.1994 ist nur unzureichend bekannt. Allenfalls ließe sich ein Startprofil durch Verteilung der gesamten eingebrachten SF_6 -Menge in die 20cm-Schicht in der Höhe des Peak-Maximums bei 63,9m NN generieren. Da die Modellierung aber stark vom Anfangsprofil abhängig ist, wird von einem solchen Vorgehen abgesehen.
- die weiteren als Startprofile in Frage kommenden Profile vom 7.12.1994 und 19.1.1995 (Abbildung 3.10) weisen eine zu geringe Tiefenauflösung auf. Zudem muß davon ausgegangen werden, daß diese Profile durch unzureichende horizontale Homogenisierung der SF_6 -Verteilung nicht repräsentativ für das gesamte Monimolimnion sind (vergleiche auch Abschnitt 3.5.2).
- wird das Profil vom 7.2.1995 als Startprofil gewählt, so läßt sich insbesondere die

Entwicklung der oberen Flanke des Peaks nur sehr unbefriedigend nachvollziehen. Offenbar wurde die Ausbreitung der SF₆-Verteilung im Zeitraum vom 7.2.-5.4.1995 durch einzelne Mischungsereignisse bestimmt (siehe auch Abbildung 3.10 im Abschnitt 3.5.2). Diese lassen sich durch den im Programm verwendeten zeitlich gemittelten Diffusionskoeffizienten nur schlecht beschreiben. Das Profil vom 7.2.1995 ist daher nicht als Startprofil verwendbar.

Die Wahl des Profils vom 5.4.1995 als Startprofil erlaubt einen Vergleich der gemessenen mit den modellierten Profilen für einen Zeitraum von $1\frac{1}{2}$ Jahren. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind in Abbildung 7.1 nur die Profile zu Ende der Sommerstagnation am 12.10.1995 und am 1.10.1996 als Vergleichsprofile eingezeichnet. Das modellierte Profil vom 12.10.1995 (durchgezogene Linie), also ein halbes Jahr nach Modellstart, zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem gemessenen Profil. Die besten Ergebnisse werden erzielt, wenn gemäß dem in Abschnitt 5.4.4 beschriebenen Ansatz für die vertikalen Diffusionskoeffizienten im Tiefenbereich zwischen den durch die Leitfähigkeitswerte von 4 mS/cm und 27 mS/cm Tiefen ein Diffusionskoeffizient von $4,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ und unterhalb dieser Tiefe $6,5 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ verwendet wird. In den 6 untersten Modellschichten werden die gemessenen Diffusionskoeffizienten eingesetzt. In der Chemokline wird ein Wert von $0,45 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ angesetzt, der im Bereich der Fehler mit den in Kapitel 3.5.6 erstellten Abschätzung übereinstimmt. Damit läßt sich der beobachtete Aufstau von SF₆ (zweite Meßtiefe) unterhalb der Chemokline nachvollziehen. Die Abweichungen liegen dann bei fast allen Meßpunkten im Bereich der Fehlerbalken, deren Höhe den Tiefenfehler wiedergibt.

Das gemessene Profil vom 1.10.1996, also $1\frac{1}{2}$ Jahre nach Modellstart, kann mit dem im Modell verwendeten zeitlich mittleren Diffusionskoeffizienten nicht optimal nachvollzogen werden. In der untersten Tiefe und knapp oberhalb des Maximums sowie in den drei obersten Meßtiefen stimmen die berechneten Konzentrationen mit den gemessenen weitgehend überein. Unterhalb der Chemokline ist eine Erhöhung der SF₆-Konzentrationen gegenüber den beobachteten festzustellen. Offenbar ist der im Bereich der Chemokline verwendete Diffusionskoeffizient für den Sommer 1996 zu gering und bildet eine Diffusionssperre.

Im Bereich des Maximums werden um bis zu 15% (500fmol/l) zu hohe Konzentrationen errechnet. Das Maximum liegt zudem zu tief.

Eine Erklärung kann wiederum in der Verwendung des zeitlich gemittelten Diffusionskoeffizienten gesucht werden. Der Ansatz für die turbulenten Diffusionskoeffizienten beruht auf den aus der Entwicklung der Leitfähigkeits- und SF₆-Profilen ermittelten Diffusionskoeffizienten. Die Diffusionskoeffizienten, wie sie aus der Leitfähigkeitsentwicklung berechnet wurden, basieren auf einem Zeitraum vom 7.12.1994 bis zum 1.12.1995. Sie liefern wie oben beschrieben für den Modellierungszeitraum vom 5.4. - 12.10.1995 für die SF₆-Verteilung gute Ergebnisse. Die aus der SF₆-Verteilung, basierend auf dem Zeitraum vom 15.5.1995 - 1.10.1996, ermittelten Diffusionskoeffizienten liegen, wie in Kapitel 4.3.4 beschrieben, in der gleichen Größenordnung wie die aus der Leitfähigkeitsentwicklung berechneten. Dieser Zeitraum schließt aber eine dreimonatige Phase der Eisbedeckung mit ein, die das Mittel der Diffusionskoeffizienten erniedrigt, da während der Eisbedeckung eine abgesenkte turbulente Diffusion zu erwarten ist. Die tatsächlichen im Monimolimnion auftretenden Diffusionskoeffizienten können demnach zumindestens abschnittsweise, beispielsweise im

Winter 95/96, höher sein als die im Programm verwendeten. Dies kann in dem im Modell verwendeten Diffusionsansatz für das Monimolimnion nicht berücksichtigt werden. Ein mit äußeren Einflüssen wie Windenergieeintrag und mit der Tiefe parametrisierter Diffusionsansatz, wie er für das Hypolimnion verwendet wird, könnte bessere Ergebnisse erzielen, liegt aber nicht vor.

Für die weiteren Simulationen ist jedoch die erzielte Übereinstimmung des modellierten mit dem gemessenen Profil ausreichend, da auch das Verhalten der Flanken und die Tiefenlage des Maximums des SF_6 -Peaks bei Einführung eines Zu- bzw. Abflusses signifikante Änderungen erfährt.

Im folgenden soll zunächst die Auswirkung eines SF_6 -freien Zuflusses einmal unterhalb und einmal oberhalb des Konzentrationsmaximums und sodann die Auswirkung eines Abflusses in den gleichen Tiefen betrachtet werden.

7.2 Numerische Fehler

Bei der Einbeziehung advektiver Prozesse in die Modellierung tritt bei der verwendeten expliziten Differenzenmethode eine Verfälschung der Lösung durch eine künstlich erzeugte numerische Diffusion auf. Das kommt wie folgt zustande:

Ein Zu- oder Abfluß bewirkt im Modell eine vertikale Ausgleichsströmung. Beispielsweise verursacht ein Zufluß am Boden eine Vertikalströmung nach oben. Es wird also während eines Zeitschrittes Wasser einer bestimmten Konzentration, hier von SF_6 , von einer Schicht in die darüberliegende transportiert. Vor der Ausführung des nächsten Zeitschrittes wird das hinzugekommene Wasser dieser Konzentration mit dem Volumen der ganzen Box vermischt. Dies bedeutet, daß in dem Beispiel der Modellierung der SF_6 -Ausbreitung im Monimolimnion die Konzentration in einem Zeitschritt über die gesamte Höhe der Schicht von 20cm verändert wird. Tatsächlich würde aber nur eine Verschiebung um wenige Millimeter bis Zentimeter während eines solchen Zeitintervalls erfolgen. Die Advektion führt also durch die Diskretisierung zu einer schnelleren Änderung der Konzentration in einem größeren Tiefenbereich und damit zu einer künstlichen, nicht erwünschten Verbreiterung. Für die im folgenden verwendeten Zuflussmengen bzw. Entnahmeraten ist dieser Effekt in Abbildung 7.2 dargestellt. Dazu wurde für die Simulation eines Abflusses bzw. eines Zuflusses nur die Advektion, aber keine Diffusion zugelassen. Sodann wurde das resultierende Profil auf das Startprofil zurückverschoben.

Die Seegeometrie hat bei der Advektion ebenfalls einen Einfluß auf das Profil. Wird die Seeform durch einen Kegelstumpf angenähert, so bewirkt eine Verschiebung des Peaks nach oben eine Stauchung, eine Verschiebung nach unten aber eine Streckung. Die Maximumskonzentration sollte aber bei einer reinen Advektion die gleiche bleiben.

Die zurückverschobenen Profile zeigen sowohl den Effekt der numerischen Diffusion als auch der Verschiebung (Abbildung 7.2). Das nach unten advektierte Profil weist eine Verbreiterung, das nach oben advektierte Profil eine Verringerung der Peakbreite auf. Dieses Verhalten ist bei einem Zu- bzw. Abfluß von $3 \text{ m}^3/\text{Tag}$ deutlicher zu sehen als bei $0,6 \text{ m}^3/\text{Tag}$. Die durch Verschiebung und durch numerische, künstliche Fehler erzeug-

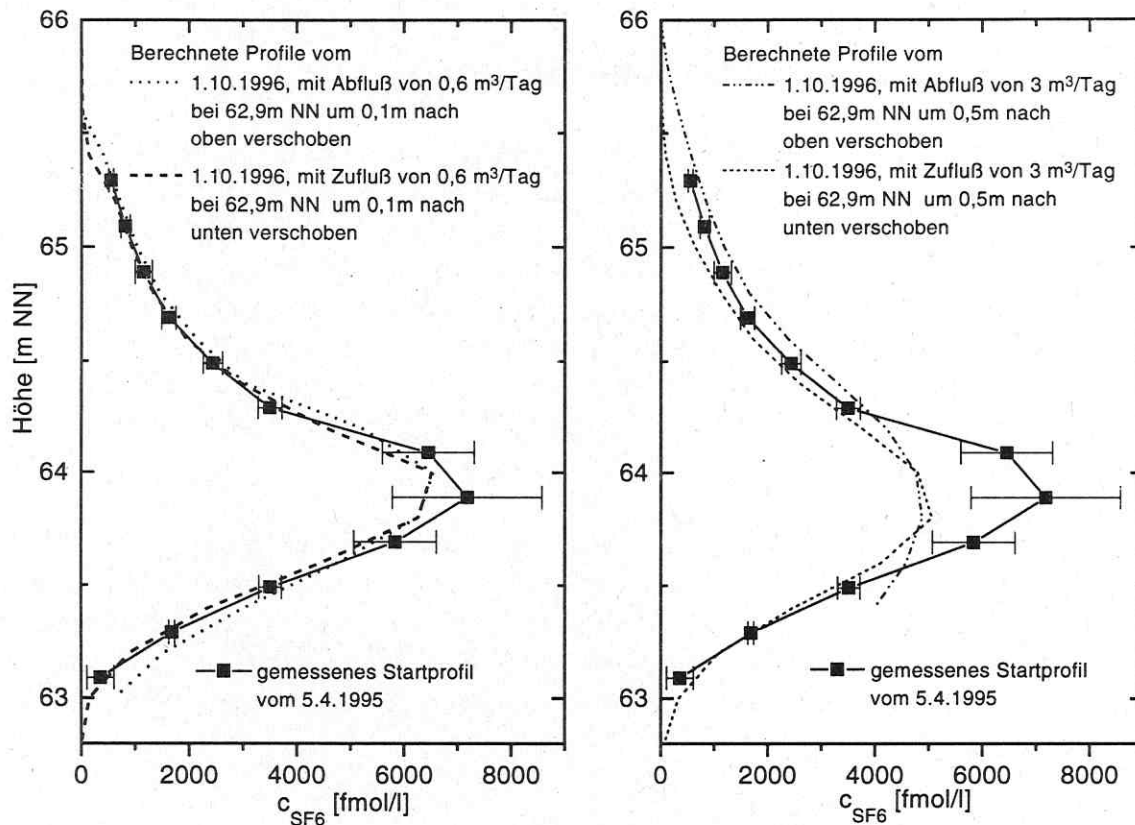


Abb. 7.2: Numerische Fehler bei der Modellierung mit Advektion. Es tritt eine Veränderung der Peakbreite und des Konzentrationswertes im Maximum des Peaks auf.

ten Veränderungen der Peakbreite lassen sich aber nicht trennen. Beide Profile zeigen aber eine Abnahme der Konzentration im Maximum, die auf die numerische Verfälschung zurückzuführen ist. Wiederum ist die Konzentrationsverminderung bei einer zu- bzw. abfließenden Wassermenge von 3 m³/Tag stärker als bei 0,6 m³. Bei einem Zufluß von 3 m³/Tag ist aber die Verschiebung des Peaks bereits so groß, daß – wie sich im folgenden zeigen wird – trotz der numerischen Fehler die Simulation eine Aussage über die Möglichkeit eines solchen Zuflusses zuläßt.

