Katja Siemens

# Entwicklung eines aggregierten Modells zur Simulation der Gewässergüte in Talsperren als Baustein eines Flussgebietsmodells 

Dezember 2009

## Entwicklung eines aggregierten Modells zur Simulation der Gewässergüte in Talsperren als Baustein eines Flussgebietsmodells

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)<br>an der Fakultät Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften der Technischen Universität Dresden

vorgelegt von<br>Dipl. Hydrol. Katja Siemens<br>geb. am 14.04.1972<br>in Dresden

Gutachter: Prof. Dr. Jürgen Benndorf, Institut für Hydrobiologie, Technische Universität Dresden<br>Prof. Dr. Dietrich Borchardt,<br>Department Aquatische Ökosystemanalyse Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung - UFZ<br>Prof. Dr. Brigitte Nixdorf,<br>Lehrstuhl Gewässerschutz, Brandenburgische Technische Universität Cottbus

Eingereicht im Januar 2009

## Zusammenfassung

Der großräumige Abbau von Braunkohle in der Lausitz führte in der Vergangenheit zu einer extremen Beeinflussung des Wasserhaushaltes im Einzugsgebiet der Spree. Mit dem Beginn der Sanierung und Flutung der Tagebaue kommt es nun langfristig zu einer verstärkten Nutzung der existierenden Oberflächengewässer und der Einbindung der entstehenden Tagebaurestseen in das Fließgewässernetz.

Die Kopplung von Mengenbewirtschaftungsmodellen mit Gütemodellen berücksichtigt die Verfügbarkeit und Verteilung der begrenzten Ressource Wasser im Einzugsgebiet und der aus der Bewirtschaftung resultierenden Gewässergüte. Dies entspricht auch dem Leitbild der EU-WRRL (2000) für ein integriertes Flussgebietsmanagement, was eine einzugsgebietsbezogene Betrachtung der vorhandenen Ressourcen unter Berücksichtigung aller beeinflussten und beeinflussenden Kriterien fordert.

Werden Modelle, die unterschiedlich sensitive und komplexe Systeme abbilden, miteinander gekoppelt, erfordert dies eine Anpassung der Datenstruktur und der zeitlichen Skalen. Schwerpunkt dieser Arbeit war die Entwicklung einfacher, robuster Simulationswerkzeuge für die Prognose der Gewässergüte in den Talsperren Bautzen und Quitzdorf. Als Basis diente das komplexe Standgewässergütemodell SALMO. Das Modell wurde zunächst um einfache Algorithmen ergänzt, so dass es trotz einer angepassten, stark reduzierten Datengrundlage, plausible Ergebnisse simulierte. Stochastisch erzeugte Bewirtschaftungsszenarien und die komplex simulierten Modellergebnisse bezüglich der resultierenden Gewässergüte, wurden als Trainingsdaten für ein Künstliches Neuronales Netz (ANN) genutzt. Die für beide Talsperren trainierten ANN sind als effektive Black-Box-Module in der Lage, das komplexe Systemverhalten des deterministischen Modells SALMO widerzuspiegeln.

Durch eine Kopplung der entwickelten ANN mit dem Bewirtschaftungsmodell WBalMo ist es möglich, Bewirtschaftungsalternativen hinsichtlich ihrer Konsequenzen für die Gewässergüte zu bewerten.

ANN sind systemgebundene Modelle, die nicht auf andere Gewässersysteme übertragen werden können. Allerdings stellt die hier erarbeitete Methodik einen fundierten Ansatz dar, der für die Entwicklung weiterer aggregierter Gütemodule im Rahmen integrierter Bewirtschaftungsmodelle angewendet werden kann.


#### Abstract

The large-scale extraction of lignite in Lusatia in the past had an extreme impact on the water balance of the Spree river catchment. The restoration and flooding of the opencast pits put heavy demand on existing surface waters for a long time period. The resulting artificial lakes have to be integrated in the riverine network.

The coupling of management models and water quality models allows to consider both availability and distribution of limited water resources in the catchment and resulting water quality. This is corresponding to the principles of the EU-WFD for integrated river basin management, which is a basin-related consideration of available resources taking into account all influencing and influenced characteristics.

Adjustment of data structure and time scale is necessary if models describing unequally sensitive and complex systems are to be coupled. Main focus of this task was to develop simple and robust simulation tools for the prediction of water quality in the reservoirs Bautzen and Quitzdorf. The complex water quality model SALMO served as a basis.

In a first step, simple algorithms had to be amended in order to generate plausible simulation results despite of an adapted reduced data base. Stochastically generated management scenarios and complex simulated model results regarding the resulting water quality were employed as training data for an Artificial Neuronal Network (ANN). The trained ANN's are efficient black box modules. As such they are able to mirror complex system behaviour of the deterministic model SALMO.

By coupling the developed ANN with the management model WBalMo it is possible to evaluate management strategies in terms of their impact on the quality of the water bodies.

ANN's are system-linked models. A transfer to other aquatic systems is not possible. However, the methodology developed here represents an in-depth approach which is applicable to the development of further aggregated water quality models in the framework of integrated management models.


## Inhaltsverzeichnis

Symbole und Abkürzungen ..... ix
1 Einleitung ..... 1
2 Grundlagen ..... 5
2.1 Modelle ..... 5
2.2 Flussgebietsmodellierung ..... 13
2.3 Gewässergütemodellierung ..... 19
2.3.1 Gewässergüte ..... 20
2.3.2 Standgewässergütemodelle ..... 22
2.4 Künstliche neuronale Netze - ANN ..... 30
3 Methoden ..... 37
3.1 Untersuchungsgewässer ..... 38
3.2 Schnittstellen ..... 41
3.3 Messprogramm ..... 42
3.4 Datenbank ..... 43
3.5 Datenauswertung ..... 44
3.6 Gütemodellierung ..... 47
3.6.1 Komplexe Gütemodellierung ..... 48
3.6.2 $\quad$ Reduzierte Gütemodellierung ..... 49
3.6.3 Stochastische Gütemodellierung ..... 53
3.6.4 Modellaggregation - ANN ..... 55
4 Ergebnisse ..... 59
4.1 Messprogramm ..... 59
4.2 Datenauswertung ..... 61
4.3 Gütemodellierung ..... 72
4.3.1 Komplexe Gütemodellierung ..... 72
4.3.2 $\quad$ Reduzierte Gütemodellierung ..... 79
4.3.3 $\quad$ Stochastische Gütemodellierung ..... 81
4.3.4 Modellaggregation - ANN ..... 87
4.4 Modellkopplung ..... 94
5 Diskussion ..... 99
5.1 Integriertes Flussgebietsmanagement ..... 99
5.2 Gütemodule ..... 101
5.2.1 Mittelwerte ..... 102
5.2.2 Empirische Beziehungen ..... 102
5.3 Von der komplexen zur aggregierten Modellierung ..... 103
5.3.1 Modellanpassung ..... 104
5.3.2 Modellreduktion ..... 105
5.3.3 Modellaggregation - ANN ..... 107
5.4 Beleuchtung des eigenen Beitrags ..... 108
6 Schlussfolgerungen und Ausblick ..... 109
A Talsperre Bautzen ..... 125
B Talsperre Quitzdorf ..... 137
C Parametrisierung von SALMO ..... 147
D Datenübergabe an WBaIMo ..... 149

## Tabellenverzeichnis

2.1 Modell-Dichotomien ..... 7
2.2 Nutzungsanforderungen an Flusseinzugsgebiete ..... 14
2.3 Trophiekontinuum bezogen auf Grenzwerte von $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ während der Frühjahrs- zirkulation ..... 21
2.4 Standgewässermodelle, Evolution, Publikation ..... 25
3.1 Bezeichnung der Gütekriterien ..... 42
3.2 Variation der Stoffimporte für die stochastische Simulation ..... 54
4.1 Repräsentation der Gütekriterien im aggregierten Gütemodell ..... 62
4.2 Nachweisgrenze von Arsen- und Schwermetall ..... 68
4.3 Ableitung abhängiger Größen über Regressionsfunktionen ..... 71
4.4 Standardwerte für die Nährstoffkonzentration im Zufluss ..... 95
C. 1 Parametrisierung Salmo ..... 148
D. 1 Parametrisierung Monatsmittel ..... 150
D. 2 Parametrisierung Jahresmittel ..... 151

## Abbildungsverzeichnis

2.1 Beziehung zwischen Modellkomplexität und Modellgültigkeit ..... 10
2.2 Struktur des Modells SALMO ..... 29
2.3 ANN - McCulloch-Pitts-Zelle ..... 31
2.4 Grundschema eines Perzeptrons ..... 32
2.5 Grundschema eines Feedforward-Netzes ..... 33
2.6 Sigmoide und lineare Übertragungsfunktion ..... 33
3.1 Konzept zur Erarbeitung eines vereinfachten Gütemoduls ..... 37
3.2 Spreeeinzugsgebiet - Lage aller berücksichtigten Flie $ß$ - und Standgewässer. ..... 39
3.3 Umrisse der Untersuchungsgewässer und Lage der Messstellen ..... 40
3.4 Struktur der Access-Datenbank (Beispiel TS Bautzen) ..... 44
3.5 Eingangs- und Ausgangsdatenmatrix von SALMO ..... 50
3.6 Ableitung der Schichtungsperiode ..... 52
3.7 Nutzung von Eingangs- und Ausgangsdaten stochastischer Simulationen zum Training von ANN ..... 55
3.8 Unterteilung der Daten für Training, Validierung und Test des ANN ..... 56
4.1 TS Quitzdorf - oPO 4 - P-Vertikalprofile an der Sediment-Wasser-Kontaktzone ..... 60
4.2 TS Quitzdorf - Verteilung des Chlorophylls ..... 61
4.3 TS Bautzen - Entwicklung der Phosphor-Bilanz am Zu- und Ablauf ..... 63
4.4 TS Bautzen - Trophieentwicklung (Vollenweidermodell) ..... 64
4.5 TS Bautzen - Abhängigkeit der berechneten P-Freisetzungsrate von der Ni-65
4.6 TS Bautzen - Frachten des anorganischen Stickstoffs am Zulauf, am Ablauf der Vorsperre und am Grundablass der Talsperre ..... 65
4.7 TS Bautzen - Verlauf von Stauspiegel, Sichttiefe sowie Phytoplankton-Frischmasseund Sestontrockenmasse im Jahr 199766
4.8 TS Quitzdorf - Boxplots von K und Na ..... 67
4.9 TS Bautzen - Boxplots von pH und Mn ..... 68
4.10 TS Bautzen - Boxplots von $\mathrm{N}_{\text {ges }}$ und $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ ..... 69
4.11 TS Bautzen und TS Quitzdorf - Boxplots der Sauerstoffkonzentration ..... 70
4.12 TS Bautzen - empirische Ableitung von $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ aus $\mathrm{N}_{\text {ges }}$ ..... 71
4.13 TS Quitzdorf - empirische Ableitung von $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ aus $\mathrm{N}_{\text {ges }}$, von $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ aus$\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$ sowie Chl -a aus Phytoplankton72
4.14 TS Bautzen - SALMO-Modellsimulation: Szenario (1997) mit Standardpa-rametern73
4.15 TS Bautzen - SALMO-Modellsimulation: Szenario (1997) mit Berücksichti-gung einer erhöhten Denitrifikation74
4.16 TS Bautzen - SALMO-Modellsimulation: Szenario (1997) mit Berücksichti-
74 gung einer erhöhten Denitrifikation und Lichtlimitation
4.17 TS Quitzdorf - SALMO-Simulation mit Standardparametern und mit dem angepassten Sediment-Submodell ..... 78
4.18 TS Bautzen - Bestimmtheitsmaß $r^{2}$ der empirischen Ableitung von $T E$ aus ..... 80
4.19 TS Bautzen - empirische Ableitung TH aus TE ..... 80
4.20 TS Quitzdorf - Bestimmtheitsmaß $r^{2}$ der empirischen Ableitung von $T E$ aus$\square$
$\sum R G$ über 1... 365 Tage (links), empirische Ableitung $T E$ aus $\sum_{i=1}^{30} R G_{i}$ (rechts) ..... 81
4.21 Simulation mit kompletter und reduzierter Eingangsdatenmatrix (1997) ..... 82
4.22 TS Bautzen - Vergleich von stochastischen und deterministischen Simulationen ..... 83
4.23 TS Bautzen - Boxplot der stochastischen Simulation und Monatsmittel derhistorischen Messungen und reduzierten Gütemodellierung; P-SRP84
4.24 TS Bautzen - Boxplot der stochastischen Simulation und Monatsmittel der ..... 85
4.25 TS Quitzdorf - Boxplot der stochastischen Simulation und Monatsmittel der86
4.26 TS Bautzen - Anpassung des neuronalen Netzes für das Epilimnion - unge-schichtete Verhältnisse87
4.27 TS Bautzen - Boxplot von stochastischen SALMO-Simulationen und neuro- ..... 88
4.28 TS Bautzen - Korrelation zwischen SALMO-Ergebnissen und neuronalemNetz89
4.29 TS Bautzen - ANN- und stochastische SALMO-Simulation für ein zufällig ausgewähltes Jahr ..... 90
4.30 TS Quitzdorf - Korrelation zwischen SALMO-Ergebnissen und neuronalemNetz92
4.31 TS Quitzdorf - SALMO und ANN- und stochastische SALMO-Simulation ..... 93
4.32 TS Quitzdorf - SALMO und ANN mit und ohne Gedächtnis ..... 93
4.33 Bausteine des Gütemoduls für die Talsperren Bautzen und Quitzdorf ..... 94
4.34 TS Bautzen - Simulationsergebnisse Modul und langjährige Monatsmittelwerte ..... 97
4.35 TS Quitzdorf - Simulationsergebnisse Modul und langjährige Monatsmittel- ..... $\square$
werte ..... 98
A. 1 TS Bautzen - Monatsboxplots K, Na und SO4 ..... 126
A. 2 TS Bautzen - Monatsboxplots $\mathrm{Al}, \mathrm{Cl}$ und $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}$ ..... 127
A. 3 TS Bautzen - Monatsboxplots Mg und Ca ..... 128
A. 4 TS Bautzen - Monatsboxplots pH , Mn und BSB5 ..... 129
A. 5 TS Bautzen - Monatsboxplots T, $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ und $\mathrm{Chl}-\mathrm{a}$ ..... 130
A. 6 TS Bautzen - Monatsboxplots NH4 - N, NO3 - N und NO2 - N ..... 131
A. 7 TS Bautzen - Monatsboxplots O2, P - SRP und Phytoplankton ..... 132
A. 8 TS Bautzen - Ableitungen von $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ und $\mathrm{Chl}-\mathrm{a}$ ..... 133
A. 9 TS Bautzen - Simulation mit kompletter und reduzierter Eingangsdatenma-trix $(1996,1998)$134
A. 10 TS Bautzen - Boxplot von stochastischen SALMO-Simulationen und neuro- nalem Netz ..... 135
B. 1 TS Quitzdorf - Monatsboxplots K, Na und SO4 ..... 138
B. 2 TS Quitzdorf - Monatsboxplots Al und Cl und Fe ..... 139
B. 3 TS Quitzdorf - Monatsboxplots Mg und Ca ..... 140
B. 4 TS Quitzdorf - Monatsboxplots pH , Mn und BSB5 ..... 141
B. 5 TS Quitzdorf - Monatsboxplots T, $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ und Chl - a ..... 142
B. 6 TS Quitzdorf - Monatsboxplots NH4 - N, NO3 - N und NO2 - N ..... 143
B. 7 TS Quitzdorf - Monatsboxplots O2, P - SRP und Phytoplankton ..... 144
B. 8 TS Quitzdorf - Simulation mit kompletter und reduzierter Eingangsdatenma-trix $(1994,1999)$145
B. 9 TS Quitzdorf - Boxplot von stochastischen SALMO-Simulationen und neu-ronalem Netz-mit/ohne „Gedächtnis"146

## Symbole und Abkürzungen

## Messgrößen

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
| :---: | :---: | :---: |
| $\mathrm{BSB}_{5}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Biologischer Sauerstoffbedarf |
| Chl-a | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Chlorophyll a |
| DIC | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Gelöster anorganischer Kohlenstoff (engl. dissolved inorganic carbon) |
| DOC | $m g L^{-1}$ | Gelöster organischer Kohlenstoff (engl. dissolved organic) |
| $\mathrm{F}_{\text {ges }}$ | $m g L^{-1}$ | Gesamteisen |
| $\mathrm{N}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Gesamtstickstoff |
| $\mathrm{NH}_{4}-\mathrm{N}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Ammonium-Stickstoff |
| $\mathrm{NO}_{2}-\mathrm{N}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Nitrit-Stickstoff |
| $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Nitrat-Stickstoff |
| NWG | - | Nachweisgrenze |
| $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$ | $m g L^{-1}$ | Orthophosphat-Phosphor |
| $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Gesamtphosphor |
| PAR | $\mathrm{Jcm}^{-2} \mathrm{~d}^{-2}$ | Photosynthetisch aktive Strahlung (engl. photosynthetically active radiation) |
| $\mathrm{P}-\mathrm{SRP}$ | $m g L^{-1}$ | Gelöster reaktiver Phosphor (engl. soluble reactive phosphorus) |
| RG | $\mathrm{Jcm}^{-2} \mathrm{~d}^{-2}$ | Globalstrahlung |
| TOC | $m g L^{-1}$ | Gesamter organischer Kohlenstoff (engl. total organic carbon) |

## Symbole des Modells SALMO

| Symbol | Einheit | Bedeutung |
| :---: | :---: | :---: |
| AE | $\mathrm{m}^{3} \mathrm{~d}^{-1}$ | Wasserfluss vom Epilimnion in das Hypolimnion |
| AH | $\mathrm{m}^{3} \mathrm{~d}^{-1}$ | Wasserfluss vom Hypolimnion in das Epilimnion |
| D | $m g L^{-1}$ | Detrituskonzentration in der durchmischten Schicht |
| DH | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Detrituskonzentration im Hypolimnion |
| IIN | $\mathrm{Jcm}^{-2} \mathrm{~d}^{-2}$ | Globalstrahlung |
| N | $m g L^{-1}$ | Konzentration des gesamten anorganischen Stickstoffs in der durchmischten Schicht |
| NH | $m g L^{-1}$ | Konzentration des gesamten anorganischen Stickstoffs im Hypolimnion |
| NHIN | $m g L^{-1}$ | Import von Stickstoff in das Hypolimnion |
| NIN | $\mathrm{gm}^{-3}$ | Stickstoffimport durch die Zuflüsse |
| OH | $m g L^{-1}$ | Sauerstoffkonzentration im Hypolimnion |
| OHIN | $m g L^{-1}$ | Import von Sauerstoff in das Hypolimnion |
| OIN | $m g L^{-1}$ | Sauerstoffkonzentration im zufließenden Wasser |
| P | $\mathrm{mg} \mathrm{m}^{-3}$ | SRP-Konzentration (Ortho-Phosphat) in der durchmischten Schicht |
| PH | $\mathrm{mg} \mathrm{m}{ }^{-3}$ | SRP-Konzentration (Ortho-Phosphat) im Hypolimnion |
| PHIN | $\mathrm{mg} \mathrm{m}^{-3}$ | Phosphatimport in das Hypolimnion |
| PIN | $\mathrm{mg} \mathrm{m}^{-3}$ | Import von Phosphat (SRP) durch die Zuflüsse |
| POMHIN | $m g L^{-1}$ | Import von Phosphat (SRP) in das Hypolimnion |
| POMIN | $\mathrm{gm}^{-3}$ | Import an partikulären organischen Material |
| QHIN | $\mathrm{m}^{3} \mathrm{~d}^{-1}$ | Zufluss in das Hypolimnion |
| QHOUT | $\mathrm{m}^{3} \mathrm{~d}^{-1}$ | Abfluss aus dem Hypolimnion |
| QIN | $\mathrm{m}^{3} \mathrm{~d}^{-1}$ | Zufluss in die durchmischte Schicht |
| QOUT | $\mathrm{m}^{3} \mathrm{~d}^{-1}$ | Abfluss aus der durchmischten Schicht |
| S | m | Stauspiegel |
| T | ${ }^{\circ} \mathrm{C}$ | Epilimniontemperatur |
| TH | ${ }^{\circ} \mathrm{C}$ | Hypolimniontemperatur |
| V | $\mathrm{m}^{3}$ | Gewässervolumen |


| Fortsetzung |  |  |
| :--- | :--- | :--- |
| Symbol | Einheit | Bedeutung |
| VE | $\mathrm{m}^{3}$ | Epilimnionvolumen |
| VH | $\mathrm{m}^{3}$ | Hypolimnionvolumen |
| X1, X2 | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Phytoplanktonbiomasse (2 Gruppen) in der <br> durchmischten Schicht |
| XH1, XH2 | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Phytoplanktonbiomasse im Hypolimnion |
| XHIN1, XHIN2 | $\mathrm{mgm}^{-3}$ | Import von Phytoplankton in das das Hypolim- |
|  |  | nion |
| XIN1, XIN2 | $\mathrm{gm}^{-3}$ | Import von Phytoplankton im zufließenden |
|  |  | Wasser |
| Z | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Zooplanktonbiomasse in der durchmischten |
|  | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Schicht |
| ZH | $\mathrm{mgm}^{-3}$ | Zooplanktonbiomasse im Hypolimnion |
| ZHIN | $\mathrm{m}^{2}$ | Hyport von Zooplankton in das Hypolimnion |
| ZHM | $\mathrm{gm}^{-3}$ | Zooplanktonbiomasse im zufließenden Wasser |
| ZIN | m | Effektive Durchmischungstiefe (mittlere Tiefe |
| ZMIX |  | der durchmischten Schicht) |
|  |  | Tatsächliche Durchmischungstiefe |
| ZMIXREAL | m |  |

## Modelle und Modellbegriffe

| Abkürzung | Bedeutung |
| :--- | :--- |
| ANN | Künstliches Neuronales Netz (engl. artificial <br> neural network) |
| FEG | Flusseinzugsgebiet |
| MLP | multi layer perceptron |
| N-A-Modelle | Niederschlag-Abfluss-Modell |
| SALMO | Simulation by an Analytical Lake Model |
| WbalMo | Water Balance Model |

## Institutionen und Einrichtungen

| Abkürzung | Bedeutung |
| :--- | :--- |
| DFG | Deutsche Forschungsgemeinschaft |
| IKSE | Internationale Kommission zum Schutz der El- |
| IKSR | be |
|  | Internationale Kommission zum Schutz des |
| LfUG | Rheins |
| LTV Sachsen | Landesamt für Umwelt und Geologie Sachsen |
|  | Landestalsperrenverwaltung des Freistaates |
| RWTH Aachen | Sachsen |
|  | Rheinisch-Westfälische Technische Hochschu- |
| TU Dresden | le Aachen |
| TS | Technische Universität Dresden |
| TSB | Talsperre |
| TSQ | Talsperre Bautzen |

## 1 Einleitung

Die Entstehung der mitteleuropäischen Braunkohlelagen vor 6 bis 36 Millionen Jahren hat ihre Ursache in einer Klimaänderung hin zu wärmeren und humideren Bedingungen. Es entstanden riesige tropische Sumpfmoorwälder. Abgestorbene Pflanzenteile versanken im Morast. Durch Verpressen und Verdichten der Pflanzenlagen entstand, bedingt durch anoxische Verhältnisse, die Braunkohle (RÖCKMANN, 2001).

In der Niederlausitz ca. 50 km südöstlich von Berlin liegt das faächenmäßig größte Braunkohlerevier Deutschlands. Die ersten Braunkohlefunde datieren auf das Jahr 1789. Die wirtschaftliche Nutzung begann 1850 und 1872 wurde hier die erste Brikettfabrik der Welt in Betrieb genommen. Nach dem 2. Weltkrieg setzte die neu entstandene DDR in Hinblick auf die Energieversorgung der Wirtschaft und Bevölkerung in starkem Maße auf die Braunkohle, weil auf ihrem Gebiet andere Energieträger nur in sehr begrenztem Umfang zur Verfügung standen. Unter dem Eindruck der Ölkrisen in den 1970er Jahren ging man dazu über, alle verfügbaren Braunkohlelagerstätten in das Energiekonzept einzubeziehen. Annähernd 40 Tagebaue waren in Betrieb mit einer Gesamtfläche von ca. $800 \mathrm{~km}^{2}$. Die notwendige Grundwasserabsenkung im Abbaugebiet und Überleitung von Sümpfungswässern in angrenzende Oberflächengewässer führte zu einer nachhaltigen Beeinflussung des Wasserhaushaltes (ARnOLD und Kuhlmann, 1993). Die Fläche der durch die Grundwasserabsenkung betroffenen Gebiete beläuft sich auf ca. $2000 \mathrm{~km}^{2}$ und erzeugte ein Defizitvolumen im Grundwasserhaushalt von 13 Mrd. m ${ }^{3}$ (LUCKNER und EICHHORN, 1996.

Durch die Überleitung des Grundwassers in die angrenzende Spree kam es hier über Jahrzehnte zu einer künstlichen Abflusserhöhung. Mit dem Ende der großräumigen Braunkohleförderung im Jahr 1994 besteht seitdem die Aufgabe einer nachhaltigen Sanierung des gesamten Gebietes. Die Restlöcher werden in einem Zeitraum von ca. 35 Jahren geflutet. Durch den Wegfall der Überleitung normalisiert sich langfristig auch der Grundwasserspiegel. Andererseits stehen An- und Unterlieger vor dem Problem, dass etablierte Nutzungen des Oberflächenwassers, durch den über Jahrzehnte regulierten Abfluss im Einzugsgebiet, nun mit Mengendefiziten konfrontiert zu werden.

Als weiteres Problem bei der Sanierung werden die während des Braunkohleabbaus entstandenen riesigen kulturfeindlichen Halden und Restlöcher mit hohen Anteilen an zweiwerti-
gem Eisen und Sulfat sowie niedrigen pH -Werten gesehen. Ursache dafür sind die Verwitterungsprodukte der verbreitet auftretenden Eisensulfidminerale $\mathrm{FeS}_{2}$ (Pyrit und Markasit). Bei Wiederanstieg des Grundwassers werden diese vollständig ausgewaschen und führen zu einer starken Versauerung der entstehenden Seen. Diesem Prozess kann durch Mikroorganismen im Seesediment entgegen gewirkt werden. Dies erfolgt durch die Oxidation organischer Substanz und den Verbrauch von Protonen (RÖCKMANN, 2001). Als wichtigste Gegenmaßnahme ist es deshalb erforderlich, über mehrere Jahrzehnte große Mengen an Wasser aus den angrenzenden Oberflächengewässern zu entnehmen und in die sich füllenden Restseen einzuleiten. Da hier die entstehenden Seen in das Flusseinzugsgebiet der Spree eingebunden werden, wirken diese wiederum auf die unterliegenden Flussabschnitte zurück.

Im Einzugsgebiet der Spree sind daher langfristig Entscheidungen über eine optimale Sanierung der Tagebaurestlöcher unter Berücksichtigung der noch im Gebiet vorhandenen Nutzungsansprüche zu treffen. Dabei interessiert neben einer mengenwirtschaflich konsistenten Planung auch die langfristige Entwicklung der Gewässergüte im gesamten Einzugsgebiet. Für die Zuleitung von Oberflächenwasser ist vor allem dessen potenziell mögliche Pufferkapazität von Bedeutung. Durch basisches Oberffächenwasser kann ein Teil der frei verfügbaren Protonen aus dem Grundwasser abgepuffert werden, was zu einer Verbesserung des pH -Wertes führt (PEIN und PFEIFFER, 1996).

Der zusätzliche Bewirtschaftungsdruck auf die Gewässer wirkt jedoch auch auf die Wassergüte der Oberflächengewässer selbst zurück und kann z.B. zu verstärktem Algenwachstum oder Sedimentresuspension führen. Außerdem könnten durch eine intensivierte Wassermengenbewirtschaftung andere Nutzungsarten beeinträchtigt werden.

Das Modellsystem WBalMo (Abschnitt 2.2) ist ein seit vielen Jahren in der Praxis bewährtes Werkzeug zur wasserwirtschaftlichen Planung im Spreeeinzugsgebiet. Prognosen zur langfristigen Entwicklung des Wasserdargebotes berücksichtigen neben natürlichen Einflussfaktoren (Niederschlag, Verdunstung) auch die anthropogenen Nutzungen im Einzugsgebiet (Entnahme, Über- oder Einleitung, Speicherwirtschaft) (WALTHER, 2003).

Im Rahmen eines vom Bundesministerium für Bildung und Forschung sowie den Ländern Sachsen und Brandenburg geförderten Projektverbundes „Untersuchung zur Gewässerbeschaffenheitsentwicklung der Spree" (KÖNGETER, 2004) wurde für das gesamte Spreeeinzugsgebiet ein gekoppeltes Bewirtschaftungs-Gewässergütemodell entwickelt. Ausgehend von einer konkret vorgegebenen Wassermengenbewirtschaftungsstrategie sollte mit Hilfe einfacher Simulationswerkzeuge eine Prognose ausgewählter Gütekriterien ermöglicht werden. Als Simulationsgrundlage diente dabei das Mengenbewirtschaftungsmodell WBalMo. Für unterschiedliche Teilsysteme ${ }^{1}$ wurden durch die beteiligten Hochschulen und Unterneh-

[^0]men Modellbausteine für die Prognose von insgesamt 24 Einzel- und Stoffgruppen entwickelt (Tab. 3.1).

Die im Oberlauf von Spree und Schwarzem Schöps gelegenen Stauhaltungen Bautzen und Quitzdorf bestimmen wesentlich die Wassergüte der nachfolgenden Flussabschnitte und fungieren als wassermengenwirtschaftliche Speicher. Beide Talsperren sind in die Auffüllung der Restlöcher des Braunkohletagebaus einbezogen. Für sie wurde eine im Sommer abzugebende Wassermenge von 20 Mio. $\mathrm{m}^{3}$ vertraglich zwischen der Landestalsperrenverwaltung des Freistaates Sachsen (LTV) und der Lausitzer Braunkohle AG (LAUBAG) vereinbart. Hierfür ist es erforderlich, den Wasserspiegel der Talsperre Bautzen um etwa 4 m abzusenken, was einem Stauinhalt von 25,6 Mio. $\mathrm{m}^{3}$ entspricht.

Neben den absoluten Wassermengen interessierte auch die zu erwartende Pufferkapazität des zugeleiteten Oberflächenwassers und die Güte des abgegebenen Wassers in den nachfolgenden Gewässerabschnitt. Die Kopplung des Kernmodells WBalMo mit Gewässergütemodellen erforderte die Anpassung der Modelle auf eine gemeinsame Daten- und Zeitskala. Das Kernmodell war neben der Aufbereitung der Bewirtschaftungsdaten auch für die Datenübergabe in und aus den Gütemodulen zuständig (Abschnitt 3.6. Andererseits war eine Abschätzung der Wassergüte in den Gewässern selbst notwendig.

Ziel der hier vorgestellten Arbeit war die Entwicklung, Anpassung und Evaluierung reduzierter Gütemodelle für die Talsperren Bautzen und Quitzdorf. Als Grundlage diente das komplexe Standgewässergütemodell SALMO. Das Modell wurde um einfache Algorithmen ergänzt, die zur Generierung einer konsistenten Eingangsdatenmatrix (Abschnitt 3.6.2) von Bedeutung waren. Die Simulationsergebnisse mit Bewirtschaftungsszenarien wurden als Trainingsdaten für die Modellaggregation mit Hilfe eines Künstlichen Neuronalen Netzes (ANN) genutzt.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Frage, inwieweit kausales Prozesswissen von Standgewässersystemen, das in komplexen Modellen 'verpackt' ist, über Modellaggregation reduziert werden kann, ohne an Plausibilität einzubüßen.

## 2 Grundlagen

Der Schwerpunkt dieser Arbeit lag in der Entwicklung eines aggregierten ökologischen Modells zur Simulation der Gewässergüte in Talsperren unter Verwendung künstlicher neuronaler Netze (ANN). Als Grundlage diente ein komplexes deterministisches Gewässergütemodell. Das aggregierte Modell wurde in ein Flussgebietsmodell eingebunden. Dieses Modell diente der Simulation stochastisch generierter Bewirtschaftungsszenarien für das gesamte Einzugsgebiet. Gleichzeitig war es als Kernmodell für die Übergabe aller Eingangsdaten und Übernahme der Simulationsergebnisse vom aggregierten Gütemodell von zentraler Bedeutung.

Die hier vorgestellten Grundlagen definieren zum einen wichtige Begriffe (Modell, Gewässergüte) und erläutern und vertiefen die unterschiedlichen verwendeten Modelltypen (Flussgebietsmodell, Gewässergütemodell, ANN), die für die Bearbeitung wesentlich waren. Zum anderen werden Bewertungskriterien zur Beurteilung der Modellgüte vorgestellt. Da eine Aggregation eines komplexen Modells immer mit einem Informationsverlust einhergeht, war es notwendig zu entscheiden, ob das abgeleitete vereinfachte Modell robuste Ergebnisse produziert.

Durch die Kopplung eines Gewässergütemodells an ein Bewirtschaftungsmodell wurden zwei unterschiedlich dynamische Modelle gekoppelt, die Systeme unterschiedlicher Dynamik repräsentieren. Die dabei auftretenden Probleme beim Übergang von einer Skala zur anderen wird hier ebenfalls diskutiert.

### 2.1 Modelle

Ein Modell ist ein vereinfachendes Abbild der Wirklichkeit. Ein Modell zeichnet sich demnach durch Abstraktion aus. Die bewusste Vernachlässigung bestimmter Merkmale hat das Ziel, die für den Modellzweck wesentlichen Systemeigenschaften hervorzuheben. Der Modellzweck oder das Modellziel können dabei ganz unterschiedlich motiviert sein. So können Modelle zu Analyse und zum Erkenntnisgewinn über in komplexen Systemen ablaufende

Prozesse und deren Eigenschaften und Abhängigkeiten dienen und zur Testung von Hypothesen und Annahmen genutzt werden. Dabei haben mathematische Modelle vor Experimenten im Freiland oder Labor den Vorteil, nicht an zeitliche oder räumliche Grenzen zu stoßen, da diese beliebig wiederholbar sind. Weiterhin lassen sich mit Hilfe mathematischer und statistischer Verfahren ansonsten schwer messbare Größen quantifizieren. Im Folgenden wird ausschließlich auf die Nutzung mathematischer Modelle eingegangen. Diese Gruppe von Modellen kann auch für die Inter- oder Extrapolation nichtlinearer Prozesse eingesetzt werden. Damit sind Vorhersagen komplexer Prozesse möglich wie beispielsweise bei der Wettervorhersage. Als Managementwerkzeuge helfen Modelle, die Konsequenzen unterschiedlicher Handlungsoptionen aufzuzeigen (SOETAERT \& HERMAN, 2009). Dazu zählen beispielsweise auch Bewirtschaftungsstrategien von Flusseinzugsgebieten hinsichtlich ihrer Konsequenzen für die Gewässergüte zu bewerten, abzuwägen und zu optimieren.

Eine von weiten Kreisen der Forschung anerkannte Theorie wurde durch STACHOWIAK (1973) entwickelt. Danach ist der Begriff Modell durch drei Merkmale gekennzeichnet:

1. Abbildung. Ein Modell ist immer ein Abbild von etwas, eine Repräsentation natürlicher oder künstlicher Originale, die selbst wieder Modelle sein können.
2. Verkürzung. Ein Modell erfasst nicht alle Attribute des Originals, sondern nur diejenigen, die dem Modellentwickler bzw. Modellnutzer relevant erscheinen.
3. Pragmatismus. Pragmatismus bedeutet soviel wie Orientierung am Nützlichen. Ein Modell ist einem Original nicht von sich aus zugeordnet. Die Zuordnung wird durch die Fragen „Für wen?", „Warum?" und „Wozu?" relativiert. Ein Modell wird vom Modellentwickler bzw. Modellnutzer innerhalb einer bestimmten Zeitspanne und zu einem bestimmten Zweck für ein Original eingesetzt.

Es ist nicht unwesentlich, sich zunächst einen Überblick über die Bandbreite bestehender Modelltheorien und -ansätze zu verschaffen.

Eine von BOLKER (2007) zusammengestellte Systematik vorhandener Modellansätze gibt einen Überblick über die Vielfalt an Möglichkeiten, theoretische oder anwendungsbezogene Fragestellungen mit Modellen zu bearbeiten. Wie aus Tab. 2.1 ersichtlich, können Modelle nach Modellzweck und zugrundeliegenden Methoden, technischen Details und Wissensstand unterschieden werden. Meistens ist es nicht möglich, ein Modell einem einzigen Modelltyp zuzuordnen. Oftmals wird unter einem Modell eine systembeschreibende Anordnung unterschiedlicher miteinander gekoppelter Teilmodelle verstanden, die jeweils wesentliche Teilprozessen abbilden. Somit kann unter einem Modell bereits eine einfache lineare Übertragungsfunktion verstanden werden. Durch Kopplung mit weiteren Modellen entsteht ein

Tabelle 2.1: Modell-Dichotomien BOLKER 2007)

| Scope and approach |  |
| ---: | :--- |
| abstract | concrete |
| strategic | tactical |
| general | specific |
| theoretical | applied |
| qualitative | quantitative |
| descriptive | predictive |
| mathematical | statistical |
| mechanistic | phenomenological |
| pattern | process |
| Technical details |  |
| analytical | computational |
| dynamic | static |
| continuous | discrete |
| population-based | individual-based |
| Eulerian | Lagrangian |
| deterministic | stochastic |
| Sophistication |  |
| simple | complex |
| crude | sophisticated |

systembeschreibendes Modell, welches in der Lage ist, komplexe natürliche Systeme abzubilden.