Aussagen aus der Breite des Peaks und dem Wert des Konzentrationsmaximums müssen aber mit Vorsicht behandelt werden.

7.3 Zuflußsimulationen

Bei der Annahme eines Zuflusses wird davon ausgegangen, daß sich das zufließende Wasser entsprechend seiner Dichte auf eine feste Tiefe einschichtet. Dies ist beispielsweise möglich, wenn Wasser hoher Leitfähigkeit und damit hohen Salzgehaltes und hoher Dichte in den See – eventuell auch oberhalb der Chemokline – eintritt und entsprechend seiner

Dichte entlang des Sediments nach unten fließt. Dabei würde bereits eine Mischung mit dem Seewasser auftreten und somit eine Einschichtung mit der entstehenden Mischdichte stattfinden. Ebenso kann sich aufsteigendes salines Grundwasser seiner Eintrittstiefe und -dichte entsprechend einschichten. Die Einschichtungstiefe kann also im gesamten Tiefenbereich des Monimolimnions liegen.

Es werden exemplarisch zwei Fälle untersucht, einmal die Einschichtung in die unterste Modellschicht bei 62,9m NN, zum anderen in einer Tiefe von 64,3m NN, also oberhalb des SF_6 -Konzentrationsmaximums. Im Modell wird dazu die Einschichtungstiefe fest vorgegeben und dem zufließenden Wasser die Temperatur und Leitfähigkeit des Seewassers dieser Tiefe zugewiesen. Das zufließende Wasser und das Seewasser besitzen damit auf jeden Fall die gleiche Dichte. Der Zufluß bewirkt eine vertikale Ausgleichsströmung nach oben. Der Zufluß wird als SF_6 -frei angenommen, da wie oben beschrieben die SF_6 -Hintergrundkonzentration von Grundwasser gering gegenüber den erzeugten Konzentrationen im Monimolimnion ist.

Zufluß bei 62,9m NN Abbildung 7.3 zeigt neben dem Startprofil, den Vergleichsprofilen und dem ohne Zufluß modellierten Profil vier Simulationsergebnisse unter Annahme eines Zuflusses bei 62,9m NN. Es sind die sich ergebenden Profile für eine Schüttungsrate von 0,6 m³/Tag, 1,2 m³/Tag, 3 m³/Tag und 6 m³/Tag dargestellt. Bei einem mittleren Volumen des Monimolimnions von etwa 9000 m³ lassen sich diese Werte auch als Austauschzeiten ausdrücken:

0,6 m ³ /Tag	≈ 40 Jahre
1,2 m ³ /Tag	≈ 20 Jahre
3,0 m ³ /Tag	≈ 8 Jahre
6,0 m ³ /Tag	≈ 4 Jahre

Die Zuflüsse von 3 und 6 m³/Tag bewirken eine deutliche Verschiebung des modellierten gegenüber beiden gezeigten gemessenen Profilen nach oben. Dabei findet auch eine Anhebung der Chemokline gegenüber der gemessenen, welche als Querbalken angedeutet ist, statt. Am 1.10.1996 liegt die modellierte Chemokline mit einem Zufluß von 6 m³/Tag bei 65,6m NN gegenüber der gemessenen Lage von 65,26m NN. Offensichtlich kann die Verschiebung der Chemokline durch zutretendes Grundwasser bei dieser Zuflußrate nicht schnell genug durch die turbulente Erosion ausgeglichen werden. Ein Zufluß dieser Größe kann damit ausgeschlossen werden. Die Zuflüsse von 0,6 m³/Tag und 1,2 m³/Tag bewirken bei beiden Vergleichsterminen eine geringe Verschiebung der oberen Flanke des Peaks. Das Maximum des modellierten Profils ist mit beiden Zuflußraten am 12.10.1995 minimal verschoben und liegt immer noch im Bereich der Fehler; am 1.10.1996 wird die Lage des Maximums mit der Zuflußrate von 0,6 m³/Tag eher besser wiedergegeben. Die untere Flanke wird bis zum 12.10.1995 nur sehr geringfügig verschoben. Am 1.10.1996 ist diese Verschiebung deutlicher zu erkennen, wobei ein Zufluß von 1,2 m³/Tag eher zu geringe Konzentrationen in den untersten Tiefen bewirkt. Demgegenüber führt ein Zufluß von 0,6 m³/Tag zu Konzentrationen in den unteren Tiefen, die noch gut mit den Beobachtungen verträglich sind.

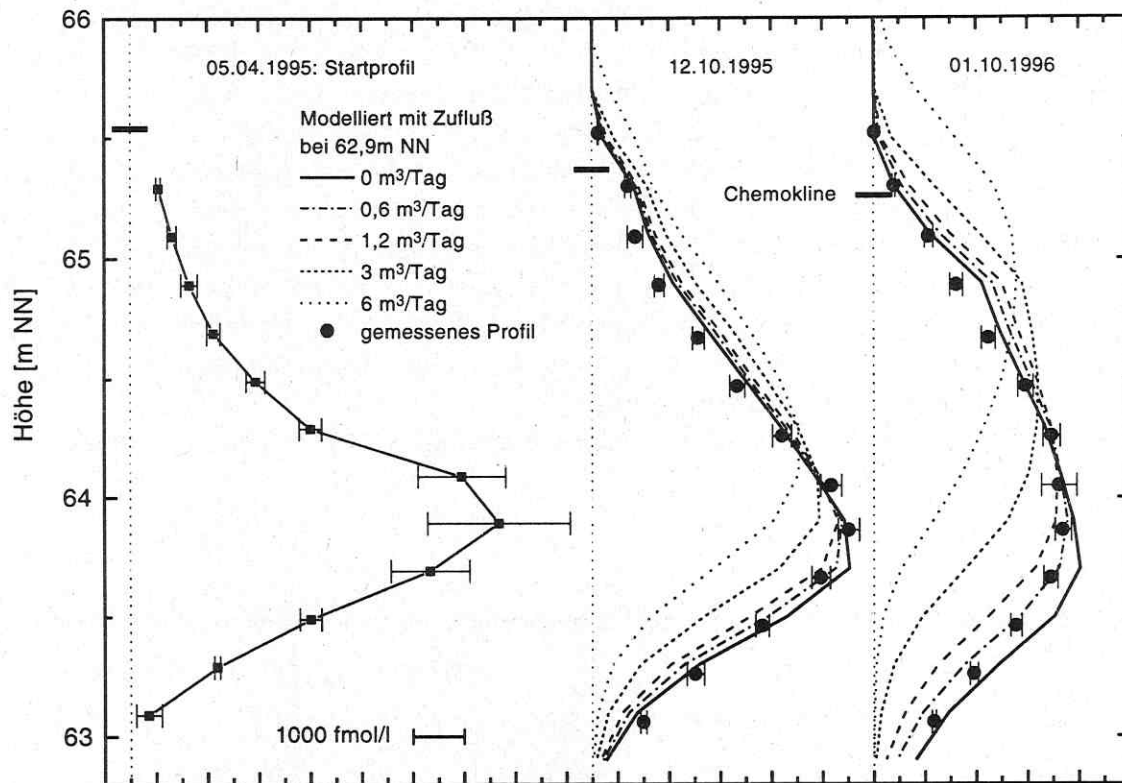


Abb. 7.3: Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion unter Annahme eines Zuflusses bei 62,9m NN. Links ist das Startprofil dargestellt. Die unterbrochenen Linien geben die Simulation eines Zuflusses wieder und lassen die Abschätzung einer maximalen Zuflussmenge zu.

Letztendlich kann damit ein Zufluß von bis zu $\approx 1 \text{ m}^3/\text{Tag}$ nicht ausgeschlossen werden, insbesondere da die Modellierung ohne einen Zufluß das gemessene Profil nur näherungsweise wiedergibt.

Zufluß bei 64,3m NN Ein Zufluß, der sich oberhalb des SF_6 -Konzentrationsmaximums auf einer Höhe von 64,3m NN einschichtet, müßte bezüglich obigen Ausführungen eine Leitfähigkeit von ungefähr 28 mS/cm besitzen. Es wurden wiederum Zuflußmengen von 1,2 m^3/Tag , 3,0 m^3/Tag und 6 m^3/Tag angenommen (Abbildung 7.4). Zunächst läßt sich erkennen, daß ein Zufluß in dieser Einschichtungstiefe nahezu keinen Einfluß auf die untere Flanke des Profils hat, da die vertikalen Ausgleichsströmungen nur nach oben erfolgen. Diese führen aber zu einer Anhebung der oberen Flanke der SF_6 -Verteilung oberhalb der Einschichtungstiefe. In dieser Tiefe selbst werden die berechneten SF_6 -Konzentrationen mit der Zeit geringer als die beobachteten. Dies hat durch diffusiven Transport auch Einfluß auf die tieferliegenden Schichten im Bereich des Konzentrationsmaximums, in

denen die Konzentration ebenfalls absinkt.

Bei der Modellierung bis zum 12.10.1995 läßt sich an der oberen Flanke nur bei einer Zuflußrate von $6 \text{ m}^3/\text{Tag}$ eine deutliche Abweichung vom beobachteten Profil erkennen. Ebenso ist nur mit dieser Zuflußrate ein signifikanter Unterschied zwischen dem gemessenen und modellierten Profil in der Einschichtungstiefe festzustellen. Deutlicher treten die Unterschiede am 1.10.1996 hervor. Ein Zufluß von $1,2 \text{ m}^3/\text{Tag}$ ändert im Vergleich zum gemessenen Profil die Profilform merklich. Allerdings sind die sich ergebenden Abweichungen nicht wesentlich größer als bei dem ohne Abfluß modellierten Profil. Demgegenüber erzeugt schon ein Zufluß von $3 \text{ m}^3/\text{Tag}$ eine Verminderung der SF_6 -Konzentration in der Einschichtungstiefe, die die Profilform stark verändert und damit nicht mehr tolerierbar ist. Ein Zufluß von $6 \text{ m}^3/\text{Tag}$ hebt die Chemokline auf $65,6 \text{ m NN}$ gegenüber den beobachteten $65,26 \text{ m NN}$ an und verändert die Profilform völlig, es entsteht ein zweites lokales Maximum oberhalb der Einschichtungstiefe.

Aus diesen Betrachtungen ergibt sich wiederum als maximal möglicher Zufluß ein Wert von $\approx 1 \text{ m}^3$.

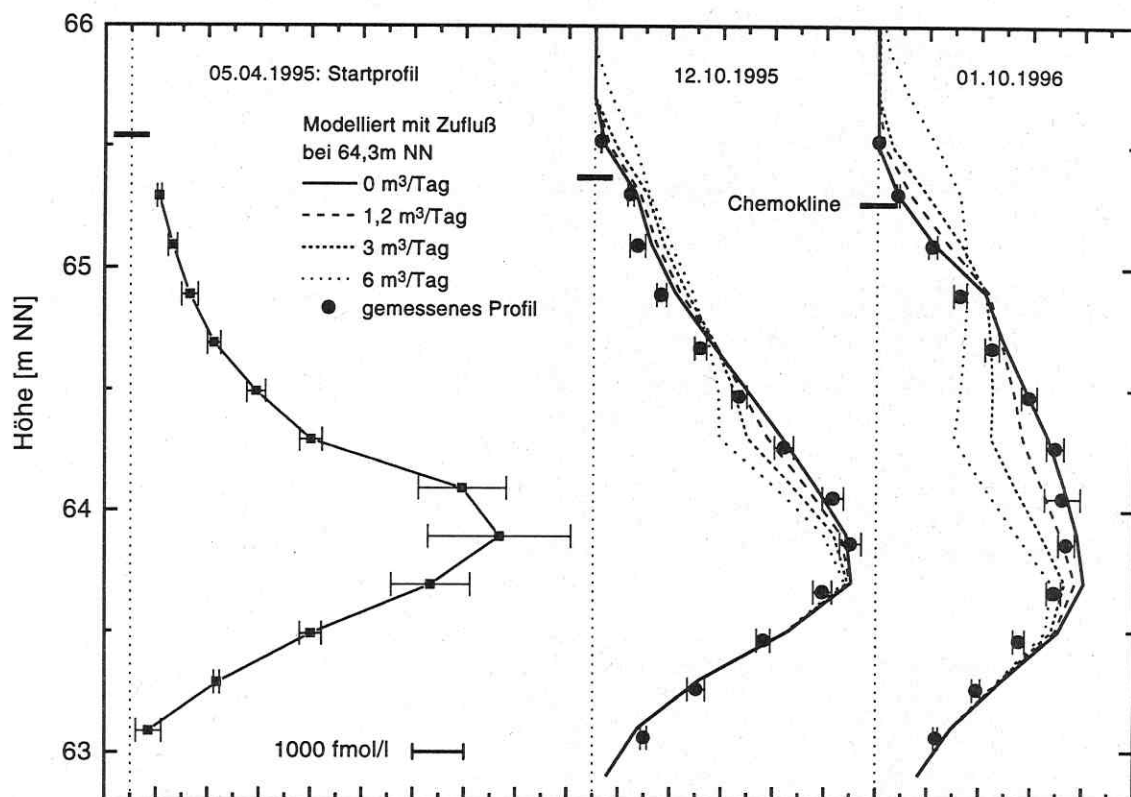


Abb. 7.4: Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion unter Annahme eines Zuflusses bei $64,3 \text{ m NN}$. Die Auswirkungen sind an den modellierten Profilen vom 1.10.1996 klar zu erkennen: In der Einschichtungstiefe tritt eine Verminderung der Konzentration auf.

7.4 Abflußsimulationen

Die Simulation eines Abflusses ist in LIMNMOD durch die Möglichkeit der Einführung einer Tiefenwasserableitung gegeben. Es kann eine Entnahme von Wasser in beliebigen Tiefen eingeführt werden, wobei das entnommene Wasser alle Modellgrößen mit sich führt. Für das Monimolimnion sind insbesondere die Leitfähigkeit und SF_6 von Relevanz. Eine Wasserentnahme in einer Schicht führt in den darüberliegenden Schichten zu einer vertikalen Ausgleichsströmung nach unten.

Es wird für die folgenden Simulationen jeweils ein Abfluss in einer bestimmten Tiefe definiert, wobei mit 62,9m NN und 64,3m NN die gleichen Tiefen wie bei den Zuflußsimulationen verwendet werden. Ebenfalls werden die Änderungen der Profilform für die gleichen Wassermengen, diesmal als Entnahmemenge, von 1,2 m³/Tag, 3,0 m³/Tag und 6 m³/Tag betrachtet.

Bei Entnahmemengen von 3,0 m³/Tag und 6 m³/Tag ergibt sich für den betrachteten Zeitraum vom 5.4.1995 bis zum 1.10.1996 durch die Wasserentnahme allein eine zusätz-

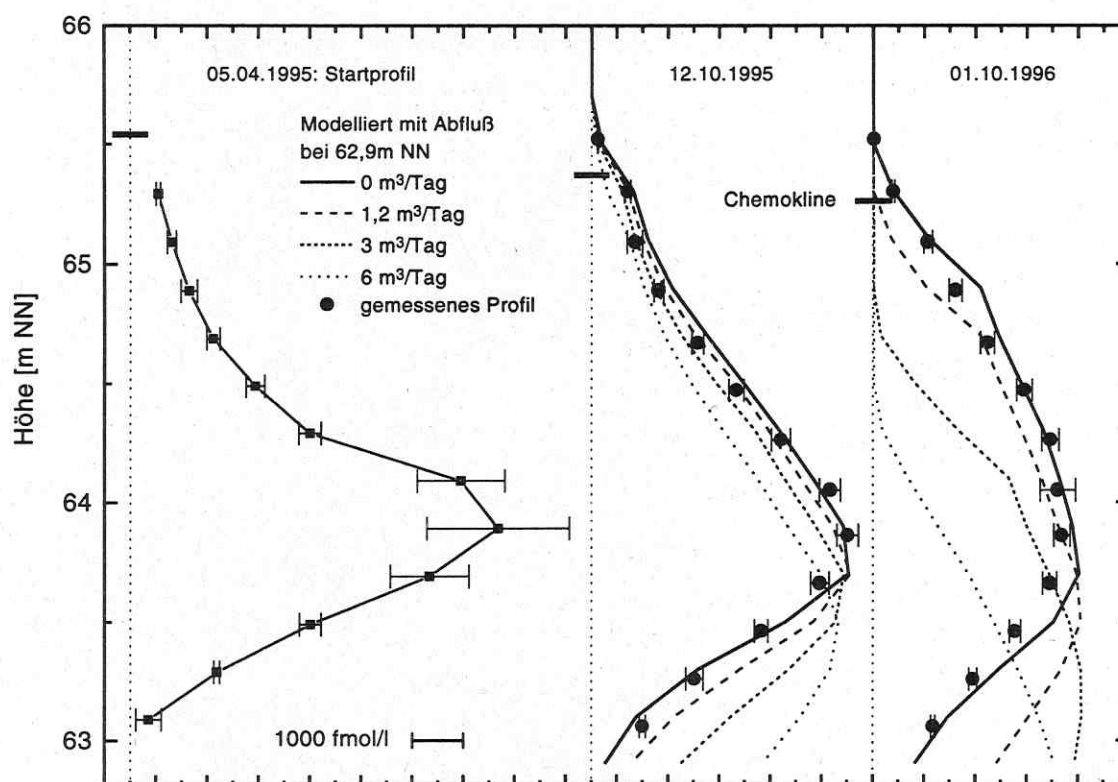


Abb. 7.5: Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion unter Annahme eines Abflusses bei 62,9m NN. Ein Abfluß in dieser Tiefe führt zu einer Verschiebung der gesamten SF_6 -Verteilung nach unten.

liche Absenkung der Chemokline von $\approx 40\text{cm}$ beziehungsweise $\approx 80\text{cm}$. Diese Fälle sind demnach im Prinzip von vornherein aus den nachfolgenden Betrachtungen auszuschließen. Sie werden dennoch mitgeführt, um die Auswirkungen auf die SF_6 -Verteilung aufzuzeigen.

Abfluß bei 62,9m NN Durch die Annahme eines Abflusses am Seegrund wird der SF_6 -Peak insgesamt nach unten verschoben (Abbildung 7.5). Die Vergleichsmessung vom 12.10.1995 läßt dies schon nach einem Modellierungszeitraum von 6 Monaten erkennen, wobei sich insbesondere die mit einem Abfluß von 3 bzw. 6 m^3/Tag errechneten Profile deutlich vom gemessenen Profil unterscheiden. Die Tiefe des Maximums und die untere Flanke sind signifikant nach unten verschoben. Abflußmengen dieser Größe sind daher nicht möglich. Dies wird auch durch das Vergleichsprofil vom 1.10.1996 bestätigt. Die berechneten Profile weichen völlig von der beobachteten ab und lassen einen klaren Ausschluß der Abflußraten von 3 und 6 m^3/Tag zu. Schon bei einer Abflußmenge von 1,2 m^3/Tag läßt sich am 1.10.1996 – nach etwa $1\frac{1}{2}$ Jahren Modellierungszeitraum – eine Ver-

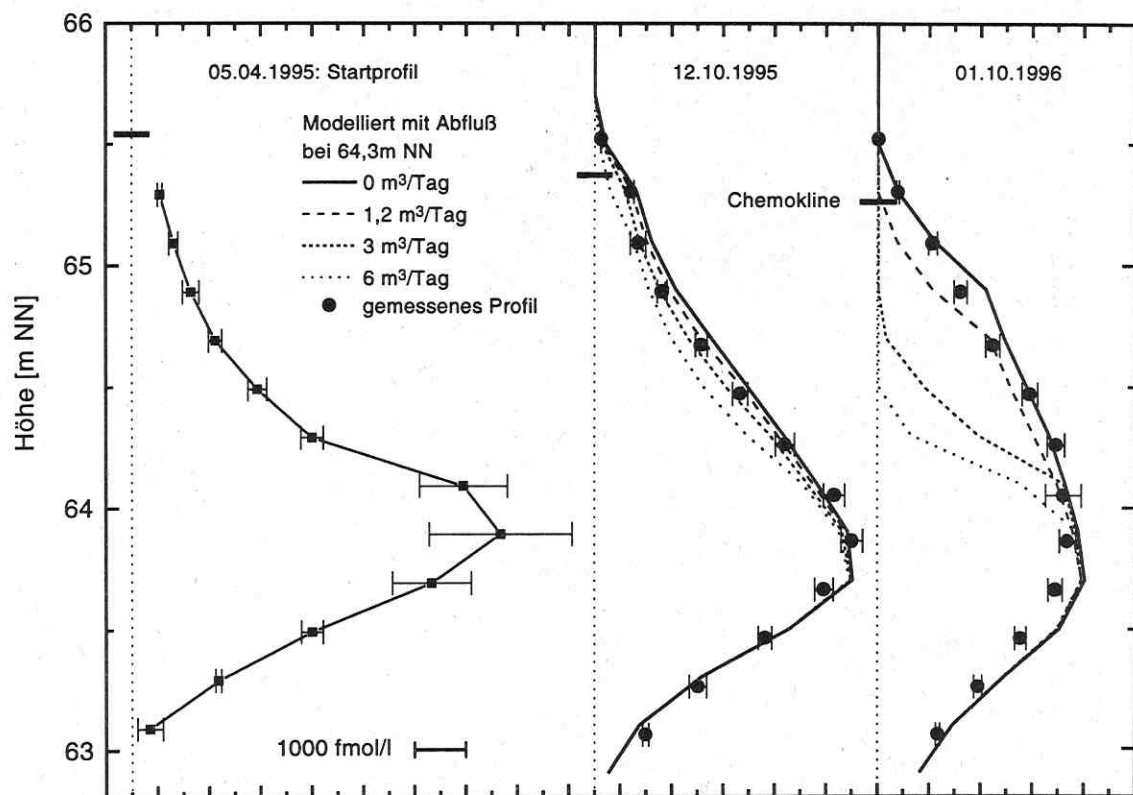


Abb. 7.6: Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion unter Annahme eines Abflusses bei 64,3m NN. Die obere Flanke des Peaks wird abgesenkt, die unter Flanke erfährt keine Änderung.

schiebung des Maximums sowie der unteren Flanke des Peaks soweit nach unten erkennen, daß ein Abfluß dieser Größe unmöglich erscheint.

Ein alleiniger Abfluß am Seegrund müßte demnach wesentlich kleiner als $1 \text{ m}^3/\text{Tag}$ sein.