## Modellbildung

Neben dem Wissen um die Eigenschaften von Modellansätzen (Tab. 2.1), sind sowohl der Modellzweck als auch die Detailkenntnis über systeminterne Prozesse maßgeblich bei der Festlegung einer bestimmten Modellarchitektur. In der Regel sind für die Strukturierung und Erstellung eines objekt- und zweckgebundenen Modells folgende Arbeitsschritte zu durchlaufen:

1. Abgrenzung Auswahl der richtigen Skala. Dementsprechend wird das zu untersuchende System vereinfacht. Auswahl der wichtigsten Zustandsgröße und deren Beziehungen. Irrelevante Prozesse werden ignoriert.
2. Reduktion Weglassen von Objektdetails.
3. Dekomposition Die ablaufenden Prozesse werden zunächst einzeln mathematisch formuliert. Definition und Zuordnung von Parametern. Das Untersuchungssystem wird
aufgelöst und in einzelne Segmente, die man als Teilmodelle bezeichnet, zerlegt.
4. Komposition Vereinigung der Teilmodelle zu einem Gesamtmodell. Die Teilmodelle werden miteinander gekoppelt. Es entsteht ein Modellsystem.
5. Validation Vergleich der Modellergebnisse mit realen gemessenen Werten. Bewertung der Abbildungstreue und Plausibilität der Simulationsergebnisse gegenüber der Realität bzw. einer definierten Standardsituation (Abschnitt 2.1).
6. Anpassung Mit Hilfe der Modellergebnisse werden Modellparameter optimiert um die Modellleistung zu verbessern. Bei deterministischen Modellen sollten Parameter nur im Bereich natürlich möglicher Größenordnungen angepasst werden und durch Labor- oder Freilandmessungen abgesichert sein.
7. Anwendung Das Modell wird entsprechend dem zu Beginn formulierten Modellzweck für ein System angewendet. Es muss berücksichtigt werden, dass Modelle nur innerhalb zu definierender Gültigkeitsgrenzen zuverlässig arbeiten.

## Maßstabsproblem

Modellierer haben je nach Arbeitsschwerpunkt unterschiedliche Blickwinkel auf die Frage nach dem zu wählenden Modellmaßstab. Darunter versteht man das Verhältnis zwischen einem modellierten und dem realen System. Je größer der Maßstab, desto mehr reicht das Modell an das reale System heran. Die Anpassung von einem Maßstab zum anderen wird als Skalierung bezeichnet. Dieser Prozess geht mit einer Anpassung der Eigenschaften des Modells einher. Je größer der Maßstab, desto genauer werden die Eigenschaften des realen Systems durch das Modell wiedergegeben. Je nach Modellzweck richtet sich der zu wählende Maßstab nach der notwendigen Abbildungsgenauigkeit und den technischen und theoretischen Möglichkeiten diesem gerecht zu werden. Je genauer die Prozesse eines Systems bekannt sind, desto größer kann der Abbildungsmaßstab gewählt werden. Modelle gelten immer innerhalb bestimmter Maßstabsgrenzen, die im weiteren als Skala bezeichnet werden. Innerhalb dieser Grenzen können Modelle entsprechend zuverlässige Ergebnisse liefern, deren Güte mit bereits beschriebenen Verfahren validiert wird.

Gekoppelte Modelle, wie Wassermengenbewirtschaftungs- und Gewässergütemodelle, repräsentieren häufig unterschiedliche räumliche und zeitliche Skalen. Die Schwierigkeit bei der Erarbeitung derartiger gekoppelter Modelle liegt in einer sinnvollen Verknüpfung dieser Teilmodelle und der Gewähr eines optimalen Datenflusses. Prozessschwerpunkte, wie die

Wasserbilanz eines Flusseinzugsgebietes, können in einem großräumigen Raster mit mittleren Monatswerten hinreichend genau beschrieben werden. Für eine Beschreibung der biologischen Prozesse im gleichen Gebiet ist dies hingegen nicht sinnvoll. Die biologischen Prozesse unterliegen einer hohen räumlichen und zeitlichen Variabilität und reagieren als stark rückgekoppelte Systeme äußerst sensibel auf Änderungen von Randbedingungen. Die Gratwanderung bei einer integrierten Betrachtung von Bewirtschaftungsmodellen und Gewässergütemodellen, bezogen auf ein komplexes Flusseinzugsgebiet mit Fließ- und Standgewässern, besteht demnach in der Optimierung aus maximal möglicher und minimal notwendiger Komplexität der Teilmodelle (Abb. 2.1).

> FLÜGEL (2000) definiert dieses Dilemma wie folgt: '"Integrierte Modellierungssysteme basieren auf der Umsetzung interaktiv rückgekoppelter Prozessstrukturen der Systemanalyse in einen objektorientierten Regionalisierungsansatz und haben zum Ziel, die Wasser- und Stofftransportdynamik physikalisch basiert aus unterschiedlichen Raum- und Zeitskalen zu simulieren."

Diese Definition kann verallgemeinert auch für eine weitere Kopplung komplexer Systeme wie Flusseinzugsgebiete geltend gemacht werden, die eine weitere Systemkomponente, die Gewässergüte, beinhaltet und bezüglich ihrer Dynamik anderen Zeitskalen folgt.

Ein dem Modellzweck angemessenes Ergebnis kann durch eine gut strukturierte Vorgehensweise erreicht werden. Dies erfordert eine Systemanalyse und Identifikation ablaufender Prozesse im System sowie eine anschließende Wichtung dieser Prozesse hinsichtlich ihrer Bedeutung für das Gesamt- bzw. Teilsystem. Die ausgewiesenen Systeme und Prozesse müssen außerdem hinsichtlich ihrer Relevanz für den definierten Modellzweck getestet werden bspw. im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse (Siemens, 1998, MIELEITNER \& REICHERT, 2006). Diese Struktur kann als Matrix für eine zielgerichtete Prozessforschung verwendet werden.

Sind die relevanten Teilprozesse identifiziert und funktional in Gleichungen beschrieben (Teilmodelle), wird das künstliche System durch Kopplung dieser Teilmodelle gebildet. Der Wechsel zwischen unterschiedlichen Skalen kann dabei zu Sprüngen und Unsicherheiten in der Numerik führen. Prinzipiell dient immer die gröbste Skala zur Orientierung. MANIAK (1998) empfiehlt sogenannte genestete Teilmodelle zu verwenden. Dabei werden Teilmodelle in der nächsthöheren Skala eingebettet. Die Aggregation der Ergebnisse in die gröbere Skala ist dann erforderlich, um eine Kopplung zwischen zwei Modellen unterschiedlicher Maßstäbe zu erreichen. Die Aggregation selbst enthält dann jedoch die gesamte detaillierte Information des ursprünglichen Skalenbereiches, auch wenn diese Information nicht mehr extrahiert werden kann. Es wird sozusagen aggregiertes Wissen weitergegeben ohne die dazugehörige Detailinformation.

Eine Validierung und Verifikation sollte bereits im Rahmen der Entwicklung der Teilmodelle erfolgen. Der abschließende Test des komplexen Systemmodells wird jedoch erst zeigen, inwieweit eine Nutzung auf komplexem Niveau empfohlen werden kann.

## Modellgüte

Managementmodelle müssen anwenderfreundlich sein und zu glaubwürdigen, nachvollziehbaren Ergebnissen führen. Diese beiden Anforderungen stehen sich oft konträr gegenüber. Anwenderfreundlichkeit erfordert eine überschaubare Menge einfach verfügbarer Eingangsdaten für eine Simulation. Glaubwürdigkeit und Nachvollziehbarkeit hingegen bedürfen einer genauen, prozessorientierten Beschreibung des Systems.


Abbildung 2.1: Beziehung zwischen Modellkomplexität und Modellgültigkeit nach AUER \& CANALE (1986)

Abb. 2.1 illustriert dieses Verhältnis zwischen Modellkomplexität und Modellgültigkeit (AUER \& CANALE, 1986). Eine zu starke Verallgemeinerung des Modells hat eine weniger spezifische Beschreibung der betrachteten Prozesse zur Folge was zu einer Verringerung der Gültigkeit und Aussagekraft der Modellergebnisse führt. Die Modellgüte ist hier durch eine Reihe unabhängiger Faktoren bestimmt. Je nach Heterogenität und Komplexität der natürlichen Prozesse weist jedes Modell systematische Fehler auf. Bei einfachen Modellen können
diese aus Vereinfachungen sowie Annahmen für unbekannte oder schwer beschreibbare GröBen und Parameter in den Modellgleichungen resultieren (Prozessunsicherheit).

Eine detaillierte Prozessbeschreibung hingegen erfordert mehr, zumeist schwierig messbare oder ableitbare Eingangsinformationen (Parameterunsicherheit). Der Aufwand bei der Datenerhebung, vor allem von Gewässergütedaten, ist enorm, so dass die Wiedergabe der natürlichen Variabilität nur in diskreten Zeitschritten erfolgt und oft keine kurzzeitig und selten auftretenden Extremereignisse erfasst. Neben methodischen Fehlern bei der Probennahme kann es bei der Datenerhebung gleichfalls zu numerischen Ungenauigkeiten wie Rundungsund Diskretisierungsfehlern kommen. Um aus diskreten Daten eine kontinuierliche Datenreihe zu erzeugen, wird zwischen zwei Meßterminen linear interpoliert oder Splines höherer Ordnung angepasst (SILVERT, 2001). Dies kann ebenfalls zu Fehlern führen, wenn das Interpolationsverfahren stark von der natürlichen Variabilität der erhobenen Daten abweicht und das Modell sensibel auf die interpolierten Daten reagiert.

Für eine Optimierung des Modellergebnisses ist es daher notwendig Modellkomplexität und Modellgültigkeit gegeneinander abzuwägen.

Nicht zuletzt spielen zufällige Fehler beim Programmieren oder der Datenerfassung eine nicht unwesentliche Rolle.

Die Beurteilung der Modellgüte erfolgt in der Regel anhand von ex-post Prognosen. Dieses Verfahren wird auch Evaluation genannt und gibt dem Bearbeiter Gelegenheit, Fehler und Schwachstellen seines Modells zu erkennen, indem historische Ereignisse als Vergleich der Quasi-Prognose genutzt werden. Das Wissen um die Genauigkeit der Simulation gibt Sicherheit bei der Bewertung tatsächlicher, d.h. ex-ante Prognosen. Die üblichen Arbeitsschritte hierbei bestehen in (ZIELKE, 1998):

1. Minimierung von Eingangsdatenfehlern,
2. Minimierung bzw. Eliminierung von Programmierfehlern,
3. Plausibilitätstest (Verifikation),
4. Sensitivitätsanalyse (Einfluss der Parameterunsicherheit, SIEMENS (1998); OMLIN et al. (2001b); MIELEITNER \& REICHERT (2006)),
5. Vergleich mit Labor und/oder Feldmessungen.

Traditionell gängige Verfahren für den Vergleich von Meßwerten und Simulationsergebnissen untersuchen beispielsweise die Korrelation, die mittleren, absoluten und relativen Fehler. Die Untersuchung des Konvergenzverhaltens dient der Optimierung zwischen Skalierung
und Modellergebnis. Bei schrittweiser Verfeinerung der zeitlichen und/oder räumlichen Auflösung wird die Abweichung zwischen Zielwert (z.B. Meßgröße) und Modellergebniss kleiner.

Maßzahlen geben Auskunft über die Qualität der Simulation. Oft hängt die Beurteilung einer Prognose von unterschiedlichen Faktoren ab. REICK (2000) unterteilt diese in externen, internen und relativen Maßstäbe .

Als externen Maßstab könnte man beispielsweise den Modellzweck nennen. Je nachdem, welche Vorhersagegenauigkeit man mit einer Simulation erreichen möchte, kann eine Prognose mal als gut, unter anderen Zielstellungen hingegen wieder als unzureichend bewertet werden. Eine zuverlässige Modellierung von Prozessen mit mathematischen Modellen kann immer nur im Rahmen eines ausgewiesenen Gültigkeitsbereichs erfolgen. Es muss angegeben werden, innerhalb welcher physikalischen, chemischen oder biologischen Bereiche (bspw. min $<\mathrm{T}<\max$, oder min $<\mathrm{P}-\mathrm{SRP}<\max$ ) das Modell brauchbare Ergebnisse liefert.
Der interne Maßstab hängt stark von der Variabilität der Eingangsdaten und Meßwerte ab. Ziel einer Evaluation ist zu beurteilen, inwieweit bestimmte Ereignisse mit dem gewählten Modell überhaupt abgebildet werden können. Dies gilt vor allem für Extremereignisse. Meistens ist es hierfür nicht möglich, die Güte einer Simulation anhand realer d.h. gemessener Werte eindeutig zu verifizieren. Die Wahrscheinlichkeit einer Fehlprognose liegt in diesem Bereich sehr hoch.

Die Unterschiede zwischen Modellergebnissen und Vergleichswerten sind oftmals größer als das bereits vorhandene empirische Wissen vermuten ließe. Klassische Validierungstechniken unterschätzen dabei die Güte der Simulation, da Zeitverschiebungen, Beschleunigungen oder Verzögerungen nicht berücksichtigt werden.
Beim Vergleich unterschiedlicher Modellansätze - relativer Maßstab - werden außerdem Methodenunterschiede vernachlässigt. Prinzipiell können visuelle und quantitative Methoden unterschieden werden. Allerdings schließt eine visuelle Bewertung eine objektive Betrachtung aus und kann im Vergleich zur quantitativen Analyse gegensätzliche Ergebnisse liefern. Die Kombination objektiver statistischer Tests und unterschiedlicher subjektiver visueller Methoden kann die Frage beantworten, welches Modell die Realität besser repräsentiert (JACHNER et al., 2007). Ein Szenarienvergleich zeigt Modellstärken und -schwächen innerhalb eines Modells auf.

Die Evaluation der Modellgüte ist nur für ex-post Prognosen, d.h. die Simulation realer, bereits stattgefundener Ereignisse möglich. Für die Modellierung umfangreicher Szenarien, wie im hier vorgestellten Projekt, ist dieses Wissen wichtig, um erkannte Schwächen und Stärken bei der Bewertung der Szenarienergebnisse untereinander einbeziehen zu können. Für
die Modellanwendung ist es nicht von Interesse, die Realität exakt zu reproduzieren. Vielmehr sollen typische saisonale und lokale Muster wiedergegeben werden können. Dies ist vor allem von Bedeutung, wenn Entscheidungsträger langfristige Planungen auf Grundlage einer umfangreichen Szenarienanalyse beschließen sollen.

### 2.2 Flussgebietsmodellierung

Definitionen von Flusseinzugsgebieten (FEG) gehen unterschiedlich detailliert auf wesentliche Randbedingungen ein (TUCKER GILMAN et al., 2004):

> In der EU-Wasserrahmenrichtlinie (EU-WRRL, 2000) stellt ein Flusseinzugsgebiet das Gebiet dar, dessen Oberfächenabfluss über ein Netz von Fließund Standgewässern in einer einzigen Flussmündung, Estuar oder Delta ins Meer mündet.

WOLF et al. (1999) hingegen definiert Flusseinzugsgebiete weitergehend als das Gesamtgebiet aus dem sowohl Ober- als auch Grundwasser in ein Fließgewässer entwässert, welches ins Meer oder in einen abflusslosen See mündet.

Je nach dem werden bei der Modellbildung einerseits lediglich oberflächenrelevante Prozesse und Einflüsse berücksichtigt. Anderseits kann gerade das Grundwasser auf das Gesamtgebiet rückwirken. Neben der Definition der natürlichen Gegebenheiten, definiert sich ein Einzugsgebiet auch über seine Infrastruktur und Nutzung (Tab. 2.2). Beide werden unmittelbar durch das FEG beeinflusst und wirken ihrerseits auf das Gesamtgebiet zurück. Beispielsweise wird ein Talsperrenbau nur notwendig sein, wenn eine gesteuerte Wasserabgabe (Trinkoder Brauchwasser) oder Wasserrückhalt (Hochwasserschutz) für die Entwicklung und den Schutz des Einzugsgebietes wichtig ist.

Die Vielzahl der in Tab. 2.2 genannten Nutzungsansprüche in einem FEG erfordern ein Management der limitierten Ressource Wasser. Die Berücksichtigung aller anthropogenen Nutzungsansprüche und natürlichen Prozesse bei Entscheidungen sind wesentliche Voraussetzung für die langfristige Entwicklung des Gebietes. Aus diesem Grund werden auf der Grundlage der EU-Wasserrahmenrichtlinie (EU-WRRL, 2000) große Anstrengungen zur Schaffung eines Gerüstes zur Kopplung und Kooperation unterschiedlicher Modellansätze auf Einzugsgebietsebene unternommen (WASSON et al., 2003). Diese multikriterielle Optimierungsaufgabe eines integrierten Flussgebietsmanagements (IFGM) wurde in einer Reihe von Forschungsprojekten mit Schwerpunkten auf unterschiedlichen Randbedingungen behandelt:

Tabelle 2.2: Nutzungsanforderungen an Flusseinzugsgebiete

| Wasserspeicher | Entnahme von Trinkwasser, Kühl- und Brauchwasser für <br> industrielle Anlagen oder Bewässerung landwirtschaftlicher Flächen, <br>  <br> Überleitung z.B. in Tagebaurestseen |
| ---: | :--- |
| Vorfluter | Einleitung industrieller und kommunaler Abwässer oder <br>  <br> Niederschlagswasser |
| Hochwasserschutz | Eindeichung überflutungsgefährdeter Gebiete; Schaffung von <br>  <br> Retentionsräumen |
| Energiegewinnung | Bau und Betrieb von Kraftwerken |
| Fischereiwirtschaft | Entnahme von Frischwasser für Zuchtanlagen |
| Schifffahrt | Gewährleistung eines Mindestwasserstandes |
| Erholungsort | Schaffung von Freizeitangeboten |
| Umweltschutz | Erhalt und Förderung der Biodiversität in aquatischen Ökosystemen |

- Entwicklung von Wirtschaft und Bevölkerung auf dem Gebiet der Europäischen Union und die länderübergreifende Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie (EU-WRRL, 2000)
(HarmoniCa, DE LANGE et al., 2002).
- Lösungen für die regionalen negativen Auswirkungen der globalen Veränderung der Umwelt bezüglich der Nutzung und Bewirtschaftung der Wasserressourcen (GLOWA, RIELAND, 2004).
- Entwicklung eines Multiagentensystem (MAS) zur Verbesserung der wassermengenwirtschaftlichen Planung unter Einbeziehung physikalischer, hydrologischer, sozialer und ökonomischer Aspekte; Projekt: FIRMA (2003) (Fresh water integrated resource management with agents).

Entwicklung der Wassergüte bei variabler Bewirtschaftung eines Fließgewässersys-- tems vor dem Hintergrund einer großflächigen Sanierung des Wasser- und Stoffhaushaltes in einer Bergbaufolgelandschaft (Spreeprojekt KÖNGETER, 2004).

Zur Lösung derartig komplexer Fragestellungen werden gekoppelte Modelle benötigt, die in der Lage sind, die für die Fragestellung relevanten Prozesse zu simulieren. Ein üblicher Weg ist die Bildung sogenannter genesteter Modelle. Darunter versteht man das Koppeln und Verschachteln einzelner Modelle, um zu einem möglichst umfassenden Abbild des Gesamtgebiets zu kommen. Ein weiterer Ansatz ist die Bildung von Multiagentensystemen (MAS), einem Zusammenschluss unterschiedlich spezialisierter Modelle, die gemeinsam auf die Lösung multikriterielle Probleme hinarbeiten.

Die Entwicklung von Managementwerkzeugen erfordert eine Anpassung der Modelle für die Modellnutzer. Die Nutzer (Politiker, Bürgervereine, Naturschutzvereine oder Industrie
sowie Behörden und Entscheidungsgremien) sind während der Entwicklung mit einzubeziehen. Dabei wird oftmals schnell klar, dass Modellnutzer ein Werkzeug benötigen, welches bei der Beurteilung unterschiedlicher Managementstrategien hilft. Dabei sollte der Nutzer in der Lage sein, das Modell eigenständig zu nutzen und die Modellergebnisse entsprechend zu interpretieren.

Zunächst ist jedoch zu analysieren, welche Prozesse innerhalb eines FEG für die Lösung des Managementproblems relevant sind. Dabei sollte eine Wichtung erfolgen. Diese ist für die Definition des Modellzwecks wesentlich und entscheidet auch über die zeitliche und räumliche Auflösung des gekoppelten Modells. Der in dieser Arbeit vorgestellte Ansatz, sah eine klare Präferenz der Wassermengenbewirtschaftung vor der Gewässergüte vor, so dass die entwickelten Gütemodule lediglich als zusätzliche Information gewertet werden können, ohne im Modell direkt auf eine optimierte Bewirtschaftung rückzuwirken.

Das in dieser Arbeit entwickelte Gütemodul wurde in ein Bewirtschaftungsmodell eingebunden, welches die Wassermengenbewirtschaftung einzugsgebietsbezogen optimiert. Bewirtschaftungsmodelle stellen ihrerseits bereits ein gekoppeltes Modell dar. Es setzt sich im wesentlich zusammen aus Niederschlags-Abfluss-Modellen sowie Modellen, die die zeitlich und räumlich variable Nutzung im FEG berücksichtigt. Zu Optimierung der Bewirtschaftung werden mit Hilfe von Zeitreihenmodellen künstliche Abflussereignisse sowie alternative Nutzungsstrategien (Szenarien) generiert. Die Kopplung mit einem Gütemodell ermöglicht es, diese Bewirtschaftungsalternativen hinsichtlich ihrer Konsequenzen für die Gewässergüte zu bewerten.

## Bestimmung des Gebietsabflusses

Kernziel der Modellierung von FEG ist die Bestimmung des natürlich verfügbaren, Abflussvolumens innerhalb eines definierten Flusslängsschnittes. Für die Bestimmung des Abflussverhaltens von FEG ist es notwendig, diese zunächst als natürliche Systeme zu betrachten. Das heißt, eine Nutzung oder Bewirtschaftung durch den Menschen wird nicht berücksichtigt. Nur so ist es möglich, das natürliche Abflussregime mit Hilfe deterministischer Modelle zu beschreiben.

Das Gesamteinzugsgebiet setzt sich aus kleinen Teileinzugsgebieten zusammen, deren Abflusscharakteristika sehr unterschiedlich sein können.

Oftmals werden (Teil-)Modelle getrennt für jedes Teileinzugsgebiet angepasst, dann zu einem Flussgebietsmodell miteinander gekoppelt. Mit diesem, das gesamte Einzugsgebiet repräsentierenden Modell ist es möglich, komplexe Simulationen beispielsweise zur Abflussgeneration oder verfügbaren Wassermenge im Gesamtgebiet zu modellieren.

Das Abflussverhalten in Einzugsgebieten hängt zumeist direkt mit der lokalen Niederschlagsaktivität und der Gebietsmorphologie zusammen. Die Gebietseigenschaften (z.B. Fläche, Neigung, Bodenparameter) gehen bei der Modellierung von Abflussereignissen als konstante Randbedingungen in die Modelle ein. Mit Hilfe von Niederschlags-Abfluss-Modellen ( N -A-Modellen) kann dann der natürliche Gebietsabfluss simuliert werden. Man unterscheidet hier zwischen Kurz- und Langzeitmodellierung. Die Kurzzeitmodellierung betrachtet beispielsweise die Entstehung und den Ablauf von Hochwasserwellen in Folge von Starkniederschlägen. Derartige schnell ablaufenden Ereignisse haben in der Regel nur geringen Einfluss auf den Wasserhaushalt und den Zustand des Ökosystem in einem Einzugsgebiet. Allerdings können solche Extremereignisse mit hohen Schwemmmaterial- oder Nährstofffrachten einher gehen und daher ein Ökosystem nachhaltig stören. Ein markantes Beispiel für eine anthropogen verursachte Katastrophe ist der Dammbruch von Baja Mare (Rumänien 2000, UNEP / OCHA ASSESSMENT MISSION, 2000). Aus ökonomischer Sicht ist das Schadenspotential derartiger Ereignisse sehr hoch und damit für Nutzergruppen wie Katastrophenmanagement, Anwohner, Industrie oder Versicherer durchaus interessant. Die Langzeitmodellierung (z.B.: BROOK90, FEDERER, 1995) (oder HYSIM, MANLEY, 2006) zielt auf eine Abbildung des gesamten Wasserhaushaltes für charakteristische saisonale Entwicklungen im Einzugsgebiet ab. Im Rahmen eines Managementmodells bilden N-A-Charakteristika wie mittlerer monatlicher Niederschlag und Abfluss die Basis für stochastische Simulationen.

## Erfassung aller Nutzungen im FEG

Die anthropogene Nutzung führt in der Mehrzahl der Fließgewässer zu einer starken Verformung der natürlichen Abflusskurven. Zunehmender Nutzungsdruck auf die Fließgewässer kann dazu führen, dass die benötigte Wassermenge die real verfügbare übersteigt. Dieser Nutzungskonflikt macht eine interne Rangfolge anhand wirtschaftlicher Wertigkeit zur Optimierung der Nutzung notwendig. Die verfügbare Wassermenge bzw. die Aufnahmekapazität des Gewässers am Ort und zum Zeitpunkt der Nutzung stellen dabei die limitierenden Faktoren für alle Nutzungsansprüche dar. Die ökonomische und ökologische Entwicklung von FEG hängt unmittelbar von der Entwicklung externen Randbedingungen wie Siedlungsstrukturen oder Verlagerung und Degradierung von Wirtschaftsstandorten oder die Änderung des regionalen und globalen Klimas ab. Sie sind daher unbedingt bei der Planung langfristiger Managementstrategien mit zu berücksichtigen.

FEG erstrecken sich zudem oftmals über politische und administrative Grenzen hinweg. Dies erfordert neben der wirtschaftlichen Optimierung auch eine politische Regelung der Gewässernutzung mit unterschiedlichen Interessengruppen im überregionalen Maßstab. Dies erfolgt meistens auf der Grundlage überregionaler oder internationaler Abkommen, die eine
mit allen Anliegern abgestimmte Nutzung regeln, wie sie von internationalen Flussgebietskommissionen wie der IKSE oder IKSR vorbereitet und koordiniert werden.

## Bewirtschaftungsmodelle

Werden N-A-Modelle mit Nutzungsansprüchen gekoppelt, entsteht ein Bewirtschaftungsmodell (MANIAK, 1998). Sie haben oft einen stark anwendungsbezogenen Hintergrund und dienen der Abstimmung und Steuerung von Bewirtschaftungsmaßnahmen in einem FEG. Auch hier wird zwischen kurz- und langfristiger Simulation unterschieden.

Kurzfristige Bewirtschaftungsmaßnahmen, wie die Hochwasserentlastung oder die Wahl des aktuell optimalen Entnahmehorizont für die Gewinnung von Trinkwasser aus einer Talsperre, werden hingegen über deterministische Ansätze in Echtzeit realisiert, da hier ein angepasstes 'Feintuning' notwendig ist, was die Einbeziehung der aktuell ablaufenden dynamischen Prozesse erfordert.

Für einen langfristigen Bewirtschaftungshorizont von 5-30 Wasserhaushaltsjahre werden stochastische Modellansätze (z.B. Monte-Carlo) für die Modellierung der hydrologischen Prozesse in Kombination mit unterschiedlichen Bewirtschaftungsszenarien verwendet. Die Bandbreite von angebotenen Varianten hilft bei der Optimierung der quantitativen Zielfunktion zur Steuerung von Durchfluss und Speicherständen sowie den hiervon direkt bzw. indirekt abhängigen Größen wie Gewässergüte und Stofftransport.

Neben dem vom Danish Hydrolic Institute (DHI) entwickelten Modell MIKE, hat sich das Wassermengenbewirtschaftungsmodell Water Balance Model (WBalMo WASY GmbH, 2003, DiETRICH und REDETZKY, 2003, ehemals ArcGRM) für die Planung und das Management von FEG bewährt. Das Modell generiert das natürliche Wasserdargebot (unter Berücksichtigung aller oberirdischen Speicher) und stellt es den wasserwirtschaftlichen Nutzungsansprüchen (Einleitungen, Entnahmen) gegenüber. Die Nutzung wird durch stochastisch generierte Szenarien (Monte-Carlo) zeitlich und räumlich variiert. Die Zeitschrittweite beträgt einen Monat. Mit Hilfe zielgerichteter Variantenrechnungen kann eine Optimierung der Bewirtschaftung hinsichtlich der Wassermenge erreicht werden.

## Szenariengenerierung

Für die Simulation langfristiger Änderungen der hydrologischen Eigenschaften in einem FEG werden lange Zeitreihen über mindestens 10 Perioden (Vegetationszyklen) benötigt, um zu robusten Ergebnisse zu kommen. Vor allem die Einbeziehung von Extremereignissen ist wichtig, da sie die Modellstabilität hinsichtlich dieser Ausnahmesituationen testen. Da
oftmals keine entsprechend langen Messreihen vorliegen, werden Messreihen mit Hilfe von Zeitreihenmodellen verlängert. Mit Zeitreihenmodellen werden statistische Zusammenhänge zwischen zwei oder mehreren Variablen beschrieben.

Der bisher noch zurückhaltende Einsatz von Zeitreihenmodellen in der Praxis liegt am relativ hohen Kalibrierungsaufwand sowie der Notwendigkeit einer Neukalibrierung, wenn sich Randbedingungen ändern (MANIAK, 1998). Ein gekoppelter Betrieb von Zeitreihenmodellen (ThOMAS und FIERING, 1962, FIERING, 1964, 1967) und deterministischen (z.B. Folgescheitelalgorithmus) erscheint sinnvoll und wird bereits auf vielen naturwissenschaftlichen Gebieten wie der Hydrologie angewandt.

Die Simulation mit Szenarien dient der Abwägung möglicher Handlungsalternativen hinsichtlich ihrer Konsequenzen. Vorrangig kommen sie als Hilfsmittel bei Planungsaufgaben wie der Erarbeitung von Bewirtschaftungsplänen zum Einsatz. Ein relativer Vergleich von Szenarienergebnissen untereinander ist dabei einem absolutem Vergleich mit realen Messwerten vorzuziehen, da komplexe Modelle noch immer Unsicherheiten bezüglich ihrer Abbildungsgenauigkeit aufweisen. Ein Beispiel für die Nutzung analysierter gemessener Zeitreihen oder künstlich generierter Zeitreihen zur Ableitung von Szenarien ist die Monte-CarloSimulation. Die Basis dieses stochastischen Verfahrens sind sehr häufig durchgeführte Zu fallsexperimente, wobei die statistischen Eigenschaften der realen Zeitreihe als Randbedingungen gelten. Diese sind unter anderem: Verteilung, Mittelwert, Varianz, Periodizität, Saisonalität oder die Wahrscheinlichkeit von Extremereignissen. Durch die Erzeugung von Zufallszahlen werden künstliche Zeitreihen erzeugt, die diese Bedingungen erfüllen. Computergenerierte Zufallsvorgänge ermöglichen die Simulation einer beliebig großen Zahl unterschiedlicher künstlicher Zeitreihen in nahezu unbegrenztem Umfang (METROPOLIS \& Ulam, 1949, FEDRA, 1983; Smith \& HERBERT, 1979, u.v.a.m.).

In diesem Zusammenhang steht auch die Entwicklung und Anwendung sogenannter künstlicher neuronaler Netze (Abschnitt 2.4), die auf Grund ihres enormen Datenbedarfs meistens auf Monte-Carlo-Simulationen zurückgreifen.

## Integriertes Flussgebietsmanagementmodell

Die hier vorgestellte Arbeit stand vor dem Hintergrund der Entwicklung eines Flussgebietsmanagementmodells für das Einzugsgebiet der Spree. Dem stark gegliederten Einzugsgebiet der Spree, gekennzeichnet durch jahrzehntelange Beeinflussung des Wasserhaushalts durch Braunkohleförderung, steht in den kommenden Jahren ein Rehabilitierungsprozess enormen Ausmaßes bevor. Die bisherige Nutzung im Einzugsgebiet wird sich bezüglich Land- und

Forstwirtschaft, Industrie und Tourismus grundlegend ändern und damit auch die Anforderungen an das Gebiet. Ein Hauptschwerpunkt jedoch stellt die Wassergüte der Oberffächengewässer dar, welche wie in Abschnitt 1 erläutert, auf Grund der geogenen Voraussetzungen gezielter Bewirtschaftungsmaßnahmen bedarf, um gewünschte Nutzungsziele langfristig umzusetzen.

Daher wurden ein Bewirtschaftungsmodell mit Gewässergütemodellen gekoppelt. Als Bewirtschaftungsmodell wurde das Modell WBalMo (WASY GMBH, 2003) genutzt, welches Abfluss- und Bewirtschaftungsdaten für alle relevanten Entnahme- und Einleitungspunkte im gesamten Einzugsgebiet generierte und an die Teilmodule übergab.

Für die Gütemodellierung erfolgte die Nutzung bereits vorhandener Modelle, die für die jeweiligen Stand- und Fließgewässerabschnitte modifiziert und angepasst wurden. Hauptproblem bei der Verknüpfung der Gütemodule mit dem Kernmodell war die schon in Abschnitt 2.1 diskutierte Inkompatibilität der zeitlichen und räumlichen Maßstäbe. Es war notwendig, dynamische Prozesse zu beschreiben und robuste Ergebnisse zu erzeugen, die bei Entscheidungen bzgl. einer optimierten Bewirtschaftung hilfreich sind. Eine optimierte Bewirtschaftung wird hierbei je nach Standpunkt unterschiedlich definiert und verstanden. In der hier vorgestellten Arbeit galt der Grundsatz „Menge vor Güte" (WALTHER, 2003). Damit bestand keine modellinterne Rückkopplung zwischen Mengenbewirtschaftung und Zielgrößen bezüglich der Gewässergüte. Das Gesamtmodell dient daher lediglich dazu, fassbare Informationen für die zu erwarteten Systemzustände zu liefern, die bei der Diskussion, Planung und Abstimmung der einzelnen Interessengruppen ein Grundlage darstellen.

### 2.3 Gewässergütemodellierung

Die Sensitivität von Gewässern auf anthropogene Belastungen ist zum einen abhängig vom Typ der Gewässer (Stand-, Fließgewässer oder Grundwasser) und zum anderen von der Gewässerstuktur (morphologische, geologische, chemische, biologische, hydrologische Eigenschaften). Oft kommt es zu komplexen Transformationen der Belastungskomponenten oder der gewässerinternen Zustandsgrößen wie der Phytoplankton- oder Sauerstoffkonzentration. Ohne das Wissen über strukturelle Eigenschaften sowie funktionale Zusammenhänge innerhalb der Gewässer ist es nicht möglich, Reaktionen auf äußere Einflüsse zu beurteilen oder vorherzusagen.

Die Transformation von Belastungsgrößen im Gewässer unterliegt unterschiedlichen Einflüssen und Abhängigkeiten. So hängt beispielsweise der Einfluss von Nährstoffimporten in ein Standgewässer von der Grundbelastung im Gewässer selbst ab. Gewässer können als Nährstoffquelle (Stoffimport $<$ Stoffexport) oder -senke (Stoffimport $>$ Stoffexport) fungieren.

Dieses Verhalten kann sich durch Änderung der äußeren Belastung oder Manipulation des Gewässers saisonal bedingt oder dauerhaft umkehren (siehe Abb. 4.3). Hierbei haben gewässerinterne Prozesse und Rückkopplungsmechanismen eine wesentliche Bedeutung für die Transformation in Standgewässern. Standgewässer sind daher verhältnismäßig robust gegenüber durch Havarien oder Starkniederschläge verursachte externen Stoßbelastungen. Die Konzentration auf interne Prozesse führt zu Phasenverschiebungen bei langfristigen kontinuierlichen Eingriffen im Gewässer. Dies können gezielte Maßnahmen zur Gewässersanierung (Biomanipulation, ökotechnologische Maßnahmen) oder Veränderung der Nutzung bzw. Belastung der Gewässer sein (BENNDORF und RÖSKE, 1995).

Anthropogene Belastungskomponenten können energetisch (Kühlwasser), chemisch (Abwasser) oder biologisch (Krankheitserreger) sein. Diese externe Belastung gelangt punktuell oder diffus in die Gewässer. Mit Hilfe von Konzentrations- und Abflussmessungen in Zufluss und Grundwasser sind die importierten Frachten (Abschnitt 3.5) quantifizierbar. Die innere Belastung wird durch interne Umsatzprozesse verursacht. Dabei sind sowohl die in das Gewässer importierten externen Belastungskomponenten als auch die interne Grundbelastung beteiligt. Der Stoff- und Energieumsatz erfolgt in einer Vielzahl kleiner miteinander gekoppelter Teilprozesse. Eine Quantifizierung und Bilanzierung dieser Belastung ist nur unter Berücksichtigung dieser Teilprozesse möglich. Mit Hilfe von Gewässergütemodelle ist es möglich die Teilprozesse (soweit bekannt) zu beschreiben und die Ergebnisse zu Interpretation der Systemantwort zu nutzen (Abschnitt 2.3.2).