Abfluß bei 64,3m NN Ein Abfluß bei 64,3m NN läßt nach einem halben Jahr Modellierungszeitraum für keine der drei betrachteten Abflußraten eine Aussage zu (Abbildung 7.6), da bezüglich des Vergleichsprofils vom 12.10.1995 keine signifikante Abweichung zu beobachten ist. Ein Modelljahr später am 1.10.1996 ist aber ein deutlicher Effekt zu erkennen. Allenfalls ist das aus der Modellierung mit einem Abfluß von $1,2 \text{ m}^3/\text{Tag}$ resultierende Profil mit den Beobachtungen gerade noch verträglich. Ein alleiniger Abfluß muß also auch für diese Tiefe unter etwa $1 \text{ m}^3/\text{Tag}$ liegen.

7.5 Diskussion

Aus den in diesem Kapitel vorgestellten Modellierungen lassen sich zusammenfassend folgende Aussagen ableiten:

Zufluß Ein Zufluß von $\approx 1 \text{ m}^3/\text{d}$ in einer konkreten Tiefe ist aus der berechneten SF_6 -Konzentrationsverteilung nicht auszuschließen. Ein größerer Zufluß verändert die SF_6 -Verteilung signifikant. Zudem dürfte die Chemokline sich dann nicht mehr absenken, was der Beobachtung widerspricht.

Abfluß Ein Abfluß von $> 1 \text{ m}^3/\text{d}$ in einer konkreten Tiefe ist aufgrund der sich dann ergebenden SF_6 -Verteilungen auszuschließen. Größere Abflußmengen würden zudem zu einer verstärkten Absenkung der Chemokline führen, die so nicht beobachtet werden kann.

Abfluß und Zufluß kombiniert In Kapitel 4.3.5 wurde die Auswirkung einer Durchspülung der unteren Schichten des Monimolimnions auf die aus den zwei Tracern Leitfähigkeit und SF_6 berechneten Diffusionskoeffizienten gezeigt. Es ergab sich, daß die Spülrate maximal $\approx 1 \text{ m}^3/\text{d}$ betragen darf, wenn die aus den beiden Tracern berechneten Profile der Diffusionskoeffizienten im Rahmen der Fehler übereinstimmen sollen.

Es kann demnach kein Abfluß kombiniert mit einem Zufluß von jeweils $\gg 1 \text{ m}^3/\text{d}$ auftreten, auch wenn dann der Netto - Zu- oder Abfluß kleiner als m^3/d ist. Dies wird unterstützt durch die in Kapitel 3.5.3 dargestellte SF_6 -Bilanz, die auf eine Austauschzeit des Monimolimnions von ≈ 29 Jahren führt. Eine Durchspülung des Monimolimnions mit einer Rate von $1 \text{ m}^3/\text{d}$ entspricht aber schon einer Austauschzeit von ≈ 25 Jahre. Eine größere Spülrate würde eine kürzere Austauschzeit bedeuten und ist demnach auch aufgrund der SF_6 -Bilanz auszuschließen.

Kapitel 8

Diskussion

Mit der Beobachtung der Ausbreitung der künstlich eingebrachten SF_6 -Tracer-Verteilung und der natürlichen Tracer Temperatur, Leitfähigkeit und Isotopie konnten die Transport- und Durchmischungsprozesse im Hufeisensee erfolgreich charakterisiert und quantifiziert werden. Dabei wird das Potential eines solchen Multi-Tracer Ansatzes bei einer ganzen Reihe von Abschätzungen deutlich.

Im Monimolimnion zeigt der Vergleich der aus der Entwicklung der Leitfähigkeitsverteilung und aus der SF_6 -Ausbreitung ermittelten Diffusionskoeffizienten, daß beide Tracer im Rahmen der Fehler diesselben Werte für die als zeitliches Mittel zu verstehenden turbulenten Diffusionskoeffizienten ergeben. Durch das unterschiedliche Verhalten der beiden Tracer bei einem Zufluß im Monimolimnion konnte eine maximal mögliche Spülung auf $\approx 1\text{m}^3/\text{Tag}$ eingegrenzt werden. Es hat sich gezeigt, daß die genaueren Volumendaten und die andere Probennahmetechnik oberhalb der Chemokline eine exaktere Bestimmung der aus dem Monimolimnion abdiffundierten SF_6 -Menge erlauben, als dies aus der Bilanz im Monimolimnion selbst möglich ist. Da Bilanzierungen oberhalb der Chemokline bisher nur auf unvollständigen Beobachtungen beruhen, wäre hier jeweils eine ergänzende Beprobung im Mai und Oktober 1997 wünschenswert. Damit könnte die Quantifizierung der Diffusion über die Chemokline wesentlich exakter werden und eine Reihe von Ergebnissen bei relativ geringem Meßaufwand zusätzlich erhärtet werden.

Die SF_6 -Bilanz im Monimolimnion könnte zwar im nachhinein durch präzisere Volumendaten etwas verbessert werden. Sie als zu ungenau zu bezeichnen wird ihrer prinzipiell hohen Sensitivität für einen Tiefenwasserzu- oder -abfluß jedoch nicht gerecht: Im konkreten Fall des Hufeisensees ist der mögliche Austausch des Monimolimnions durch Grund- oder Deponiewässer so gering, daß er mit einer Austauschzeit von > 25 Jahren beschrieben werden muß. Daß dies durch eine zweijährige Zeitserie nicht exakt quantifizierbar ist, verwundert nicht. In anderen Seen mit höheren Austauschraten hätte ein vergleichbares Experiment bereits zu klareren Ergebnissen geführt. In jedem Falle ist die Eignung von SF_6 als aquatischer Langzeittracer, speziell dort, wo die Variationen natürlicher Tracer zu unsensitiv sind, offensichtlich. Selbst mit nur einer Probennahme pro Jahr könnten mit dieser Methode Spülraten von salinen Tiefenwasserkörpern über weit mehr als 2 Jahre

verfolgt bzw. überwacht werden.

Die verwendete Isotopenbilanz erwies sich als empfindliches Instrument zur Quantifizierung des oberflächennahen Hauptgrundwasserzuflusses. Eine solche Bilanzierung ist auch außerhalb eines Seemodells wie LIMNMOD durchzuführen, wenn ein Profil der Isotopie des Sees zu Beginn und am Ende der thermischen Schichtungsphase bestimmt wird, die Isotopie des Niederschlages gemäß Formel 6.3 und die Verdunstung gemäß Formel 5.46 parametrisiert wird und neben meteorologischen Standarddaten auch eine gemessene Zeitserie der Seeoberflächentemperatur vorliegt.

Das für die Verhältnisse des meromiktischen Hufeisensees modifizierte Seemodell LIMNMOD kann die Beobachtungen über mehrere Jahre hinweg gut nachvollziehen. Auch die Chemoklinenerosion wird vom Modell befriedigend beschrieben. Einzig die Salzbilanz im Epilimnion kann nicht geschlossen werden, da hier die durch biologische Prozesse verursachten Änderungen erst bei Kopplung mit biochemischen Modellteil korrekt beschrieben werden. Die Modelleichung erfolgte unter Verwendung von Parameterwerten, wie sie auch von anderen Seen bekannt sind. Dies bedurfte allerdings (1) der Einführung eines windrichtungsabhängigen Effizienzfaktors für den Windenergieeintrag, (2) einer dem Auftriebsfluß entsprechenden exponentiellen Abnahme desselben mit der Tiefe und (3) der Annahme einer vollständigen Absorption der kurzwellige atmosphärischen Einstrahlung bei Erreichen des Seegrundes. Diese Modifikationen sind keine Spezialitäten des Hufeisensees, vielmehr wurden sie bisher nicht berücksichtigt, da sie bei größeren, tieferen und weniger windabgeschatteten Seen kaum ins Gewicht fallen.

Nach der Validierung des Modells durch Beobachtungsdaten vom Hufeisensee sollte prinzipiell eine Übertragbarkeit auf andere Seen gegeben sein. Für erste Testläufe kann die für jeden See unterschiedliche und eigens experimentell zu bestimmende Eindringtiefe z_0 des Auftriebsflusses auch anhand einer empirischen Parametrisierung mit der mittlere Seetiefe z_m abgeschätzt werden: $z_0 = 0,067 \cdot z_m + 1,6$ [Maiss, 1996]. In der vorliegenden Arbeit wurden die Diffusionskoeffizienten über und unterhalb der Chemokline mit den Tracern Leitfähigkeit und SF_6 experimentell gewonnen und ins Modell übernommen. Größenordnungsmäßig dürfte damit auch eine Orientierung für die Verhältnisse an anderen Seen mit ähnlich starkem halinen Dichtesprung gegeben sein. Dennoch wäre hier die Bestimmung einer geeigneten Parametrisierung in Abhängigkeit von der Tiefe und des Schichtungszustandes wie sie z.B für den Tiefenbereich bis 20m besteht, eine wichtige zukünftige Aufgabe.

Die Größe der turbulenten Diffusion über die Chemokline und im Bereich direkt darüber bestimmt neben der Tiefe wesentlich die Erosion der Chemokline. Inwieweit die am Hufeisensee beobachtete Erosionsrate von $\approx 34\text{cm/Jahr}$ auf andere Seen übertragbar ist, ist deshalb fraglich. Hier sollte eine geschlossene Darstellung als Funktion des Dichtegradients, der Seebeckenform, der Wassertiefe und des Windenergieeintrages gesucht werden. Wenn, wie im Hufeisensee, winterliche Zirkulationsmischungen die diffusiv über das Sommerhalbjahr aufgeweitete Chemokline wieder auf den scharfen Dichtesprung des Vorwin-

ters bringen, kann jedoch von mindestens 30cm/Jahr Chemoklinenabsenkung durch dieses kombinierte Zusammenspiel ausgegangen werden. Hintergrund hierfür ist, daß in diesem Fall die Diffusion der Salzionen über die Chemokline der kontrollierende Faktor ist, dessen Größe auch in anderen Seen weitgehend von der rein molekularen Diffusion bestimmt wird.

Ein weiterer lohnender Schritt wäre die Kopplung des Seemodells mit erprobten Grundwassermodellen. Mit dieser Kombination ergäbe sich Werkzeug, welches bei der Beantwortung vieler offener Fragestellungen zur zukünftigen Gewässergüte in Bergbaufolgelandschaften benötigt wird.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Lageplan des gefluteten Tagebaurestloches Hufeisensee	7
2.2	Morphometrische Gestalt des Hufeisensees	8
2.3	See- und Sedimentfläche des Hufeisensees	10
2.4	Volumen des Hufeisensees	11
2.5	See- und Sedimentfläche im Monimolimnion	12
2.6	Volumen des Monimolimnions	13
2.7	Seequerschnitt	14
2.8	Haline Schichtung des Hufeisensees	16
2.9	Thermische Schichtung des Hufeisensees	19
2.10	Dichte	22
2.11	Stabilität in der Wassersäule	24
2.12	Pegelstände und Lage der Chemokline	26
2.13	Hydrogeologisches Umfeld des Hufeisensees	28
3.1	Ostwaldsche Löslichkeit von SF_6	34
3.2	Molekulare Diffusionskoeffizienten von SF_6	36
3.3	Einbringen des Tracers	38
3.4	Bestimmung der tatsächlich eingebrachten Tracermenge	39
3.5	Probennahme und Meßtiefenbestimmung	41
3.6	Probennahme mit Waschflaschen	43
3.7	Alu-Beutel Probennahmetechnik	44
3.8	Ausgasung und SF_6 -Konzentrationen am 12.10.1995	46
3.9	Ausgasung und SF_6 -Konzentrationen am 13.09.1995	47
3.10	SF_6 -Profile und Bilanz im Monimolimnion	55
3.11	SF_6 -Menge pro 20cm-Box	57
3.12	Verhalten des Konzentrationsmaximums	59
3.13	Entwicklung der SF_6 -Konzentration oberhalb des Konzentrationsmaximums	60
3.14	SF_6 -Konzentrationen im Hypolimnion vom 12.9.95, 11.10.95 und 30.9.96	62
4.1	Leitfähigkeit und Temperatur am 15.5.95 und 18.7.95	70
4.2	Stabilität und vertikaler Diffusionskoeffizient aus der Temperaturentwicklung vom 15.5. - 18.7.1995	71
4.3	Auftriebsfluß	73
4.4	Temperaturmeßkette	76
4.5	Temperaturentwicklung in 1,2m Wassertiefe	78

4.6	Tagesgang der oberflächennahen Wassertemperatur unter Eis	79
4.7	Temperaturprofil vom 17.04.96	81
4.8	Eismodell nach Rogers et al.	82
4.9	Fehler durch die Diskretisierung	85
4.10	Modellierte Temperaturentwicklung im Monimolimnion für verschiedene Annahmen des Sedimentwärmefflusses	87
4.11	Abschätzung des Sedimentwärmefflusses aus der Temperaturmodellierung .	88
4.12	Optimierte Simulation der Temperaturentwicklung im Monimolimnion . . .	89
4.13	Profile der optimierten Simulation der Temperaturentwicklung	90
4.14	Interpolierte Leitfähigkeitsprofile im Monimolimnion	92
4.15	Zeitliche Entwicklung der Leitfähigkeit im Monimolimnion	93
4.16	Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion, aus der Leitfähigkeit bestimmt	94
4.17	Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion während der sommer- lichen Schichtung	95
4.18	Zeitliche Entwicklung der SF ₆ -Konzentration	96
4.19	Vertikale Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion	97
4.20	Vergleich der aus der Leitfähigkeits- und SF ₆ -Entwicklung ermittelten ver- tikalen Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion	99
4.21	Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion unter Berücksichtigung eines Zu- flusses	101
4.22	Stabile Isotope im tiefen Monimolimnion	104
5.1	Physikalische Prozesse im See	110
5.2	Wärmeaustausch mit der Atmosphäre	113
5.3	Diskretisierung zur Tiefenverteilung der kurzwelligen Strahlung	114
5.4	Konvektive Turbulenz	117
5.5	Ansatz der turbulenten Diffusionskoeffizienten im Modell	122
5.6	Isotopenfraktionierung bei der Verdunstung	126
5.7	Variabler Seespiegel: Berechnung der Tiefen	129
5.8	Schichteinteilung	131
5.9	Programmablauf	135
5.10	Eingabedaten für das Seemodell	136
6.1	Globalstrahlung	145
6.2	Lufttemperatur	146
6.3	Relative Feuchte	147
6.4	Niederschlag	148
6.5	Lineare und kubische Mittelung der Windgeschwindigkeit	150
6.6	Windrosen	152
6.7	Effizienzfaktor für die Windgeschwindigkeit	153
6.8	Übersicht über die verwendeten meteorologischen Daten	155
6.9	Stabile Isotope im Niederschlag	156

6.10	Beziehung zwischen den Isotopenwerten im Niederschlag und der Lufttemperatur	157
6.11	Local Meteoric Water Line	158
6.12	Wasserentnahme zur Bewässerung: Pumpzeiten	160
6.13	Pegel 3979o	163
6.14	Wasserbilanzoptimierung	164
6.15	Kumulativ aufgetragene Terme der Wasserbilanz	165
6.16	Leitfähigkeitsbilanz	170
6.17	Atmosphärische Wärmeaustauschterme	173
6.18	Mittlere gemessene und modellierte Temperaturen im Epi- und Hypolimnion	174
6.19	Sprungschichtverlauf und Chemoklinenabsenkung	175
6.20	Modellierte und beobachtete Temperaturprofile 1992/93	178
6.21	Modellierte und beobachtete Temperaturprofile 1993/94	179
6.22	Modellierte und beobachtete Temperaturprofile 1994/95	180
6.23	Modellierte und beobachtete Leitfähigkeitsprofile 1992/93	183
6.24	Modellierte und beobachtete Leitfähigkeitsprofile 1993/94	184
6.25	Modellierte und beobachtete Leitfähigkeitsprofile 1994/95	185
6.26	Isopenverdunstungslinie	186
6.27	Modellierte $\delta^{18}\text{O}$ - und δD -Profile	188
6.28	Gemittelte gemessene und modellierte Werte der stabilen Isotope im Epi- limnion	189
6.29	Modellierte Profile der Tritiumverteilung	191
7.1	Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion	194
7.2	Numerische Fehler	197
7.3	Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion unter Annahme eines Zuflusses bei 62,9m NN	199
7.4	Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion unter Annahme eines Zuflusses bei 64,3m NN	200
7.5	Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion unter Annahme eines Abflusses bei 62,9m NN	201
7.6	Modellierung der SF_6 -Verteilung im Monimolimnion unter Annahme eines Abflusses bei 64,3m NN	202

Tabellenverzeichnis

2.1	Zusammenfassung der Wasseranalysen des Hufeisensees und des Hauptgrundwasserleiters 15	30
3.1	Hintergrundkonzentrationen	52
3.2	Diffusionskoeffizienten in der Chemokline	65
4.1	Abschätzung des Wärmeenergieeintrags unter Eis durch solare Strahlung und Grundwasser	83
5.1	LIMNMOD:Physikalische Prozesse	111
5.2	LIMNMOD: Übersicht über die benötigten Eingabedaten	137
6.1	Eich- und Optimierungsgrößen	142
6.2	Vorhandene meteorologische Daten	143
6.3	Jahresniederschläge	149
6.4	Meßdatenbasis	169
6.5	Abgeleitete Vergleichsgrößen	172
A.1	Vertikale und zeitliche Gradienten der Leitfähigkeit im Monimolimnion für den Zeitraum 7.12.94 - 1.12.95	216
A.2	Vertikale und zeitliche Gradienten der Leitfähigkeit im Monimolimnion für den Zeitraum 15.5.95 - 11.10.95	217
A.3	Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion, aus der Leitfähigkeitsentwicklung vom 7.12.94 - 1.12.1995 berechnet	218
A.4	Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion, aus der Leitfähigkeitsentwicklung vom 15.5.94 - 11.10.1995 berechnet	219
A.5	Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion, aus der Entwicklung der SF ₆ -Verteilung berechnet	220
C.1	Molekulare Diffusionskoeffizienten der Wärme	222
D.1	Morphometrische Daten 92,8m NN - 67,4m NN	225
D.2	Morphometrische Daten 67,1m NN - 62,8m NN	226

Literaturverzeichnis

- BEAR J., 1972: Dynamics of fluids in porous media. American Elsevier Publishing Company, Inc.
- BENGTTSSON, 1996: Mixing in ice-covered lakes. *Hydrobiologia* 322, pp.91-97
- BKK, 1974: Auslaufbetriebsplan Tagebaurestloch Hufeisenteich (Tagebau Bruckdorf/Nord). VEB BKK-Braunkohlenkombinat Geiseltal, Beuna
- BRUTSAERT W., 1975: On a derivable formula for longwave radiation from clear skies. *Water Resour. Res.* 11: 742 - 744
- BÜHRER H., AMBÜHL H., 1975: Die Einleitung von gereinigtem Abwasser in Scen. *Schweiz. Z. Hydrol.* 37: 347 - 396
- CHRISTOPH G., 1995: Modellrechnungen zur Entwicklung des Hufeisensees in der Nähe der subhydrischen Deponie Halle-Kanena. In: UFZ Bericht Nr. 4/1995 : Beiträge zum Workshop "Braunkohlebergbaurestseen"
- CRANK J., 1975 *The mathematics of diffusion*. Claredon, Oxford, 2. Auflage
- CRC, 1996: *CRC Handbook of chemistry and physics*, 76th edition, David R. Lide (Editor in chief), CRC Press
- c't, 1989: Akima-Interpolation, c't 1989/6
- DALMOLIN J., 1993: Schwefelhexafluorid als Tracer für den Stofftransport im Grundwasser Diplomarbeit. Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg
- DERMIETZEL J., GLÄSER H. R., HAENDEL D., KOWSKI P., 1995: Komplexe Erfassung von Fließpfaden und Stofftransportvorgängen aus einem in ein Tagebaurestloch verbrachten Deponiekörper -Fallstudie Hufeisensee- . *Z. geol. Wiss* 23(1).
- FISCHER J., 1997: Persönliche Mitteilung. Geologisches Landesamt Sachsen-Anhalt
- FULDA C., 1996: Persönliche Mitteilung. Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg
- GAT, J.R., 1995: Stable Isotopes of Fresh and Saline Lakes, in : A. Lerman, D. Imboden and J.R. Gat (Editors), 1995: *Physics and chemistry of lakes*. Springer-Verlag
- GLÄSER H.R., 1995: Geophysikalische Untersuchungen zum Nachweis von Fließwegen – Fallstudie Hufeisensee. in: UFZ Bericht Nr. 4/1995 : Beiträge zum Workshop "Braunkohlebergbaurestseen"
- GLÄSER W., KLAPPER H., 1992: Stoffumsätze beim Füllprozeß von Tagebaurestseen. Arbeitsgemeinschaft der Großforschungseinrichtungen. *Boden, Wasser und Luft*. S.19 - 23

- GLÄSSER W., 1995: Persönliche Mitteilung. UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle, Bad Lauchstädt
- GONFIANTINI, 1986: "Environmental Isotopes in Lake studies" in: Handbook of Environmental Isotope Geochemistry (eds.: P.Fritz and J.Ch.Fontes), Volume 2: The terrestrial environment, B, pp.113-168, Elsevier, Amsterdam 1986
- HAMM A., 1991: Tagebau Garzweiler II: Limnologische Entwicklung des Restsees. Gutachten aus dem Materialband zu den Leitentscheidungen zum Abbauvorhaben Garzweiler II. Hrg. Ministerium für Umwelt, Raumordnung und Landwirtschaft des Landes Nordrhein-Westfalen, Düsseldorf, S.33 - 65.
- HEINZ G., 1990: Mischungs- und Strömungsverhältnisse im Westteil des Bodensees. Dissertation am Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg.
- HEINZ G.,ILMBERGER J.,SCHIMMELE M., 1990: Vertical mixing in Überlingersee, western part of Lake Constance. Aquatic sciences 52/3, pp. 256 - 268
- HENNIG G. ET AL., 1992: Gefährdungsabschätzung einschließlich Sicherungs/Sanierungskonzept für den Standortbereich der Deponie am Hufeisensee Kanena. Harres Pickel Consult (HPC), Merseburg
- HORVATH A.L., 1985: Handbook of Aqueous electrolyte solutions
- IMBERGER J., PATTERSON J.C., 1981: Reservoir dynamics modelling. In: Prediction in water quality. Proceedings of a Symposium in Canberra 1982 (Australia). Australian Academy of science. Ed. O'Loughlin E.M., Cullen, P.
- IAEA, 1986: Technical Report Series No.264. Environmental Isotope Data No.8: World Survey of Isotope Concentration in Precipitation (1980-83). International Atomic Energy Agency, Vienna
- IAEA, 1990: Technical Report Series No.311. Environmental Isotope Data No.9: World Survey of Isotope Concentration in Precipitation (1984-87). International Atomic Energy Agency, Vienna
- IAEA, 1994: Technical Report Series No.371. Environmental Isotope Data No.10: World Survey of Isotope Concentration in Precipitation (1988-91). International Atomic Energy Agency, Vienna
- IMBODEN D.M., GÄCHTER R., 1978: A dynamic lake model for trophic state prediction. J.Ecol. Modell. 4, pp.77-98
- IMBODEN D.M. UND WÜEST A., 1995: Mixing Mechanisms in Lakes, in : A. Lerman, D. Imboden and J.R. Gat (Editors), 1995: Physics and chemistry of lakes. Springer-Verlag
- IUP, 1997: Unveröffentlichte Messungen. Institut für Umweltphysik der Universität Heidelberg.
- KARAGOUNIS I., 1992: Ein physikalisch-biochemisches Seemodell. Mitteilungen der Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich. Herausgeber: Prof.Dr.Dr.h.c.D.Vischer.
- KINZELBACH W., W.H.CHIANG, R.HASSINGER, J.Y.LIN UND W.SCHÄFER , 1991: Möglichkeiten und Grenzen von hydraulischen Maßnahmen zur Vermeidung des Stoffaustrags aus der Abraumkippe des Tagebauvorhabens Garzweiler II. Gutachten aus dem

Zweiten Untersuchungsprogramm Braunkohle der Landesregierung Nordrhein-Westfalen. Hrg.: Der Minister für Umwelt, Raumordnung und Landwirtschaft des Landes Nordrhein-Westfalen, Düsseldorf, S.285-307

KING D.B. AND E.S. SALTZMAN, 1995: Measurement of the diffusion coefficient of sulfur hexafluoride in water. *J.Geophys.Res.*, pp.7083 - 7088

KOWSKI, P., 1995: Pegelwerte der einzelnen Probennahmen, Kanena. Persönliche Mitteilung. UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle, Bad Lauchstädt

MAISS M., 1992: Schwefelhexafluorid (SF₆) als Tracer für Mischungsprozesse westlichen Bodensee. Ph.D.Thesis, Institut für Umweltphysik, University of Heidelberg, 219 pp.