### 2.3.1 Gewässergüte

Zur objektiven Bewertung der aktuellen oder hypothetischen Gewässergüte anhand gemessener bzw. modellierter Zustandsgrößen wurden verschiedene Leitbilder, Indizes und Kriterien abgeleitet. Dabei ist die Gewässergüte ein nicht klar definierter Begriff. Die Beurteilung des Gewässerzustandes richtet sich nach dem Hintergrund und Zweck der Bewertung, z.B. bei der Beurteilung der Gefährdung des Menschen durch Krankheitserreger oder Giftstoffe. Bei der Bewertung der Regenerationsfähigkeit eines Gewässers ist es wichtig, Stoffe und Stoffgruppen sowie potentiell ablaufende Stoffumsatzprozesse zu berücksichtigten, die eine Sanierung fördern bzw. behindern können.

Die Bewertung des Belastungszustand von Gewässern mit organisch abbaubarem Material erfolgt für Fließ- und Standgewässer nach unterschiedlichen Kriterien. Für Fließgewässer hat sich das Saprobiensystem als bisher gebräuchlichstes Verfahren durchgesetzt. Das System erlaubt anhand auftretender Leitorganismen die Einordnung eines Gewässers in Güteklassen

Tabelle 2.3: Trophiekontinuum bezogen auf Grenzwerte von $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ während der Frühjahrszirkulation (LAMPERT und SOMMER, 1999, S.415)

| Trophie | $\mathrm{P}_{\text {ges }}\left[\mu \mathrm{g} \mathrm{L}{ }^{-1}\right]$ |
| :--- | :---: |
| ultra-oligotroph | $<5$ |
| oligotroph | $5-10$ |
| mesotroph | $10-30$ |
| eutroph | $30-100$ |
| hypertroph | $>100$ |

über die normierte Ermittlung des Saprobienindex (DIN, 1991). Weitere Verfahren basieren auf der Bewertung anhand des $\mathrm{BSB}_{5}$, der Ammonium-Stickstoff-Konzentration oder des Sauerstoffgehaltes.

In stehenden Gewässer hingegen dominieren gewässerinternen Stoffumsatzprozessen wie die Primärproduktion. Die kann vor allem während der Wachstumsperiode zu kritischen Systemzuständen wie Algenblüten oder Sauerstoffmangel führen und die Gewässergüte massiv beinträchtigen. Aus diesem Grund wird die Verfügbarkeit von Pflanzennährstoffen wie Phosphor und Stickstoff für die Bewertung der Gewässergüte in stehenden Gewässern zu Grunde gelegt. Die Einteilung der Trophie richtet sich nach festgelegten Grenzwerten wie der $\mathrm{P}_{\text {ges }}$-Konzentration während der Frühjahrszirkulation (LAWA ARBEITSKREIS GEWÄSSERBEWERTUNG - STEHENDE GEWÄSSER, 1998, 2001; TGL 27885/01, 1982; LAMPERT und SOMMER, 1999, siehe Tab. 2.3.).

Der Zustand eines Gewässers sollte jedoch nicht allein auf Grundlage seiner biologischen oder chemischen Eigenschaften beurteilt werden. Vielmehr sollte das Gesamtbild eines Gewässers berücksichtigt werden und dessen Einbettung, Austausch und Kopplung mit angrenzenden Systemen wie dem Sediment, der Atmosphäre oder angrenzenden Gewässer.

Die EU-Wasserrahmenrichtlinie (EU-WRRL, 2000) setzt auf eine leitbildgestützte Bewertung der Biozönose von Standgewässern. Als Leitbild wird der gute ökologische Zustand gesehen. Das bedeutet ein natürlicher, unbelasteter Zustand. Dieser kann je nach Gewässertyp variieren und ist durch die Definition von Gewässertypen und Gütekriterien zu spezifizieren. Die Typisierung erfolgt bezogen auf geographische, topographische, geologische, hydrologische und morphologische Kenngrößen. Als Gütekriterien werden biologische, hydromorphologische und physikalisch-chemischen Qualitätskomponenten definiert BORCHARDT et al. 2002).

Viele Gewässer entsprechen nicht den Leitbildern oder gewünschten Güteklassen. Zum Erreichen dieser Zielgrößen sind Maßnahmen notwendig, die auf Grund der Eigenschaften von Standgewässern oft erst mit großer zeitlicher Verzögerungen wirken. Die Anwendung von

Gütemodellen erlaubt dabei mögliche Maßnahmen hinsichtlich der Effizienz für die Manipulation des Gewässers als Rechenexperiment zu testen und gegeneinander abzuwägen.

### 2.3.2 Standgewässergütemodelle

Die theoretische und experimentelle Nutzung ökologischer Modelle (Patten et al., 1982; STRAŠKRABA, 1982, KOSCHEL et al., 1983, u.v.a.m.) sowie deren Unterstützung bei der Entscheidung optimaler Managementstrategien bei der Steuerung oder Sanierung von Standgewässern (JøRGENSEN, 1980; BENNDORF et al., 1981; AMBÜHL, 1982; BENNDORF \& RECKNAGEL, 1982; BENNDORF, 1995b; PETZOLDT, 1996b; WILLMITZER et al., 1998 , etc.) hat in den letzten Jahrzehnten eine rasante Entwicklung erlebt. Für eine adäquate Nutzung in Forschung, Gewässermanagement und Gewässersanierung sollten Modelle folgende Grundprinzipien berücksichtigen (BENNDORF et al., 1985):

## 1. Maximal mögliche Einfachheit

Das Modell sollte bezüglich der Anzahl der Zustandsvariablen so einfach wie möglich sein, damit es für den Nutzer überschaubar bleibt. Die Zahl an Zustandsvariablen sagt nichts über die Zuverlässigkeit und Genauigkeit eines Modells aus (JøRGENSEN et al. 1978; BENNDORF \& RECKNAGEL, 1982; STRAŠKRABA, 1982, siehe Abb. 2.1).

## 2. Maximal notwendige Komplexität

Das Modell sollte eine maximale, für die Abbildung aller wichtigen ökologischen Steuermechanismen notwendige Komplexität aufweisen. Die sogenannte Strukturgültigkeit ist die Grundvoraussetzung dafür, dass der Einfluss externer und interner Steuergrößen überhaupt realitätsnah simuliert werden kann. Da in Ökosystemen oftmals die Wirkung indirekter Effekte über direkte Effekte dominiert, werden recht komplexe Modelle benötigt (PATTEN et al., 1982). Es wäre jedoch irreführend zu denken, dass eine Erhöhung der Anzahl der Zustandsgrößen der beste Weg wäre, diese Voraussetzung zu erfüllen (siehe Prinzip 1 und Abb. 2.1). Eine vielversprechendere Alternative besteht darin, „kleine" Modelle zu konstruieren, die dennoch eine große Zahl von ökologischen Steuermechanismen beinhalten. Dies kann durch Verbesserung der Realitätsnähe bei der Beschreibung der Ratenvariablen (z.B. Respirations-, Sedimentations, Grazingraten) erreicht werden, oder durch Einfügen angemessener Hilfsfunktionen als Ersatz für Prozesse und Ökosystemkomponenten, die nicht als Zustands- oder Ratenvariablen enthalten sind.
3. Maximal mögliche Allgemeingültigkeit

Das Modell sollte möglichst allgemeingültige Parameter enthalten, d.h. Parameter die durch physikalische, chemische und biologische Prozesse gut definiert sind. Die Werte
hierfür sollten vorzugsweise durch Messung von Umsatzraten in Labor- und Feldexperimenten gewonnen werden. Ein entscheidender Vorteil der Bestimmung ,,allgemeingültiger" Parameter ist, dass die aufwendige Kalibrierung für jeden neuen See oder Talsperre oder neue Bedingungen in einem einzelnen Gewässer entfällt. Bezüglich der großen Unsicherheiten bei der Modellierung von Gewässerökosystemen (vgl. BECK, 1983), könnte die hier empfohlene Methode der Parameterbestimmung möglicherweise als zu starke Vereinfachung angesehen werden. Es ist aber die einzige Möglichkeit, zu Modellen zu gelangen, die für die Überprüfung wissenschaftlicher Hypothesen oder für Management-Entscheidungen geeignet sind.

## 4. Geeignete Validation

Die Gültigkeit eines Modells muss auf geeignete Weise verifiziert werden. Für ein Standgewässermodell bedeutet das, das die Gültigkeit an einer Klasse von Gewässern mit unterschiedlichem Trophiegrad und unterschiedlicher physikalischer und morphometrischer Struktur ohne Änderung der Modellstruktur oder von Parametern geprüft werden muss (siehe Prinzip 3). Nur solche „allgemeingültigen" Modelle, die auf diese Weise validiert wurden, können mit ausreichender Zuverlässigkeit auf unbekannte Situationen angewendet werden.

Gab es zunächst Zweifel an der Möglichkeit, Gewässergütemodelle zu generalisieren (Prinzip 3, VAN STRATEN, 1983), so hat die erfolgreiche Entwicklung derartiger Modelle gezeigt, dass es möglich ist, gewässerinterne Prozesse und Interaktionen funktional und allgemeingültig zu formulieren. Dazu wurde in Labor- und Freilanduntersuchungen und -experimenten gewonnenes Wissen um kausale Zusammenhänge bzgl. Wachstumsbedingungen wie Nährstoffverfügbarkeit, Sauerstoffgehalt oder Temperatur und Strahlung, Nahrungsnetzen und interne Rückkopplungsmechanismen in einer Vielzahl immer komplexer werdender mathematischer Gewässergütemodelle zusammengefasst (Tab. 2.4) und kann wie im folgenden Abschnitt beschrieben für unterschiedliche Zwecke angewendet werden.

Grundsätzlich können Standgewässergütemodelle in zwei Gruppen eingeteilt werden (KREIS MAtHEMATISCHE FLUSSGEbIETSMODELLE, 2002, S.36):

1. stationäre Modelle, die empirisch (black-box) oder halbempirisch (grey-box) abgeleitet wurden (CARLSON, 1977; SAS, 1989, VOLLENWEIDER \& KEREKES, 1980) und
2. dynamische Modelle, die Wechselwirkungen funktional beschreiben (ökologische Modelle) (Tab. 2.4).

Der Schwerpunkt bei der Entwicklung ökologischer Standgewässermodelle muss auf Stoffumsatzprozessen (Transformation) liegen, die durch eine Vielzahl direkter und indirekter

Wechselbeziehungen und Rückkopplungen physikalischer, chemischer und biologischer Systemkomponenten gekennzeichnet ist. Auf Grund dieser Eigenschaft gelten Standgewässer in einem Flusseinzugsgebiet bestehend aus Fließ- und Standgewässer bezogen auf den Stoffhaushalt als Senken bzw. Quellen (KREIS MATHEMATISCHE FLUSSGEBIETSMODELLE, 2002, Abschnitt 2.3.1.

Die komplexen gewässerinternen Wechselbeziehungen sind jedoch nur zum Teil bekannt und kausal beschrieben. Die Simulation unterschiedlicher Systemzustände kann jedoch nur dann plausible Ergebnisse liefern, wenn die „innere Struktur" des Systems berücksichtigt wurde. In den vergangen Jahrzehnten wurden eine Vielzahl unterschiedlicher Standgewässergütemodelle entwickelt. Die in Tab. 2.4 vorgestellten Modelle fokussieren dabei auf unterschiedliche Kernprozesse im Gewässer (autotrophe Produktion, chemischer Umsatz, Hydrodynamik). Die Berücksichtigung der räumlichen Auflösung (Einbox, Zweibox, 1-D, 2-D, 3-D) in Modellen ermöglicht die Einbindung horizontaler und vertikaler Gradienten und Austauschprozesse im Gewässer sowie eine differenziertere Betrachtung einzelner Gewässerkompartimente (Lithoral-Pelagial, Epilimnion-Hypolimnion) und deren Wechselwirkungen. Die Tab. 2.4 gibt gleichfalls einen Einblick in die zum Teil starke Kopplung von Modellen mit unterschiedlichen Modellschwerpunkten (Hydrodynamik, Gewässergüte).

Mit steigendem Wissen um gewässerinterne Prozesse, Interaktionen und Rückkopplungsmechanismen und der Möglichkeit diese funktional zu beschreiben, sowie der Zunahme der Rechenleistung von Computern machte die Entwicklung von Gütemodellen seit den 1970er/80er Jahren große Fortschritte. Begann man zunächst mit einfachen Input-Output Modellen (VOLLENWEIDER \& KEREKES, 1980), die zur Abbildung stationärer Zustände geeignet waren, folgten später erste 1-D und 2-D Modelle (IMBERGER \& Patterson, 1981, KARAGOUNIS et al., 1993; REICHERT, 1994; GOUDSMIT et al., 1996; HAMILTON \& SCHLADOW, 1997, BONNET et al., 2000, BENNDORF et al., 1982), die vor allem mittelfristige Prozesse simulieren. In Mitteleuropa sind diese durch die Jahreszeiten zeitlich limitiert. Mittlerweile werden komplexe biologische und chemische Modelle mit hydrodynamischen (physikalischen) 3-D Modellen gekoppelt (LORD et al., 1994, RAJAR \& CETINA, 1997), wie sie zunächst für die Zirkulations- und Strömungsmodellierung von Tiefsee- und Küstenregionen entwickelt wurden (BONNET \& WESSEN, 2001; BLECK, 1998; BLUMBERG \& MELLOR, 1987, SONG \& HAIDVOGEL, 1994). Für die Standgewässermodellierung sind diese Modelle vor allem für die Modellierung kurzfristiger, komplexer Systemreaktionen auf Stossereignisse wie Sturm, Hochwasser oder Havarien interessant.

Die Zahl der in der Praxis angekommenen Gütemodelle ist nach wie vor überschaubar. Zum einen macht die Vielzahl notwendiger Eingangsinformationen eine Anwendung auf breiter Basis schwierig. Zum anderen wird die Anwendung von Modellen für das Gewässermanagement durchaus skeptisch gesehen (PETZOLDT, 2004). Modellskeptiker vertreten hierbei die

Tabelle 2.4: Standgewässermodelle, Evolution, Publikation

| Modell | Typ | Bemerkung | Publikationen |
| :---: | :---: | :---: | :---: |
| $\begin{aligned} & \text { AQUAMOD1 } \\ & \text { AQUAMOD2 } \\ & \text { AQUAMOD3 } \end{aligned}$ | $\begin{aligned} & \text { 0D } \\ & \text { 0D } \\ & 0 D \end{aligned}$ | Einboxmodell Gewässer voll durchmischt Zweiboxmodell Epi- und Hypolimnion Dreiboxmodell Epi-, Hypolimnion und Sediment | STRAŠKRABA 1976 <br> STRAŚKRABA 1979 <br> DVORAKOVA \& KOZERSKI 1980 |
| RESQUAL II MINLAKE | $\begin{aligned} & \hline \text { 1D } \\ & \text { 1D } \end{aligned}$ | Gewässergütemodell für flache Talsperren Weiterentwicklung von RESQUAL II | STEFAN \& CARDONI 1982 <br> RILEY \& STEFAN  <br> 1987 1988 |
| CE-QUAL-RIV1 CE-QUAL-R1 CE-QUAL-W2 V2 CE-QUAL-W2 V3 | $\begin{aligned} & 1 \mathrm{D} \\ & 2 \mathrm{D} \\ & 2 \mathrm{D} \end{aligned}$ | Hydrodynamik und Gewässergüte in Talsperren und deren Abfluss <br> Hydrodynamik und Gewässergüte mit Fließ- und Standgewässerinteraktion | $\begin{aligned} & \hline \text { BEDFORD et al. } 1983 \\ & \hline \text { COLLINS \& WLOSINSKI } 1983 \text {; } \\ & \hline \text { USCE 1986 } \\ & \hline \text { COLE \& BUCHAK } \\ & \hline \text { COLE \& BUCHAK } \\ & \hline \end{aligned}$ |
| DYRESM <br> DYRESM-WQ | $1 \mathrm{D}$ <br> 1D | Hydrodynamik, kalibrierungsfrei <br> Hydrodynamik(vertikal) und Gewässergüte (z.B. CAEDYM) | $\|$IMBERGER et al. 1978 ; <br> IMBERGER \& PATTERSON 1981, <br> 1990 <br> HAMILTON \& SCHLADOW <br> SCHLADOW \& HAMILTON <br> 1997, |
| T- and Mixing Modell LIMNMOD | $\begin{aligned} & \hline \text { 1D } \\ & \text { 1D } \end{aligned}$ | mit Berücksichtigung des Sediments | WÜST (1987; WÜEST et al. 2000 |
| $\begin{aligned} & \hline \text { PROTEC } \\ & \text { PROTECH-C } \end{aligned}$ | $\begin{aligned} & \text { 1D } \\ & \text { 1D } \end{aligned}$ | Hydrodynamik einfach, Austauschraten zwischen 10 cm Schichten, 'Berechnung der Durchmischungstiefe ZMIX nach MoninObukhov, komplexes Phytoplanktonmodell mit bis zu acht verschiedenen Spezies | FBA 1989   <br> REYNOLDS \& IRISH 1993 1997);  <br> ELLIOTT et al. 1999a b 2000 |
| AQUASIM AQUASIM Lake Zürich BELAMO | $\begin{aligned} & 1 \mathrm{D} \\ & 1 \mathrm{D} \\ & 0 \mathrm{D} \end{aligned}$ | Hydrodynamik, Gewässergüte und Sediment | $\begin{array}{\|l\|l\|} \hline \text { Goudsmit et al. } & 1996 \\ \hline \text { OMLIN } \text { et al. } & 2001 \mathrm{ba} \\ \hline \text { MIELEITNER \& REICHERT } & 2006 \\ \hline \end{array}$ |
| SALMO <br> SALMO II <br> SALMO-HR | 0D <br> 0D <br> 1D | Gewässergüte, Zweiboxmodell (Epi-, Hypolimnion) <br> Gewässergüte, Zweiboxmodell (Epi-, Hypolimnion) <br> Gewässergüte und Hydrodynamik (HydroMod-3D) | BENNDORF $1979 \mathrm{~b} ;$; <br> BENNDORF \& RECKNAGEL $1982 ;$ <br> BENNDORF et al. $1982 ;$ <br> BENNDORF 1988 <br> BAUMERT et al. $2005 ;$ <br> PETZOLDT et al. 2005 ; ; <br> ROLINSKI et al. (2005) |
| CAEDYM ELCOM | $1 / 2 / 3 \mathrm{D}$ 3 D | Gewässergüte und Hydrodynamik (z.B. DYRESM, ELCOM) <br> Hydrodynamik und Gewässergüte (z.B. CAEDYM) | $\begin{aligned} & \text { HAMILTON \& HERZFELD 2001, } \\ & \text { HODGES } 2000 \end{aligned}$ |
| LAKE <br> HydroMod-3D | $\begin{aligned} & 1 \mathrm{D} \\ & \text { 3D } \end{aligned}$ | Hydrodynamik und Gewässergüte (z.B. SALMO-HR) | $\begin{aligned} & \hline \text { BAUMERT \& RADACH } 1992 \\ & \hline \text { DUWE } 1988 \\ & \hline \end{aligned}$ |
| BETTER ELMO | 2D 3D | Hydrodynamik (Austauschraten) und Gewässergüte (T-abhängig), keine SedimentResuspension <br> Hydrodynamik und Hydrobiologie, Sedimenttransport | BENDER et al. 1990 ; OZIRANSKY \& SHTEINMAN 1993, BONNET \& WESSEN 2001, |

Meinung, dass allein Messungen und Erfahrungen ausreichen, um Reaktionen komplexer Gewässersysteme hinreichend genau abschätzen zu können. Komplexe Ökosysteme wie Gewässer sind jedoch kaum intuitiv überschaubar, so dass Simulationen Konsequenzen aufzeigen können, die man so nicht erwarten konnte. Dies bedeutet, Standgewässermodelle können auch für die Klärung komplexer nicht überschaubarer Prozesse im Gewässer genutzt werden. Eine Kombination aus Modell und Expertise würde beide Aspekte, quantitative Analyse und Erfahrung, miteinander verknüpfen (PETZOLDT und SIEMENS, 2002; SILVERT, 2001).

Ein Schwerpunkt bei der praxisbezogenen Anwendung von Standgewässergütemodellen liegt in dem Einsatz gezielter Maßnahmen zur Sanierung eutrophierter natürlicher und künstlicher Gewässer. Der dafür verfügbare Maßnahmenkatalog ist breit gefächert (WILLMITZER et al., 1998, Rinke et al., 2001; Petzoldt et al., 2002, Petzoldt \& Uhlmann, 2006). Welche Maßnahme dabei für das jeweilige Gewässer geeignet ist, kann unter anderem mit Hilfe von Szenarioanalysen an Modellen getestet werden. Außerdem dienen Szenarioanalysen dem Erkenntnisgewinn komplexer Prozesse in Standgewässern. Auf diese Weise ähneln Simulationsmodelle Experimenten, wobei diese kaum noch an rechentechnische Grenzen in Raum und Zeit stoßen.

Szenarien zur langfristigen Entwicklung der Gewässergüte bei variierenden Randbedingungen sind hingegen nicht nur für Maßnahmen der Gewässersanierung interessant. Auch die Nutzung von Gewässern durch unterschiedliche Interessengruppen, wie Trinkwasserversorgung, Landwirtschaft (Bewässerung), Industrie (Kühlwasserentnahme), Fischereiwirtschaft sowie Freizeit und Erholung stellen unterschiedliche Anforderungen an die Wasserverfügbarkeit und -qualität. Als eine weitere Interessentengruppe ist hier noch die Tagebauwirtschaft zu nennen, die vor allem durch massive Eingriffe in ober- und unterirdische Wasserspeicher einen langfristigen Einfluss auf Menge und Güte der Oberflächengewässer der betroffenen Gebieten hat.

Das im Folgenden vorgestellte Gewässergütemodell SALMO wurde in vorliegender Arbeit als Grundlage für die Entwicklung der Gewässergüte bei Simulation mit stochastisch generierten Bewirtschaftungsszenarien (WBalMo, siehe Abschnitt 3.6.3) genutzt.

## Das Standgewässergütemodell SALMO

Das Modell SALMO ${ }^{1}$ (Abb. 2.2, BENNDORF, 1979b; BENNDORF \& RECKNAGEL, 1982 , BENNDORF et al., 1982; BENNDORF, 1988; BENNDORF et al., 2000) ist auf Grund seines deterministischen Ansatzes in der Lage, Zustandsgrößen wie die Konzentrationen von Sauerstoff $\left(\mathrm{O}_{2}\right)$ Phosphor ( $\mathrm{P}-\mathrm{SRP}$ ), anorganischem Stickstoff ( $\mathrm{N}_{\mathrm{ges}}$ ) oder Phytoplankton bei unterschiedlichen Systemzuständen abzubilden. Es beschreibt wichtige Kompartimente der pelagischen Nahrungskette eines geschichteten Standgewässers mit Hilfe von Differentialgleichungen (BENNDORF, 1979ab; PETZOLDT, 1996a; BENNDORF et al., 2000). Die in Abschnitt 2.3.2 definierten Grundprinzipien für die Konstruktion eines allgemein gültigen ökologischen Modells wurden wie folgt berücksichtigt:

1. Maximal mögliche Einfachheit - Das Modell besitzt eine überschaubare Anzahl von Kompartimenten (13 Zustandsgrößen, wobei „H" für Hypolimnion steht). Das Gewäs-

[^1]ser wird als horizontal durchmischt und mit zwei vertikalen Schichten simuliert, wobei die Sprungschicht (ZMIXREAL) variabel ist. Aus drei parametrisierten Phytoplanktongruppen werden jeweils zwei ausgewählt ( $X_{i}, X H_{i}$ ). Es gibt eine Zooplanktongruppe $(Z, Z H)$. Ein einstufiges Wachstumsmodell für das Phytoplanktonwachstum, d.h. keine Trennung zwischen Phosphat-Aufnahme und Wachstum, jedoch einen Selbsthemmungsterm (Konkurrenz) für das Phytoplankton wie auch für das Zooplankton. Weitere Zustandsgrößen sind Orthophosphat ( $P, P H$ ), Stickstoff ( $N, N H$ ), Detritus ( $\mathrm{D}, \mathrm{DH}$ ) und Sauerstoff $(\mathrm{O}, \mathrm{OH})$.

Das Sediment-Submodell berücksichtigt folgende Prozesse: vereinfachte Partikel- und Nährstoffsedimentation, P-Rücklösung und Denitrifikation. Das Sediment-Submodell ist auf tiefe, geschichtete Gewässer anwendbar. Die komplexen Wechselwirkungen zwischen Sediment und Wasserkörper wurde hier über einfache Austauschterme berücksichtigt.

Aufgrund der relativ kompakten Struktur des Modells sind die Anforderungen an die gewässerspezifischen Eingangsdaten im Vergleich zu anderen Modellen moderat. Als Eingangsgrößen werden folgende Zeitreihen benötigt: Stauspiegel und Stauinhalt ( $S$, $V$ ), Zu- und Abfluss (QIN, QOUT), photosynthetisch aktive Strahlung (PAR), Wassertemperatur ( $T$ ), Importe von Nährstoffen (PIN, NIN) und partikulärem organischen Material (POMIN) sowie die variable Durchmischungstiefe (ZMIXREAL).

Im Wesentlichen handelt es sich dabei um zuverlässige und zeitlich dichte Messungen von Randbedingungen und Startwerten. Liegen nur ungenaue Eingangsdaten vor, ergibt sich ein extrem breites Vertrauensband für die Modellvorhersagen (PETZOLDT \& RECKNAGEL, 1992; PETZOLDT, 1996a).
2. Maximal notwendige Komplexität - Großes Gewicht wurde auf die realitätsnahe Einbeziehung einer großen Zahl direkter und indirekter Kopplungen zwischen den Zustandsgrößen gelegt. So geht das Zooplankton als Zustandsgröße in das Modell ein, Fische hingegen als variable Randbedingung.
3. Maximal mögliche Allgemeingültigkeit - Durch die kausale Beschreibung der direkten und indirekten Beziehungen folgt eine große Zahl (127) experimentell bestimmter Parameter, die außerdem eine hohe Robustheit des Modells und breite Anwendbarkeit auf Gewässer unterschiedlicher Trophie garantieren BENNDORF \& RECKNAGEL, 1982).
4. Geeignete Validation - Das Modell wurde bisher auf über 20 Gewässer unterschiedlicher Trophie angewendet. Hieraus resultiert eine gute Kenntnis der inhärenten Schwächen und deren Auswirkung auf das Simulationsergebnis, die bei Szenarioanalysen
verbal berücksichtigt werden können (BENNDORF \& RECKNAGEL, 1982; BENNDORF et al., 1985, PETZOLDT, 1996b; BENNDORF und PETZOLDT, 1999, WILLMITZER et al., 1998; RINKE et al., 2001; PETZOLDT und SiEMENS, 2002; PETZOLDT \& UhLMANN, 2006).

Es existieren Nutzungsverträge mit mehreren Talsperrenbetreibern und Ingenieurbüros. Beispiele für Anwendungen sind die Talsperren Saidenbach (mesotroph), Neunzehnhain und Ohra (oligotroph), TS Bautzen (hypertroph), Bleichlochtalsperre (dystroph), TS Muldenstein (bei Bitterfeld), TS Weida, TS Zeulenroda, TS Eibenstock, Wahnbachtalsperre, TS Leibis-Lichte, Stechlinsee, Biesbosch-Speicher (Niederlande), die Seen Lappajärvi und Längelmävesi (Finnland), Speicher der Thames Water Authority (Großbritannien) u.a.

Der besondere Vorteil eines analytischen gegenüber einem empirischen Wassergütemodell besteht darin, dass neben Szenarien mit unterschiedlicher Nährstoffbelastung und unterschiedlicher Verweilzeit auch die Wirkung gewässerinterner Faktoren, wie Lage der Durchmischungstiefe, Einfluss lichtabsorbierender Stoffe oder Veränderung der Zooplanktonbestandsstruktur (Biomanipulation) simuliert werden können.

Während der letzten Jahre wurde das Gewässergütemodell SALMO in zwei Richtungen weiter entwickelt und getestet. Mit der Kopplung an ein hydrodynamisches Modell (HydroMod3D, DUWE, 1988) folgte SALMO dem allgemeinen Trend hin zur Nutzung eines hoch auflösenden Modells, welches die Antriebsprozesse in einem Gewässer besser abbilden und damit auch biologische und chemische Prozesse realistischer darstellen kann BAUMERT et al., 2005; PETZOLDT et al. 2005; ROLINSKI et al., 2005). Dieser Ansatz ist vor allem für die kurzfristige Prognose von Naturereignissen wie Hochwasser oder Sturm geeignet. Für eine Abschätzung langfristiger Systemreaktionen wie diese für die Entwicklung optimaler Bewirtschaftungstrategien benötigt wird, ist die Verwendung dieses Ansatzes jedoch nicht zu empfehlen. Einerseits können die hierfür benötigten Daten aufgrund ihres enormen Umfangs nicht bereitgestellt werden können. Andererseits benötigt eine detaillierte Simulation lange Rechenzeiten, welche für derartig Praxisaufgaben nicht akzeptabel sind. Er bleibt daher vorerst ein Forschungswerkzeug mit dem Ziel Prozesse und Muster in Abhängigkeit zur gewässerinternen Dynamik zu erkennen und anhand realer Messdaten (gewonnen in umfangreichen Messkampagnen) zu verifizieren.

Der in dieser Arbeit vorgestellte Ansatz ist der Versuch, ein einfaches Input-Output Modell auf der Grundlage von SALMO zu entwickeln. Das Modell sollte in der Lage sein, schnell und robust Bewirtschaftungsszenarien hinsichtlich ihres langfristigen Einflusses auf die Gewässergüte zweier Talsperren zu bewerten. Die dazu notwendige Kopplung mit einem Bewirtschaftungsmodell (WBalMo) erforderte eine Vereinfachung bei der Generierung der


Abbildung 2.2: Struktur des Modells SALMO (BENNDORF et al. 1985)

Eingangsdatenstruktur sowie der zeitlichen Auflösung (siehe Abschnitt 3.6.2. Des Weiteren bestand aber der Anspruch, das verfügbare Wissen aus SALMO in dem einfachen Modell zu erhalten.

Die Kopplung eines Gewässergütemodells mit einem Bewirtschaftungsmodell ist notwendig, um zum einen die Vorgaben der EU-Wasserrahmenrichtlinien (EU-WRRL, 2000) durch zielgerichtete Maßnahmen umsetzen zu können ohne andere Bewirtschaftungsansprüche an die Gewässer außer Acht zu lassen. Zum anderen spielte die Optimierung der zeitlich und
räumlichen Bewirtschaftung des Flusseinzugsgebietes sowohl mengenmäßig als auch in Be zug auf die Güte eine entscheidende Rolle. Vor allem interessierte dabei die zusätzliche Belastung der Talsperren durch Überleitung von Oberflächenwasser in zu flutende Tagebaurestlöcher. In der vorliegenden Arbeit wird dieser Aspekt noch eingehender diskutiert.

### 2.4 Künstliche neuronale Netze - ANN

Sollen komplexe Prozesse detailliert mit Hilfe von Modellen abgebildet werden, kann die erforderliche Rechenzeit derartig ansteigen, dass ein anwendungsorientierter Einsatz kaum praktikabel ist. Die hier vorgestellte Arbeit stand ebenfalls vor dem Problem, einerseits das komplexe ökologische System einer Talsperre abzubilden und andererseits ein einfaches, robustes Prognosemodell zu entwickeln, welches die komplexen Strukturen implizit beinhaltet ohne bei der Simulation direkt darauf Rücksicht zu nehmen.

Hierfür bietet sich die Nutzung von künstlichen neuronalen Netzen (artificial neural network -ANN) als Werkzeug an. Die Idee neuronaler Netze leitet sich aus der Vorstellung biologischer Neuronen im Nervensystem lebender Organismen ab. Sie sind in der Lage, „intuitiv" Beziehungen zwischen abhängigen Größen zu erlernen. Hier liegen Vorstellungen vom Lernen lebender Organismen zugrunde. Die Verknüpfung neurologischer Forschungsergebnisse auf dem Gebiet der Informationsverarbeitung im menschlichen Gehirn mit moderner Rechentechnik führte letztendlich zu einer Umsetzung der natürlichen Prozesse bei der Informationsverarbeitung am Computer. Abstrahiert stellen ANN somit mathematische Modelle natürlicher neuronaler Netze dar (PodDIG und Sidorovitch, 2001).

Neuronale Netze sind black-box-Modelle und besitzen keine physikalisch erklärbaren Parameter. Es ist daher nicht möglich, Prozesse deterministisch zu beschreiben. Ein neuronales Netz ist somit nur in dem Bereich einsetzbar, in dem es trainiert wurde. Eine direkte Übertragnung auf ein anderes Gewässer oder extreme Ereignisse außerhalb der „Erfahrungen" des Netzes ist nicht möglich.

Hieraus folgt ein wesentliches Kriterium für die Trainingsdaten. Die Daten müssen den gesamten Bereich des Verhaltens des Gewässers, einschließlich von Extremzuständen abdecken. Der Vorteil gegenüber analytischen Ansätzen besteht darin, dass keine Gebiets- und Prozessparameter zu ermitteln sind. Ein Prozessverständnis ist nicht vonnöten, die Ableitung zum Teil schwierig zu erfassender Zustandsgrößen kann entfallen. Ist das neuronale Netz einmal erstellt, ist der für die Anwendnung benötigte Rechenaufwand verhältnismäßig gering. Die Simulation beinhaltet lediglich einfache Matrizenoperationen.


Abbildung 2.3: McCulloch-Pitts-Zelle McCulloch \& Pitts, 1943)

## Entwicklung der ANN

Erste Versuche, einfache künstliche Netzstrukturen zu entwickeln, wurden bereits in den frühen vierziger Jahren unternommen. So stellt die McCulloch-Pitts-Zelle (Abb. 2.3) eines der ersten Neuronenmodelle überhaupt dar. Sie wurde 1943 von MCCULLOCH \& PITTS (1943) als logisches Schwellenwertelement mit mehreren binären Eingangs- und einem einzigen Ausgangssignal entwickelt. Die Ausgangsgröße erhält nur dann den Wert 1 (true), wenn die Summe aller Eingangsgrößen einen Schwellenwert überschreitet. McCulloch \& Pitts (1943) wiesen nach, dass es bereits mit derartig einfachen Netzen möglich ist, jede Form von logischer oder arithmetischer Funktion zu berechnen.

Eine erste Blütezeit erfuhr die Entwicklung künstlicher Intelligenz in den 50er und 60er Jahren. Eine Reihe bis heute grundlegender Modelle und Ansätze wurden in dieser Zeit entwickelt. Das von Rosenblatt (1958) entwickelte Modell des Perzeptrons stellt bis heute die Grundlage der ANN dar (Abb. 2.4). Ein Perzeptron bestand zunächst aus einem einzigen künstlichen Neuron mit anpassbaren Gewichten und einem Schwellwert. Ziel des Modells ist es, ein Eingabe- in ein Ausgabesignal umzuwandeln.

## Multi-Layer-Perzeptron - MLP

Mit der Entwicklung des Backpropagation-Lernalgorithmus (WERBOS, 1974, RUMELHART et al. 1986, HAGAN et al., 1996) begann Mitte der Achtziger Jahre ein bis heute andauernder Entwicklungsboom auf dem Gebiet der ANN. Die Vernetzung mehrerer Perzeptroneneinheiten (multi layer perceptron - MLP) ergibt ein ANN. Der Ausgabewert eines Perzeptrons bildet dabei den Eingabewert eines anderen. Die einzelnen Perzeptrone sind untereinander


Abbildung 2.4: Grundschema eines Perzeptrons
verknüpft und werden nunmehr als Neurone bezeichnet. Die Stärke einer Verbindung zwischen einzelnen Neuronen werden durch Gewichte $w_{(1 \ldots n)}$ repräsentiert. Die Einstellung der Gewichte erfolgt im Rahmen des gewählten Lernalgorithmus. Die untereinander verknüpften Neurone werden in Schichten angeordnet. Dabei sind bis auf die Neuronen der Eingabeschicht alle weiteren Schichten autonom, da sie von außen nicht beeinflusst werden können. Diese autonomen Schichten werden auch als verborgene Schichten (hidden layer) bezeichnet. Prinzipiell sind mehrere Perzeptronenschichten möglich, wobei sich maximal zwei verborgene Schichten als sinnvoll ergeben haben (HAGAN et al. 1996). Für die Funktionsapproximation bei der Abbildung komplexer nichtlinearer funktioneller Zusammenhänge haben sich MLP als geeignet erwiesen (REHKUGLER und KERLING, 1995).

## Backpropagation Lernalgorithmus

Der Backpropagation Lernalgorithmus ist ein Beispiel für ein Gradientenabstiegsverfahren, das zur Minimierung von Netzfehlern eingesetzt wird (LÄMmLE und Cleve, 2001). Er gehört zu den Lernverfahren des überwachten Lernens. Er wurde im Rahmen dieser Arbeit angewendet und soll hier eingehender erläutert werden.