MAISS M., ILMBERGER J., ZENGER A., MÜNNICH K.O., 1994A: A SF₆ tracer study of horizontal mixing in Lake Constance. *Aquatic sciences* 56/4, pp.307 - 328

MAISS M., ILMBERGER J., MÜNNICH K.O., 1994B: Vertical mixing in Überlingersee (Lake Constance) traced by SF₆ and heat. *Aquatic sciences* 56/4, pp.329 - 347

MAISS M., STEELE L.P., FRANCEY R.J., FRASER P.J., LANGENFELDT R.L., TRIVETT N.B.A., LEVIN I., 1996: Sulfur Hexafluoride – a powerful new atmospheric tracer. *Atmospheric environment* Vol.30, pp.1621-1629

MAISS M., 1996: Semi-empirical parametrizations of diapycnal diffusivities in lakes. Contribution to the workshop on "Physical Processes in Natural Waters", 16-18 Sep. 1996, EAWAG, Kastanienbaum, Switzerland. Manuscript in preparation

MAISS M., 1997: Unveröffentlichte Daten. Persönliche Mitteilung. Institut für Umweltphysik der Universität Heidelberg

MAJOUBE M., 1971: Fractionnement en oxygène-18 et en deutérium entre l'eau et sa vapeur. *J. Chim. Phys.*, 197: 1423-1436

MARTI D.E. UND D.M. IMBODEN, 1986: Thermische Energieflüsse an der Wasseroberfläche: Beispiel Sempachersee. *Schweiz. Z. Hydrol.* 48 (2), pp.196 - 229

MERLIVAT L., 1978: Molecular diffusivities of H₂¹⁶O, HD¹⁶O and H₂¹⁸O in gases. *J. Chem. Phys.*, 69: 2864 - 2871

ORLOB G.T., SELNA L., 1970: Temperature Variations in deep reservoirs. Proceeding of 6th Annual Sanitation and Water Resource Engineering Conference, Vanderbilt University, Nashville, TN, pp.64-77

Oakey N.S. & ELLIOT J.A., 1982: Dissipation within the surface mixed layer. *J. Phys. Oceanogr.* 12: 171 - 185

PATTERSON J.C., HAMBLIN P.F., 1988: Thermal simulation of a lake with winter ice cover. *Limnol. Oceanogr.* 33(3), S.323-338

ROEDEL W., 1992: Physik unserer Umwelt: Die Atmosphäre. Springer Verlag

ROGERS C.K., LAWRENCE G.A. AND P.F.HAMBLIN, 1995: Observations and numerical simulation of a shallow ice-covered midlatitude lake. *Limnology and Oceanography* 40/2, S. 374-385

SCHARF B.W., DERMETZEL J., MELZER A., RICHTER W., RÖNICKE H., 1996: Beitrag zur Limnologie des Hufeisensees In: UFZ Bericht Nr. 4/1995 : Beiträge zum Workshop "Braunkohlebergbaurestseen"

- SCHULZE M., 1993: Datenzusammenstellung älterer Messungen am Hufeisensee für internen Gebrauch. Institut für Gewässerforschung IFG-GKSS, Magdeburg
- SIEDLER, PETERS, 1986: Properties of sea water, in : Landolt-Börnstein, Gruppe 5, Band 3a, 1986 Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaft und Technik; Ozeanographie. Springer Verlag
- SONNTAG C., 1996 Persönliche Mitteilung. Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg
- STRAUCH G., BIRGER J., CHRISTOPH G., DERMETZEL J., GLÄSER H.R., GLÄSSER W., HAENDEL D., HANSCHMANN G., KOWSKI P., KRAUSS G., MÜHLE K., NITZSCHE H.M., RICHTER W., WIESER T., 1996: Untersuchungen an einer anaeroben Deponie zu Stofftransport, Stoffumsetzungen und Wechselbeziehungen zwischen Deponieinhaltsstoffen und Grund- bzw. Oberflächenwässern - Modellfall ehem. Braunkohletagebau Bruckdorf-Nord/Deponie Halle-Kanena. Bericht des UFZ - Umweltforschungszentrums Leipzig - Halle, Sektion Hydrogeologie
- UHDE M., 1992: Mischungsprozesse im Hypolimnion des meromiktischen Lago Cadagno: Eine Untersuchung mit Hilfe natürlicher und künstlicher Tracer. Diplomarbeit, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
- VWA: VERSUCHSANSTALT FÜR WASSERBAU, HYDROLOGIE UND GLAZIOLOGIE DER EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN HOCHSCHULE ZÜRICH, 1992: LIMNMOD, Physikalisch - biochemisches Seemodell, Handbuch
- Walz V., 1997: Experimentelle Tracerstudien und Modellierungen der Austauschprozesse in einem meromiktischen Restsee (Hufeisensee). Diplomarbeit am Institut für Umweltphysik der Universität Heidelberg
- WANNINKHOF W., LEDWELL J.R., WATSON A.J., 1991: Analysis of Sulfur Hexafluoride in Seawater. J.Geophys.Res. 96, S.8733 - 8740
- WANG M.-P., HARLEMANN D.R.F., 1982: Hydrothermal-biological coupling of lake eutrophication models. MIT Report 270.
- WETZEL R.G., 1983: Limnology. Saunders College Publishing
- WIESER T., BIRGER J., 1994: Dreidimensionale und morphometrische Daten des Hufeisensees. UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle, Bad Lauchstädt (persönliche Mitteilung)
- WIESER T., 1995: Persönliche Mitteilung. UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle, Bad Lauchstädt
- WILHELM E., BATTINO R., WILCOCK R.J., 1977: Low-pressure Solubility of Gases in Liquid Water. Chem. Rev. 77, S.219 - 262
- WILLIAMS G.P., 1969: Water temperature during the melting of lake ice. Water resources research 5, S.1134 - 1138
- WTW, 1993: Leitfähigkeitsfibel. Einführung in die Konduktometrie für Praktiker. WTW - Wissenschaftlich-Technische Werkstätten, Weilheim
- WU J., 1980: Wind - stress coefficients over sea surface near neutral conditions - a revisit. J. Phys. Oceanogr. 10(5), S. 727 - 740

- WÜEST A., 1987: Ursprung und Größe von Mischungsprozessen im Hypolimnion natürlicher Seen. Dissertation Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Nr.8350
- WÜEST A., PIEPKE G., HALFMAN J.D., 1996: Combined effects of dissolved solids and temperature on the density of Lake Malawi. In: Johnson (Hrsg.): The Limnology, Climatology and Paleoclimatology of the East African Lakes (in Vorbereitung)
- YURTSEVER Y., GAT JR., 1981: Atmospheric waters. In: Gat JR, Gonfiantini R. (eds) Stable Isotope Hydrology. Tech Rep Ser 210, IAEA, Wien, pp. 103-142
- ZIMMERMANN M., 1995: Schwefelhexafluorid als Tracer für Austauschprozesse im Monimolimnion des Hufeisensees. Diplomarbeit am Institut für Umweltphysik der Universität Heidelberg
- ZIMMERMANN M., J.ILMBERGER, W.KINZELBACH, G.STRAUCH, W.GLÄSSER UND M.MAISS, 1996: Schwefelhexafluorid (SF_6) als Tracer für Austauschprozesse im Monimolimnion eines Tagebaurestsees. Erweiterte Zusammenfassung der Jahrestagung 1995 in Berlin, Deutsche Gesellschaft für Limnologie; S.332-336, Krefeld.

Anhang A

Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion

Höhe [m NN]	$\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ [mS/(cm·s)]	$\sigma \frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ [mS/(cm·s)]	$\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial z}$ [mS/(cm·m)]	$\sigma \frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ [mS/(cm·m)]
64,9	-7,71E-08	9,0E-09	-4,94	2,39
64,8	-5,41E-08	7,8E-09	-4,41	1,82
64,7	-4,38E-08	4,6E-09	-3,68	1,08
64,6	-3,59E-08	4,5E-09	-3,05	0,84
64,5	-2,98E-08	3,5E-09	-2,23	0,67
64,4	-2,54E-08	3,7E-09	-1,90	0,40
64,3	-2,34E-08	3,4E-09	-1,50	0,40
64,2	-2,08E-08	2,1E-09	-1,32	0,35
64,1	-1,81E-08	2,1E-09	-1,31	0,27
64,0	-1,80E-08	1,7E-09	-1,12	0,24
63,9	-1,50E-08	1,7E-09	-1,03	0,46
63,8	-1,13E-08	1,6E-09	-1,12	0,31
63,7	-9,95E-09	1,0E-09	-1,19	0,24
63,6	-9,49E-09	1,6E-09	-1,02	0,28
63,5	-7,63E-09	1,8E-09	-0,90	0,16
63,4	-7,17E-09	1,6E-09	-0,90	0,20
63,3	-5,43E-09	1,5E-09	-1,04	0,16

Tab. A.1: Vertikale und zeitliche Gradienten der Leitfähigkeit im Monimolimnion für den Zeitraum 7.12.94 - 1.12.95

Höhe [m NN]	$\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ [mS/(cm·s)]	$\sigma \frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ [mS/(cm·s)]	$\frac{\partial \kappa_{25}}{\partial z}$ [mS/(cm·m)]	$\sigma \frac{\partial \kappa_{25}}{\partial t}$ [mS/(cm·m)]
64,9	-3,71E-08	6,2E-09	-6,30	0,81
64,8	-3,51E-08	6,7E-09	-5,72	0,39
64,7	-3,18E-08	9,2E-09	-4,64	0,13
64,6	-3,06E-08	6,2E-09	-3,62	0,27
64,5	-2,38E-08	7,2E-09	-2,66	0,51
64,4	-1,22E-08	8,3E-09	-2,03	0,34
64,3	-1,89E-08	4,9E-09	-1,68	0,35
64,2	-1,50E-08	3,8E-09	-1,54	0,26
64,1	-1,13E-08	3,8E-09	-1,53	0,14
64,0	-1,06E-08	3,8E-09	-1,30	0,18
63,9	-1,08E-08	3,7E-09	-1,14	0,33
63,8	-1,19E-08	5,2E-09	-1,32	0,19
63,7	-8,44E-09	3,0E-09	-1,29	0,19
63,6	-6,36E-09	4,2E-09	-1,14	0,15
63,5	-8,44E-09	6,5E-09	-1,03	0,06
63,4	-7,29E-09	5,0E-09	-0,97	0,17
63,3	-4,05E-09	3,4E-09	-1,03	0,14