Soll ein MLP mit Hilfe eines Backpropagation Algorithmus trainiert werden, geschieht dies im Allgemeinen in zwei Schritten:

1. Vorwärtsvermittlung (Feedforward),
2. Rückwärtsverteilung (Backpropagation).

Bei dieser Art der Netzarchitektur sind die Neurone in Schichten angeordnet (Abb. 2.5), wobei die Eingänge für jedes Neuron einer Schicht die Ausgänge eines jeden Neurons der vorhergehenden Schicht sind. Die Eingänge für die Neurone der ersten Schicht sind sämtliche

1. verdeckte Schicht


Abbildung 2.5: Grundschema eines Feedforward-Netzes


$$
a=\frac{e^{n} \cdot e^{-n}}{e^{n}+e^{-n}}
$$



Abbildung 2.6: Sigmoide (links) und lineare (rechts)Übertragungsfunktion

Netzeingänge eines Zeitschritts. Zu jedem Neuron gehört ein Gewichtsfaktorenvektor, der für jeden Neuroneneingang einen Gewichtsfaktor $w$ enthält. Im Neuron wird jeder Eingangswert mit dem dazugehörigen Gewichtsfaktor multipliziert und das Produkt zum Biaswert $b$ addiert (Abb. 2.4):

1. Feedforward: Zunächst werden die Gewichte $w$ und Anfangsbelegung der Schwellenwerte des MLP eingestellt. Anschließend werden für einen ersten Zeitschritt (z.B. Tages- oder Monatswerte) zu lernende Muster d.h. sowohl Eingangsdaten $p$ als auch Ausgangsdaten $a$ übergeben. Der Ausgangswert der Neurone der Eingangsschicht ist der Eingabewert selbst bzw. der normierte Wert. Die Neurone der nächsten Schicht sind verborgen (hidden Layer). Jedem Eingang $p$ eines Neurons wurde ein Anfangsgewicht $w$ zugeordnet mit dem der Eingabewert multipliziert wird. Die Summe aller Produkte eines Neurons werden zu einem Bias $b$ (Schwellenwert) addiert:

$$
\begin{equation*}
n=\sum p_{i} \cdot w_{i}+b_{i} \tag{2.1}
\end{equation*}
$$

Die Resultierende $n$ ist der Eingang für eine Übertragungsfunktion (Abb. 2.6). Für die verdeckten Schichten kommen oftmals sigmoide und für die Ausgabeschicht lineare Übertragungsfunktionen zum Einsatz. Jede Schicht ist somit durch eine Gewichtsfaktorenmatrix,
einen Biasvektor und die verwendete Übertragungsfunktion charakterisiert. Die Anzahl benötigter Schichten, sowie die Anzahl der Neuronen jeder Schicht sind analytisch nicht zu ermitteln oder aus der Problemstellung ableitbar. Die Ausgabeschicht, hat zwangsläufig ebenso viele Neurone wie Ausgangsgrößen.
2. Backpropagation: Der berechnete Ausgabewert wird nun mit der gewünschten Ausgabe verglichen und ein Fehlersignal gebildet. Entsprechend dieses Signals werden rückwärts gerichtet zunächst die Gewichte der vorletzten Schicht verändert und wieder ein Fehlersignal für die nächste d.h. vorhergehende Schicht berechnet. Ist man bei der ersten Schicht angelangt, kann ein neues Eingangsmuster berechnet werden und die Prozedur wird wiederholt. Auf diese Weise verringert sich der Fehler Schritt für Schritt. Als Abbruchkriterium kann eine maximale Anzahl von Wiederholungen angegeben werden. Üblicher ist jedoch, den Lernschritt bei Erreichen einer bestimmten Fehlergrenze abzubrechen. Die Lernrate gibt vor, wie stark sich die Gewichte pro Lernschritt verändern. Dies ist wichtig, da bei zu kleiner Annäherung sehr viele Lernschritte nötig sind. Zu groß gewählte Raten können dazu führen, dass zuvor erlerntes wieder zerstört wird, bzw. am korrekten Ergebnis 'vorbeigelernt' wird. Übliche Werte liegen im Bereich zwischen 0,1 und 1,0 KÖHLE, 1990).

## Anwendung von ANN

Die Nutzung künstlicher neuronaler Netze in den Naturwissenschaften geht bis auf die Renaissance der Entwicklung von ANN Mitte der 1980er Jahre zurück. Zunächst wurden Netze für gut untersuchte Systeme trainiert, deren Schlüsselprozesse bekannt waren und mit ausreichend Mess- bzw. Modelldaten untersetzt werden konnten. Erfolge können mittlerweile vor allem auf dem Gebiet der Hydrologie, Meteorologie und Hydraulik verzeichnet werden. So konnten zuverlässig arbeitende Netze zur N-A-Modellierung (MinNS \& HALL, 1996) sowie Abfluss- und Hochwasservorhersage (DibiKe \& Solomatine, 2001; Cullmann, 2007, PETERS, 2008) entwickelt werden. Außerdem wurden ANN für die Steuerung der Bewässerung in der Landwirtschaft entwickelt (SCHÜTZE, 2005; SCHMITZ et al., 2007).

Für Anwendungen im Bereich der Limnologie können Ansätze zur Bestimmung des Auftretens von Algenblüten in Standgewässern (PETZOLDT, 1996;; KIELB, 1996; CÜNEYT et al., 2000, WALTER et al., 2001; RECKNAGEL et al., 2006) oder Einstellung biologischer, chemischer oder physikalischer Gewässergütekriterien (BORCHARDT et al., 1997, SCHLEITER et al., 1999) genannt werden. Auch werden Sukzessionsprozesse durch Mustererkennung und Clusterbildung wie bei CHON et al. (1996) durch die Nutzung sogenannter Kohortenkarten oder „Self- Organizing-Maps (SOM’s) nachvollzogen.

Bisherige Erfahrungen haben gezeigt, dass ANN effiziente Werkzeuge für die Mustererkennung und Klassifizierung von Prozessen sowie zur Angleichung von Funktionen darstellen.

Die hier vorgestellte Arbeit verfolgt ebenfalls das Ziel ein einfaches, robustes Simulationswerkzeug zur Simulation von Gewässergütekriterien mit Hilfe von ANN zu erarbeiten. Als Herausforderung stand hier jedoch noch die Kopplung an ein Bewirtschaftungsmodell und der langfristige Prognosehorizont.

## 3 Methoden

Das Ziel dieser Arbeit ist es, einen Baustein zur Abschätzung zukünftig möglicher Systemzustände für die Talsperren Bautzen und Quitzdorf zu erstellen. Dies erforderte Vorarbeiten wie Datenorganisation, statistische Analyse historischer und aktueller Daten, ergänzende Messungen und Datenaufbereitung für die Modellsimulationen. Die zu diesem Zweck angelegten Datenbanken stellten die notwendigen Informationen zu meteorologischen, chemischen, physikalischen und wasserwirtschaftlichen Randbedingungen zur Verfügung.

Als Grundlage zur Modellierung komplexer Simulationsgrößen wie Orthophosphat, hypolimnische Sauerstoffkonzentration oder Phytoplanktonbiomasse wurde das Modell SALMO genutzt (Abschnitt 2.3.2). Die Anpassung auf die Untersuchungsgewässer erforderte hierbei


Abbildung 3.1: Konzept zur Erarbeitung eines vereinfachten Gütemoduls
auch die Einbeziehung bisher nicht berücksichtigter Prozesse wie verstärkte P-Freisetzung aus dem Sediment (siehe auch Abschnitte 3.6.1 und 4.3.1).

Eine Vereinfachung des Gütemodells selbst geht sinnvollerweise mit einer Reduktion der Anforderungen an die Eingangsdaten einher. Sie sollten aus einfach messbaren bzw. quantifizierbaren Größen mit einer groben zeitlichen Auflösung bestehen.

Für das Gütemodell bedeutet das die Ableitung vereinfachter Algorithmen. Weiterhin sollte die unter diesen Umständen zu erwartende Prognosegüte bewertet werden.

Die anschließend durchgeführten Simulationen mit stochastisch generierten Eingangsdaten dienten zum einen dem Test, ob das Systemverhalten plausibel abgebildet werden kann. Zum anderen wurden die gewonnenen Eingangs- und Ausgangsinformationen zum Training künstlicher neuronaler Netze genutzt. Die Netze stellen eine vereinfachte Simulation des Übertragungsverhaltens des komplexen Modells SALMO dar und sind der Kern des vereinfachten Gütemoduls (Abb. 3.1).

### 3.1 Untersuchungsgewässer

Die Untersuchungsgewässer liegen am südlichen Rand des im Verbundprojekt (Abschnitt 1) berücksichtigten Spreeeinzugsgebietes.

Die Talsperren Bautzen und Quitzdorf befinden sich ca. 80 km bzw. 100 km nordöstlich von Dresden (Abb. 3.2). Beide Gewässer befinden sich im Verantwortungsbereich der Landestalsperrenverwaltung des Freistaates Sachsen (LTV).

## Talsperre Bautzen

Die Talsperre Bautzen wurde 1972 fertiggestellt und in Betrieb genommen. Ihre ursprünglichen Funktionen waren Bereitstellung von Kühlwasser für das Kraftwerk Boxberg, Hochwasserschutz, Niedrigwasseraufhöhung in der Spree, Bewässerung landwirtschaftlicher Flächen, Erholung und Sportfischerei.

Die Kühlwasserbereitstellung und Bewässerung spielen zur Zeit keine Rolle mehr. Zwischenzeitlich kam es zu keinen größeren Wasserentnahmen. Allerdings ist die Talsperre vertraglich in die Wassermengenbewirtschaftung im Zusammenhang mit der Sanierung der Lausitzer Braunkohlereviere einbezogen.

Die maximale Tiefe der Talsperre beträgt bei Betriebsstau ca. 12 m und die mittlere Tiefe $7,4 \mathrm{~m}$. Die theoretische Aufenthaltsdauer des Wassers beträgt 0,53 Jahre. Die Spree ist der



#### Abstract

Abbildung 3.2: Spreeeinzugsgebiet - Lage aller im BMBF-Verbundprojekt „Spree" (FKZ 02 WB 9968/2) berücksichtigten Fließ- und Standgewässer.


einzige Zufluss der Talsperre. Bei Betriebsstau umfasst das geflutete Gebiet eine Fläche von ca. 533 ha bei einem Volumen von ca. $39,3 \mathrm{Miom}^{3}$. Das Speicherbecken Bautzen ist stark windexponiert und deshalb im Sommer instabil geschichtet (instabil dimiktischer Schichtungstyp). Die Instabilität macht sich bei einzelnen Extremwetterlagen im Sommer bemerkbar, wo es zu einer zeitweiligen Durchmischung des Wasserkörpers kommen kann.

Die Gesamt-Phosphor-Belastung der Talsperre beträgt im Mittel zwischen $3,4-17,5 \mathrm{~g} \mathrm{~m}^{-2} \mathrm{a}^{-1}$. Auf Grund der Hypertrophierung kam es in der Vergangenheit besonders in den wärmeren Sommermonaten häufig zu vermehrtem Blaualgenwachstum und rapidem Absinken der Wasserqualität. Aus diesem Grund wurde die Talsperre seit 1977 als Untersuchungs- und Experimentalgewässer des Institutes für Hydrobiologie der TU Dresden genutzt. Das Langfrist-Biomanipulationsexperiment Talsperre Bautzen (BENNDORF, 1995a, BENNDORF et al., 1998) hat wesentlich zum Verständnis der Funktionsweise des planktischen Nahrungsnetzes bei-


Abbildung 3.3: Umrisse der Untersuchungsgewässer und Lage der Messstellen
getragen und ist neben einer Reihe von wissenschaftlichen Publikationen in der Anwenderrichtlinie Biomanipulation dokumentiert (BENNDORF und KamJunke, 1999). Als Technologie zur Blaualgenbekämpfung wurde mit großem Erfolg ein kombiniertes Verfahren der gewässerinternen Phosphatfällung und künstlicher Destratifikation erprobt (DEPPE und BENNDORF, 1998, DEPPE \& BENNDORF, 2002).

## Talsperre Quitzdorf

Die Talsperre Quitzdorf wurde 1974 in Betrieb genommen. Ihre ursprünglichen Funktionen waren: Bereitstellung von Kühlwasser für das Kraftwerk Boxberg, Hochwasserschutz, Niedrigwasseraufhöhung in Schöps und Spree, Bewässerung landwirtschaftlicher Flächen, Füllwasser für Fischteiche, Erholung, Sportfischerei und Naturschutz. Ebenso wie bei der Talsperre Quitzdorf spielen Kühlwasserbereitstellung und Bewässerung mittlerweile keine Rolle mehr. Eine größere Wasserentnahme erfolgt einzig für die Speisung von Fischteichen in unmittelbarer Nähe der Talsperre (ca. $9 \mathrm{Miom}^{3} \mathrm{a}^{-1}$ ). Die momentane Nutzung der Talsperre wird vor allem unter dem Gesichtspunkt der Sanierung der Lausitzer Tagebaurestseen gesehen.

Mit einer maximalen Tiefe von $7,8 \mathrm{~m}$ und einer mittleren Tiefe von $2,7 \mathrm{~m}$ bei Betriebsstau ist die Talsperre Quitzdorf ein Flachstausee. Die theoretische Aufenthaltsdauer des Wassers beträgt 0,64 Jahre. Hauptzufluss ist der Schwarze Schöps, welcher wiederum in die Spree mündet. Bei Betriebsstau umfasst das geflutete Gebiet eine Fläche von ca. 750 ha bei einem Volumen von ca. $22 \mathrm{Miom}^{3}$. Damit ist die Talsperre flächenbezogen die größte im Freistaat Sachsen. Besonders in den wärmeren Sommermonaten kommt es oft zu Blaualgenwachstum und einer rapiden Verschlechterung der Wasserqualität. Nähere Details, insbesondere zur Planktonbesiedlung der Talsperren sind in KÖHLER et al. (2002) dargestellt.

### 3.2 Schnittstellen

Hintergrund dieser Arbeit war die Kopplung des Bewirtschaftungsmodells WBalMo mit Gewässergütemodellen, die an unterschiedlichen Bilanzpunkten im Einzugsgebiet die Gewässergüte simulieren. Um für die Kopplung der Modelle einen konsistenten Datenfluss innerhalb des Gesamtmodells zu gewährleisten, waren eine Reihe von Schnittstellen zu definieren.

WBalMo war als Kernmodell für die Datenübergabe und -weiterleitung an die Gütemodelle zuständig. Dabei kann zwischen Bewirtschaftungsdaten, Antriebsdaten und Gütekriterien unterschieden werden. Bewirtschaftungs- und Antriebsdaten werden innerhalb des Modells WBalMo generiert. Die Gütekriterien als Eingangsdaten für die Gütemodellierung eines Bilanzpunktes ergeben sich aus den Ergebnissen der Simulation der Gütekriterien des nächsten oberliegenden Bilanzpunktes und der diffusen Einträge im bilanzierten Gewässerabschnitt.

Die Festlegung der Gütekriterien erfolgte nach den für die jeweiligen Gewässer relevanten Größen (Tab. 3.1). Für jedes Standgewässer und jeden Fließgewässerabschnitt (Bilanzpunkte) wurde dieselbe Matrix an Gütekriterien abgeleitet und die Ergebnisse an das Kernmodell zurückgeführt. Bezüglich der Wichtigkeit der Simulationsgrößen ist zu beachten, dass die Bedeutung der Größen innerhalb des FEG durchaus variieren kann. In den hier betrachteten nichtversauerten Gewässerabschnitten spielen beispielsweise $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}$ oder $\mathrm{SO}_{4}$ als Gütekriterium eine eher untergeordnete Rolle. Dies verhält sich in versauerten Gewässern völlig anders, wo Eisen und Sulfat als Verwitterungsprodukte aus dem Sediment der Bergbauhalden ausgewaschen werden und zur weiteren Versauerung der entstehenden Restseen und unterliegenden Gewässerabschnitte des Spreeeinzugsgebietes beitragen (siehe dazu auch Abschnitt 1 .

Die Talsperren Bautzen und Quitzdorf, lagen am „oberen Rand" des Simulationsgebietes (Abb. 3.2). D.h. WBalMo übergab hier lediglich Bewirtschaftung- und Antriebsdaten an die

Tabelle 3.1: Bezeichnung der Gütekriterien im Gesamtmodell.

| Gütekriterien | Einheit | Bedeutung |
| :---: | :---: | :---: |
| $\mathrm{O}_{2}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Sauerstoff |
| ${ }^{\circ} \mathrm{PO}_{4}-\mathrm{P}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Ortho-Phosphat |
| $\mathrm{N}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Gesamtstickstoff |
| Phytoplankton | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Phytoplankton |
| $\mathrm{T}_{\mathrm{w}}$ | ${ }^{\circ} \mathrm{C}$ | Wassertemperatur |
| $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Gesamtphosphor |
| $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Nitrat-Stickstoff |
| $\mathrm{NH}_{4}-\mathrm{N}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Ammonium-Stickstoff |
| $\mathrm{Chl}-\mathrm{a}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Chlorophyll |
| pH | - | pH-Wert |
| BSB | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | biologischer Sauerstoffbedarf |
| Mn | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Mangan |
| $\mathrm{SO}_{4}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Sulfat |
| $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Gesamteisen |
| Cl | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Chlorid |
| Al | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Aluminium |
| K | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Kalium |
| Na | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Natrium |
| Mg | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Magnesium |
| Ca | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Calcium |
| As | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Arsen |
| Zn | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Zink |
| Pb | $\mathrm{mg} \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}$ | Blei |
| Cd | $\mathrm{mg} \mathrm{L}{ }^{-1}$ | Cadmium |

Gütemodelle der beiden Gewässer. Die im Vorfeld der Simulation durchgeführte Auswertung gemessener Gütekriterien diente dazu, diese bezüglich ihrer saisonalen und korrelativen Eigenschaften zu gruppieren. Dabei war zu entscheiden, welche Größen mit einem komplexen Modell abgebildet werden müssen, welche ausreichend genau über einfache empirische Beziehungen beschreibbar sind und welche über Monats- oder Jahresmittelwerte behandelt werden können.

### 3.3 Messprogramm

Für die TS Bautzen konnte auf eigene Daten für den Zeitraum von 1990 bis 1999 zurückgegriffen werden, während an der TS Quitzdorf im Jahr 2000 ein intensives Messprogramm in Zusammenarbeit mit der Landestalsperrenverwaltung des Freistaates Sachsen (LTV) durchgeführt wurde. Die Vergleichbarkeit der Ergebnisse wurde am Anfang des Messprogramms während einer gemeinsamen Untersuchung geprüft und es zeigte sich eine gute Übereinstimmung aller Messgrößen. Es wurden alle Zu - und Abflüsse und eine Station auf der Talsperre
(tiefste Stelle) alternierend von beiden Partnern untersucht, woraus sich ein zweiwöchiges Probenahmeraster ergab (Abb. 3.3).

Da große Teile der TS Quitzdorf relativ flach sind (1-3 m) und Unterschiede zwischen den verschiedenen Beckenbereichen zu erwarten waren, wurde eine zusätzliche Station im Flachwasserbereich eingerichtet und monatlich beprobt. Bei den Beprobungen der Freiwasserzone wurde in 1 m -Schritten von der Oberfläche bis zum Grund gemessen. Die Sichttiefe wurde mit einer Secchi-Scheibe ermittelt. Für die Bestimmung von $\mathrm{O}_{2}$ (nach Winkler), o $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$, $\mathrm{P}_{\mathrm{ges}}, \mathrm{NH}_{4}-\mathrm{N}, \mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}, \mathrm{NO}_{2}-\mathrm{N}, \mathrm{SO}_{4}$, Sestontrockenmasse und $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}$ wurden Wasserproben aus den Tiefen 0, 3, 5 und 7 m mit Hilfe eines 21 Friedinger-Schöpfers entnommen und im Labor analysiert. Weitere Größen (DOC, DIC, Chl - a) wurden als Mischproben aus den verschiedenen Tiefenhorizonten bestimmt oder die Ergebnisse solcher Mischproben von der LTV zur Verfügung gestellt. Für die Bestimmung von oPO ${ }_{4}-\mathrm{P}, \mathrm{P}_{\text {ges }}, \mathrm{NH}_{4}-\mathrm{N}, \mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$, $\mathrm{NO}_{2}-\mathrm{N}$ und $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}$ wurden die photometrischen Verfahren nach DIN verwendet.

Darüber hinaus wurde in der Talsperre Quitzdorf die diffusive Freisetzung von Orthophosphat mit Hilfe von Dialysesamplern (sogenannten „peepern") bestimmt (Methode nach HESSLEIN, 1976). Die Berechnung der Freisetzungsrate erfolgte mit dem von HUPFER et al. (2000) benutzten Verfahren. In Ergänzung zu den Strömungsmessungen, durchgeführt durch die RWTH Aachen (KÖNGETER et al., 2004) und in Kooperation mit dem DFG-Projekt „Raum-zeitliche Variation der ökologischen Bedeutung von Microcystinen in eutrophen Gewässern" (Be 1671/4-1) wurden Horizontalverteilungen von biologischen und chemischen Gütekriterien untersucht. Hierzu wurden an 9 bis 11 Messstellen Profilmessungen von Chlorophyll (Fluoreszenz-Sonde), Temperatur, Sauerstoffkonzentration und pH-Wert (WTW-Sonden) durchgeführt sowie die Nährstoffkonzentrationen (Phosphor, Stickstoff) bestimmt. Für den Zeitraum von 1993 bis 1999 stellte die LTV Wassergütedaten zur Verfügung.

### 3.4 Datenbank

Wird ein Gewässer über längere Zeit kontinuierlich untersucht, so ist es notwendig, die anfallenden Daten systematisch zu organisieren. Die Vorteile liegen hierbei besonders in der einfachen Reproduzierbarkeit ausgewerteter Ergebnisse. Außerdem ist es möglich, Daten unterschiedlich zu systematisieren und unter verschiedenen Gesichtspunkten auszuwerten.

Die Talsperre Bautzen ist ein vom Institut für Hydrobiologie der TU Dresden seit 1976 intensiv untersuchtes Gewässer. Auf Grund der dadurch zwangsläufig entstandenen Heterogenität der Datenquellen (unterschiedliche Institutionen, wechselnde Bearbeiter, unterschiedliche Fragestellungen, Weiterentwicklung der Software) erforderte die Erstellung der Datenbank


Abbildung 3.4: Struktur der Access-Datenbank (Beispiel TS Bautzen)
und die Plausibilitätsprüfung einen wesentlich höheren Aufwand als ursprünglich angenommen.

Die erfassten Daten wurden in Form einer relationalen Datenbank mit Hilfe von Microsoft Access organisiert (Abb. 3.4). Auch für die Talsperre Quitzdorf wurde eine, wenn auch wesentlich kleinere, Datenbank angelegt. Beide Datenbanken enthalten Daten unterschiedlicher Institutionen. So wurden neben den Messungen des Institutes für Hydrobiologie auch System- und Bewirtschaftungsdaten der LTV, meteorologische Daten des Deutschen Wetterdienstes (DWD) und des Institutes für Hydrologie und Meteorologie der TU Dresden aufgenommen. Außerdem wurden hydrologische Daten vom Landesamt für Umwelt und Geologie des Freistaates Sachsen (LfUG) zur Verfügung gestellt. Alle Daten wurden mit einer Quellenangabe versehen.

### 3.5 Datenauswertung

Die statistische Auswertung verfolgte folgende Ziele:

- Bilanzierung von Stofffrachten für alle relevanten Simulationsgrößen,
- Identifikation von Trends und Auswahl eines Zeitraumes für Vorhersagen,
- Beschreibung der durch Saisonalität bedingten Streuung der Simulationsgrößen,
- Untersuchung von Beziehungen der Stoffe untereinander und zum Zufluss,
- Aufbereitung von Eingangsdaten für das Modell SALMO.

Zur Auswertung wurde im wesentlichen das Open Source Programm „R" (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2008) verwendet, ein Grafik- und Statistiksystem mit einer sehr leistungsfähigen vektor- und matrizenorientierten Programmiersprache.

## Frachtberechnung

Die verlässliche Abschätzung von Stofffrachten ist eine wichtige Voraussetzung für die Bilanzierung der Im- und Exporte und der Stoffumsatzprozesse der Talsperren. Hierbei zeigt sich, dass die Auswahl von geeigneten Verfahren von zahlreichen Autoren sehr kontrovers diskutiert wird (TREUNERT et al., 1974;, JOHNSON, 1979, DANN et al., 1986; KELLER et al., 1997, BEHRENDT et al., 1999).

Häufig wird versucht, den bei einer regelmäßigen Beprobung oft vernachlässigten Einfluss von Hochwasserereignissen mit Hilfe von Regressionsbeziehungen (C-Q-Beziehung) zwischen Konzentration und Abfluss auszugleichen oder mit Hilfe einer Abflusswichtung zu berücksichtigen. KELLER et al. (1997) weist jedoch auf die in diesem Zusammenhang oft auftretenden statistischen Probleme (z.B. Extrapolation) hin und empfiehlt eher einfache Berechnungsverfahren. Auch die Nutzung des Bewirtschaftungsmodells WBalMo als Kernmodell spricht dafür, einfache robuste Verfahren zu wählen und die zeitliche Diskretisierung möglichst grob zu halten.

Es zeigte sich, dass die durchflussgewichtete Mittelung (Verfahren nach BEHRENDT et al. 1999), die Methoden 1 und 2 nach KELLER et al. (1997) und das von DANN et al. (1986) favorisierte Verfahren „period weighted sample mean" bei den meisten Stoffen (d.h. sowohl bei gelösten Stoffen wie TP und $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$ als auch beim Seston) sehr ähnliche Ergebnisse lieferten. Beim Verfahren „period weighted sample mean" wurden außerdem Ausreißer gedämpft und die bei monatlicher Frachtberechnung beobachtete kritische Überschätzung von Extremereignissen ausgeglichen, ohne umgekehrt diese Werte ganz zu vernachlässigen. Aufgrund der besseren Vergleichbarkeit wurde jedoch letztlich das von vielen Autoren und unter anderem auch von BEHRENDT et al. (1999) favorisierte Verfahren der durchflussgewichteten Mittelung verwendet.

## Trends

Es wurden zunächst Monatsfrachten berechnet und anschließend in monatliche Mittelkonzentrationen rückgerechnet. Anhand dieser Mittelwerte wurde geprüft, ob auf Grund äußerer Einflüsse zeitliche Trends im Verhalten der untersuchten Größen auftreten. Bei Vorliegen
von Trends kann prinzipiell eine Trendkorrektur vorgenommen werden. Da die im Untersuchungszeitraum beobachteten Trends zwischen 1990-1995 im wesentlichen auf die verringerte Nährstoffbelastung nach der deutschen Wiedervereinigung zurückgeführt werden können, wurden bei den betroffenen Wassergütekriterien nur die Jahre 1996-1999 nach Abklingen des Trends für weitere Analysen verwendet.

## Mittelwerte und Varianzen

Nicht für alle Gütekriterien ist es notwendig, diese kausal zu modellieren oder anhand von Regressionsanalysen mit anderen Größen empirisch in Beziehung zu setzen. Deshalb wurde zunächst untersucht, bei welchen Größen eine einfache Angabe von Mittelwerten als vorläufig ausreichend hinnehmbare Information dienen könnte.

In Ergänzung zu mittleren Verläufen wurden die Varianzen wichtiger Wassergütekriterien analysiert. Aus der Größe der Varianz (bzw. Spannweite) lassen sich Informationen ableiten, in welchen Monaten diese Kriterien besonders sensitiv auf äußere Steuergrößen (meteorologische Faktoren, Bewirtschaftung) oder systeminterne Rückkopplungen (z.B. Dynamik der Planktonentwicklung) reagieren. Für diese Größen war eine Simulation mit einem komplexen Modell notwendig.

Konnte jedoch ein relativ ausgeglichenes intraannuelles Verhalten bei geringer Streuung festgestellt werden, wurde ein Mittelwert aller vorhandenen Messwerte unabhängig vom Messtermin als ausreichend betrachtet. Zum Teil lagen nur für eine sehr begrenzte Anzahl von Terminen Messungen vor, so dass auf eine Prüfung auf Saisonalität und Streuung verzichtet werden musste. Zeigten Größen dieser Kategorie hingegen eine eindeutig ausgeprägte Saisonalität, wurden im Modul monatliche Mittelwerte verwendet.

## Empirische Beziehungen

Nicht für alle Größen kann eine direkte kausale Abhängigkeit angegeben werden, da die zugrunde liegenden Prozesse teilweise zu komplex oder zu stark zufällig gesteuert sind. Teilweise würde die genaue Beschreibung auch einfach einen im Vergleich der zur Verfügung stehenden Zeit und zum erwarteten Nutzen zu hohen Aufwand bereiten. Empirische Zusammenhänge hingegen ermöglichen es, Beziehungen zwischen ein oder mehreren Größen ohne kausale Berücksichtigung aller physikalischen, chemischen oder biologischen Gesetzmäßigkeiten abzuleiten. Es konnten im wesentlichen lineare Beziehungen verwendet werden. Um annähernd symmetrische Verteilungen zu erreichen, haben sich linearisierende Transformationen wie Logarithmierung oder Potenzen als notwendig erwiesen.

### 3.6 Gütemodellierung

Die an den wesentlichen im Gewässer ablaufenden Umsatzprozesse beteiligten Stoffe werden als „Schlüsselgrößen" bezeichnet. Hierzu zählen sowohl die Nährstoffe, wie Phosphor und Stickstoff als auch die biogenen Fraktionen (Phytoplanktonbiomasse, Chlorophyll, Detritus, TOC, $\mathrm{BSB}_{5}$ ) sowie Sauerstoff. Deren Konzentration bzw. Masse wird zum einen durch externe Prozesse wie Strahlung aber auch durch interne wie Primärproduktion, Respiration und Zooplanktongrazing gesteuert. Zur Abbildung dieser Größen wird daher ein Modell benötigt, welches den Stoffumsatz sowie die direkten und indirekten Beziehungen zwischen diesen Größen über eine komplexe Simulation beschreibt. Zu diesem Zweck wurde das komplexe Modell SALMO (Abschnitt 2.3.2) auf beide Untersuchungsgewässer angewendet.

Die Modellierung der Gewässergüte erfolgte in mehreren Schritten. Zunächst wurde die gesamte Eingangsdatenmatrix für das komplexe Gütemodell auf Grundlage verfügbarer Messdaten erstellt. Dazu lieferten die jeweiligen Datenbanken (Abschnitt 3.4) alle für die Eingangsdatenmatrix (Abb. 3.5) notwendigen Informationen. Auch die Validationsdaten zur Bewertung der Modellanpassung entstammen den Datenbanken. Diese komplexe Gütemodellierung diente der Modellanpassung an die jeweiligen Gewässer und der Bewertung der Modellgüte. Diese Information ist Voraussetzung, um die nachfolgenden Schritte hin zu einer Modellvereinfachung und -aggregation hinsichtlich ihrer Güte bewerten zu können. Die Modellergebnisse entsprechen hierbei der mit SALMO maximal möglichen Anpassung - einem Optimum.

Im zweiten Schritt wurden die Eingangsinformationen reduziert (Abb. 3.5). Dazu wurden wieder Messwerte der Datenbanken verwendet. Diese wurden entsprechend dem Umfang und der zeitlichen Auflösung den „zukünftigen" stochastisch generierten Eingangsdaten des Bewirtschaftungsmodells (Kernmodells) zu Monatsmitteln aggregiert. Durch den Vergleich der Ergebnisse aus dieser reduzierten Modellierung mit denen der komplexen Gütemodellierung konnten zu erwartende Änderungen in der Modellgüte evaluiert werden. Für diesen Schritt wurden eine Reihe alternativer Algorithmen und empirischer Abhängigkeiten abgeleitet, mit deren Hilfe die fehlenden Eingangsinformationen generiert werden konnten.

Anschließend folgte die Simulation der Gewässergüte auf Basis der stochastisch generierten unterschiedlichen Bewirtschaftungszustände - die stochastische Gütemodellierung. Dazu wurden alle Algorithmen und empirischen Abhängigkeiten aus der reduzierten Gütemodellierung berücksichtigt. Eine Bewertung der Modellgüte war nicht mehr möglich, da keine gemessenen Vergleichsdaten mehr zur Verfügung standen. Vielmehr sollten alle möglichen Systemzustände hinsichtlich variabler Stoffimporte in die Gewässer getestet und Daten für das Training Neuronaler Netze generiert werden.

Die Modellaggregation des komplexen Modells SALMO in ein stark vereinfachtes Black-Box-Modell erfolgte durch Training künstlicher neuronaler Netze - ANN (Abschnitt 2.4). Diese sind in der Lage, komplexe Zusammenhänge mit Hilfe empirischer Beziehungen abzuleiten. Die Evaluation der aggregierten Modellergebnisse erfolgte durch Vergleich mit den Ergebnissen der stochastischen Gütemodellierung.

Somit war es möglich, den Einfluss aller Vereinfachungen hinsichtlich der Struktur und Auflösung der Eingangsdaten und auch der Modellaggregation zu bewerten.

### 3.6.1 Komplexe Gütemodellierung

Die Anpassung von SALMO an die Untersuchungsgewässer erfolgte im Wesentlichen über die Implementierung bisher nicht berücksichtigter Prozesse. Dabei wurde vor allem der Prozess der Phosphorrücklösung aus dem Sediment bei Sauerstoff- und Nitratmangel im Hypolimnion bzw. in der bodennahen Grenzschicht betrachtet. Hierbei flossen auch die Ergebnisse aus einer im Jahr 2001 durchgeführten Studie zur Entwicklung der Gewässergüte von einem sehr flachen Gewässer ein (WETZEL, 2002; BENNDORF und WETZEL, 2003). Weitere Anpassungen erfolgten in Bezug auf die Lichtextinktion im planktonfreien Wassers, den Fischbestand sowie die vorhandenen Algengruppen. Für alle anderen Parameter wurden die Standardwerte des Modells verwendet.

Die Validation sollte nicht für ein spezielles Jahr erfolgen. Vielmehr wurde für eine Reihe repräsentativer Jahre 1996-1999 eine „mittlere" Anpassung vorgenommen. Dies soll gewährleisten, dass auch für zukünftig ganz unterschiedliche System- und Bewirtschaftungszustände im Mittel ein plausibles Simulationsergebnis zu erwarten ist.

## Temperatur und Schichtungsverhältnisse

Viele chemische und biologische Prozesse hängen hinsichtlich ihrer Dynamik stark von der Temperatur ab. Die Temperatur geht daher als Eingangsgröße TE bzw. TH direkt in das Modell ein (Abb. 3.5). Die Ermittlung der Schichtungsverhältnisse dient im Modell SALMO vor allem zur Bestimmung der Perioden, in denen ein Gewässer im sogenannten Zweibox-Modus läuft. Das bedeutet, durch Ausbildung einer mehr oder weniger stabilen Schichtung kommt es permanent oder zeitweilig zu einer vertikalen Trennung des Gewässerkörpers in Epi- und Hypolimnion. Diese Unterscheidung ist wichtig, da es während dieser Phase quasi zu einer Trennung der chemischen, physikalischen und biologischen Prozesse im Epi- bzw. Hypolimnion kommt, in denen unterschiedliche Faktoren und Parameter dominieren. Während dieser Phase korrespondieren beide Schichten nur über turbulenten Stoff- und Energieaustausch miteinander. Dieser turbulente Austausch wird in SALMO über die Eingangsgrößen
$A E$ und $A H$ parametrisiert, die zwar vorgegeben aber während der Simulation nicht geändert werden können. Das Schichtungsverhalten eines Gewässers wird durch thermische und dynamische Randbedingungen wie dem Energie- bzw. Wärmeeintrag aus Strahlung sowie der vom Wind angetriebenen Durchmischung gesteuert. Die daraus resultierenden internen und externen Randbedingungen können in ihrer Gesamtheit nur mit einem physikalischen Modell beschrieben werden. In SALMO kann die vertikale Schichtung jedoch nur über eine externe Eingangsgröße parametrisiert werden. Hierfür ist die Tiefe der durchmischten Oberflächenschicht ZMIX REAL festzulegen.

Da bisher kein entsprechender physikalischer Ansatz verfügbar war, wurden die Zeitpunkte für Start und Zusammenbruch der Sommerstagnation sowie die Lage der Thermokline anhand gemessener Temperaturprofile abgeleitet. Dazu wurde die Tiefe ermittelt, bei der die zweite Ableitung der Temperatur ein Minimum aufweist. Wies eine Profilmessung zwei und mehr Minima auf oder wurde das Minimum nahe dem Grund oder der Oberfläche festgestellt, wurde ZMIXREAL manuell festgelegt.

Die Eingangs- und Validationsdaten für Epi- und Hypolimnion bzw. den gesamten Wasserkörper während der Vollzirkulation wurden als volumengewichtete Mittelwerte aus den Messwerten der einzelnen Tiefenstufen in Abhängigkeit von ZMIXREAL gebildet.

Diese Methode galt als ausreichend, da bisher keine stochastisch generierten Eingangsdaten für Szenarienanalysen genutzt wurden. Für die hier vorgestellte Fragestellung musste hingegen eine Methode entwickelt werden, die ZMIXREAL intern in Abhängigkeit der verfügbaren stochastisch generierten Eingangsdaten ableitet (Abschnitt 3.6.2).

### 3.6.2 Reduzierte Gütemodellierung

Eine Kopplung des Gütemodells mit dem Kernmodell WBalMo erforderte eine Reduktion der Eingangsinformationen für die Gütesimulation sowohl vom absoluten Umfang als auch in Bezug auf die zeitliche Auflösung. Als Ergebnis dieser Reduktion werden durch WBalMo lediglich Monatsmittelwerte von Globalstrahlung, Zu - und Abfluss an das Gütemodell übergeben. Es war daher zu bewerten, inwieweit unter diesen Voraussetzungen noch realistische Simulationsergebnisse zu erwarten sind. Dazu wurden die in der Modellanpassung verwendeten Eingangsdaten als Grundlage verwendet und entsprechend der Vorgabe reduziert. Wichtig war hierbei vor allem, eine Methode zu entwickeln, die Lage der Thermokline ZMIXREAL, der Epi- und Hypolimniontemperaturen ( $T E, T H$ ) sowie die Volumenbilanzen für Epi- und Hypolimnion $(V E, V H)$ aus den nun verfügbaren Informationen abzuleiten.