Tab. A.2: Vertikale und zeitliche Gradienten der Leitfähigkeit im Monimolimnion für den Zeitraum 15.5.95 - 11.10.95

Ganzes Jahr Höhe [m]	Volumen Fall1		Volumen Fall2	
	K_v [m ² /s]	ΔK_v [m ² /s]	K_v [m ² /s]	ΔK_v [m ² /s]
64,9	6,8E-09	3,3E-09	6,5E-09	3,1E-09
64,8	6,1E-09	2,5E-09	5,8E-09	2,4E-09
64,7	6,1E-09	1,8E-09	5,7E-09	1,7E-09
64,6	6,2E-09	1,7E-09	5,7E-09	1,6E-09
64,5	7,2E-09	2,2E-09	6,6E-09	2,0E-09
64,4	7,3E-09	1,5E-09	6,5E-09	1,4E-09
64,3	7,9E-09	2,1E-09	7,0E-09	1,9E-09
64,2	7,6E-09	2,0E-09	6,7E-09	1,8E-09
64,1	6,4E-09	1,3E-09	5,6E-09	1,2E-09
64,0	6,3E-09	1,3E-09	5,5E-09	1,2E-09
63,9	5,3E-09	2,4E-09	4,6E-09	2,1E-09
63,8	3,8E-09	1,1E-09	3,3E-09	9,5E-10
63,7	2,8E-09	6,4E-10	2,4E-09	5,5E-10
63,6	2,6E-09	7,7E-10	2,2E-09	6,7E-10
63,5	2,0E-09	4,7E-10	1,7E-09	4,1E-10
63,4	1,3E-09	3,7E-10	1,1E-09	3,3E-10
63,3	5,0E-10	1,6E-10	4,6E-10	1,4E-10

Tab. A.3: Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion, aus der Leitfähigkeitsentwicklung vom 7.12.94 - 1.12.1995 berechnet

Sommer Höhe [m]	Volumen Fall1		Volumen Fall2	
	K_v [m ² /s]	ΔK_v [m ² /s]	K_v [m ² /s]	ΔK_v [m ² /s]
64,9	3,5E-09	5,4E-10	3,4E-09	5,2E-10
64,8	3,4E-09	3,9E-10	3,2E-09	3,7E-10
64,7	3,6E-09	3,8E-10	3,4E-09	3,6E-10
64,6	3,9E-09	5,2E-10	3,6E-09	4,8E-10
64,5	4,4E-09	1,0E-09	4,0E-09	9,3E-10
64,4	4,8E-09	1,0E-09	4,2E-09	9,3E-10
64,3	5,4E-09	1,3E-09	4,7E-09	1,1E-09
64,2	4,9E-09	1,0E-09	4,2E-09	9,2E-10
64,1	4,2E-09	7,8E-10	3,6E-09	6,5E-10
64,0	4,3E-09	9,8E-10	3,7E-09	8,3E-10
63,9	4,2E-09	1,5E-09	3,6E-09	1,3E-09
63,8	3,0E-09	8,6E-10	2,6E-09	7,4E-10
63,7	2,3E-09	7,7E-10	2,0E-09	6,5E-10
63,6	2,0E-09	8,2E-10	1,7E-09	7,2E-10
63,5	1,7E-09	8,2E-10	1,5E-09	7,4E-10
63,4	1,1E-09	6,4E-10	1,0E-09	5,7E-10
63,3	3,8E-10	3,3E-10	3,5E-10	3,0E-10

Tab. A.4: Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion, aus der Leitfähigkeitsentwicklung vom 15.5.94 - 11.10.1995 berechnet

Höhe [m NN]	K_v [m ² /s]	ΔK_v [m ² /s]
65,1	4,04E-09	1,60E-09
65,0	3,71E-09	1,42E-09
64,9	3,63E-09	1,08E-09
64,8	3,73E-09	9,93E-10
64,7	3,86E-09	8,33E-10
64,6	3,61E-09	8,80E-10
64,5	3,54E-09	1,17E-09
64,4	3,64E-09	1,30E-09
64,3	4,09E-09	1,31E-09
64,2	4,56E-09	1,69E-09
64,1	4,95E-09	2,71E-09
64,0	6,19E-09	4,50E-09
63,7		
63,6	3,87E-10	4,42E-10
63,5	6,73E-10	4,82E-10
63,4	7,78E-10	5,53E-10
63,3	7,89E-10	5,61E-10
63,2	7,93E-10	6,40E-10

Tab. A.5: Diffusionskoeffizienten im Monimolimnion, aus der Entwicklung der SF₆-Verteilung berechnet

Anhang B

Wasseranalysen Hufeisensee

Mixolimnion (bis 24 m) und Monimolimnion (ab 24 m)

Nach Schulze [1993]

Parameter	Seetiefe		Einheit
	bis 24m	ab 24m	
O ²	-	0	mg/l
pH	7,9	6,9	-
Cl ⁻	239	8472	mg/l
SO ₄ ²⁻	1147	340	mg/l
NO ₂ ⁻	0,015	0,005	mg/l
NO ₃ ⁻	0,5	0,5	mg/l
NH ₄ ⁺	0,08	180	mg/l
Ca ²⁺	351	769	mg/l
Mg ²⁺	107	244	mg/l
K ⁺	10,1	57,5	mg/l
Na ⁺	202	5200	mg/l
DOC	6	46,6	mg/l
org. N	0,4	10,2	mg/l
oPO ₄ ³⁻	0,02	-	mg/l
GPO ₄ ³⁻	0,05	4,7	mg/l

Parameter	Seetiefe		Einheit
	bis 24m	ab 24m	
GH	73,7	159	°dH
KH	6,3	134,4	°dH
Fe	0,15	176	mg/l
Cd	0,2	0,55	µg/l
Cr	0,2	5,6	µg/l
Cu	0,2	3,5	µg/l
Mn	10	3750	µg/l
IC	25	106	µg/l
Al	0,07	0,19	µg/l
SiO ₂	0,45	24	µg/l
AOX	31	400	µg/l
H ₂ S	-	300	µg/l
Ni	11,4	5,5	µg/l
Pb	8,5	10	µg/l
Zn	30	70	µg/l

Anhang C

Molekulare Diffusionskoeffizienten

Wärme Die molekulare Diffusion der Wärme ist temperaturabhängig. Die in Tabelle C.1 aufgeführten Werte wurden CRC [1996] entnommen.

Temperatur	Molekularer Diffusionskoeffizient
0°C	$1,34 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$
5°C	$1,38 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$
10°C	$1,43 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$

Tab. C.1: Molekulare Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Temperatur

SF₆ In Kapitel 3.1.2 wird die Temperaturabhängigkeit der molekularen Diffusion von SF₆ in Wasser erläutert. Für die im Monimolimnion des Hufeisensees auftretenden Temperaturen von 1°C bis 8°C ergeben sich nach Gleichung 3.6 Werte der molekularen Diffusionskoeffizienten für SF₆ von $6,1 - 7,6 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$.

Ionen Für die im Monimolimnion des Hufeisensees auftretenden Hauptionen Na⁺ und Cl⁻ betragen die molekularen Diffusionskoeffizienten bei 25°C $1,334 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ beziehungsweise $2,032 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ [CRC, 1996]. Der molekulare Diffusionskoeffizient D_{mol} für das Salz errechnet sich nach CRC [1996] gemäß

$$D_{mol} = \frac{(z_+ + |z_-|) \cdot D_+ D_-}{z_+ D_+ + |z_-| D_-} \quad (\text{C.1})$$

D_+, D_- molekulare Diffusionskoeffizienten der Ionen
 z_+, z_- Ionenladung

Für NaCl ergibt sich damit in verdünnten Lösungen bei 25°C ein Wert von $1,6 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Die restlichen auftretenden Ionen besitzen Diffusionskoeffizienten, die im wesentlichen bei $1 - 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ liegen (bei 25°C).

Für eine NaCl-Lösung (0,5 normal, entspricht Meerwasser der Salinität 32,9) geben Siedler und Peters [1986] eine Beziehung für die den molaren Diffusionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Temperatur an.

$$D_{mol} = 10^{-11} \cdot (62,5 + 3,63 T) \quad [\text{m}^2/\text{s}] \quad (\text{C.2})$$

D_{mol} molekulare Diffusionskoeffizienten der Ionen
 T Temperatur [°C]

Bei den im Monimolimnion des Hufeisensees auftretenden Temperaturen von 1°C bis 8°C ergeben damit Werte für D_{mol} von $6,6 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ bis $9,15 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$.

Anhang D

Morphometrische Daten

Verwendete morphometrische Daten. Die Seefläche wurde nach digitalisierten Daten von Wieser und Birger [1994] in 1-Meter-Tiefenschritten berechnet. Im Bereich des Monimolimnions (unterhalb 67m NN) wurden die Flächendaten in 10cm-Tiefenschritten interpoliert. Die Volumendaten wurden aus den Seeflächen unter Annahme eines kreisförmigen Kegelstumpfes berechnet. Die Werte für Wasserstände über 90,4m NN wurden extrapoliert. Die Angaben für Fall 1 und 2 beziehen sich auf die in Kapitel 2.1 angegebenen Fälle.

Höhe NN [m]	Seefläche		Volumen unter gegebener Tiefe	
	[m ²] Fall 1	Fall 2	[m ³] Fall 1	Fall 2
92,8	872760	872760	6433150	6432005
92,4	851940	851940	6150646	6149501
92,0	831130	831130	5868142	5866997
91,2	789490	789490	5303134	5301989
90,4	747860	747860	4738126	4736981
89,9	721840	721840	4384996	4383851
89,4	693130	693130	4041166	4040021
88,9	665310	665310	3708466	3707321
88,4	640130	640130	3387816	3386671
87,9	611560	611560	3079106	3077961
87,4	560300	560300	2787256	2786111
86,9	504090	504090	2526136	2524991
86,4	423910	423910	2292776	2291631
85,9	341310	341310	2107606	2106461
85,4	311110	311110	1946806	1945661
84,9	296440	296440	1796136	1794991
84,4	284180	284180	1651756	1650611
83,4	260560	260560	1380476	1379331
82,4	235010	235010	1132936	1131791
81,4	194320	194320	915954	914809
80,4	131210	131210	754118	752973
79,4	107050	107050	636540	635395
78,4	91307	91307	537851	536706
77,4	80537	80537	452307	451162
76,4	72062	72062	376079	374934
75,4	64004	64004	308064	306919
74,4	55853	55853	248123	246978
73,4	46806	46806	196712	195567
72,4	40604	40604	153071	151926
71,4	34721	34721	115422	114277
70,4	28846	28846	83620	82475
69,4	22638	22638	57847	56703
68,4	15680	15680	38646	37501
67,4	10993	10993	25606	24461

Tab. D.1: Morphometrische Daten 92,8m NN - 67,4m NN

Höhe NN [m]	Seefläche		Volumen unter gegebener Tiefe [m ³]	
	Fall 1	Fall 2	Fall 1	Fall 2
67,1	10136	10136	22613	21462
67	9850	9850	21613	20462
66,9	9565	9565	20643	19492
66,8	9279	9279	19701	18550
66,7	8993	8993	18787	17636
66,6	8707	8707	17902	16751
66,5	8422	8422	17046	15895
66,4	8136	8136	16218	15067
66,3	7904	7904	15416	14265
66,2	7672	7672	14637	13486
66,1	7439	7439	13882	12731
66	7207	7207	13149	11998
65,9	6975	6975	12440	11289
65,8	6743	6743	11754	10603
65,7	6511	6511	11092	9941
65,6	6278	6278	10452	9301
65,5	6046	6046	9836	8685
65,4	5814	5814	9243	8092
65,3	5632	5632	8671	7520
65,2	5450	5450	8117	6966
65,1	5268	5268	7581	6430
65	5086	5086	7063	5912
64,9	4904	4904	6564	5413
64,8	4722	4722	6082	4931
64,7	4540	4540	5619	4468
64,6	4358	4358	5175	4023
64,5	4176	4176	4748	3597
64,4	3994	3994	4339	3188
64,3	3824	3744	3948	2802
64,2	3654	3495	3575	2440
64,1	3485	3245	3218	2103
64	3315	2996	2878	1791
63,9	3145	2746	2555	1504
63,8	2975	2496	2249	1242
63,7	2805	2247	1960	1005
63,6	2636	1997	1688	793
63,5	2466	1748	1433	606
63,4	2296	1498	1195	443
63,3	2195	1248	970	306
63,2	2093	999	756	194
63,1	1992	749	552	107
63	1890	499	358	45
62,9	1789	250	174	8
62,8	1687	0	0	0