INPUT


Abbildung 3.5: Eingangs- und Ausgangsdatenmatrix von SALMO (schwarz: Eingangsdaten im reduzierten Fall)

## Temperatur und Schichtungsverhältnisse

Die Schichtung in Epi- und Hypolimnion basiert auf der Abhängigkeit der Dichte des Wassers von der Temperatur. Wasser hat seine maximale Dichte bei $4^{\circ} \mathrm{C}$. Je wärmer das Wasser, desto geringer die Dichte und desto größer der Gradient der Dichteänderung. D.h. mit der schnellen Erwärmung der oberen Gewässerschichten im Frühjahr vergrößert sich der Unterschied zwischen leichter werdendem Oberflächen- und schwererem Tiefenwasser derart, dass angreifender Wind bald nicht mehr in der Lage ist, den gesamten Wasserkörper zu durchmischen (UhLmaNN, 1988). Die Verteilung der absorbierten Wärmeenergie erfolgt hingegen durch turbulente Einmischung innerhalb der oberen Gewässerschicht. Antriebskraft ist hier die Windstärke und - richtung. Weitere Einflussgrößen sind außerdem die Beckenmorphometrie und Lufttemperatur.

Die gewässerinterne Temperaturverteilung und das Schichtungsverhalten hängen maßgeblich vom vorangegangenen Strahlungsangebot ab. Vor allem Gewässer mit hohem Trüb- und Gelbstoffgehalt absorbieren sowohl lang- als auch kurzwellige Strahlung bereits innerhalb der oberen Gewässerschichten (bis 10 m ) nahezu vollständig und wandeln den gesamten Strahlungsanteil in Wärme um (UhLMANN, 1988, S.43). Für beide Gewässer wurden mit Hilfe von Regressionsanalysen bestimmt, für welche Anzahl vorangegangener Tage die Globalstrahlung summiert werden muss, um den stärksten Zusammenhang mit der Epilimniontemperatur $T E$ zu bekommen. $T E$ wurde hier als volumengewichteter Mittelwert aus gemes-
senen Temperaturprofilen abgeleitet.

$$
\begin{equation*}
T E_{t}=a_{E}+b_{E} \cdot \frac{\sum_{i=1}^{t} R G_{i}}{t} \tag{3.1}
\end{equation*}
$$

Eine Regressionsanalyse volumengewichteter Mittelwerte gemessener Temperaturprofile für Epi- und Hypolimniontemperatur ( $T E$ und $T H$ ) während der Sommerstagnation diente dazu, die Hypolimniontemperatur direkt aus der Epilimniontemperatur abzuleiten.

$$
\begin{equation*}
T H_{t}=a_{H}+b_{H} \cdot T E_{t} \tag{3.2}
\end{equation*}
$$

Die Funktion für die Hypolimniontemperatur gilt jedoch nur während der sommerlichen Schichtungsperiode. Beginn, Verlauf und Zusammenbruch der Sommerstagnation ist allerdings auch für eine Reihe weiterer Eingangsgrößen wie den Zufluss (QIN) und Nährstoffimport $\left(\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}, \mathrm{N}, P O M\right)$, deren Einschichtung ins Epi- bzw. Hypolimnion und damit für die biologischen und chemischen Prozesse in den jeweiligen Schichten von Bedeutung.

Im Zusammenhang mit der hier vorgestellten Arbeit standen jedoch lediglich Zeitreihen der Globalstrahlung und der Epilimniontemperatur zur Verfügung. Daher wurden die Zeitpunkte für Beginn und und Zusammenbruch der Sommerstagnation (Abb. 3.6) wurden unter Berücksichtigung des Wärmeeintrags aus der Globalstrahlung (Gleichung 3.1) über folgenden Ansatzes berechnet:

- Entsprechend dem oben erläuterten statistischen Zusammenhang zwischen Temperatur und Globalstrahlung wurde die Einstrahlungssumme ermittelt, die in den mit Messwerten belegbaren Jahren bis zum Start der Stagnation in das Gewässer einging. Wird diese Einstrahlungssumme erreicht, beginnt sich das Gewässer zu schichten (Abb. 3.6 Punkt A).
- Mit Erreichen des Temperaturmaximums im Epilimnion (Abb. 3.6 Punkt B), änderte sich die Hypolimniontemperatur nicht mehr.
- Unterschreitet die Temperaturdifferenz zwischen Epi- und Hypolimnion den Grenzwert von 1 K , gilt die Schichtung als wieder instabil und bricht zusammen Dieser Zeitpunkt stellt das Ende der Sommerstagnation dar (Abb. 3.6 Punkt C) .

Dieser Ansatz zur Festlegung der meteorologisch möglichen Schichtungsperiode wird als ausreichend betrachtet. Zum Zusammenbruch der Schichtung können jedoch auch anthropogene Einflüsse führen. So kann eine extreme Wasserabgabe zum Leerlaufen des gesamtem Hypolimnions führen. Zur Berechnung der Volumenbilanzen von Epi- und Hypolimnion


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der Ableitung von Schichtungsperiode und der Epi (schwarz)- und Hypolimniontemperaturen (grau)
wurden folgende Bilanzgleichungen angesetzt:

$$
\begin{equation*}
V H_{t}=V H_{t-1}+0,5 \cdot Q I N_{t}-Q O U T_{t}+A E_{t}-A H_{t} \tag{3.3}
\end{equation*}
$$

Für die Berechnung des hypolimnischen Volumens beim Start der Sommerstagnation $V H_{1}$ benötigt man neben der Stauspiegelhöhe $S_{1}$ die Durchmischungstiefe zu Schichtungsbeginn ZMIXREAL $L_{1}$. Das Volumen wurde dann aus der bathymetrischen Beziehung $V=f(S-$ ZMIXREAL) abgeleitet. ZMIXREAL $L_{1}$ wurde für die Talsperre Bautzen mit einem Wert von $4,5 \mathrm{~m}$ angenommen. Dieser Wert wurde aus dem arithmetischen Mittel der zu Beginn der Sommerstagnation beobachteten Durchmischungstiefen abgeleitet.

Eine Untersuchung der Einschichtungsverteilung aus historischen Reihen ergab, dass sich der Zufluss zu ungefähr gleichen Teilen ins Epi- bzw. Hypolimnion einschichtet. Der Abfluss hingegen ist zu $100 \%$ hypolimnisch, da die Wasserentnahme an den untersuchten Talsperren ausschließlich über den Grundablass erfolgt.

Die Größen $A E$ und $A H$ parametrisieren die gewässerinternen dynamische Austauschprozesse zwischen Epi- und Hypolimnion. Bisher wurden diese Größen als Ausgleichsgröße (Restglied) aus der Volumenbilanz von Epi- und Hypolimnion berechnet. Da dazu die Lage der Thermokline ZMIXREAL vorher bekannt sein muss, ist dieses Vorgehen in unserem Fall nicht anwendbar. Als Alternative wurden für das Einmischen von epilimnischen Wassers ins

Hypolimnion folgende Mischungsformel verwendet:

$$
\begin{equation*}
A E_{t}=V H_{t} \cdot \frac{T H_{t+1}-T H_{t}}{T E_{t}-T H_{t+1}} \tag{3.4}
\end{equation*}
$$

Grundlage für diese Vorgehensweise war die Annahme, dass ein Erwärmen des Hypolimnion ausschließlich durch Einmischen wärmeren epilimnischen Wassers erfolgt, da das Hypolimnion nur über diese eine dynamische Systemgrenze verfügt.

Der umgekehrte Fall, das Einmischen hypolimnischen Wassers ins Epilimnion ist auf Grund der hochdynamischen Systemgrenze zur Atmosphäre nicht mittels einfacher Ansätze beschreibbar. Aus diesem Grund wurde für die Austauschrate ein Mittelwert von $A H=150000 \mathrm{~m}^{3} \mathrm{~d}^{-1}$ angesetzt.

Dieser Ansatz ermöglichte eine Ableitung von Epi- und Hypolimniontemperatur, Schichtungsperiode, Lage der Thermokline sowie der Austauschgrößen auf einfachem Niveau, jedoch unter Ausnutzung aller verfügbaren Eingangsinformationen. Eine physikalisch korrekte analytische Ableitung dieser Größen erfordert ein gekoppeltes hydrophysikalisch-biologisches Modell (z.B. SAMLO-HR, BAUMERT et al., 2005; PETZOLDT et al., 2005, ROLINSKI et al., 2005).

## Stoffimport

Für die in die Gewässer transportierten Stoffimporte von Stickstoff, Orthophosphat und organischem Material wurden Monatsmittelwerte der in dieser Zeit gemessenen Stoffkonzentrationen im Hauptzufluss verwendet.

### 3.6.3 Stochastische Gütemodellierung

Zunächst wurden anhand gemessener Zeitreihen die Güte der Simulation mit der reduzierten Eingangsdatenmatrix für das komplexe Modell SALMO getestet und evaluiert (Abschnitt 4.3.2). Als Prognosemodell muss dieser Ansatz in der Lage sein, auch in extremen Situationen robust zu rechnen und plausible Ergebnisse zu erzeugen. Dies wurde mit Hilfe stochastischer Simulationen getestet. Die Eingangsdaten für die stochastischen Simulationen wurden für beide Talsperren mit dem Bewirtschaftungsmodell WBalMo (Abschnitt 2.2) durch die WASY GmbH generiert und zur Verfügung gestellt. Sie entsprechen bereits dem zukünftig zu erwartenden Bewirtschaftungsmuster und beinhalten mit insgesamt 100 Realisationen eine große Bandbreite möglicher Bewirtschaftungs- und Systemzustände. Entspechend der Planung werden die Talsperren für den Einstau der Tagebaurestlöcher über einen Zeitraum von 35 J ren genutzt. Die Daten beinhalten Monatsmittelwerte der Globalstrahlung

Tabelle 3.2: Variation der Stoffimporte für die stochastische Simulation, als Faktoren der Referenzwerte

| Variante | $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$ | $\mathrm{N}_{\text {ges }}$ | POM |
| :---: | :---: | :---: | :---: |
| 1 | 1,0 | 1,0 | 1,0 |
| 2 | 0,5 | 1,0 | 1,0 |
| 3 | 2,0 | 1,0 | 1,0 |
| 4 | 1,0 | 0,5 | 1,0 |
| 5 | 1,0 | 2,0 | 1,0 |
| 6 | 0,5 | 0,5 | 1,0 |

sowie Zu - und Abflüssen der Talsperren. Die Ableitung der fehlenden Eingangsinformationen erfolgte entsprechend den für die reduzierte Gütemodellierung entwickelten Algorithmen (Abschnitt 3.6.2.

## Stoffimport

Die Stoffimporte in die Gewässer stellen eine als semidynamische Eingangsvariable zu bezeichnende Größe dar. Zum einen wurden Referenzwerte aus langjährigen Monatsmitteln der gemessenen Zuflusskonzentrationen abgeleitet. Dieses Vorgehen war angebracht, da für keine der Größen ein statistisch signifikanter Zusammenhang vom Zufluss abgeleitet werden konnte. Die monatlichen Messungen zeigten gleichfalls relativ geringe Varianzen, so dass die Mittelwerte als repräsentativ anzusehen sind. Zum anderen soll es möglich sein, extern angepasste Werte einzugeben und somit gegenüber dem mittleren Verhalten veränderte Randbedingungen zu berücksichtigen. Im Hinblick auf die Modulbildung wurden für beide Talsperren jeweils 6 Varianten festgelegt. Die damit erreichte Bandbreite soll möglichst viele der zu erwartenden Schwankungen der Stoffimporte einschließen. Die in Tab. 3.2 aufgeführten Faktoren wurden mit den Referenzwerten multipliziert. Somit ergeben sich folgende Varianten:

$$
\begin{equation*}
N=6 \text { Varianten } \cdot 100 \text { Realisierungen } \cdot 35 \text { Jahre Einstauphase } \cdot 12 \text { Monate } \tag{3.5}
\end{equation*}
$$

Die „Erfahrungen" aus dieser Vielzahl von Simulationen dienten im Weiteren dem Training künstlicher neuronaler Netze. Die Ableitung und Bilanzierung der schichtungsrelevanten Größen für die Talsperre Bautzen wurde entsprechend des oben erläuterten Algorithmus mit Hilfe eines in „R" programmierten Eingangsdatengenerators vorgenommen.



#### Abstract

Abbildung 3.7: Nutzung von Eingangs- und Ausgangsdaten stochastischer Simulationen zum Training von ANN


### 3.6.4 Modellaggregation - ANN

Das deterministische Gewässergütemodell SALMO dient dazu, chemische und biologische Zustandsgrößen von Seen und Talsperren in hoher zeitlicher Auflösung (1 Tag) zu modellieren. Der dazu notwendige Rechenaufwand übersteigt jedoch die Möglichkeiten des Gesamtmodells WBalMo. Außerdem ist eine derartig hohe zeitliche Auflösung im Rahmen des Gesamtmodells als ein langfristiges Prognosewerkzeug nicht vorgesehen. Es wurde daher nach Möglichkeiten gesucht, SALMO zu ersetzen, ohne dass die Ergebnisse an Plausibilität einbüßen. Künstliche Neuronale Netze (ANN) erwiesen sich in dieser Fragestellung als ein geeignetes Werkzeug, das in der Lage ist, nichtlineare, empirische Abhängigkeiten zu beschreiben (siehe Abschnitt 2.4).

## Datengrundlage und Netzgenerierung

In dieser Arbeit wurde ein Feedforward-Netz verwendet und mit einem BackpropagationAlgorithmus trainiert (Hagan et al., 1996). Zum Training des Netzes wird ein Eingangsund ein Ausgangsdatensatz benötigt. Der Eingangsdatensatz entspricht dem der stochastischen Gütemodellierung einschließlich aller Varianten. Die Ergebnisse dieser Simulationen bildeten den Ausgangsdatensatz für das Netztraining. Für Epi- und Hypolimnion wurden zwei unterschiedliche Netze trainiert. Der Datensatz für das Epilimnion enthält alle epilim-


Abbildung 3.8: Unterteilung der Daten für Training, Validierung und Test des ANN.
nischen Daten für geschichtete und ungeschichtete Verhältnisse. Der Datensatz für das Hypolimnion enthält ausschließlich Hypolimnionwerte während der Schichtungsperiode. Die Datensätze wurden in 3 Teile gesplittet (Abb.3.8). Die Hälfte der Werte diente zum Training des Netzes. Ein weiteres Viertel, der Validierungsdatensatz, wird ebenfalls beim Trainingsprozess benötigt. Er soll verhindern, dass das Netz zufällige, nicht für das System charakteristische Eigenschaften des Trainingsdatensatzes erlernt. Bei der großen Anzahl der Daten ist die Gefahr eines sogenannten „Übertrainings" allerdings relativ gering. Das letzte Viertel, der Testdatensatz, bleibt beim Training unangetastet. Er dient der Überprüfung des fertigen Netzes. Die Auswahl der einzelnen Teildatensätze erfolgte zufällig.

Als erster Schritt nach der Entscheidung für eine Netzarchitektur ist die Erstellung der Datensätze nötig. Für den Eingangsdatensatz wurden die Werte für Globalstrahlung, Zu- und Abfluss, Stauvolumen, und die Stoffimporte von Stickstoff und Orthophosphat (6 Varianten, siehe Abschnitt 3.2) verwendet. Diese Rohversion der Eingangsmatrix hat also die Dimension 6 Größen $\times 252000$ Monatswerte. Als Ausgangsmatrizen für Hypo-und Epilimnion wurden die mit SALMO (siehe Abschnitt 3.6.3) modellierten Zustandsgrößen für Phosphat, Nitrat, Phytoplankton, Sauerstoff und Detritus besetzt. Diese Datensätze haben also die Dimension $5 \times 252000$ Monatswerte.

Die Datensätze für das Hypolimnion wurden nun auf die Monate mit Gewässerschichtung reduziert. Das Netztraining erfolgte mit dem Programm MATLAB (QUARTERONI \& SALERI, 2006). Es wurden zunächst sowohl für das Epi- als auch für Hypolimnion Netze mit einer verdeckten Schicht erprobt. Einzig variable Größe ist hierbei die Anzahl der Neuronen der verdeckten Schicht. Es wurden Netze mit 10 bis 40 Neuronen in dieser Schicht generiert. Für
das Epilimnion ließen sich damit gute Anpassungen erzielen. Danach wurde für das Hypolimnion getestet, ob durch eine zweite verdeckte Schicht eine Verbesserung zu erzielen ist. Auch hierbei wurden zunächst für jede Schicht 10 bis 40 Neuronen verwendet. Es stellte sich heraus, dass in der ersten verdeckten Schicht mehr Neuronen nötig sind, als in der zweiten. Im Hinblick auf die Rechenzeiten beim Training des Netzes, die für eine höhere Neuronenzahl deutlich ansteigt, wurde für die erste Schicht eine Neuronenzahl zwischen 22 und 35, für die zweite zwischen 12 und 25 gewählt.

Als Gütekriterium wurden die Summe der kleinsten Quadrate der Abweichungen der mit SALMO simulierten Werte von den mit dem Netz verwendet. Das neuronale Netz hat an zeitlich variablen Größen prinzipiell die gleichen Informationen zur Verfügung wie das Modell SALMO. Das heißt, die Ausgangswerte sind Funktionen dieser Größen, was im Gegensatz zu gemessenen Trainingsdaten die theoretische Möglichkeit einer guten Anpassung bietet. Die essentiellen Unterschiede liegen darin begründet, dass SALMO auf täglicher Basis rechnet und den historischen Gewässerzustand für die Berechnung des aktuellen mit verwendet. Eine Umstellung des Netzes auf Tageswerte ist wenig praktikabel, da die Datenmatrizen unnötig groß werden, was den Rechenaufwand beim Training derart erhöhen würde, dass der Trainingsdatensatz reduziert werden müsste. Anstelle eines Informationsgewinns müsste man einen Verlust hinnehmen.

Der verwendete Netztyp besitzt, im Gegensatz zu SALMO, kein „Gedächtnis" d.h. der Systemzustand des Vormonats wird nicht im Netz gespeichert. Die Einbeziehung des historischen Gewässerzustandes erfordert, dass einige Größen des Vormonats den Eingangsdaten hinzugefügt werden. Als wesentlich wird der Stoffimport angesehen, der sich aus der Zuflusskonzentration und dem Zufluss selbst ergeben. So hat z.B. die Globalstrahlung der Vormonate einen direkten Einfluss auf den gegenwärtigen Zustand der Talsperre, zum Beispiel auf die Temperatur oder Schichtung (siehe Abschnitt 3.6.2). Es wurden Globalstrahlung, Zufluss, Stickstoff- und Orthophosphatkonzentration im Zufluss vom Vormonat der Eingangsmatrix beigefügt. Für den jeweils ersten Monat eines Szenarios von 35 Jahren wurden die Werte des aktuellen Monates verwendet. Da es sich mit dem Januar um einen Wintermonat handelt, ist auf Grund der geringen biologischen Aktivität in diesem Zeitraum nicht mit Problemen zu rechnen.

Die sich daraus ergebende Eingangsdatenmatrix hat somit die Dimension $10 \times 252000$. Ein erneutes Training mit diesen Datensätzen zeigte eine Verbesserung. Es wurde daran festgehalten, für das Epilimnion ein Netz mit einer, für das Hypolimnion mit zwei verdeckten Schichten zu verwenden. Erstens konnte so für das Epilimnion eine bessere Anpassung als für das Hypolimnion werden, zweitens steigt der Rechenaufwand für das Netztraining bei größeren Datensätzen für das Epilimnion auf Größenordnungen, die an die Grenzen der vorhandenen technischen Möglichkeiten stoßen.

## 4 Ergebnisse

Der durch zusätzliche Messungen vervollständigte Datensatz wurde im Vorfeld der Umsetzung des aggregierten Gütemodells intensiv analysiert. Zum einen diente dies dem Abschätzen der Sensitivität der einzelnen Gütekriterien auf äußere Einflüsse, wie beispielsweise dem zugrunde liegendem Bewirtschaftungsregime. Zum anderen sollten neue, im Gütemodell SALMO bisher nicht berücksichtigte Prozesse parametrisiert und über einfache Ableitungen in das Modell integriert werden. Die Erfassung horizontaler Gradienten der Stoffkonzentrationen diente der Interpretation und Evaluation der Simulationergebnisse hinsichtlich ihrer Gültigkeit für das Gesamtgewässer.

Die Anwendung des komplexen Gütemoduls SALMO für beide Untersuchungsgewässer auf ausgewählte historische Jahre 1996-1999 diente einer mittleren Anpassung des Modells auf unterschiedliche Betriebszustände der Talsperren. Damit sollte eine Überanpassung auf spezifische einmalig auftretende Systemzustände vermieden werden. Es war zu erwarten, dass plausible Ergebnisse auch nach Reduktion der Eingangsinformation und stochastischer Simulation der Talsperrenbewirtschaftung gewährleistet sind.

Mit der Aggregation des komplexen Gütemodells durch Training künstlicher neuronaler Netze für beide Talsperren, wurden einfache Simulationswerkzeuge geschaffen. Diese konnten mit dem Bewirtschaftungsmodell WBalMo gekoppelt werden. Erste Tests ergaben, dass das gekoppelte Modell stabil läuft.

### 4.1 Messprogramm

Die Datenbasis wurde im Rahmen der hier vorgestellten Arbeit während der Projektlaufzeit kontinuierlich ergänzt. Die dazu durchgeführten Freilandmessungen und Probennahmen wurden durch Dr. Markus Wetzel, Dr. Thomas Petzoldt und Katja Siemens realisiert. Die Proben wurden durch Dr. Wetzel und Frau Ball im Labor des Institutes für Hydrobiologie der TU Dresden analysiert.


Abbildung 4.1: TS Quitzdorf - $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$-Vertikalprofile an der Sediment-Wasser-Kontaktzone

## Talsperre Quitzdorf

P-Freisetzungsraten: Die Talsperre Quitzdorf ist mit einer mittleren Tiefe von $2,7 \mathrm{~m}$ und einer maximalen Tiefe von $7,8 \mathrm{~m}$ ein flaches Gewässer. Daraus wurde vermutet, dass es zu einer stärkeren diffusen Freisetzung von $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$ aus dem Sediment kommt als es der Standardparametersatz in SALMO berücksichtigt. Die diffusive Freisetzung von Orthophosphat wurde im Herbst 2000 an zwei verschiedenen Stationen (tiefster Beckenbereich sowie Flachwasserbereich) durch insgesamt 5 Dialysesampler bestimmt. Abb. 4.1 zeigt eine Gegenüberstellung typischer Orthophosphatgradienten beider Stationen. Im Interstitial, der Kontaktzone zwischen Wasser und Sediment, des tieferen Bereiches konnten oPO ${ }_{4}-\mathrm{P}$ Konzentrationen zwischen 2 und $3,5 \mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ gemessen werden (Abb. 4.1, links). Unter Berücksichtigung der Porosität des Sediments lässt sich daraus eine Orthophosphatdiffusion von 5,5 bis $13 \mathrm{mg} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$ abschätzen. Im Flachwasserbereich betrug die höchste gemessene Interstitialkonzentration $1,4 \mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1} \mathrm{oPO}_{4}$-P. Die Sedimentoberfläche war bis in eine Tiefe von ca .3 cm oxidiert und es wurde keine diffusive Freisetzung festgestellt.


Abbildung 4.2: TS Quitzdorf - Morphometrie der Talsperre und horizontale Verteilung des Chlorophylls (vertikale Mittelwerte aus Sondenmessungen) am 17.10.2000.

Messung horizontaler Gradienten: Die Unterteilung der Talsperre Quitzdorf in ein Flachwasserbecken im Talsperrenzulauf und Tiefwasserbecken an der Staumauer ließ die Vermutung zu, dass es hier zur Ausbildung signifikanter Gradienten kommt, die eine Anwendung des Gütemodells auf das Gesamtgewässer erschweren.

Ergänzend zu der Beprobung der 2 Messstellen im Flachwasserbereich und in der Nähe der Staumauer wurden am 17.10.2000 insgesamt 9 über die gesamte Talsperre verteilte Stationen beprobt. Die Aufnahme fand während der Herbstvollzirkulation und nach einer Phase stärkeren Windes statt. Die Untersuchung ergab dementsprechend eine relativ homogene Verteilung von Plankton (Abb. 4.2) und Nährstoffen und deutet in Übereinstimmung mit den hydrodynamischen Simulationen (KÖNGETER et al. 2004) darauf hin, dass die Talsperre trotz Flachheit, Größe und Gliederung durch Buchten und Inseln zumindest bei Windereignissen gut durchmischt wird.

### 4.2 Datenauswertung

Alle für die Simulation der Gewässergüte im gesamten Flusseinzugsgebiet ausgewählten Gütekriterien (Tab. 3.1) wurden zunächst einem Test bezüglich ihrer statistischen Eigenschaften unterworfen. Dabei wurde besonders Wert auf kurz- und langfristige Eigenschaften wie Saisonalität oder Trends gelegt. Außerdem wurden für die Talsperrenzuflüsse gemessene Stoffkonzentrationen für Phosphor und Stickstoff analysiert. Diese gehen als Eingangsdaten in SALMO ein. Es war zu klären, inwieweit die Stoffbilanzen Rückschlüsse auf die Stoffumsetzung und die Fixierung bzw. Freisetzung von Nährstoffen in der Talsperre zulassen.

Tabelle 4.1: Repräsentation der Gütekriterien im aggregierten Gütemodell

| Gütekriterien | Einheit | Umsetzung im Modell |
| :--- | :---: | :--- |
| $\mathrm{O}_{2}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Modell |
| $\mathrm{N}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| Phytoplankton | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| $\mathrm{~T}_{\mathrm{w}}$ | ${ }^{\circ} \mathrm{C}$ |  |
| $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | empirisch |
| $\mathrm{NH}_{4}-\mathrm{N}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| $\mathrm{Chl}-\mathrm{a}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| $\mathrm{pH}^{\mathrm{BSB}_{5}}$ | - |  |
| Mn | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Monatsmittel |
| SO | $\mathrm{mg} \mathrm{L}_{4}-1$ |  |
| Fe | $\mathrm{mg} \mathrm{L}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |
| Cl |  |  |
| Al | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| K | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | Jahersmittel |
| Na | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| Mg | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| Ca | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| As | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| Zn | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |  |
| Pb | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | $0,5 \cdot$ Nachweisgrenze |
| Cd | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ | $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ |

Als Ergebnis dieser Untersuchungen wurde entschieden, welche der Gütekriterien als Jahresoder Monatsmittel an das Kernmodell übergeben werden, welche empirisch abgeleitet werden können und welche mit in die aggregierten Gütesimulation einfließen (Tab. 4.1).

## Frachtberechnung, Trends

## Talsperre Bautzen

P-Bilanz: In den 1980er Jahren betrug die P-Flächenbelastung bis zu $6 \mathrm{~g} \mathrm{oPO} 4-\mathrm{P} \mathrm{m}^{2} \mathrm{a}^{-1}$. Ab 1990 verringerte sich die P-Belastung drastisch. Grund hierfür waren verringerte Importraten (Abb.4.3), durch die Stilllegung von Industriebetrieben, dem Bau von Kläranlagen und der Einführung phosphatfreier Waschmittel. Von 1990 bis 1995 überwog die P-Freisetzung aus dem Sediment, d.h. die Talsperre wirkte weiterhin als P-Quelle. Die nach dem Vollenweidermodell zu erwartende Verbesserung der Trophiestufe wurde aufgrund der internen


Abbildung 4.3: TS Bautzen - Entwicklung der Phosphor-Bilanz am Zu- und Ablauf (Daten: LTV und
TU Dresden).

Belastung erst mit einer Zeitverzögerung von etwa 4 Jahren erreicht (Abb.4.4).

Seit 1996 hat sich ein neues Gleichgewicht auf immer noch hohem Niveau etabliert und die Talsperre wirkt wieder als P-Senke. Größere Freisetzungsereignisse treten nur noch im August auf, wenn $\mathrm{O}_{2}$ und $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ im Hypolimnion reduziert sind (Abb. 4.3). Nach dem Vollenweidermodell (Orthophosphatversion nach BENNDORF, 1979a) hat sich die Trophie der ursprünglich hypertrophen Talsperre seit 1990 verbessert und liegt jetzt an der Grenze zwischen eutroph und polytroph. Aus der zeitlichen Änderung der hypolimnischen $\mathrm{oPO}_{4}$ - P-Konzentration wurde eine auf die jeweilige Fläche des Hypolimnions bezogene P-Freisetzungsrate abgeschätzt. Diese Freisetzungsrate liegt seit 1994 meist unter $10 \mathrm{mg} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$. Bei starkem $\mathrm{O}_{2}$ - und Nitratschwund sind auch höhere Freisetzungsraten von über $50 \mathrm{mg} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$ möglich. Hierbei besteht eine signifikante Beziehung zwischen den positiven P-Freisetzungsraten im Hypolimnion und der Nitratkonzentration direkt über dem Sediment ( $r^{2}=0,36, p<0,05$ ) (Abb. 4.5). Die hier nicht dargestellte Abhängigkeit vom Sauerstoff hat lediglich den Charakter einer Hüllkurve.

N-Bilanz: Bei der Stickstoffbilanz ist ein deutliches Defizit zwischen Zulauf und Ablauf zu erkennen (Abb. 4.6). Ursache hierfür ist höchstwahrscheinlich eine hohe sedimentgebundene



#### Abstract

Abbildung 4.4: TS Bautzen - Trophieentwicklung in den Jahren 1990, 1991, 1992 und 1999 (Vollenweidermodell in der Orthophosphatversion nach BENNDORF, 1979a, , Daten: LTV und TU Dresden).


Denitrifikation. Während der Untersuchungsperiode wurden im Mittel 52\% der importierten N-Fracht in der Talsperre eliminiert (Medianwert von 1990 bis 1999).

Rücklösung von Nährstoffen: Bei einer starken Absenkung der Talsperre war in der Vergangenheit häufig eine Resuspension von Sedimentpartikeln in Verbindung mit einer verstärkten Rücklösung von Nährstoffen aus dem Sediment festzustellen (Abb. 4.6. Die infolge des erhöhten Nährstoffdargebotes zu beobachtende zeitweise Zunahme der Algenbiomasse führte zu einer Verschlechterung des Lichtklimas im Wasserkörper der Talsperre. Dies wiederum bewirkte eine Hemmung des weiteren Algenwachstums. Auf diesen Zusammenhang deuten die zunächst sinkenden und danach wieder ansteigenden Werte der Sichttiefe hin (Abb. 4.7).

## Talsperre Quitzdorf

Ebenso wie in der Talsperre Bautzen, spielt in der Talsperre Quitzdorf die interne Phosphatbelastung eine sehr große Rolle für die Primärproduktion und den damit verbundenen Stoffumsatzprozessen. Die Talsperre ist gemäß LAWA-Klassifikation als polytrophes Gewässer (Ackermann (LTV), pers. Information) zu bezeichnen. Für das Frühjahr wurden in der Regel geringere Indexwerte als für den Sommer festgestellt.


Abbildung 4.5: TS Bautzen - Abhängigkeit der berechneten Phosphorfreisetzungsrate von der Nitratkonzentration *über Grund 1993-2000 (Daten: LTV und TU Dresden).


Abbildung 4.6: TS Bautzen - Frachten des anorganischen Stickstoffs am Zulauf, am Ablauf der Vorsperre und am Grundablass der Talsperre (Daten: LTV und TU Dresden)

## Mittelwerte, Varianzen, Nachweisgrenzen

Eine Weitergabe von Gütekriterien in Form von Mittelwerten bedeutet, dass diese Größen nicht mehr auf variable Randbedingungen wie Bewirtschaftung, hydrologische oder meteo-

Stauspiegel


Abbildung 4.7: TS Bautzen - Verlauf von a) Stauspiegel, b) Sichttiefe sowie c) PhytoplanktonFrischmasse und Sestontrockenmasse im Jahr 1997 (Daten: LTV und TU Dresden)
rologische Verhältnisse reagieren können. Trotzdem ist diese Vorgehensweise für eine Reihe der in dieser Arbeit berücksichtigten Größen nach dem derzeitigen Erkenntnisstand als plausibel zu betrachten. Die aus den Stichproben ermittelten statistischen Eigenschaften für diese Gütekriterien sind für beide Talsperren recht ähnlich. Anhand der folgenden Abbildungen werden die prinzipiellen Gründe, für eine Weitergabe einiger Gütekriterien in Form fixer Mittelwerte dargestellt.

Zur Erfassung der saisonalen Charakteristik sowie möglicher Schwankungen innerhalb eines Monats wurden die Messdaten als Monatsboxplots zusammengefasst (Abb. 4.8-4.11). Dargestellt sind hier jeweils der Median, die 25- und 75-\%-Quartile sowie die ausreißerbereinigten Minima und Maxima. Zur Abschätzung der longitudinalen Variabilität, d.h. zur Abschätzung des Einflusses der Talsperre auf den Stoffumsatz innerhalb des Fließgewässers, wurden die Stoffkonzentrationen für die Zuflüsse der Talsperren und die volumengewichteten Mittelwerte der Hauptsperre dargestellt. Während der Stagnationsperiode wurden die Daten der Hauptsperre nochmals in Epilimnion (grau) und Hypolimnion (schwarz) unterteilt und ebenfalls volumengewichtet gemittelt.

Die Konzentrationen von Kalium (K) und Natrium (Na) (Abb. 4.8und A.1) sowie von Alumi-



#### Abstract

Abbildung 4.8: TS Quitzdorf - Boxplots von K und Na im Zufluss und der Hauptsperre, $\mathrm{n}=\mathrm{Anzahl}$ der Werte je Monat (Boxplot: Median, Quartile und ausreißerbereinigte Minima und Maxima. Als Ausreißer werden Werte betrachtet, die mehr als das 1,5fache des Interquartilbereiches von den Quartilgrenzen entfernt sind.)


nium ( Al ), Chlorid ( Cl ) und Gesamteisen $\left(\mathrm{Fe}_{\mathrm{ges}}\right)$ (Abb. A.2 und B.2p zeigten weder saisonal noch innerhalb eines Monats signifikante Schwankungen. Diese wurden daher über ihre jeweiligen Jahresmittelwerte im Gütemodul berücksichtigt.

Waren hingegen saisonale Schwankungen wie für den pH -Wert und die Mangankonzentration (Mn) (Abb. 4.9 und B.4) mit geringen Schwankungen innerhalb eines Monats zu beobachten, wurden diese Größen im Gütemodul als Monatsmittel angegeben. Ein weiterer maßgeblicher Grund für eine Weitergabe als Fixwert war der zum Teil auch der sehr geringe Stichprobenumfang pro Monat (n). So konnten zwar für die Messwerte der Mangankonzentration (Abb. 4.9) zum Teil erhebliche Schwankungen innerhalb eines Monats beobachtet werden. Die geringe Zahl an Messwerten verhinderte jedoch eine statistisch sichere Ableitung empirischer Zusammenhänge, wie zum Beispiel eine Abhängigkeit von Primärproduktion und hypolimnischer Sauerstoffkonzentration. Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass sich die Verhältnisse in der unmittelbaren Nähe des Grundablasses sowie im nachfolgenden Gewässerabschnitt ohnehin schnell ändern: Mangan fällt bei aeroben Bedingungen wieder aus und der pH -Wert weist in eutrophen Gewässern ein ausgeprägter Tagesgang auf.

Für Arsen (As) sowie die Gruppe der Schwermetalle, wie Cadmium (Cd), Blei ( Pb ) und


Abbildung 4.9: TS Bautzen - Boxplots von pH und Mn im Zufluss und der Hauptsperre, Epilimnion=schwarz, Hypolimnion=grau, n=Anzahl der Werte je Monat (Boxplot: siehe Abb. 4.8).

Zink ( Zn ) wurden im Freiwasser beider Talsperren keine über der Nachweisgrenze liegenden Konzentrationen festgestellt (Tab.4.2). Aus diesem Grund werden im Modul jeweils 50\% der Nachweisgrenze als maximale Grundbelastung angenommen und an WBalMo übergeben.

Tabelle 4.2: Nachweisgrenze (NWG) von Arsen- und Schwermetall

| Simulationsgröße | NWG $\left[\mu \mathrm{L} \mathrm{L}^{-1}\right]$ |
| :---: | :---: |
| As | $1-50$ |
| Cd | $1-10$ |
| Pb | $<10$ |
| Zn | 50 |



Abbildung 4.10: TS Bautzen - Boxplots von $\mathrm{N}_{\mathrm{ges}}$ und $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ im Zufluss und der Hauptsperre, Epilimnion=schwarz, Hypolimnion=grau, n=Anzahl der Werte je Monat (Boxplot: siehe Abb. 4.8.

## Empirische Beziehungen

Einige Simulationsgrößen wie die Nitrat- $\left(\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}\right)$ und Orthophosphatkonzentration $\left(\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}\right)$ sowie die Phytoplanktonbiomasse reagieren auf die Änderungen der externer Randbedingungen sehr variabel. Grund hierfür ist ihre Stellung im gewässerinternen Nahrungsnetz. Zustandsgrößen wie die Wassertemperaturen in Epi- und Hypolimnion (TE und $T H$ ), welche die Geschwindigkeit der Umsatzprozesse beeinflussen, weisen naturgemäß eine ausgeprägte Saisonalität auf.

Der Einfluss von Nitrat auf die Stoffumsatzprozesse wird bereits beim Vergleich der Saisonalität und der absoluten Konzentrationen in Zufluss und Hauptsperre deutlich (Abb. 4.10 und B.6. Dabei spielen neben der Temperaturabhängigkeit der Denitrifikation auch der Schichtungsverlauf und die hydrologische Situation im Einzugsgebiet eine nicht zu vernachlässigende Rolle. Besonders im Frühjahr (Hochwasser) und im Spätsommer (Aufbruch der Schichtung) sind im Ablauf der Talsperre hohe Konzentrationsschwankungen zu beobachtet. Für beide Talsperren ist festzustellen, dass durch Denitrifikation beträchtliche Mengen Stickstoff eliminiert werden.

Weitere Größen wie die Sauerstoffkonzentration $\left(\mathrm{O}_{2}\right)$ (Abb. 4.11) zeigen starke Unterschie-



#### Abstract

Abbildung 4.11: TS Bautzen und TS Quitzdorf - Boxplot der $\mathrm{O}_{2}$-Konzentration im Zufluss und der Hauptsperre in den Talsperren Bautzen (oben) und Quitzdorf (unten); Epilimnion=schwarz, Hypolimnion=grau, n=Anzahl der Werte je Monat (Boxplot: siehe Abb. 4.8.


de zwischen Zufluss und Hauptsperre. Hierbei resultieren das veränderte saisonale Verhalten und die Unterschiede in der absoluten Konzentration aus der Steuerung durch unterschiedliche Prozesse im Epi- und Hypolimnion. Die Sauerstoffkonzentration im Zufluss entspricht der temperaturabhängigen Sättigungskonzentration. Im Epilimnion wird die $\mathrm{O}_{2^{-}}$ Konzentration durch die Primärproduktion gesteuert. Während der sommerlichen Schichtungsperiode wird das Hypolimnion vor allem durch die hypolimnische Zehrung beeinflusst, die wiederum stark von Prozessen wie Primärproduktion und Respiration anhängig ist und außerdem auf diese Prozesse zurückwirkt.

Das Modell SALMO ist in der Lage, eine Reihe von Simulationsgrößen wie der Stoffkonzentrationen von $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}, \mathrm{N}_{\mathrm{ges}}, \mathrm{O}_{2}$ sowie die Phytoplanktonmasse für Epi- und Hypolimnion zu berechnen. Die Ergebnisse dienten unter anderem der empirischen Ableitung von $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}, \mathrm{P}_{\text {ges }}$ und $\mathrm{Chl}-\mathrm{a}$ (Tab. 4.3)

Zur genaueren Spezifizierung der Beziehungen wurden die volumengewichteten Mittelwerte der Talsperre Bautzen (Abb. 4.12 und A.8) verschiedene Schichtungssituationen wie (A) Vollzirkulation, (B) Sommerstagnation-Epilimnion oder (C) Sommerstagnation-Hypolimnion zugeordnet. Standen nur sehr wenige Messgrößen zur Verfügung, wurde auf eine Untertei-


Abbildung 4.12: TS Bautzen - empirische Ableitung von $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ aus $\mathrm{N}_{\text {ges }}$
lung in Epi- und Hypolimnion verzichtet und eine für alle Schichtungszustände gültige gemeinsame Regressionsfunktion abgeleitet (A+C). Für die polymiktische Talsperre Quitzdorf (Abb. 4.13) wurde auf eine Unterteilung in Jahreszeiten und Schichten verzichtet.

Die abgeleiteten Funktionen wurden zum Teil über Transformation wie Logarithmierung oder Potenzierung gefunden. In allen vorgestellten Fällen besteht zwischen den Größen ein starker funktionaler Zusammenhang, welcher besonders durch das relativ hohe Bestimmtheitsmaß $\mathrm{r}^{2}$ zum Ausdruck kommt.

Tabelle 4.3: Ableitung abhängiger Größen über Regressionsfunktionen

| unabhängige Größe | abhängige Größe |
| :--- | :--- |
| Globalstrahlung | TE |
| TE | TH |
| $\mathrm{N}_{\text {ges }}$ | $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ |
| $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$ | $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ |
| Phytoplankton $^{\text {Chl }-\mathrm{a}}$ |  |



Abbildung 4.13: TS Quitzdorf - empirische Ableitung von $\mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$ aus $\mathrm{N}_{\text {ges }}$, von $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ aus $o \mathrm{OO}_{4}-\mathrm{P}$ sowie Chl-a aus Phytoplankton

### 4.3 Gütemodellierung

### 4.3.1 Komplexe Gütemodellierung

Für die Modellanwendung waren vier Arten von Daten bereitzustellen:

1. Beschreibung der Beckenmorphometrie: Diese kann über eine hypsographische Kurve (Stauinhaltskurve) ausreichend genau erfasst werden.
2. Startwerte für alle Zustandsgrößen: Konzentrationen von Orthophosphat, anorganischem. Stickstoff und Sauerstoff sowie die Masse an Phytoplankton, Zooplankton und Detritus im Gewässer. Diese werden genutzt, um den Zustand des Gewässers zum Startzeitpunkt der Simulation zu beschreiben. Der Startzeitpunkt für die Simulation ist jeweils der 1. Januar des Simulationsjahres.
3. Randbedingungen: Stauspiegellage (S), Zu- und Abfluss (QIN, QOUT), Zuflusskonzentrationen von Orthophosphat $\left(\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}\right)$, anorganischen Stickstoff $\left(\mathrm{N}_{\mathrm{ges}}\right)$ und partikulärem organischem Material (POM), Wassertemperaturen von Epi- und Hypolimnion (TE,TH), Durchmischungstiefe (ZMIXREAL) des Wasserkörpers sowie photosynthetisch aktive Strahlung (PAR). PAR wurde mit 0,5 der Globalstrahlung ( $R G$ ) angenommen.
4. Vergleichswerte für die Validierung der berechneten Zustandsgrößen.

Als gewässerspezifische Parameter werden der vertikale Extinktionskoeffizient und eine Unterteilung des Fischbestandes in drei Stufen (viele Kleinfische, normaler Fischbestand, hoher Raubfischbestand) benötigt. Generell besteht die Datenaufbereitung darin, Massenbilanzen aufzustellen und aus gemessenen Zeitreihen ein konsistentes Bild der hydrologischen Situation und der externen Nährstoffbelastung sowie eine einfache Beschreibung der physikalischen


Abbildung 4.14: TS Bautzen - SALMO-Modellsimulation: Szenario (1997) mit Standardparametern ohne Berücksichtigung von Denitrifikation und Resuspension (Modellsimulation als Linie, Messwerte als Punkte, epilimnische Mittelwerte für Phytoplankton, Stickstoff, Zooplankton, Orthophosphat, hypolimnisches Mittel für Sauerstoff; Daten: LTV und TU Dresden).

Struktur des Gewässers zu erstellen. Für die zeitliche Diskretisierung sollte 7 bis maximal 10 Tagen betragen.

## Talsperre Bautzen

Für die Talsperre Bautzen wurden die Ergebnisse der 14-tägig durchgeführten Probennahme sowie die täglich bestimmten Durchflussmengen der Jahre 1996 bis 1999 verwendet. Die in den folgenden Abschnitten angeführten Ergebnisse beziehen sich auf das Jahr 1997. Während dieses Zeitraumes wurden die routinemäßig durchgeführten Beobachtungen durch eine Reihe zusätzlicher Messungen ergänzt.

Da für das Hypolimnion die Phosphorfreisetzungsrate nicht direkt bestimmt werden konnten, musste diese abgeschätzt werden. Hierzu wurden aus zeitlich aufeinander folgenden Messungen der P-Konzentrationen (Mittelwerte für das Hypolimnion) die Differenzen berechnet. Diese wurden anschließend mit der jeweilige Fläche des Hypolimnions normalisiert und als flächenbezogene Freisetzungsraten in $\mathrm{mg} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$ angegeben. Die Durchmischungstiefe wurde aus den Ergebnissen der 14tägig durchgeführten Temperaturprofilmessungen ermittelt. Hierbei ist anzumerken, dass während der Sommerperiode ein häufiger Wechsel zwischen Stagnation und Durchmischung beobachtet werden konnte. Der vertikale Extinktionskoeffizient des planktonfreien Wassers wurde mit Hilfe eines sphärischen UnterwasserLichtsensors (Li-Cor LI 189) in-situ ermittelt. Auf Grund der in Bautzen durchgeführten Biomanipulation (siehe BENNDORF, 1995a) wurde ein verringerter Friedfischbestand angesetzt.


Abbildung 4.15: TS Bautzen - SALMO-Modellsimulation: Szenario mit Berücksichtigung einer erhöhten Denitrifikation (Daten: LTV und TU Dresden).


Abbildung 4.16: TS Bautzen - SALMO-Modellsimulation: Szenario mit Berücksichtigung einer erhöhten Denitrifikation und Lichtlimitation aufgrund von Sedimentresuspension beim Abstau (Daten: LTV und TU Dresden).

Im Normalfall wird zunächst ein Modelllauf mit einem Eingangsdaten- und Parametersatz durchgeführt, der das a-priori-Wissen über das betrachtete Gewässer nach bestem Wissen repräsentiert. Dieser Modelllauf wird als Referenzlauf bezeichnet. Für den vorliegenden Fall waren hierbei die Auswirkungen der durchgeführten Biomanipulation (BENNDORF, 1995a; BENNDORF und RÖSKE, 1995), sowie die das Auftreten von Klareis während des Winters 1997 zu berücksichtigen. An dieser Stelle ist zu betonen, dass außer für die Zeitreihen der Eingangsdaten und die genannten Parameter zur Beschreibung des Fischbestandes und der Eisbedeckung sowie dem Extinktionskoeffizient ausschließlich gewässerunabhängige SALMO-Standardparameter verwendet wurden. Obwohl prinzipiell bekannt war, dass,
wie in anderen Flachseen auch, im Sediment eine verstärkte Denitrifikation stattfindet, wurde dieser Prozess zunächst bewusst nicht berücksichtigt.

Beim Vergleich der Simulationsergebnisse mit den gemessenen Vergleichsdaten (Abb. 4.14) ist zunächst festzustellen, dass sowohl die Trophiestufe als auch die Höhe der Maxima und Minima bei fast allen Zustandsgrößen außer bei der Stickstoffkonzentration gut wiedergegeben wurden. Besonders bei hypolimnischen Sauerstoff sind die temporären Durchmischungsereignisse im Sommer aufgrund der instabilen Schichtung gut zu erkennen.

Allerdings sind auch deutliche Abweichungen zwischen Modell und Vergleichsdaten zu erkennen. So zeigt sich erwartungsgemäß bei der Stickstoffkonzentration eine systematische Abweichung. Weitere Abweichungen betreffen die Zooplanktonkonzentration während des Sommers und die Dynamik der Phytoplanktonkonzentration. Hierbei fällt besonders das von den Vergleichsdaten abweichend simulierte Phytoplanktonmaximum im Herbst auf.

Führt man nun im Unterschied zu tiefen Seen zusätzlich zur Denitrifikation im Freiwasser (abhängig von hypolimnischer $\mathrm{O}_{2}$-Konzentration, Temperatur und organischem Substrat) eine permanente sedimentgebundene Denitrifikation von $0,085 \mathrm{mg} \mathrm{N} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$ in das Modell ein, so lässt sich der Verlauf der Stickstoffkonzentration gut abbilden (Abb. 4.15).

Bei näherer Betrachtung lässt sich auch für das Ausbleiben der „Herbstmassenentwicklung" des Phytoplanktons eine plausible Erklärung finden (Abb. 4.7). Im Spätsommer 1997 wurde die Talsperre stark abgesenkt (Abb. 4.7 a). In der Modellsimulation führt der geringere Wasserstand zu einer Verbesserung des Lichtklimas und in Folge zu einer starken Phytoplanktonentwicklung. Der Sichttiefe nach zu urteilen (Abb. 4.7 b) konnte tatsächlich eine starke Trübung des Wassers beobachtet werden. Diese war jedoch nicht durch eine Phytoplanktonentwicklung veruracht, sondern durch einen resuspensionsbedingten Anstieg der Sestonkonzentration (Abb. 4.7 c) in Folge der Stauspiegelabsenkung. Bei der mikroskopischen Planktonzählung wurde im betreffenden Zeitraum ebenfalls eine erhöhte Schwebstoffkonzentration festgestellt.

Zur Berücksichtigung der schwebstoffbedingten Resuspension wurde der Extinktionskoeffizient für den Zeitraum von Tag 240 bis zum Jahresende von normalerweise $0,54 \mathrm{~m}^{-1}$ auf 2,5 $\mathrm{m}^{-1}$ erhöht. Der nun realistischere Verlauf der simulierten Phytoplanktonkonzentrationen ist ein Indiz dafür, dass die resuspensionsbedingt verringerte Lichttransmission möglicherweise eine stärkere Phytoplanktonentwicklung unterdrückt hat (Abb.4.16).

Nicht alle Abweichungen zwischen Modell und Messung ließen sich auf die beschriebene Weise mit einfachen Mitteln der Modellanpassung beheben. Trotzdem konnten auch diese Abweichungen wichtige Hinweise zur Bewertung der Simulationsergebnisse liefern. Im vorgestellten Fall kann z.B. der Rückgang der Zooplanktonbiomasse im Sommer als Sommer-
depression gedeutet werden. Hierbei handelt es sich um ein komplexes Phänomen BENNDORF und CLASEN (2001), welches durch die in Abhängigkeit von der Temperatur genau gleichzeitige Wirkung von Mortalitätsfaktoren der Daphnienpopulation (Seneszenz, geringe Rekrutierung aufgrund von Futtermangel, hoher Fraßdruck durch Jungfische) hervorgerufen wird. Die Unterschiede beim Phytoplankton im Sommer können auf die Anwendung einer zeitlich beschränkten Blaualgenbekämpfungsmaßnahme mit Eisensalzen DEPPE und BENNDORF (1998); DEPPE \& BENNDORF (2002) zurückgeführt werden.

Für die prognostischen Simulationen bedeutet dies, dass die Vorhersagegüte des analytischen Modells SALMO prinzipbedingt begrenzt ist. So wurde für die stochastische Simulation eine Parametrisierung gewählt, die generelle Verhaltensmuster der Talsperren (z.B. Denitrifikation am Sediment) berücksichtigt. Einzelereignisse, wie z.B. Sedimentresuspension belieben jedoch unberücksichtigt, da deren Auswirkungen stark von der Vorgeschichte (wie oft wurde schon abgesenkt) und der Sedimentbeschaffenheit (z.B. Verdichtung durch Trockenfallen, BENNDORF und WETZEL (2003)) abhängen. Da auf der anderen Seite bisher keine ausreichend langfristigen Untersuchungen in Gewässern mit schwankendem Stauspiegel vorliegen, ist eine modellhafte Beschreibung derzeit nicht möglich. Es ist lediglich festzustellen, dass eine plötzliche Stauspiegelabsenkung in einer flachen, eutrophen Talsperre im Regelfall zu einer Verschlechterung der Wassergüte führt, bedingt zum einen durch Resuspension von Sedimentpartikeln, zum anderen durch verstärktes Algenwachstum.

## Talsperre Quitzdorf

Die Datenaufbereitung erfolgte analog zur Talsperre Bautzen. Die Simulation wurde für die Jahre 1993 bis 2000 durchgeführt, wobei im folgenden exemplarisch ebenfalls auf das Jahr 1997 eingegangen werden soll. Als Basis dienten tägliche meteorologische Daten des Instituts für Hydrologie und Meteorologie der TU Dresden, tägliche hydrologische Daten des LfUG Sachsen, tägliche Bewirtschaftungsdaten, monatliche Wassergütedaten der LTV und eigene Messungen aus dem Jahr 2000. Aufgrund der Flachheit der Talsperre bildet sich im Sommer keine stabile Schichtung aus. Zur Simulation wurde deshalb die Einbox-Version von SALMO genutzt. Als gewässerspezifische Größen wurden die Stauinhaltskurve und ein in-situ bestimmter vertikaler Extinktionskoeffizient verwendet. Für den Fischbestand wurde angenommen, dass dieser nicht durch Biomanipulationsmaßnahmen beeinflusst war.

Auch im vorliegenden Fall soll zunächst eine ausschließlich auf den Standardparametern basierende Simulation vorgestellt werden (Abb. 4.17, A). Anschließend wird eine angepasste Simulation vorgestellt (Abb. 4.17, B), die folgende spezifische Prozesse eines Flachgewässers explizit berücksichtigt:

- verstärkte P-Sedimentation (Fällung und Adsorption am Sediment),
- Denitrifikation im Hypolimnion, vor allem aber am Sediment,
- Kopplung der P-Freisetzung an das Vorhandensein von Nitrat (Umrechnung als $\mathrm{O}_{2^{-}}$ Äquivalent mit Hilfe der Nernstschen Gleichung).

Da in der Einbox-Version von SALMO definitionsgemäß keine „hypolimnische $\mathrm{O}_{2}$-Konzentration" simuliert werden kann, wird davon ausgegangen, dass bei Nitratschwund auch ein sedimentnaher Sauerstoffmangel auftritt.

Die Standardsimulation gab lediglich die Trophiestufe korrekt wieder. Ansonsten kam es bei allen Zustandsgrößen (Abb. 4.17 A) zu charakteristischen Abweichungen. Besonders auffällig ist das „Weglaufen" der Stickstoffkurve (1). Die Sauerstoffminima am Sediment (3) können aufgrund des Einschichtansatzes prinzipbedingt nicht abgebildet werden. Wichtig ist jedoch nicht die Sauerstoffkonzentration allein, sondern das durch Sauerstoff- und Nitratkonzentration bestimmte Redoxpotential. Aus diesem Grunde ergab die Simulation auch keine erhöhte P-Rücklösung und dementsprechend ein geringeres Phosphatangebot. Dies hat zur Folge, dass das für den August berechnete Maximum der Cyanobakterienkonzentration geringer ausfällt als das tatsächlich im Gewässer beobachtete (6).

In der angepassten Simulation (Abb. 4.17B) besteht eine deutlich bessere Übereinstimmung zwischen Modell und Realität. Hierbei erfolgte nicht etwa eine Kalibrierung des Gesamtmodells, sondern lediglich die Berücksichtigung einzelner Prozesse, die sowohl von ihrem Grundmechanismus als auch in ihrem quantitativen Ausmaß in einem Flachgewässer erwartet werden können. So findet in der hypertrophen Talsperre aufgrund des stets ausreichenden Angebots an organischen Stoffen in den oberen Sedimentschichten eine temperaturabhängige Denitrifikation statt (1). Die abgeschätze Denitrifikationsrate am Sediment beträgt $0,085 \mathrm{mgNm}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$. Im Winter, im Frühjahr und temporär auch im Sommer sind die oberen Sedimentschichten gut oxidiert, so dass es zu einer Netto-P-Sedimentation durch Fällung und Adsorption kommt (2) (Abb. 4.1). Bei $\mathrm{O}_{2}$ - und Nitratschwund (3, 4) hingegen kann eine anaerobe P-Freisetzung (5) beobachtet werden, die in Folge zu einer massiven Cyanobakterienentwicklung (6) führt.

Im Modell wurden diese Prozesse durch eine Brutto-P-Sedimentationsrate von $0,05 \mathrm{~d}^{-1}$ sowie durch die bereits bei der Standardparametrisierung im Modell enthaltene flächenbezogene P-Freisetzung berücksichtigt. Die P-Freisetzungsrate ( 1 bis $7 \mathrm{mg} \mathrm{P} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$ ) wird in SALMO normalerweise durch eine $\mathrm{O}_{2}$-abhängige Monod-Funktion beschrieben. Da die sedimentnahe $\mathrm{O}_{2}$-Konzentration in der Einschichtversion nicht simulierbar ist, wurde die Monod-Beziehung stöchiometrisch von Sauerstoff- auf Nitratabhängigkeit umgestellt.

Generell liegen die angenommenen Parameterwerte in einem plausiblen Bereich, der auch durch Massenbilanzen und durch Peeper-Messungen (z.B. Abb. 4.1) in-situ in den Talsperren Bautzen und Quitzdorf unterstützt wird (WETZEL, 2002; BENNDORF und WETZEL, 2003).
(A) Standardparamter

(B) angepasstes Sediment-Submodell


Abbildung 4.17: TS Quitzdorf - SALMO-Simulation mit Standardparametern (A) und mit dem angepasstem Sediment-Submodell (B) Daten: LTV.

### 4.3.2 Reduzierte Gütemodellierung

Durch die Kopplung des komplexen Gütemodells mit einem Bewirtschaftungsmodell, wurde die Anzahl an Eingangsinformationen stark reduziert. Für die Simulation der Gewässergüte standen der Zufluss QIN, der Abfluss QOUT und die Globalstrahlung $R G$ zur Verfügung. Die zeitliche Diskretisierung dieser Eingangsdaten war mit Monatsmittelwerten sehr grob. Es stellt sich in diesem Zusammenhang die Frage, welche Auswirkungen eine derart geringe Eingangsinformation auf die Simulationsgüte haben wird. Als Grundlage für die Erstellung reduzierter Eingangsdatensätze dienten die historischen Datensätze aus der Modellanpassung der beiden Talsperren. Die sonst sehr umfangreichen Daten wurden bis auf QIN, QOUT sowie $R G$ sowie die Messungen der Stoffimporte reduziert und zu Monatsmittelwerten zusammengefasst. Für die Ableitung der schichtungsrelevanten Eingangsgrößen bzw. der Wassertemperaturen wurde der in Abschnitt 3.6 .2 beschriebene Algorithmus angewendet.

SALMO berücksichtigt bisher lediglich zwei Schichten: Epi- und Hypolimnion. Die Globalstrahlung $R G$ wurde daher zu volumengewichteten Mittelwerten der Epilimniontemperatur in Beziehung gesetzt. Es zeigte sich, dass der statistisch beste Zusammenhang beider GröBen zu finden war, wenn die mittleren Globalstrahlungssummen der zurückliegenden 55 Tage (TS Bautzen) bzw. 22 Tage (TS Quitzdorf) einbezogen wurde (Abb. 4.18 und 4.20, Korrelogramm). Da die zeitliche Auflösung im Modul einen Monat beträgt, wurden Regressionen angewendet, welche die mittlere Einstrahlung der letzten 60 Tage ( 2 Monate) bzw. 30 Tage (1 Monat) berücksichtigen (Abb. 4.18 und 4.20. Regression). Das Bestimmtheitsmaß r ${ }^{2}$ verändert sich durch diesen Schritt nur wenig. Somit ergaben sich die folgenden Funktionen 4.1 und 4.2 für die Talsperre Bautzen sowie 4.3 für die Talsperre Quitzdorf. Die ermittelte Funktion für die Hypolimniontemperatur gilt nur während der sommerlichen Schichtungsperiode.

Beim Vergleich der Ergebnisse (Abb. 4.21-(A) und A.9p fällt zunächst auf, dass trotz der vereinfachten Ableitung des Schichtungsverhaltens, der Beginn sowie die Dauer der Schichtungsperiode gut getroffen werden. Die Lage der Thermokline kann jedoch auf Grund der groben zeitlichen Auflösung nicht genau wiedergegeben werden. Fehlen kurzfristige Durchmischungsereignisse, wie sie in Bautzen besonders nach Starkwindphasen zu beobachten sind, hat dies das Ausbleiben der Einmischung sauerstoffreichen Wassers ins Hypolimnion zur Folge. Aus diesem Grund kommt es während der Stagnationsperiode zu einer verstärkten Sauerstoffzehrung. Gleichfalls ist festzustellen, dass im Unterschied zur Simulation mit täglichen Eingangsdaten die Stickstoffkonzentration in der Talsperre Bautzen höher liegt. Ursache hierfür ist die Überschätzung der Denitrifikation. Beide Prozesse, der erhöhte Sauerstoffschwund und der Nitratschwund, führen im Modell zu einer erhöhten hypolimnischen Phosphorrücklösung.


Abbildung 4.18: TS Bautzen - Bestimmtheitsmaß $r^{2}$ der empirischen Ableitung von $T E$ aus $\sum R G$ über 1... 365 Tage (links), empirische Ableitung $T E$ aus $\sum_{i=1}^{60} R G_{i}$ (rechts)


Abbildung 4.19: TS Bautzen - empirische Ableitung $T H$ aus $T E$

Eine radikale Reduktion der Eingangsinformationen führt somit zu einem Verlust an Ausgangsinformation bei der Simulation kurzfristiger dynamischer Prozesse. Trotzdem ist es weiterhin möglich, das saisonale Verhalten sowie die Amplituden abzubilden. Dieses Resultat erscheint vor dem Hintergrund einer Langfristprognose als durchaus zufriedenstellendes Ergebnis.

Für die ungeschichtete Talsperre Quitzdorf kann festgestellt werden, dass die Abbildung bei Simulation mit Monatsmittelwerten zu keinen großen Abweichungen führt (Abb. 4.21.(B) und B.8. Die Ergebnisse zeigen prinzipiell eine sehr gute Übereinstimmung mit denen der komplexen Simulation.

## TS Bautzen

$$
\begin{align*}
& T E_{t}=-1,81+0,013 \cdot \frac{\sum_{i=1}^{60} R G_{i}}{60}  \tag{4.1}\\
& T H_{t}=-0,68+0,87 \cdot T E_{t} \tag{4.2}
\end{align*}
$$

## TS Quitzdorf

$$
\begin{equation*}
T E_{t}=0,06+0,011 \cdot \frac{\sum_{i=1}^{30} R G_{i}}{30} \tag{4.3}
\end{equation*}
$$



Abbildung 4.20: TS Quitzdorf - Bestimmtheitsmaß $r^{2}$ der empirischen Ableitung von $T E$ aus $\sum R G$ über 1... 365 Tage (links), empirische Ableitung $T E$ aus $\sum_{i=1}^{30} R G_{i}$ (rechts)

### 4.3.3 Stochastische Gütemodellierung

Ziel der stochastischen Simulationen war es, einen möglichst umfangreichen Trainingsdatensatz an Eingangsdaten und SALMO-Simulationsergebnissen für das Training des künstlichen neuronalen Netzes (ANN) zu generieren. Dazu wurde ein stochastisch erzeugter Datensatz von Zu - und Abfluss sowie Globalstrahlung verwendet. Die darin enthaltenen Bewirtschaftungsszenarien entsprechen dem für den Einstau der Tagebaurestseen geplanten Szenario. Globalstrahlung und Zuflüsse wurden stochastisch anhand historischer Messreihen generiert. Diese Daten wurden entsprechend dem in Abschnitt 3.6 .3 beschriebenen Schema variiert.

Die in diesem Zusammenhang zunächst interessierende Frage war, inwiefern mit reduzierten Eingangsdaten realistisches Systemverhalten abgebildet werden kann. Der Vergleich von Simulationsergebnissen mit historischen und reduzierten Eingangsdaten (Abb. 4.22) zeigt, dass sowohl Saisonalität als auch „mittlere" Extremwerte gut abgebildet werden. Allerdings kommt es wegen der Nutzung eines größeren Bewirtschaftungsbereiches häufiger zu einem Auftreten extremer Zustände (Niedrigwasser) in der Talsperre. Dies ist beim Vergleich der in Abb. 4.23, 4.24 und 4.25 dargestellten Boxplots im Vergleich zu Monatsmittelwerten der historisch modellierten und langjährig gemessenen Stoffkonzentrationen gut zu erkennen. Vor allem im Hypolimnion der Talsperren Bautzen und Quitzdorf kommt es, bedingt durch Sauerstoffdefizit, häufiger zur Resuspension und daher zur Phosphatrücklösung. Dieser Effekt ist einerseits mit der stärkeren Absenkung des Wasserspiegels durch Überleitung in die Tagebaurestseen zu erklären. Andererseits führt, wie in Abschnitt4.3.2 bereits diskutiert, die vereinfachte Ableitung der Schichtung zu einer Unterbindung der hypolimnischen Sauerstoffeinmischung aus dem Epilimnion.

Wenn die Gewässergüte mit stochastisch generierten Eingangsgrößen simuliert wird, kann das typische Systemverhalten in Saisonalität und möglichen Extrema plausibel abgebildet werden. Allerdings kommt es durch die im Vergleich zu historischen Eingangsdaten größeren

## (A) TS Bautzen



Abbildung 4.21: Simulationen mit kompletter (täglicher) und mit reduzierter (monatlicher) Eingangsdatenmatrix für das Jahr 1997


Abbildung 4.22: TS Bautzen - Vergleich von Simulationsergebnissen mit stochastisch generierten (3500 Jahre) und mit historischen Eingangsinformationen (4 Jahre).

Variabilität der stochastischen Simulation im Bereich extremer Bewirtschaftungszustände auch zu einer Häufung extremer Systemzustände, welche in historischen Perioden noch nicht beobachtet werden konnten.


Hypolimnion


Abbildung 4.23: TS Bautzen - Boxplot der stochastischen Simulation (3500 Jahre) und Monatsmittel der historischen Messungen $(1996-1999)=$ hellgraue Kreise sowie Monatsmittel aus der reduzierten Gütemodellierung (1996-1997) = dunkelgraue Dreiecke, P-SRP


Abbildung 4.24: TS Bautzen - Boxplot der stochastischen Simulation (3500 Jahre) und Monatsmittel der historischen Messungen $(1996-1999)=$ hellgraue Kreise sowie Monatsmittel aus der reduzierten Gütemodellierung $(1996-1997)=$ dunkelgraue Dreiecke, $\mathrm{O}_{2}$


Abbildung 4.25: TS Quitzdorf - Boxplot der stochastischen Simulation (3500 Jahre) und Monatsmittel der historischen Messungen $(1996-1999)=$ hellgraue Kreise sowie Monatsmittel aus der reduzierten Gütemodellierung (1996-1997) = dunkelgraue Dreiecke, P-SRP und $\mathrm{O}_{2}$


Abbildung 4.26: TS Bautzen - Anpassung eines neuronalen Netzes für das Epilimnion - ungeschichtete Verhältnisse, eine verdeckte Schicht, 5 Durchgänge für Neuronenanzahl von 10 bis 40 Neuronen, mittlere quadratische Abweichung

### 4.3.4 Modellaggregation - ANN

## TS Bautzen

Wie in Abschnitt 3.6.4 beschrieben, wurden für das Epilimnion und das Hypolimnion getrennte Netze erstellt. Für das Epilimnion wurde ein Netz mit einer verdeckten Schicht gewählt. Die Neuronenanzahl der verdeckten Schicht wurde zwischen 10 und 40 variiert. In jeweils 5 voneinander unabhängigen Durchgängen wurden Anpassungen mit jeder Neuronenzahl durchgeführt. Das Ergebnis ist in Abb. 4.26 dargestellt; je dunkler der Grauton, desto besser ist die Anpassung. Für das weiter zu verwendete ANN wurde die Parametrisierung mit 38 verdeckten Neuronen aus dem 3. Durchgang gewählt. Die mittlere quadratische Abweichung für die unabhängigen Testdaten beträgt hier 0,01 .

Für das Hypolimnion konnte bei Verwendung nur einer verdeckten Schicht keine zufriedenstellende Parametrisierung gefunden werden. Für zwei verdeckte Schichten wurden (nach einem Probelauf von bis zu 35 Neuronen je Schicht) sämtliche Kombinationen für den Bereich von 22 bis 35 Neuronen für die erste und 10 bis 25 Neuronen für die zweite Schicht untersucht. Für jeden Fall wurden 7 bis 8 voneinander unabhängige Parametrisierungen erstellt. Für das Modul wurde die Kombination aus 26 und 15 Neuronen gewählt. Die mittlere quadratische Abweichung beträgt 0,02 .


Abbildung 4.27: TS Bautzen - Gegenüberstellung von hypolimnischen $\mathrm{O}_{2}$ und Phytoplankton im Epilimnion der von stochastischen SALMO-Simulationen (hell) mit dem Netzausgabe (dunkel). Boxplot von Median, Quartilen (Boxen), Minimum, Maximum (Striche) und Ausreißern (Punkte).

Die im Folgenden dargestellten Ergebnisse entstammen dem unabhängigen, externen Validierungsdatensatz (Abb. 3.8). Die obere Graphik der Abb. 4.27 zeigt einen Jahresgang der hypolimnischen Sauerstoffkonzentration als Monatsboxplots. Jedem dieser Boxplot liegen jeweils 5250 Werte zugrunde. Die Ergebnisse (SALMO-hell, neuronales Netz-dunkel) haben eine ähnliche Verteilung, das heißt, im Mittel wird das Systemverhalten für diese Größe gut nachgebildet. Das gilt analog auch für die Phytoplanktonkonzentration (Abb. 4.27, unten) sowie die weiteren, im Anhang dargestellten Simulationsgrößen (Abb. A.10).

In Abb. 4.28 sind die mit dem neuronalen Netz (ANN) berechneten Werte im Vergleich zu den Ergebnissen der stochastischen Simulation mit SALMO aufgetragen. Für das Hypolimnion sind ausschließlich die Werte dargestellt, die für den Zeitraum der Sommerstagnation berechnet wurden. Für den Stickstoff wurde in einer zusätzlichen Variante der gemessene Eintrag verdoppelt. Daher ist in der Darstellung eine zweite, etwas losgelöste Punktwolke zu erkennen. Trotz der komplexeren Netzstruktur, die für das Hypolimnion verwendet wurde, scheinen die Anpassungen für das Epilimnion generell etwas besser zu sein. Die Ursachen hierfür liegen in der höheren Komplexität des Systems Hypolimnion. So wird ein Großteil der epilimnisch ablaufenden Prozesse über Energieeintrag von oben (kurz- und langwellige Strahlung) gesteuert. Die Steuerung des Hypolimnions hingegen erfolgt sowohl in Abhängigkeit vom Eintrag aus dem Epilimnion, also von oben, als auch rückgekoppelt von unten, durch Rücklösung aus dem Sediment bei Anaerobie. Der Trainingsdatensatz für beide Schichten beinhaltete jedoch lediglich die Eingangsgrößen „von oben". In Anbetracht dieser Einschränkungen können die Ergebnisse als zufriedenstellend eingeschätzt werden.

Der Vergleich eines zufällig ausgewählten Jahresganges von Simulationsergebnissen zwischen dem neuronalen Netz und SALMO (Abb. 4.29) zeigt, dass sowohl saisonaler Verlauf als auch Größenordnung gut getroffen werden. Es kann festgestellt werden, dass neuronale Netze unter diesen Bedingungen komplexe deterministische Modelle wie SALMO ersetzen

## Epilimnion



Hypolimnion





Abbildung 4.28: TS Bautzen - Korrelationen SALMO-Werte vs. neuronales Netz (ANN) für die simulierten Größen im Epilimnion (bzw. ungeschichteten Zustand) sowie Hypolimnion



#### Abstract

Abbildung 4.29: TS Bautzen - ANN- und stochastische SALMO-Simulation für ein zufällig ausgewähltes Jahr (SALMO-Epilimnion = hellgrau, SALMO-Hypolimnion = hellgrau gestrichelt, ANN-Epilimnion = dunkelgrau, ANN-Hypolimnion = dunkelgrau gestrichelt)


können. Die hier erstellten neuronalen Netze gelten ausschließlich für Epi- bzw. Hypolimnion der Talsperre Bautzen bei den zugrunde liegenden Randbedingungen. Da die Trainingsdaten bereits einen großen Bereich möglicher Systemzustände vorgeben, wird davon ausgegangen, dass die Netze innerhalb des von WBalMo vorgesehenen Bereiches stabil sind. Bei einem mit zufällig generierten Eingangsdaten durchgeführten „Stresstest" zeigte sich eine hohe Robustheit.

## TS Quitzdorf - Neuronales Netz ohne Gedächtnis

Für die Talsperre Quitzdorf wurde das Training des neuronalen Netzes in gleicher Weise wie für die Talsperre Bautzen vorgenommen. Da die Talsperre Quitzdorf im Sommer aufgrund der geringen Tiefe von maximal $7,5 \mathrm{~m}$ nicht geschichtet ist, wurde hier nur ein Netz für den gesamten Wasserkörper generiert. Es wurden Netze mit einer und zwei verdeckten Schichten erprobt. Das Netz mit zwei verdeckten Schichten führte jedoch zu keiner signifikanten Verbesserung der Anpassungen. Im Vergleich zur Talsperre Bautzen war die Abbildung des komplexen Modells durch das neuronale Netz zunächst deutlich schlechter. Die Ergebnisse wiesen eine deutlich größere Streuung auf (Abb. B.9).

Die mittlere Anpassung der Größen im Vergleich zu den Ergebnissen der stochastischen

Simulation zeigen bereits eine gute Übereinstimmung (Abb. 4.30, „ohne Gedächtnis"). Allerdings können für die Stoffkonzentrationen einige Sommerextremwerte aus der SALMOSimulation nicht durch das neuronale Netz abgebildet werden.

Anhand der Darstellung eines exemplarisch ausgewählten Jahresganges der Sauerstoffkonzentration (Abb. 4.31, dunkelgraue Linie) ist zu erkennen, dass dieser gut abgebildet werden kann. Ursache hierfür ist die Tatsache, dass bedingt durch die geringe Tiefe des Wasserkörpers die Sauerstoffkonzentration nahezu ausschließlich durch Temperatur und die Strahlungsangebot geprägt ist.