Tab. D.2: Morphometrische Daten 67,1m NN - 62,8m NN

Anhang E

Übersicht über die SF₆-Profile

07.02.1995				14.03.1995			
Höhe (±8cm) [m NN]	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]			Höhe (±10cm) [m NN]	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]		
	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}		C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}
65,38	84	14	17%	65,56	84	20	24%
65,18	205	27	13%	65,36	404	59	15%
64,98	412	107	26%	65,16	477	67	14%
64,78	608	110	18%	64,96	783	170	22%
64,58	748	57	8%	64,76	1554	230	15%
64,38	1344	250	19%	64,56	1971	157	8%
64,18	1974	718	36%	64,36	3310	472	14%
63,98	7324	349	5%	64,16	3727	217	6%
63,78	8267	850	10%	63,96	7194	622	9%
63,58	5371	330	6%				
63,38	2262	460	20%				
63,18	692	31	5%				
62,98	145	36	25%				

05.04.1995				15.05.1995			
Höhe (±5cm) [m NN]	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]			Höhe (±5cm) [m NN]	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]		
	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}		C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}
65,29	552	44	8%	65,34	289	90	31%
65,09	817	86	11%	65,14	638	79	12%
64,89	1152	160	14%	64,94	882	85	10%
64,69	1620	130	8%	64,74	1372	110	8%
64,49	2436	181	7%	64,54	2176	144	7%
64,29	3503	219	6%	64,34	3453	193	6%
64,09	6454	856	13%	64,14	4547	230	5%
63,89	7177	1393	19%	63,94	5230	586	11%
63,69	5835	768	13%	63,74	5407	246	5%
63,49	3510	210	6%	63,54	4161	384	9%
63,29	1684	56	3%	63,34	1977	168	9%
				63,14	920	80	9%

21.06.1995				18.07.1995			
Höhe	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]			Höhe	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]		
(±5cm)				(±5cm)			
[m NN]	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}	[m NN]	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}
65,77	6	0	6%	65,29	596	80	13%
65,57	47	8	17%	65,09	1029	89	9%
65,37	488	191	39%	64,89	1414	106	8%
65,17	697	147	21%	64,69	1608	127	8%
64,97	1008	97	10%	64,49	2638	163	6%
64,77	1407	119	8%	64,29	4128	506	12%
64,57	2124	357	17%	64,09	4790	507	11%
64,37	3730	213	6%	63,89	4993	233	5%
64,17	4659	241	5%	63,69	4502	539	12%
63,97	5227	273	5%	63,49	3286	420	13%
63,77	5386	276	5%	63,29	1733	125	7%
63,57	3573	219	6%	63,09	1493	120	8%
63,37	2037	161	8%				
12.09.1995				11.10.1995			
Höhe	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]			Höhe	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]		
(±5cm)				(±3cm)			
[m NN]	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}	[m NN]	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}
65,42	440	65	15%	65,52	126	9	7%
65,22	686	136	20%	65,3	702	60	9%
65,02	925	73	8%	65,09	851	152	18%
64,82	1511	89	6%	64,89	1316	92	7%
64,62	2360	118	5%	64,67	2080	113	5%
64,42	3269	154	5%	64,47	2839	150	5%
64,22	3779	324	9%	64,26	3708	184	5%
64,02	4773	404	8%	64,05	4667	207	4%
63,82	5293	708	13%	63,86	5013	207	4%
63,62	4123	588	14%	63,66	4470	181	4%
63,42	2676	96	4%	63,46	3326	131	4%
63,22	1499	65	4%	63,26	2021	169	8%
				63,06	998	61	6%
17.04.1996				06.06.1996			
Höhe	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]			Höhe	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]		
(±3cm)				(±3cm)			
[m NN]	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}	[m NN]	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}
65,52	19	8	42%	65,52	22	2	11%
65,3	272	13	5%	65,3	220	17	8%
65,09	616	173	28%	65,09	683	83	12%
64,89	1374	211	15%	64,89	1521	111	7%
64,67	2078	124	6%	64,67	2294	280	12%
64,47	2611	148	6%	64,47	2992	160	5%
64,26	3526	169	5%	64,26	3545	182	5%
64,05	4016	190	5%	64,05	3980	180	5%
63,86	3775	300	8%	63,86	3949	193	5%
63,66	3692	143	4%	63,66	3696	329	9%
				63,46	2927	122	4%
				63,26	2215	96	4%

01.10.1996			
Höhe ($\pm 3\text{cm}$) [m NN]	SF ₆ - Konzentration [fmol/l]		
	C _{SF6}	Δ C _{SF6}	Δ C _{SF6}
65,52	25	3	10%
65,3	396	26	7%
65,09	1078	86	8%
64,89	1616	126	8%
64,67	2241	137	6%
64,47	2956	152	5%
64,26	3465	168	5%
64,05	3607	347	10%
63,86	3688	155	4%
63,66	3448	139	4%
63,46	2775	108	4%
63,26	1951	77	4%
63,06	1177	39	3%

Anhang F

Akima-Interpolation

Die Interpolation nach Hiroshi Akima definiert zwischen den Stützstellen ein Polynom dritten Grades.

$$P_i(x_i) = A_i + B_i \cdot (x - x_i) + C_i \cdot (x - x_i)^2 + D_i \cdot (x - x_i)^3 \quad (\text{F.1})$$

Es muß die Stetigkeit der Funktion und ihrer Ableitung an der Stützstelle gewährleistet sein. Daher müssen die folgenden Nebenbedingungen für zwei angrenzende Kurvenstücke erfüllt sein:

$$\begin{aligned} P_{i-1}(x_i) &= P_i(x_i) \\ P'_{i-1}(x_i) &= P'_i(x_i) \end{aligned}$$

Die Steigung t_i an der Stützstelle wird nach der von H. Akima bestimmten Steigungsformel berechnet.

$$t_i = \frac{|m_{i+1} - m_i| \cdot m_{i-1} + |m_{i-1} - m_{i-2}| \cdot m_i}{|m_{i+1} - m_i| + |m_{i-1} - m_{i-2}|} \quad (\text{F.2})$$

Dabei ist m_i die Steigung zwischen zwei Stützstellen

$$m_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (\text{F.3})$$

und dementsprechend

m_{i-2} die Steigung zwischen x_{i-2} und x_{i-1}

m_{i-1} die Steigung zwischen x_{i-1} und x_i

m_i die Steigung zwischen x_i und x_{i+1}

m_{i+1} die Steigung zwischen x_{i+1} und x_{i+2}

Definiert man nun in einem Teilintervall obiges Polynom dritter Ordnung mit der Bedingung, daß diese Funktion durch die i -te und $i+1$ -te Stützstelle verläuft, also daß gilt:

$$\begin{aligned} P_i(x_i) &= y_i \\ P_i(x_{i+1}) &= y_{i+1} \end{aligned}$$

und daß der Gradient der Funktion die nach Gleichung F.2 bestimmte Steigung aufweist,

$$\begin{aligned} P'_i(x_i) &= t_i \\ P'_i(x_{i+1}) &= t_{i+1} \end{aligned}$$

so können die Polynomkoeffizienten nach

$$\begin{aligned} A_i &= y_i \\ B_i &= t_i \\ C_i &= \frac{\frac{y_{i+1}-y_i}{x_{i+1}-x_i} - 2t_i - t_{i-1}}{x_{i+1} - x_i} \\ D_i &= \frac{t_i + t_{i-1} - 2\frac{y_{i+1}-y_i}{x_{i+1}-x_i}}{(x_{i+1} - x_i)^2} \end{aligned}$$

berechnet werden.

Eine ausführliche Beschreibung der Akima-Interpolation, die auch eine Pascal-Routine für die Akima-Interpolation beinhaltet, ist in c't [1989] zu finden.

Danksagungen

Hiermit möchten wir allen Mitarbeitern des UFZ-Umweltforschungszentrums Leipzig-Halle und des Instituts für Umweltphysik (IUP) der Universität Heidelberg recht herzlich danken, die zum Gelingen des Projektes beigetragen haben.

Im Fall des UFZ gilt unserer besonderer Dank Frau Asmussen und den Herren Dr. Richter, Haendel, Riedel und Russ für die unermüdliche Hilfe bei der Probennahme auf dem Hufeisensee. Den Drs. Christoph, Dermietzel, Schimmele, Schulze, Strauch, Wieser, Frau Schmitz und Herrn Kowski möchten wir für die freundliche Unterstützung und die Bereitstellung von Daten über den Hufeisensee danken. Auch die tatkräftige organisatorische Unterstützung durch Frau Schneider wissen wir zu schätzen.

Im Fall des IUP möchten wir uns bei Herrn Bader und Herrn Dr. Bayer für die Tritium-Messungen und bei Frau Facklam für die Deuterium- und ^{18}O -Analysen bedanken. Herrn Prof. Dr. Sonntag sei für seine stete Bereitschaft zu lehrreichen Diskussionen über die Isotopenhydrologie gedankt.

Herrn Dr. Döring und Frau Trefflich vom Institut für Agrarökonomie und Agrarraumgestaltung der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg danken wir für die freundliche Überlassung der Wetterdaten der Stationen Zöberitz und Seeben.

Dem Deutschen Wetterdienst (Herrn Mieskes und Herrn Schmidt in Offenbach und Frau Rafalczyk in Hamburg) sei für die zu wissenschaftlichen Zwecken gebührenfreie Überlassung der Wetterdaten der Stationen Schkeuditz und Halle-Kröllwitz gedankt. Herrn Dr. Schumann von der DWD-Station in Halle-Kröllwitz sei besonders für die hilfreichen Diskussionen über die lokale Meteorologie gedankt.

Bei Herrn Fischer vom Geologischen Landesamt Sachsen-Anhalt bedanken wir uns für aufschlußreiche Diskussionen zum hydrogeologischen Umfeld des Hufeisensees und für die Bereitstellung der Pegelstand-Zeitreihe für den Grundwasserpegel 39790.

Der Agrargenossenschaft Reideburg danken wir für die freundliche Überlassung der Daten zu den Bewässerungsentnahmen.

Herrn Eckert vom Wasserskiclub am Hufeisensee danken wir für seine Unterstützung und für die Mitteilung einer Reihe von Beobachtungen zum See.

Herrn Dr. Trösch von der Versuchsanstalt für Wasserbau, Hydrologie und Glaziologie (VAW) der ETH Zürich danken wir für die Überlassung des Quellcodes und der Handbücher für das Seemodell LIMNMOD.

Falls wir bei der Fülle der Informationsquellen jetzt noch jemanden unbeabsichtigterweise vergessen haben sollten, möchten wir Ihm/Ihr hiermit herzlich danken.

UFZ-Umweltforschungszentrum Leipzig-Halle GmbH
Sektion Hydrogeologie
Hallesche Straße 44
D-06246 Bad Lauchstädt
Telefon 034635/73-215
Telefax 034635/73-287