Ebenso können sowohl der Verlauf und als auch die Größenordnung der Konzentrationen von $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}, \mathrm{N}_{\text {ges }}$ und des Phytoplanktons recht zufriedenstellend berechnet werden. In Abb. 4.32 (dunkelgraue Linie) ist der Verlauf des Stickstoffgehaltes für zwei aufeinander folgende Jahre dargestellt. Besonders für das zweite Jahr ist zu erkennen, dass der Verlauf gut nachgebildet wird, die Werte des neuronalen Netzes aber durchweg zu niedrig sind. Derartig drastische Unterschiede treten jedoch relativ selten auf. Gleichfalls ist eine ähnlich gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen beider Modelle für die Orthophosphat- und die Phytoplanktonkonzentration festzustellen.

Die Abweichungen zwischen den Ergebnissen der unterschiedlichen Verfahren weisen darauf hin, dass der aktuelle Zustand des Gewässers ohne Berücksichtigung der Importe und Umsätze der Vormonate in einigen Fällen nur unzureichend simuliert werden kann. Es wurde deshalb eine Alternative gesucht, die die Verhältnisse in der Talsperre Quitzdorf besser berücksichtigt.

## TS Quitzdorf - Neuronales Netz mit Gedächtnis

Es wurde versucht, den Zustand des Gewässers im Vormonat dadurch zu berücksichtigen, indem anstelle der Stoffimporte von $\mathrm{oPO}_{4}-\mathrm{P}$ und $\mathrm{N}_{\text {ges }}$ die Vormonatswerte der Konzentration dieser Stoffe im Gewässer als Eingangswerte verwendet wurden. Um bei der großen Datenmenge die Netzarchitektur einfach zu halten, wurde am Feedforward-Netz festgehalten. Für den Eingangsdatensatz wurden die ausgewählten Vormonatsgrößen aus dem Ausgangsdatensatz der SALMO-Simulation anstelle der Vormonatsstoffimporte eingefügt. Es ist zu beachten, dass hier die Werte des neuronalen Netzes mit SALMO-Ausgangsdaten berechnet wurden. Erste Anwendungen zeigen, dass das Netz auch dann stabil bleibt, wenn die eigenen Vormonatsergebnisse verwendet werden. Ein Vergleich in Abb. 4.30 zeigt eine deutliche Verbesserung in der Modellanpassung bei Berücksichtigung des Vormonats gegenüber der Anpassung „ohne Gedächtnis" für alle berücksichtigten Größen.

Auch die Gegenüberstellung der Jahresgänge zufällig ausgewählter Jahre in Abb. 4.31 und 4.32 zeigt eine Verbesserung der Ergebnisse, wenn beim Training des Netzes die Vorgeschichte (mittelgraue Linie mit Sternchen) mit berücksichtigt wird.

## ANN ohne „Gedächtnis"



ANN mit „Gedächtnis"





Abbildung 4.30: TS Quitzdorf - Korrelationen SALMO-Werte vs. neuronales Netz (ANN) für die simulierten Größen ohne und mit „Gedächtnis"


Abbildung 4.31: TS Quitzdorf - stochastische SALMO-Simulation und ANN mit und ohne Gedächtnis für ein zufällig ausgewähltes Jahr. (SALMO - hellgrau gestrichelt, ANN ohne „Gedächtnis" - dunkelgrau, ANN mit „Gedächtnis" - mittelgrau mit Sternchen)


Abbildung 4.32: TS Quitzdorf - stochastische SALMO-Simulation und ANN mit und ohne „Gedächtnis" für zwei aufeinander folgende Jahre. (SALMO - hellgrau gestrichelt, ANN ohne „Gedächtnis" - dunkelgrau, ANN mit „Gedächtnis" - mittelgrau mit Sternchen)


Abbildung 4.33: Bausteine des Gütemoduls für die Talsperren Bautzen und Quitzdorf

### 4.4 Modellkopplung

Bei der Konzeption zum Aufbau des Gütemoduls waren die Randbedingungen Einfachheit, programmtechnische Stabilität und inhaltliche Robustheit der Ausgaben zu berücksichtigen. Die Abbildung des komplexen Modells SALMO durch ANNs hatte zum Ziel, die eigentlichen Informationen nicht in einem komplexen Algorithmus, sondern in den Gewichten der ANNs zu aggregieren. Bei empirischen Übertragungsfunktionen ist die Kerninformation in den Funktionsparametern enthalten. Außerdem flossen eine Reihe von Gütekriterien als Mittelwerte in das Gesamtmodul ein (Tab. 3.1).

Die Einbettung aller gewonnenen statistischen Kenngrößen und empirischen Funktionen sowie der Übertragungsfunktionen aus den ANN in einem kompakten Gütemodul (Abb. 4.33) war der letzte Schritt zur Kopplung mit dem Kernmodell WBalMo. Dabei fiel die Wahl auf eine möglichst einfache C++ - DLL als die eleganteste Lösung, eine stabile Kopplung zu gewährleisten (PETZOLDT et al., 2004a|b).

Alle numerischen Daten wurden direkt in die DLL hinein kompiliert. Auf diese Weise wird zwar die normalerweise anzustrebende Trennung von Code und Daten nicht erreicht. Da die Gewinnung der Netzparameter und der empirischen Gleichungen und Konstanten aber ohnehin nicht ohne den Originaldatensatz möglich ist und die Module gewässerspezifisch sind, bestand hierfür keine direkt Notwendigkeit. Andererseits erwächst daraus jedoch der Vorteil einer einfacheren Handhabung, einer geringeren Anfälligkeit gegenüber fehlerhaften Eingaben und einer potentiell höheren Stabilität, da alle Algorithmen und Daten in einer einzigen Datei zusammengefasst wurden. Da der Quelltext des Moduls offen gelegt wird (Open Sour-

Tabelle 4.4: Standardwerte für die Nährstoffkonzentration im Zufluss (Angaben in $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$ )

|  | TS Bautzen |  | TS Quitzdorf |  |
| :--- | :---: | :---: | :---: | :---: |
| Eingangsgröße | PIN | NIN | PIN | NIN |
| Januar | 0,124 | 7,07 | 0,061 | 11,34 |
| Februar | 0,097 | 6,80 | 0,038 | 10,37 |
| März | 0,087 | 6,79 | 0,036 | 10,23 |
| April | 0,073 | 5,93 | 0,030 | 10,08 |
| Mai | 0,103 | 5,92 | 0,063 | 16,31 |
| Juni | 0,143 | 5,34 | 0,119 | 19,13 |
| Juli | 0,125 | 5,33 | 0,090 | 11,77 |
| August | 0,154 | 5,76 | 0,099 | 16,95 |
| September | 0,156 | 5,72 | 0,072 | 10,98 |
| Oktober | 0,142 | 5,66 | 0,071 | 11,26 |
| November | 0,135 | 5,89 | 0,029 | 10,91 |
| Dezember | 0,145 | 6,91 | 0,021 | 11,04 |

ce) können von einem qualifizierten Anwender durchaus Änderungen in der Struktur sowie am Inhalt vorgenommen werden

## Eingangsdaten

Der durch das Kernmodell übergebene Eingangsdatenvektor enthält die Werte zur Festlegung der externen Randbedingungen ( $V$, QIN, QOUT, RG, PIN, NIN) für den jeweils aktuellen Monat und die beiden Vormonate sowie die Werte zur Beschreibung der internen Zustandsgrößen $P$ und $N$ des jeweiligen Vormonats in der Talsperre (also des vorherigen Modulaufrufes).

Liegen für den jeweils ersten Monat der Simulationsperiode keine Daten der Vormonate vor, werden aktuellen Werte ersatzweise mehrfach verwendet. Die hydrologischen und meteorologischen Variablen $V$, QIN, QOUT und $R G$ werden der Übergabe von WBalMo erwartet. Für PIN und NIN ist die jeweilige monatlich gemittelte Nährstoffkonzentration im Zufluss der Talsperren Bautzen und Quitzdorf anzugeben (Tab. 4.4).

Die Eingangskonzentrationen können in gewissen Grenzen variiert werden, d.h. sie können für PIN und/oder NIN einzeln oder simultan auf minimal $50 \%$ vom Standardwert verringert oder (für Testzwecke) auf maximal $200 \%$ erhöht werden. Die Standardwerte entsprechen durchflussabhängig gemittelten Monatsmittelkonzentrationen ab 1990 (für NIN) bzw. 1996 (für PIN) (Tab. 4.4). Prinzipiell kann auch ein konstanter Wert für das gesamte Jahr eingesetzt werden. Bei der Modulerstellung wurde der Schwerpunkt auf die Beziehungen zur Mengenbewirtschaftung gelegt. Für eine detailliertere Abbildung des Systemverhaltens in

Abhängigkeit von der externen Nährstoffsituation wären zusätzliche Untersuchungen, weitere stochastische Modellsimulationen sowie eine Neuanpassung der neuronalen Netze erforderlich.

## Ausgabedaten

Die Ergebnisse werden jeweils als Datenvektor für den betreffenden Monat an das Kernmodell zurückgegeben. Der Datenvektor enthält jeweils die 25 Simulationsgrößen getrennt für das Epilimnion und Hypolimnion sowie den Grundablass (Tab. D. 2 und D.1.

## Test der Modellkopplung

Erste Simulationsergebnisse mit dem Gütemodul, die mit Hilfe einer speziellen Testroutine durchgeführt wurden (Abb. 4.34 und 4.35) zeigen, dass das Modul variabel auf verschiedene Bewirtschaftungszustände in den Talsperren reagiert. Mittelwerte und Varianzen liegen im Rahmen der langjährigen beobachteten Mittelwerte. Ein „Aufschaukeln" des Moduls konnte nicht beobachtet werden. Der durchgeführte Stresstest mit Hilfe von Zufallszahlen zeigte eine hohe Robustheit des Moduls, selbst unter unrealistischen Bedingungen.


Abbildung 4.34: TS Bautzen - Simulationsergebnisse Modul und langjährige Monatsmittelwerte







Abbildung 4.35: TS Quitzdorf - Simulationsergebnisse Modul und langjährige Monatsmittelwerte

## 5 Diskussion

Der großräumige Abbau von Braunkohle in der Lausitz führte in der Vergangenheit zu einer extremen Beeinflussung des Wasserhaushaltes im Einzugsgebiet der Spree. Mit dem Beginn der Sanierung und Flutung der Tagebaue kommt es nun langfristig zu einer verstärkten Nutzung der existierenden Oberflächengewässer und der Einbindung der entstehenden Tagebaurestseen in das Fließgewässernetz.

Für unterschiedliche Standgewässer und Fließgewässerabschnitte (Bilanzprofile) wurden durch unterschiedliche Institutionen, wie der TU Dresden, RWTH Aachen, BTU Cottbus, IGB Berlin oder dem DGFZ, Gütemodule entwickelt und mit dem Mengenbewirtschaftungsmodell WBalMo gekoppelt (KÖNGETER, 2004). Ziel war es, ein integriertes Flussgebietsmanagementmodell für das Einzugsgebiet der Spree zu entwickeln und so die Abstimmung langfristiger Bewirtschaftungsszenarien unter Berücksichtigung der Gewässergüte im Einzugsgebiet der Spree zu gewährleisten.

### 5.1 Integriertes Flussgebietsmanagement

Das Leitbild der EU-WRRL (2000) für ein integriertes Flussgebietsmanagement ist eine einzugsgebietsbezogenes Management der vorhandenen Ressourcen. Dies erfordert eine integrierte Betrachtung aller beeinflussten und beeinflussenden Kriterien. Die Kopplung von Mengenbewirtschaftungsmodellen mit Gütemodellen berücksichtigt dabei die Verfügbarkeit und Verteilung der begrenzten Ressource Wasser im Einzugsgebiet und der daraus resultierenden Gewässergüte. Auf diese Weise kann das Management im Einzugsgebiet auf Grundlage der Kriterien Wassermenge und Wassergüte optimiert werden.

Die zur Umsetzung dieser Zielstellung nutzbaren Ansätze und Strategien hängen von der Struktur und den Randbedingungen im Einzugsgebiet ab. Auch das Wissen über allgemeine und gebietsspezifische Prozesse sowie die verfügbare Datenlage spielen eine entscheidende Rolle.

Für kleine, gut untersuchte oder homogen strukturierte Einzugsgebiete, wie dem Willamette River ANNEAR et al. 2004), ist es möglich, die Gewässergüte mit einem konsistenten, in
sich geschlossenen, analytischen Modellansatz (CE-Qual-W2, COLE \& BUCHAK, 2000) zu modellieren. Vorteil dieser Methode ist die Prognosefähigkeit auch für noch nicht beobachtete Systemzustände. Außerdem ist es möglich die Simulationsergebnisse einzelner Teilgebiete zu vergleichen und zu bewerten. Nachteil ist der andauernd große Bedarf an Eingangsinformationen sowie die unter Umständen langen Rechenzeiten.

Das Spreeeinzugsgebiet ist ein sehr komplexes System bestehend aus Fließ- und Standgewässerabschnitten sowie dem Spreewald, einer durch Flusslaufverzweigungen der Spree entstandene Auen- und Moorlandschaft. Auf Grund dieser heterogenen Gliederung sowie der Beeinflussung einzelner Teilgebiete durch den Braunkohleabbau, war es notwendig, für jedes Teilgewässer spezifische Gütemodule anzupassen. Diese Modularisierung hat den Vorteil einer besseren Anpassung an die jeweils betrachteten Gewässer. Die Berücksichtigung gewässerspezifischer Schwerpunktprozesse wie Resuspension, Hydrodynamik oder Grundwasserströmung durch die Einbindung verschiedener Modellansätze bei der Erarbeitung der einzelnen Gütemodule (WERNER und MÜLLER, 2003; MÜLLER, 2003; KÖNGETER et al., 2004, RUBBERT, 2007) ermöglicht dabei vor allem auf die tagebaubeeinflussten Gewässerabschnitte einzugehen. Nachteil dieses Ansatzes ist eine mangelnde methodische und inhaltliche Kohärenz der unterschiedlichen Modelltypen und die sich daraus ergebende Gefahr systematischer Fehler.

Die Kopplung der entwickelten Gütemodule mit einem Mengenbewirtschaftungsmodell erforderte eine Anpassung der Datenstruktur und zeitlichen Skalen. Die daraus folgende Aggregation und Vereinfachung hat eine Beschränkung der Anwendbarkeit der Modelle auf die jeweils betrachteten Gewässer sowie eine begrenzte Gültigkeit auf den zur Anpassung verwendeten Wertebereich zur Folge. Dieser Einschränkung wurde durch stochastisch generierte Bewirtschaftungsszenarien begegnet mit dem Ziel, möglichst viele, potentiell mögliche Bewirtschaftungszustände sowie den natürlichen Schwankungsbereich von beispielsweise Stoffimporten bei der Modellaggregation zu berücksichtigen. Vorteil dieses methodischen Ansatzes sind deutlich kürzere Rechenzeiten und die daraus resultierende Eignung als Prognosemodell für langfristige Bewirtschaftungsstrategien.

Schwerpunkt dieser Arbeit war die Entwicklung einfacher, robuster Simulationswerkzeuge für die Prognose der Gewässergüte in den Talsperren Bautzen und Quitzdorf. Diese sollten in der Lage sein, einzugsgebietsrelevante Gewässergütekriterien zu simulieren. Die dabei angewendeten Methoden sollen hier zusammengefasst, bewertet und mit den Ansätzen weiterer Standgewässergütemodule verglichen werden.

### 5.2 Gütemodule

Für die Entwicklung der Gütemodule war es notwendig, die Talsperren Bautzen und Quitzdorf hinsichtlich ihrer Kopplung mit angrenzenden Systemen wie dem Grundwasser oder diffusen Zuflüssen und deren Relevanz für die Gewässergüte der Talsperren zu bewerten. Auch interne Prozesse wie die Hydrodynamik wurden bezüglich ihres langfristigen Einflusses auf die Gewässergüte hinterfragt. Ziel war es, alle für die gewässerinternen biologischen und chemischen Umsatzprozessen wesentlichen externen Randbedingungen mit zu berücksichtigen.

Die Untersuchungsgewässer unterlagen keinem relevanten, diffusen Stoffeinträgen aus dem Grundwasser (SIEMENS et al., 2003). Aus diesem Grund konnte auf eine Kopplung mit einem Grundwassermodell verzichtet werden. Importe von beispielsweise Sulfat oder gelöstem Eisen spielen vor allem bei den entstehenden Tagebaurestseen wie dem Bärwalder See eine Rolle, da sie zur Versauerung der Gewässer beitragen. Austauschprozesse zwischen Grundwasser, Seesediment und Gewässerkörper wirken hier langfristig auf die Gewässergüte zurück und müssen durch Einbeziehung aggregierter Grundwassersubmodelle berücksichtigt werden (WERNER und MÜLLER, 2003, MÜLLER, 2003).

Die Talsperre Quitzdorf bilden keine deutlich abgrenzbaren Teilbecken. Trotz eines ausgeprägten Flachwasserbereichs kommt es auf Grund der starken Windexponiertheit zu einer regelmäßigen Durchmischung. Die Talsperre wird daher als homogen angesehen (SIEMENS et al., 2003). Auch für die Talsperre Bautzen wurde angenommen, dass Temperaturen und Stoffe in Epi- und Hypolimnion während der sommerlichen Schichtungsperiode gleich verteilt sind. Die Hydrodynamik spielt in beiden Talsperren vor allem für kurzfristige Prognosen wie der Feststellung des optimalen Entnahmehorizontes für die Trinkwasserversorgung eine Rolle (BAUMERT et al., 2005; ROLINSKI et al., 2005). Auf Grund des langfristigen Prognosehorizontes ist eine explizite Einbeziehung eines hydrodynamischen Modells für die Simulation der Gewässergüte in der hier vorgestellten Arbeit nicht erforderlich.

Im Gegensatz dazu wurde durch die RWTH Aachen für die Talsperre Spremberg $^{1}$ ein reduziertes Gütemodul unter Einbeziehung eines aggregierten hydrodynamischen Modells entwickelt (Köngeter et al., 2004, RUBBERT, 2007). Die Umsatzprozesse dieser Talsperre sind stark an das hydrodynamische Verhalten des Wasserkörpers und dessen Kopplung mit dem Seesediment gebunden und weisen eine deutliche Gliederung der Beckenmorphologie auf (RUBBERT, 2007).

[^2]Neben der Systemanalyse wurden die für das Gesamtgebiet definierten Gütekriterien hinsichtlich ihrer Bedeutung für Stoffumsatzprozesse in den Talsperren analysiert. Die Gütekriterien wurden für alle berücksichtigten Fließ- und Standgewässerabschnitte im gesamten Flusseinzugsgebiet simuliert. Die Relevanz für die chemischen Prozesse und Stoffumsätze unterschieden sich je nach Gewässer.

Im Ergebnis der Analyse wurde entschieden, in welcher Form diese Größen im Gütemodul zu behandeln sind, z.B. als Mittelwerte (Abschnitt[5.2.1), mit Hilfe von Regressionsfunktionen (Abschnitt 5.2.2) oder mit Neuronalen Netzen, die das Eingangs- und Ausgangsverhalten eines komplexen Wassergütemodells abbilden (Abschnitt5.3).

### 5.2.1 Mittelwerte

Werden Gütekriterien als gemessene mittlere Konzentrationen im Gütemodul weitergegeben, passieren diese den Bilanzpunkt Talsperre unbeeinflusst vom Bewirtschaftungsregime. Am nächstfolgenden Bilanzprofil im Einzugsgebiet gehen sie als Eingangsgröße in die Gütemodellierung ein. Dieses Vorgehen ist gerechtfertigt, da die Größen zum Teil keine Relevanz für die chemischen und biologischen Prozesse der eutrophen Talsperren Bautzen und Quitzdorf besitzen. So haben beispielsweise Eisen oder Sulfat eine hohe Bedeutung für Gewässer mit niedrigem pH -Wert wie die entstehenden Tagebaurestseen der Lausitz. Im Rahmen der Entwicklung des Gütemoduls für den Restsee Bärwalde wurden diese Größen durch die simulierten Stoffflüsse berücksichtigt (WERNER und MÜLLER, 2003).

Größen wie Mn , pH -Wert und BSB mit einer saisonalen Ausprägung, jedoch mit unveränderlichem Umsatzmustern im Gewässer (vgl. Eingangs- vs. Ausgangskonzentration), gingen direkt als Monatsmittel in das Gütemodul ein (Tab.4.1). Für einige Größen kam es zwar zum Teil zu erhebliche Schwankungen innerhalb eines Monats; die geringe Zahl an Messwerten verhinderte jedoch eine statistisch sichere empirische Ableitung.

Konservative Größen ohne ausgeprägte Saisonalität wie $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}, \mathrm{Cl}$ und Mg wurden als Jahresmittelwerte an das Kernmodell übergeben (Tab. 4.1). Außerdem wurden Größen, deren Datengrundlage durch einen stark begrenzten Werteumfang keine statistisch relevante Aussagen zuließen wie $\mathrm{SO}_{4}$, Al, K, Na und Ca , ebenfalls als Jahresmittelwerte in das Gütemodul eingespeist.

### 5.2.2 Empirische Beziehungen

Die Einbindung von Gütekriterien wie $\mathrm{T}_{\mathrm{w}}, \mathrm{P}_{\text {ges }}, \mathrm{NO}_{3}-\mathrm{N}$, und $\mathrm{Chl}-\mathrm{a}$ (Tab. 4.3) über Regressionsfunktionen (Abschnitt 4.2) hat den Vorteil, dass Änderungen der unabhängigen

Größen direkt auf die abgeleiteten Größen rückwirken. Als unabhängige Größen konnte dabei zum einen auf externe Eingangsgrößen des Bewirtschaftungsmodells wie Zufluss, Abfluss und die Globalstrahlung zurückgegriffen werden. Diese werden als Eingangsvariablen aus dem Bewirtschaftungsmodell übergeben und dienen dem „Antrieb" für die Simulation der Gewässergüte. Die modellierten Gütekriterien $\mathrm{P}-\mathrm{SRP}, \mathrm{N}_{\mathrm{ges}}$ und Phytoplankton stellten ebenfalls unabhängige Größen für die empirische Ableitung dar.

Die empirisch abgeleiteten Temperaturen für Epi- und Hypolimnion bzw. den gesamten Wasserkörper gingen wiederum als Eingangsgrößen in die Gütemodellierung ein. Das hohe Bestimmheitsmaß ( $r^{2}>0,8$ für beide Gewässer) lässt die Vermutung zu, dass die Globalstrahlung als unabhängige Größe einen Großteil der Variabilität der Temperatur erklärt. Eine Berücksichtigung zusätzlicher Einflussgrößen ist mit diesem Ansatz jedoch nicht vorgesehen.

Nachteil empirischer Verfahren ist, dass die zur Ableitung verfügbare Datenmenge begrenzt war, keine oder wenige Extremereignisse enthielt und auf Grund dessen in extremen Bereichen oft stark streute. Dies beschränkt die Aussagekraft der empirischen Übertragungsfunktionen auf mittlere, gut beobachtete Systemzustände und erhöht die Wahrscheinlichkeit von Fehlprognosen bei Extremereignissen.

### 5.3 Von der komplexen zur aggregierten Modellierung

Innerhalb eines Einzugsgebietes können stehende Gewässer wie Talsperren und Seen nicht einfach als Flussabschnitt betrachtet werden. Aufgrund der längeren Verweilzeit in stehenden Gewässern dominieren Stoffumsatzprozesse (Transformationen) über reine Transportprozesse. Daher muss auch der Schwerpunkt der verwendeten Modelle auf der Beschreibung des Stoffumsatzes liegen. Im Zentrum dieses Umsatzes steht die autotrophe Produktion organischer Stoffe durch Algen und höhere Wasserpflanzen sowie Abbau und Transformation durch die Glieder des Nahrungsnetzes. Neben den durch die Nahrungsnetze gebildeten Rückkopplungsschleifen sind außerdem die im Gewässer selbst entstehenden hydrophysikalischen Randbedingungen (Temperatur, Schichtung, Lichtklima) zu beachten. Auch diese werden durch hydrologische (Zufluss) und meteorologische (Globalstrahlung) Randbedingungen sowie das Bewirtschaftungsregime (Abfluss) verändert und beeinflussen ihrerseits die Güte der Talsperren und des abgegebenen Wassers.

Das kausalanalytische Modell SALMO (BENNDORF \& RECKNAGEL, 1982) beschreibt wesentliche Kernprozesse dieses Stoffumsatzes. Die Auswirkungen auf weitere Wassergütekriterien lassen sich teilweise direkt aus den Zustandsgrößen $\mathrm{P}-\mathrm{SRP}, \mathrm{N}_{\mathrm{ges}}, \mathrm{O}_{2}$ und Phytoplankton ableiten.

Um den Informationsverlust von einer komplexen zur aggregierten Simulation zu minimieren, wurden folgende Teilschritte definiert:

1. Anpassung des Modells SALMO an die jeweiligen Untersuchungsgewässer.
2. Reduzierung der Eingangsdatenmatrix des Gütemodells sowie die Anpassung der zeitlichen Skala.
3. Simulation von Bewirtschaftungsszenarien mit stochastisch generierten Eingangsdaten.
4. Aggregation des deterministischen Modells durch Training eines künstlichen neuronalen Netzes (ANN).

### 5.3.1 Modellanpassung

Die Modellanpassung (Abschnitt 4.3.1) erfolgte für beide Talsperren in moderater Weise und folgt so dem Grundsatz der maximal möglichen Allgemeingültigkeit (BENNDORF et al. 1985). Eine zu starke Orientierung der Modelle auf die Validierungsdaten würde den Gültigkeitsbereich der Anpassung einschränken und die Aussagekraft der Modellergebnisse für extreme Systemzustände herabsetzten.

Für die Talsperre Bautzen führte die Anpassung der sedimentgesteuerten Denitrifikationsrate (NDSMAX) zu einer Verbesserung der Simulation der Stickstoffkonzentration. Außerdem ließ sich die schwebstoffbedingte Unterdrückung der Phytoplanktonentwicklung durch Erhöhung des Lichtextinktionsfaktors (EPSMIN) besser abbilden (Abb. 4.14-4.16). Diese Effekte sind auf eine Aufwirbelung von Sedimentpartikeln bei starker Stauspiegelabsenkung zu erklären. Im Zusammenhang mit einer verstärkten Nutzung des Talsperre sind derartig niedrige Wasserstände häufiger zu erwarten.

Die Talsperre Quitzdorf wird als voll durchmischtes Gewässer im Einbox-Modus simuliert. Das heißt, es werden keine hypolimnischen Stoffkonzentrationen simuliert. Während der Sommermonate kommt es jedoch zu einer Ausbildung einer Grenzschicht zwischen Wasserkörper und Sediment, in der es auf Grund von Sauerstoffmangel zu einer verstärkten Denitrifikation und Phosphorrücklösung kommt. Für die Talsperre Quitzdorf wurde die sedimentnahe Denitrifikationsrate (NDSMAX) daher in Abhängigkeit zur Temperatur bestimmt. Die Phosphorrücklösung wurde hingegen vom Vorhandensein von Nitrat abhängig gemacht. Die Abbildung der saisonal bedingten verstärkten Adsorption und Fällung von Phosphor, wurde durch Anpassung der Phosphorsedimentationsrate (KPSED) Rechnung getragen (Abb. 4.17).

## Modellgüte

Die Simulationsergebnisse der komplexen Modellierung spiegeln das mittlere Verhalten der Gewässer prinzipiell wider (PetZoldt und Siemens, 2002). Außerdem wurde durch die Anpassung relevanter Prozesse eine Verbesserung in der Zeitsteuerung und der Treffsicherheit der Größenordnung beispielsweise der Denitrifikation oder Phosphorrücklösung erreicht (Abschnitt 4.3.1). Die nach wie vor vorhandenen Unterschiede zwischen Simulation und Messwerten kann zum Teil auf Prozesse wie der Klarwasserphase Phytoplanktons oder Phosphorfällung im Zulauf (DEPPE und BENNDORF, 1998; DEPPE \& BENNDORF, 2002) zurückgeführt werden. Die Klarwasserphase oder Phophorfällung stellen im allgemeinen kurzfristige Phänomene und Maßnahmen dar, die bei der Aggregation der zeitlichen Auflösung von 1 Monat als irrelevant angenommen werden können. Langfristige Sanierungsmaßnahmen durch beispielsweise eine längerfristige Zufuhr von Eisensalzen zur Phosphorfällung könnte indirekt durch Anpassung der Stoffimporte in das Modell Rechnung getragen werden.

Nach wie vor fehlt es bei der Einschätzung von Simulationsergebnissen an einer konkreten Zielgröße, d.h. einem statistisch aussagekräftigen Wert. Dies ist einerseits mit der Schwierigkeit komplexe Systeme wie Standgewässer in ihrer Gesamtheit zu beschreiben zu begründen, andererseits sind auch Messwerte mit Unsicherheiten behaftet. In Zukunft sollten jedoch auch solche Kriterien verwendet werden, die eine musterorientierte statistische Bewertung einbeziehen (GRIMM et al., 1996; JACHNER et al., 2007).

### 5.3.2 Modellreduktion

Die Kopplung des Gütemoduls mit dem Bewirtschaftungsmodell WBalMo erforderte ein Anpassung der äußeren Schnittstellen. Dazu wurden Umfang und zeitliche Auflösung (Monatsmittel) der Eingangsvariablen des komplexen Modells reduziert (Abschnitt 4.3.2). Die Datenübergabe von WBalMo an das Gütemodell konnte auf diese Weise getestet werden. Die innere Struktur des Gütemodells hingegen blieb komplett erhalten (Abb. 3.5). Somit entspricht die Parametrisierung sowie das Gleichungssystem der des für die Untersuchungsgewässer angepassten komplexen Modells SALMO.

Die verfügbaren Eingangsgrößen betrafen hydrologische (Zufluss), meteorologische (Globalstrahlung) sowie Bewirtschaftungsdaten (Abfluss). Zur Simulation mit SALMO werden hingegen auch Informationen zu Stoffimporten, die Temperatur in Epi- und Hypolimnion (TE,TH), die Lage der Thermokline (ZMIXREAL) sowie die Volumenbilanzen in Epi- und Hypolimnion ( $V E, V H$ ) in Abhängigkeit von Schichtung, Hydrologie und Bewirtschaftung benötigt.

Für die Stoffimporte wurden Monatsmittelwerte der gemessenen Stoffkonzentrationen im Zufluss verwendet. Die Probennahme erfolgte in einem ca. 14-tägigem Rhythmus, so dass hier keine großen Abweichungen gegenüber der komplexen Simulation erwartet wurden.

Zur Generierung der fehlenden Eingangsgrößen dienten Annahmen und Algorithmen unter Verwendung aller verfügbaren Informationen. Die empirische Ableitung der Epi- bzw. Hypolimniontemperaturen aus der verfügbaren Globalstrahlung erwies sich hierbei als geeignete Alternative anstelle sonst üblicher volumengewichteter Mittelwerte aus Temperaturmessungen. Es zeigte sich, dass die Temperaturen beider Talsperren signifikant von den Einstrahlungssummen der vergangenen Tage (TS Bautzen 60 Tage $=2$ Monate, TS Quitzdorf 30 Tage $=1$ Monat) abhängen (Abb. 4.18, 4.19 und 4.20). Dies ist mit der geringen Tiefe der Talsperren zu erklären. Ein alternativer Vorschlag bezieht die geographische Lage, den kontinentalen Einfluss (Entfernung vom Ozean), das Seevolumen und die mittleren Tiefe zur Berechnung der Gewässertemperaturen ein. Die Globalstrahlung geht hierbei nur als indirekte potentielle mögliche Größe über die Definition der geographischen Lage ein. Dieser Ansatz ist zur groben Abschätzung der Gewässertemperaturen geeignet, wenn auf keinerlei gemessene oder stochastisch simulierte Daten zurück gegriffen werden kann. Der hier vorgestellte Ansatz verfügte jedoch über Globalstrahlungsdaten, so dass diese Variante nicht berücksichtigt wurde.

Vor allem für geschichtete Gewässer wie die Talsperre Bautzen ist die Definition schichtungsrelevanter Parameter von Bedeutung. Während der Schichtungsperiode laufen biologische und chemische Prozesse in Epi- und Hypolimnion und damit grundsätzlich unter anderen Umgebungsbedingungen ab, was sich zum Teil stark auf die Entwicklung der Gewässergüte auswirkt. Vor allem für Talsperren, deren Wasserentnahme über den Grundablass erfolgt, ist es wichtig, die Schichtungsperiode sowie die damit verbundenen Größen (Lage der Thermokline, Volumenbilanzen für Epi- und Hypolimnion) möglichst genau zu definieren.

In der Natur hängt die Schichtungsperiode in starkem Maße von der saisonalen Variabilität der Temperatur im Gewässer selbst, vom Wind, aber auch von der Temperatur im Zufluss ab. Die Globalstrahlung sowie die daraus abgeleiteten Epi- und Hypolimniontemperaturen waren die einzig verfügbaren Informationen, die im reduzierten Eingangsdatensatz zur Verfügung standen. Der Schichtungsbeginn wurde daher in Abhängigkeit von der mittleren gemessenen Einstrahlungssumme definiert. Bei einer Temperaturdifferenz von Epi- und Hypolimnion ( $T E-T H$ ) kleiner $1 K$ wurde die Wassersäule als instabil geschichtet (PAUL, 1985) und damit ein Zusammenbruch der Schichtung angenommen (Abb.3.6. Anhand dieser stark vereinfachten Ansätze war es möglich, alle weitere Eingangsgrößen abzuleiten.

## Modellgüte

Die Reduktion der Eingangsdaten stellt eine Herausforderung an die Leistungsfähigkeit des komplexen Modells SALMO dar. Vor allem für die Talsperre Bautzen, einem dimiktischen Gewässer, ist die Ableitung der Schichtungsperiode von Bedeutung. Es zeigte sich, dass es prinzipiell möglich ist, mit reduzierten Eingangsdaten fehlende Eingangsinformationen empirisch bzw. über einfache Annahmen abzuleiten. Beginn und Ende der Schichtungsperiode wurden gut getroffen. Die Lage der Thermokline hingegen wurde in allen berücksichtigten Referenzjahren leicht unterschätzt (Abb. 4.21-(A) und A.9). Nachteil dieses Ansatzes ist, dass kurzfristige Durchmischungsereignisse und die damit verbundene Einmischung von Sauerstoff nicht mit erfasst werden können.

Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit kompletter und mit reduzierter Eingangsdatenmatrix zeigt einen prinzipiell ähnlichen Verlauf bei der Abbildung der Zustandsgrößen. Die vereinfachten Annahmen bei der Festlegung der Schichtungsperiode und der Ableitung aller schichtungsrelevanten Größen führte jedoch dazu, dass Prozesse wie Denitrifikation oder Resuspension von $P-S R P$ leicht unter- bzw. überschätzt wurde. Außerdem kommt es auf Grund der Reduktion der zeitlichen Auflösung zu einer größeren Trägheit des Systems. Bei Berücksichtigung der starken Vereinfachungen in diesem Arbeitsschritt, kann die Abbildung mit einer reduzierten Eingangsdatenmatrix dennoch als Erfolg gewertet werden.

Auch hier war eine statistisch greifbare Beurteilung schwierig, da beide Simulationsläufe von unterschiedlich komplexen Randbedingungen (Eingangsdaten) ausgingen. Eine Bewertung und ein Vergleich durch verschiedene Maßzahlen, die unterschiedliche Aspekte der Modellgüte charakterisieren wäre hier eine sinnvolle Erweiterung.

### 5.3.3 Modellaggregation - ANN

Die Verwendung von ANN für die Modellierung der Gewässergüte zur Simulation des langfristigen Systemverhaltens hat sich als eine zuverlässige, robuste Methode erwiesen. Entgegen einfachen, auf Messwerten beruhenden, empirischen Ansätzen sind ANN in der Lage, komplexe nichtlineare Zusammenhänge und Prozesse ohne genaue Kenntnis der wesentlichen deterministischen Zusammenhänge abzubilden.

Durch die Vernetzung und Wichtung der einzelnen Neuronen können alle möglichen Systemzustände simuliert werden soweit diese auch in den Trainingsdaten berücksichtigt wurden. Diese wurden mit Hilfe stochastisch generierter Eingangsdaten bestehend aus hydrologischen (Zufluss), meteorologischen (Globalstrahlung) sowie Bewirtschaftungsszenarien (Abfluss) mit dem reduzierten Modellansatz SALMO simuliert. Die Eingangsdaten wurden außerdem ergänzt durch Variation der Stoffimporte.

Es zeigte sich, dass die Berücksichtung historischer Simulationsergebnisse aus ein bis zwei vorangegangenen Rechenschritten (1-2 Monate) beim Netztraining zu einer Verbesserung der Modellergebnisse führt. Dieses Verhalten wird auch in realen Standgewässern beobachtet und ist mit der Trägheit des Wasserkörpers, d.h. dem Puffer- und Verdünnungsvermögen zu erklären (Abschnitt 2.3). Dieses Gedächtnis eines Gewässers speichert Informationen in Form von Energie und Masse (Stoff bzw. Fracht) und führt diese nach und nach wieder in das aktive System zurück. Auch SCHLEITER et al. (1999) zeigte für Fließgewässer, dass die Einbeziehung historischer Systemzustände (vorhergehende Tage) zu einer Verbesserung der Netzanpassung führt.

## Modellgüte

Der prinzipielle Weg, biologische Prozesse in Gewässern mit Hilfe von ANN nachzubilden, wurde in der Vergangenheit bereits mehrfach erfolgreich angewendet (LEK et al., 1996, PETZOLDT, 1996a; SCHLEITER et al., 1999, WALTER et al., 2001).

Mit Hilfe von ANN konnte das Abbildungsverhalten des komplexen Gewässergütemodells SALMO ersetzt werden. Zum Training des Netzes wurden Daten verwendet, die einerseits als Eingangsdaten zur Simulation mit dem komplexen Modell selbst verwendet wurden und andererseits die entsprechenden Ergebnisdaten aus SALMO. Ein direkter Vergleich zwischen Simulationsergebnissen mit SALMO und ANN zeigt eine gute Übereinstimmung für alle berücksichtigten Gütekriterien ( $\mathrm{O}_{2}, \mathrm{~N}_{\text {ges }}, \mathrm{P}-\mathrm{SRP}$ und Phytoplankton), was durch hohe Bestimmheitsmaße ( $r^{2}$ ) zwischen 0,76 und 0,99 belegt werden kann. Die Größe des gewählten Zeitschritts spielt dabei keine Rolle, da zeitabhängige biologische, chemische oder physikalische Prozesse nicht mehr berücksichtigt wurden sondern allein die Güte der aus dem ANN-Training abgeleiteten Übertragungsfunktionen.

### 5.4 Beleuchtung des eigenen Beitrags

Ein Schwerpunkt dieser Arbeit bildete die Analyse der Messwerte sowie die Ableitung und Definition vereinfachter alternativer Algorithmen zur Generierung der SALMO-Eingangsdatenmatrix auf Grundlage reduzierter Eingangsinformationen. In der Erarbeitung eines aggregierten Gewässergütemodells mit Hilfe neuronaler Netze lag der zweite Schwerpunkt. Als Ergebnis konnte eines einfaches Gütemodul erstellt werden, welches, gekoppelt an ein Mengenbewirtschaftungsmodell in Lage ist, plausible Prognosen zur langfristigen Entwicklung der Gewässergüte in Talsperren zu erstellen.

## 6 Schlussfolgerungen und Ausblick

Mit dem hier entwickelten aggregierten Gütemodul wurde ein Beitrag zum integrierten flussgebietsbezogenen Management geleistet. Zur Integration wesentlicher Prozesse und Einflussfaktoren ist es notwendig, unterschiedliche Modelle miteinander zu koppeln. Die Kommunikation zwischen den Modellen erfordert die Definition von Schnittstellen. Dies setzt eine Anpassung der externen Skalen, d.h. Eingangs- und Ausgangsinformationen sowie der zeitlichen Diskretisierung voraus. Die in dieser Arbeit entwickelten alternativen Ansätze und Algorithmen sind in der Lage, auch mit stark reduzierten Eingangsinformationen das Systemverhalten in Standgewässern plausibel und nachvollziehbar abzubilden.

Neuronale Netze sind als kompakte, robuste Black-Box-Module in der Lage, das komplexe Systemverhalten, des deterministischen Modells SALMO widerzuspiegeln. Neuronale Netze selbst sind jedoch nicht auf andere Gewässersysteme übertragbar. Allerdings stellt die hier erarbeitete Methodik einen fundierten Ansatz dar, der für die Entwicklung weiterer aggregierter Gütemodule im Rahmen integrierter Bewirtschaftungsmodelle angewendet werden kann.

Zu berücksichtigen ist jedoch, dass die Güte der Simulation mit neuronalen Netzen nie besser sein kann als die Güte deterministischer Modelle. Für eine objektive Bewertung der Simulationsgüte von deterministischen Modellen, fehlen nach wie vor allgemeingültige Kriterien und Indizes. Dies erschwert auch einen Vergleich der im Gesamtmodell implementierten Gütemodelle hinsichtlich ihrer Beiträge zur Güte des Gesamtmodells bzw. zur Fehlerfortpflanzung.

Es ist daher erforderlich, Bewertungsmethoden zu entwickeln und objektive Qualitätsmaße zu definieren. Die Evaluation der Simulationsgüte muss dabei bezogen auf die verwendeten Teilmodelle und das Gesamtmodell erfolgen.

Die im gekoppelten Gesamtmodell verwendeten Gewässergütemodelle bestehen selbst aus einzelnen Teilmodellen, die unterschiedliche Ansätze (deterministisch, stochastisch, empirisch) zur Beschreibung verschiedener Teilprozesse verwenden. Aus diesem Grund sind zunächst die Gewässergütemodelle und die in ihm verwendeten Teilmodelle hinsichtlich ihrer Simulationsgüte objektiv zu bewerten. Im Anschluss muss die Modellgüte aller Teilmodelle
evaluiert werden. Dies dient nicht primär dem direkten Vergleich der Modelle untereinander, sondern der Ermittlung der Gesamtmodellgüte.

Die Angabe eines Güteindizes ermöglicht es dem Modellanwender die Simulationsergebnisse zu bewerten. Es ist damit auch möglich Aussagen zur Prognosefähigkeit der Modelle zu treffen.

## Literaturverzeichnis

AMBÜHL, H., 1982: Eutrophierungskontrollmaßnahmen an Schweizer Mittellandseen. Wasser und Abwasser Forschung 15: 113-120.

Annear, R., M. McKillip, S. J. Khan, C. Berger, \& S. Wells, 2004: Willamette river basin temperature TMDL model: Boundary conditions and model setup. Tech. Rep., School of Engineering and Applied Science, Department of Civil and Environmental Engineering.

Arnold, I. und K. Kuhlmann, 1993: Über einige Zusammenhänge zwischen Braunkohle-förderung und Wasserbilanz in der Niederlausitz. Natur und Landschaft in der Niederlausitz 14: 3-16.

Auer, M. T. \& R. P. Canale, 1986: Mathematical modelling of primary production in Green Bay (Lake Michigan, USA), a phosphorus - and light - limited system. Hydrobiological Bulletin 20(1/2): 195-211.

Baumert, H. \& G. Radach, 1992: Hysteresis of tubulent kinetic energy in nonrotational tidal flows: A model study. Journal of Geophysical Research 97(3): 3669-3677.

Baumert, H. Z., J. Benndorf, K. Bigalke, D. Goldmann, I. Nöhren, T. Petzoldt, J. Post, und S. Rolinski, 2005: Das hydrophysikalisch-ökologische Talsperrenund Seenmodell SALMO-HR. Tech. Rep., TU Dresden, METCON, HYDROMOD, IAMARIS.

BECK, M. B., 1983: Uncertainty, system identification, and the prediction of water quality. In: M. B. Beck \& G. Van Straaten (eds.), Uncertainty and forecasting of water quality, Springer-Verlag, Berlin.

Bedford, K., R. Sykes, \& C. Libicki, 1983: Dynamic advective water quality model for rivers. J. Environ. Eng. Div. ASCE 109: 535-554.

Behrendt, H., P. Huber, P. Kornmilch, D. Opitz, O. Schmoll, G. Scholz, und R. Uebe, 1999: Nährstoffbilanzierung der Flussgebiete Deutschlands. Umweltforschungsplan des Bundesministers für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, Forschungsvorhaben Wasser, Forschungsbericht 296/25/515, Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei.

Bender, M., G. Hauser, M. Shiao, \& W. Proctor, 1990: BETTER - two-dimensional reservoir water quality model. Tech. Rep. N.WR-2-590-152, Tennessee Valley Authority, USA.

Benndorf, J., 1979a: A contribution to the phosphorus loading concept. IntRev 64(2): 177-188.

Benndorf, J., 1979b: Kausalanalyse, theoretische Synthese und Simulation des Eutrophierungsprozesses in stehenden und gestauten Gewässern. Habilitationsschrift, TU Dresden, Fakultät Bau-, Wasser- und Forstwesen.

Benndorf, J., 1988: Documentation of the dynamic ecological model SALMO II. TU Dresden, Bereich Hydrobiologie.

Benndorf, J., 1995a: Einsatz der Nahrungskettenmanipulation zur Sanierung Eutropher Seen. Schlußbericht zum Forschungsvorhaben FKZ 0339423A, Bundesministerium für Bildung, Forschung und Technologie, Wissenschaft. Tech. Rep., TU Dresden, Institut für Hydrobiologie.

Benndorf, J., 1995b: Possibilities and limits for controlling eutrophication by biomanipulation. IntRev 80(4): 519-534.

Benndorf, J. und J. Clasen, 2001: Integrierte Wasserbewirtschaftung Von Trinkwassertalsperren - Integragtion gewässerinterner Maßnahmen. ATT-Schriftreihe 3: 149-185.

Benndorf, J. und N. Kamjunke, 1999: Anwenderrichtlinie Biomanipulation am Beispiel der Talsperre Bautzen. Tech. Rep., Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie, Referat Wasserversorgung, Abwasserbeseitigung und Wasserbau., Dresden.

Benndorf, J. und T. Petzoldt, 1999: Der Einsatz eines ökologischen Modells zur Prognose der Wasserbeschaffenheit von Trinkwassertalsperren und die Wechselbeziehungen zur Wassermengenbewirtschaftung. In: ATT-Schriftenreihe; Bd1; Informationen der Arbeitsgemeinschaft Trinkwassertalsperren e.V.; Oldenburg Industrieverlag, Siegburg.

Benndorf, J. \& F. Recknagel, 1982: Problems of application of the ecological model SALMO to lakes and reservoirs having various trophic states. EcolMod 17: 129-145.

Benndorf, J. und I. RöSke, 1995: Gewässerschutz-Studienskript zur Vorlesung Wassergüte. .

Benndorf, J. und M. Wetzel, 2003: Der Sedimenteinfluss auf die Wassergüte der Talsperre Bautzen bei stark wechselnden Wasserständen: Schlußbericht zum Forschungsvorhaben FKZ 02 WB 0125, Bundesministerium für Bildung und Forschung. Tech. Rep., TU Dresden, Institut für Hydrobiologie.

Benndorf, J., D. Uhlmann, \& K. Pütz, 1981: Strategies for water qualitiy management in reservoirs in the German Democratic Republic. Water Quality Bulletin 6: 68-90.

Benndorf, J., F. Recknagel, und W. Horn, 1982: Das dynamische ökologische Modell SALMO zur Steuerung der Wasserbeschaffenheit in Standgewässern. Wiss. Z. TU Dresden 31(5): 219-228.

Benndorf, J., R. Koschel, \& F. Recknagel, 1985: The pelagic zone of Lake Stechlin. an approach to a theoretical model. In: S. Casper (ed.), Lake Stechlin. A Temperate Oligotrophic Lake., 443-453, Junk Publishers.

Benndorf, J., J. Koop, H. Schütz, A. Wagner, T. Deppe, R. Herbst, S. Hülsmann, N. Kamjunke, und H. Voigt, 1998: Biomanipulation zur Sanierung eutrophierter Seen — Erweiterung der Anwendungsmöglichkeiten. Schlußbericht zum Forschungsvorhaben FKZ 0339549, Bundesministerium für Bildung und Forschung. Tech. Rep., TU Dresden, Institut für Hydrobiologie.

Benndorf, J., H. Planke, und T. Petzoldt, 2000: Dokumentation des dynamischen ökologischen Modells SALMO. TU Dresden, Institut für Hydrobiologie.

Bleck, R., 1998: Ocean modeling in isophycnic coordinates. In: Workshop on Ocean Modeling and Parametrization., NATO, Les Houches, France.

Blumberg, A. \& G. Mellor, 1987: A description of a three-dimensional coastal ocean circulation model. In: N. Heaps (ed.), Three dimensional coastal ocean model., AGU, Washington, DC.

Bolker, B., 2007: Ecological Models and Date in R. Princeton University Press, Princeton and Oxford.

Bonnet, M. \& K. Wessen, 2001: ELMO, a 3-D water qualitiy model for nutrients and chlorophyll: first application on a lacustrine ecosystem. Ecological Modelling 141: 19-33.

Bonnet, M., M. Pulin, \& J. Devaux, 2000: Numerical modelling of thermal stratification in a lake reservoir: methology and case study. Aquatic Sciences 62: 105-124.

Borchardt, D., I. M. Schleiter, H. Werner, T. Dapper, und K.-D. Schmidt, 1997: Modellierung ökologischer Zusammenhänge in Fließgewässern mit Neuronalen Netzwerken. Wasser und Boden 49(8): 47-50.

Borchardt, D., U. Bosenius, R.-D. Dörr, B. Hansjürgens, F. Holzwarth, E. Interwies, U. Irmer, H. Jekel, S. von Keitz, A. Kraemer, C. Markard, F. Messner, V. Mohaupt, K. Müller, J. Quast, M. Schmalholz, J. Steidl, T. Stratenwerth, und H. Wiggering, 2002: Handbuch der EUWasserrahmenrichtlinie - Inhalte, Neuerungen und Anregungen für die nationale Umsetzung. Erich Schmidt Verlag, Berlin.

Carlson, R. E., 1977: A trophic state index for lakes. Limnology and Oceanography 22: 361-369.

Chon, T.-S., Y. S. Park, K. H. Moon, \& E. Y. Cha, 1996: Patternizing communities by using an artificial neural network. Ecological Modelling 90: 69-78.

Cole, T. \& E. BUCHAK, 1995: CE-QUAL-W2: A two-dimensional, laterally, hydrodynamic and water quality model, version 2.0. Waterways Experiments Station, Vicksburgh, MS.

Cole, T. \& E. BUChak, 2000: CE-QUAL-W2: A two-dimensional, laterally, hydrodynamic and water quality model, version 3.0. Waterways Experiments Station, Vicksburgh, MS.

Collins, C. \& J. Wlosinski, 1983: Lake and Reservoir Management. chap. Verification of the reservoir qualitiy model, CE-QUAL-R1, using daily flux rates., 206-212. EPA, Washington DC.

Cullmann, J., 2007: Online flood forecasting in fast responding catchments on the basis of a synthesis of artificial neural networks and process modells. Ph.D. thesis, TU Dresden.

Cüneyt, K., S. Soyupak, A. F. Cilesiz, N. Akbay, \& E. Germen, 2000: Case studies on the use of neural network in eutrophication modeling. Ecological modelling 134: 145152.

Dann, M. S., J. A. Lynch, \& E. S. Corbett, 1986: Comparison of methods for estimating sulfate export from a forested watershed. J. Environ. Qual. 15(2): 140-145.
de Lange, W., J. Luiten, \& M. Blind, 2002: Description of work of HARMONI-CA Harmonised Modelling Tools for Integrated Basin Management. .

Deppe, T. und J. Benndorf, 1998: Ein kombiniertes Verfahren der gewässerinternen Phosphatfällung und Tiefenwasserförderung zur Blaualgenbekämpfung in eutrophierten Standgewässern. In: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH. (Hrsg.), Entwicklung von Gewässertechnologien zur Sanierung von Talsperren und Seen., 261-298, Forschungsbericht, Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF), Dresden.

Deppe, T. \& J. Benndorf, 2002: Phosphorus reduction in a shallow hypertrophic reservoir by in-lake dosage of ferrous iron. Water Research 36: 4525-4534.

Dibike, Y. B. \& D. P. Solomatine, 2001: River flow forecast using artificial neural networks. Phys. Chem. Earth (B) 26(1): 1-7.

Dietrich, O. und M. Redetzky, 2003: WBalMo Spreewald - ein Modell zur Analyse des globalen Wandels auf den Wasserhaushalt eines Feuchtgebietes mit Wasserbewirtschaftung. WASY Aktuell 9(3).

DIN, 1991: Biologisch-ökologische Gewässeruntersuchung: Bestimmung des Saprobienindex (M2). In: Normenausschuß Wasserwesen (NAW) im DIN Deutsches Institut für Normung eV, DEV-24 (Hrsg.), Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Beuth Verlag, Berlin.

Duwe, K., 1988: Model der Brackwasserdynamik eines Tideästuars am Beispiel der Unterelbe. Dissertation, Universität Hamburg.

Dvorakova, M. \& H.-P. Kozerski, 1980: Three-layer model of an aquatic ecosystem. J. ISEM 2: 63-70.

Elliott, J., A. Irish, C. Reynolds, \& P. Tett, 1999a: Sensitivity analysis of PROTECH, a new approach in phytoplankton modelling. Hydrobiologia 414: 45-51.

Elliott, J., C. Reynolds, A. Irish, \& P. Tett, 1999b: Exploring the potential of the PROTECH model to investigate phytoplankton community theory. Hydrobiologia 414: 37-43.

Elliott, J., C. Reynolds, A. Irish, \& P. Tett, 2000: Modelling freshwater phytoplankton communities: An exercise in validation. Ecol. Modelling 128: 19-26.

EU-WRRL, 2000: Wasserrahmenrichtlinie-Richtlinie 2000/60/EG des europäischen Parlaments und des Rates vom 23. Oktober 2000 zur Schaffung eines Ordnungsrahmens für Maßnahmen der Gemeinschaft im Bereich der Wasserpolitik. Amtsblatt der Europäischen Gemeinschaft, Europäische Gemeinschaft.

FBA, 1989: The FBA-Welsh Water simulation model of phytoplankton dynamics in flushed systems. Authentication in a coastal lagoon. Freshwater Biology Association (FBA).

FEDERER, C., 1995: BROOK 90: A simulation modell, for evaporation, soilwater and streamflow, version 3.1., computer freeware and documentation. Tech. Rep., USDA Forest Service, PO Box 640, Durnham NH, 03824.

Fedra, K., 1983: A Monte-Carlo Approach to estimation and prediction. In: M. Beck \& G. van Straaten (eds.), Uncertainty and forecasting of water quality., 259-291, SpringerVerlag, Berlin Heidelberg New-York.

Fiering, M. B., 1964: A multivariate technique for synthetic hydrology. J. Hydraulics Div. ASCE 89(43).

Fiering, M. B., 1967: Streamflow synthesis. Havard University Press.
FIRMA, 2003: Participatory integrated assessment in five case studies. Eu project: Evk1-ct1999-00016), Maasstricht University, ICIS.

FLÜGEL, W.-A., 2000: Systembezogene Entwicklung regionaler hydrologischer Modellsysteme. Wasser und Boden 52(3): 14-17.

Goudsmit, G.-H., P. Reichert, \& A. Wüest, 1996: Modelling of physical and biogeochemical in lakes AQUASIM. In: Müller (ed.), Hydroinformatics'96, Balkema Rotterdam.

Grimm, V., K. Frank, F. Jeltsch, R. Brandl, J. UchmańSki, \& C. Wissel, 1996: Pattern oriented modelling in population ecology. The Science of the Total Environment 183: 151-166.

Hagan, M. T., H. B. Demuth, \& M. Beale, 1996: Neural Network Design. PWS Publishing.

Hamilton, D. \& M. Herzfeld, 2001: Computational aquatic ecosystem dynamics model: CAEDYM science manual. Tech. Rep., Centre for Water Research, University of Western Australia, Nedlands, WA 6907, Australia.

Hamilton, D. \& S. G. Schladow, 1997: Prediction of water quality in lakes and reservoirs. Part I - model description. EcolMod 96(1-3): 91-110.

Hesslein, R. H., 1976: An in situ sampler for close interval pore water studies. Limnol. Oceanogr. 21: 912-914.

Hodges, B., 2000: Numerical techniques in CWR-ELCOM. Tech. Rep. WP 1422-BH, Centre for Water Research, University of Western Australia.

Hupfer, M., R. Pöthig, R. Brüggemann, \& W. Geller, 2000: Mechanical resuspension of autochthonous calcite (Seekreide) failed to control internal phosphorus cycle in a eutrophic lake. Water Research 34(3): 859-867.

Imberger, J. \& J. Patterson, 1981: A dynamic reservoir simulation model - DYRESM: 5. In: H. Fischer (ed.), Transport models for inland and coastal waters., 310-361, Academic Press, New York.

Imberger, J. \& J. Patterson, 1990: Physical limnology. Adv. Appl. Mech. 27: 303-475.
Imberger, J., J. Patterson, B. Hebbert, \& I. Loh, 1978: Dynamics of reservoirs of medium size. J. Hydraulics Div. ASCE 104: 725-743.

Jachner, S., G. K. van den Boogaart, \& T. Petzoldt, 2007: Statistical methods for the qualitative assessment of dynamic models with time delay (R package qualv). Journal of Statistical Software 22(8): 1-30.

Johnson, A. H., 1979: Estimating solute transport in streams from grab samples. Water Resource Research 15: 1224-1228.

JøRGensen, S., 1980: Lake Management. Pergamon Press, Oxford.
Jørgensen, S., M. Mejer, \& M. Friis, 1978: Examination of a lake model. Ecological Modelling 4: 253-278.

Karagounis, I., J. Trösch, \& F. Zamboni, 1993: A coupled physical-biochemical lake model for forecasting water quality. application to the Northern Basin of Lake Lugano. Aquatic Sciences 55(2): 87-102.

Keller, M., M. Hilden, und M. Joost, 1997: Vergleich von Schätzmethoden für jährliche Stofffrachten am Beispiel des IKSR-Meßprogrammes 1995. Tech. Rep., Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit.

Köhle, M., 1990: Neuronale Netze. Springer, Wien.
Kielb, P., 1996: Ein hybrides wissensbasiertes System für Umweltschutz. Dissertation, TU Dresden, Fakultät Informatik.

Köngeter, J., G. Demny, S. Rubbert, und H. Schonlau, 2004: Teilprojekt 3.1: Erforschung und Modellierung der Strömungs- und Stoffumsatzprozesse im Ober- und Mittellauf der Spree sowie der Talsperre Spremberg, Koordination des Gesamtprojektes. Projektverbund: Untersuchungen zur Gewässerbeschaffenheitsentwicklung der Spree, Abschlussbericht des Teilprojektes 3.1 im Auftrag des BMBF (FKZ 02WB9967/0), des Sächsischen Landesamtes für Umwelt und Geologie sowie des Umweltamtes Brandenburg, RWTH Aachen.

KÖngeter, J. E. A., 2004: Projektübergreifender Schlussbericht zum Verbundvorhaben: Untersuchungen zur Gewässerbeschaffenheitsentwicklung der Spree. Tech. Rep., Institut für Wasserbau und Wasserwirtschaft der RWTH Aachen, Forschungszentrum Karlsruhe in der Helmholtz-Gemeinschaft, Projektträger des BMBF und des BMWA für Wassertechnologie und Entsorgung (PtWT+E); Auftraggeber: Bundesministerium für Bildung und Forschung.

Köhler, J., J. Gelbrecht, und M. Pusch, 2002: Die Spree Zustand, Probleme, Entwicklungsmöglichkeiten., Bd. 10 of Limnologie aktuell. Schweizerbart, Stuttgart.

Koschel, R., J. Benndorf, G. Proft, \& F. Recknagel, 1983: Calcite precipitation as a natural control mechanism of eutrophication. Achr. Hydrobiol. 98: 380-408.
kreis Mathematische Flussgebietsmodelle, B.-A. (Hrsg.), 2002: Mathematischnumerische Modelle in der Wasserwirtschaft. No. 24In BFG Mitteilungen, Kaiser-Augusta-Anlagen 15-17, PF 200253, 56002 Koblenz, Bundesanstalt für Gewässerkunde.

Lämmle, U. und J. Cleve, 2001: Lehr- und Übungsbuch: Künstliche Intelligenz. Fachbuchverlag Leipzig.

Lampert, W. und U. Sommer, 1999: Limnoökologie., Bd. 489. Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 2. Aufl.

LAWA Arbeitskreis GewäSSerbewertung - stehende Gewässer, 1998: Gewässerbewertung - stehende Gewässer. Vorläufige Richtlinie für eine Erstbewertung von natürlich entstandenen Seen nach trophischen Kriterien. Tech. Rep., Länderarbeitsgemeinschaft Wasser.

LAWA Arbeitskreis Gewässerbewertung - stehende Gewässer, 2001: Gewässerbewertung - stehende Gewässer. Trophieklassifikation von Talsperren. Vorläufige Richtlinie, Länderarbeitsgemeinschaft Wasser.

Lek, S., M. Delacoste, P. Baran, I. Dimopoulos, J. Lauga, \& S. Aulagnier, 1996: Application of neural networks to modeling nonlinear relationships in ecology. Ecological Modelling 90: 39-52.

Lord, D., J. Imberger, \& C. Pattiaratchi, 1994: Management of coastal waters in Western Australia, the use of integrated models. In: J. Yokosuka (ed.), International Conference on Hydro-technical Engineering for Port and Harbour Construction.

Luckner, L. und D. Eichhorn, 1996: Flutungskonzept für die Tagebaurestlöcher. Umweltprojekt/Grundwasser 18-28.

Maniak, U., 1998: Flussgebietsmodelle. In: Bundesanstalt für Gewässerkunde (Hrsg.), Mathematische Modelle in der Gewässerkunde - Stand und Perspektiven, Bd. 19, 22-35.

Manley, R. E., 2006: HYSIM 4.90. R.E. Manley and Water Resource Associates Ltd., Cambridge.

McCulloch, W. S. \& W. Pitts, 1943: A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. Bulletin of Mathematical Biophysics 5: 115-133.

Metropolis, N. \& S. Ulam, 1949: The Monte-Carlo Method. Journal of the American Statistical Association 44(247): 335-341.

Mieleitner, J. \& P. Reichert, 2006: Analysis of the transferability of a biogeochemical lake model to lakes of different trophic state. Ecol. Modelling 194: 49-61.

Minns, A. W. \& M. J. Hall, 1996: Artificial neural networks as rainfall-runoff models. Hydrological Sciences 41: 399-417.

MÜLLER, M., 2003: Modellierung von Stofftransport und Reaktionen mit einem neuentwickelten, gekoppelten Grund- und Oberflächenwassermodell am Beispiel eines Tagebaurestsees. Dissertation, Brandenburgische Technische Universität Cottbus.

Omlin, M., R. Brun, \& P. Reichert, 2001a: Biogeochemical model of Lake Zürich: sensitivity, identifiability and uncertainty analysis. Ecological Modelling 141: 105-123.

Omlin, M., P. Reichert, \& R. Forster, 2001b: Biogeochemical model of Lake Zürich: Model equations and results. Ecological Modelling 141: 77-103.

Oziransky, Y. \& B. Shteinman, 1993: Assessment of turbulent processes in Lake Kinneret by the two-dimensional reservoir water quality model BETTER. Water Science and Technology 27(7/8): 381-385.

Patten, B., T. Richardson, und M. Barber, 1982: Path analysis of a reservoir ecosystem model. Canadian Water Resources Journal 7: 252-277.

Paul, L., 1985: Das thermische Regime der Talsperre Saidenbach und einige Beziehungen zwischen abiotischen und biotischen Komponenten. Dissertation, BWF.

Pein, A. und S. Pfeiffer, 1996: Neutralisation processes in acid mine lake sediments. Arch. Hydribiol. Spec. Issues Adv. Limnol. 48: 261-267.

Peters, R., 2008: Nutzung künstlicher neuronaler Netze zur Bereitstellung von Entscheidungsgrundlagen für operative und planerische wasserwirtschaftliche Maßnahmen. Dissertation, TU Dresden.

Petzoldt, T., 1996a: Möglichkeiten zur Vorhersage von Phytoplanktonmassenentwicklungen: Von der statischen Betrachtungsweise zur Kurzfristprognose. Dissertation, TU Dresden, Fakultät Forst-, Geo- und Hydrowissenschaften.

Petzoldt, T., 1996b: Simulation der wichtigsten und Möglichen Abflußsituationen zur Bewertung der sich einstellenden Gewässergütesituation im Muldestausee mit dem dynamischen Gewässermodell SALMO II. .

Petzoldt, T., 2004: Defizite und Möglichkeiten bei der Entwicklung und Anwendung von Standgewässergütemodellen. In: Flussgebietsbewirtschaftung - quo vadis Modellierung Workshop am 11./12. November 2003 in Koblenz, Bd. 1, 212-225, Bundesanstalt für Gewässerkunde.

Petzoldt, T. \& F. Recknagel, 1992: Monte-Carlo simulation with an ecological lake model. In: D. Graillot, W. Schilling, \& T. Einfalt (eds.), Assessment of Modeling Uncertainties and Measurement Errors in Hydrology. Proceedings of the Fourth Junior Scientists Course, 189-196, Saint-Etienne, France.

Petzoldt, T. und K. Siemens, 2002: Nutzung eines ökologischen Simulationsmodells im Entscheidungsfindungsprozess: Anwendung des Modells SALMO auf die Talsperre Bautzen. Wasser und Boden 54(9): 42-48.

Petzoldt, T. \& D. Uhlmann, 2006: Nitrogen emission into freshwater ecosystems: Is there a need for nitrate elimination in all wastewater treatment plants? Acta Hydrochim. Hydribiol. 34: 305-324.

Petzoldt, T., K. Siemens, und G. Ackermann, 2002: Kombinierte Mengen-GüteBewirtschaftung einer flachen Talsperre: Vorschlag für ein optimiertes Abstauregime. In: DGL-Tagungsbericht (Kiel), Bd. 1, 345-350, Tutzing.

Petzoldt, T., R. Peters, K. Siemens, und M. Wetzel, 2004a: Ableitung vereinfachter Wassergütemodule für Talsperren mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen und Neuronalen Netzen. In: Tagungsbericht 2003 (Köln), 656-661, Deutsche Gesellschaft für Limnologie (DGL), Weißensee Verlag, Berlin.

Petzoldt, T., R. Peters, M. Wetzel, und K. Siemens, 2004b: Ableitung von Standgewässer-Gütemodulen für ein Flussgebietsmodell: Ein prototypischer Ansatz am Beispiel der Talsperren Bautzen und Quitzdorf. In: H. Bronstert, A. (u.A. (Hrsg.), Wasser und Stofftransport in heterogenen Einzugsgebieten. Beiträge zum Tag der Hydrologie 2002 22./23. März in Potsdam, 255-263.

Petzoldt, T., S. Rolinski, K. Rinke, M. König, H. Z. Baumert, und J. Benndorf, 2005: SALMO: Die ökologische Komponente des gekoppelten Modells. Wasserwirtschaft 95(5): 28-33.

Poddig, T. und Sidorovitch, 2001: Data Mining im Marketing, Kapitel 9 - Künstliche Neuronale Netze: Überblick, Einsatzmöglichkeiten und Anwendungsprobleme. Vieweg Verlag.

Quarteroni, A. \& F. Saleri, 2006: Scientific Computing with MATLAB and Octave. Springer.

R Development Core Team, 2008: R: A Language and Environment for Statistical Computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria.

RAJAR, R. \& M. Cetina, 1997: Hydrodynamic and water quality modeling: An experience. Ecological Modeling 101: 195-207.

Recknagel, F., H. Cao, B. Kim, N. Takamura, und A. Welk, 2006: Unravelling and forecasting algal population dynamics in two lakes different in morphometry and eutrophication by neural and evolutionary computation. Ecological Informatics 1: 133-151.

Rehkugler, H. und M. Kerling, 1995: Einsatz Neuronaler Netze für Analyse- und Prognosezwecke. Betriebswirtschaftliche Forschung und Praxis 3: 306-324.

REICHERT, P., 1994: AQUASIM - a tool for simulation and data analysis of aquatic systems. Wat. Sci. Tech. 30(2): 21-30.

Reick, C. H., 2000: Was Ist eine Gute Prognose? .
Reynolds, C. \& A. Irish, 1993: Model algal blooms. Tech. Rep., National Rivers Authority, UK.

Reynolds, C. \& A. Irish, 1997: Model phytoplankton dynamics in lakes and reservoirs: The problem of in-situ growth rates. Hydrobiologia 39: 5-17.

Rieland, M., 2004: Das BMBF-Programm GLOWA: Instrumente für ein vorausschauendes Management großer Flusseinzugsgebiete. HW 48(2): 83-84.

Riley, M. \& H. Stefan, 1987: Dynamic lake water quality simulation model MINLAKE. project report 263, University of Minnesota, St. Anthony Falls Hydr. Lab.

Riley, M. \& H. Stefan, 1988: MINLAKE: A dynamic lake water qualitiy management model. Ecol. Modelling 43: 155-182.

Rinke, K., M. König, und T. PetZlodt, 2001: Gewässergütesimulation mit dem Seenmodell SALMO zu den Auswirkungen von Maßnahmen der Wassergüte-Steuerung im Altmühlsee. .

Röckmann, C., 2001: Von Pyrit bis Schwefelsäure. Forum Geoökologie 12(2): 7-10.
Rolinski, S., T. Petzoldt, H. Z. Baumert, K. Bigalke, H. Horn, und J. BennDORF, 2005: Das physikalisch-ökologisch gekoppelte Talsperrenmodell SALMO-HR. Wasserwirtschaft 95(5): 34-38.

Rosenblatt, F., 1958: The Perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. Psychological Review 65(6): 386-408.

Rubbert, S., 2007: Entwicklung eines Langfristgewässergütemodells für flache Standgewässer. Dissertation, RWTH Aachen.

Rumelhart, D. E., G. E. Hinton, \& R. J. Williams, 1986: Learning representations by back-propagating errors. Nature 323: 533-536.

SAS, H., 1989: Lake Restoration by Reduction of Nutrient Loading. Expectations, Experiences, Extrapolations. Academia-Verlag Richarz, St. Augustin.

Schladow, S. G. \& D. P. Hamilton, 1997: Prediction of water quality in lakes and reservoirs: Part II - model calibration, sensitivity analysis and application. EcolMod 96(13): 111-123.

Schleiter, I. M., D. Borchardt, R. Wagner, T. Dapper, K.-D. Schmidt, H.-H. Schmidt, \& H. Werner, 1999: Modelling water quality, bioindication and population dynamics in lotic using neural networks. Ecological Modelling 120(120): 271-286.

Schmitz, G. H., S. Niels, und T. Wöhling, 2007: Irrigation control: towards a new solution of an old problem. No. 5In IHP/HWRP-Schriftenreihe, Bundesanstalt für Gewässerkunde.

SchÜtZe, N., 2005: Neue Methoden zur Steuerung der Wassergabe mit neuronalen Netzen in der Bewässerungslandwirtschaft. Dissertation, TU Dresden, Institut für Hydrologie und Meteorologie.

Siemens, K., 1998: Sensitivitätsanalyse landnutzungsabhängiger Parameter mit dem Wasserhaushaltsmodell BROOK90. Diplomarbeit, TU Dresden.

Siemens, K., T. Petzoldt, M. Wetzel, und R. Peters, 2003: Teilprojekt 3.2: Erforschung der stoffumsatzprozesse und modelluntersuchungen zur gewässergüte in den talsperren bautzen und quitzdorf. Tech. Rep., TU Dresden.

Silvert, W., 2001: Modelling as a discipline. Int. J. General Systems 30(3): 261-282.

Smith, R. \& R. Herbert, 1979: Monte-Carlo analysis of the hydrologic effects of spatial variability of infiltration. Water Resource Research 15(2).

Soetaert, K. \& P. M. Herman, 2009: A Practical guide to Ecological Modelling, Using R as a Simulation Platform. Springer, Netherlands Institute of Ecology, Yerseke, The Netherlands.

Song, Y. \& D. Haidvogel, 1994: A semi-implicit ocean circulation model using a generalized topography-following coordinate system. J. Comp. Phys. 115: 228-244.

Stachowiak, H., 1973: Allgemeine Modelltheorie. Springer Verlag Wien und New York.
Stefan, H. \& J. Cardoni, 1982: RESQUAL II: A dynamic lake water quality management models program for a stratified shallow lake or reservoir: application to Lake Chicot, arkansas. Tech. Rep., University of Minnesota.

Straškraba, M., 1976: Development of an analytical phytoplankton model with parameters empirically related to dominat controlling variables. In: R. Glaser, K. Unger, \& K. Koch (eds.), Umweltbiophysik, 33-65, Abhandlungen Akademie der Wissenschaften der DDR 1974.

Straškraba, M., 1979: Mathematische Simulation der Produktionssteuerung in Talsperren. Z. Wasser Abwasser Forschung 12: 56-64.

Straškraba, M., 1982: The application of predictive mathematical models of reservoir ecology and water quality. Can. Water. Resourc. J. 7: 283-318.

TGL 27885/01, 1982: Nutzung und Schutz der Gewässer. Stehende Binnengewässer. Klassifizierung. Fachbereichstandard, Ministerium für Umweltschutz und Wasserwirtschaft der DDR, Berlin.

Thomas, H. A. und M. B. Fiering, 1962: Mathematical synthesis of streamflow sequences in the analysis of river basins. In: A. Maas, M. M. Hufschmidt, R. Dorfman, H. A. Thomas, S. Marglin, und G. M. Fair (Hrsg.), Design of water resource systems., Havard University Press.

Treunert, E., A. Wilhelms, und H. Bernhardt, 1974: Einfluß der ProbenahmeHäufigkeit auf die Ermittlung der Jahres-Phosphor-Frachtwerte mittlerer Bäche. Hydrochemische und hydrogeologische Mitteilungen 1: 175-198.

Tucker Gilman, R., R. A. Abell, \& C. E. Williams, 2004: How can conservation biologyinform the practise of Intergrated River Basin Management? Intl. J. River Basin Management 2(2): 1-14.

Uhlmann, D., 1988: Hydrobiologie. Ein Grundriß für Ingenieure und Naturwissenschaftler. Gustav Fischer Verlag, Stuttgart, 3. Aufl.

UNEP / OCHA Assessment Mission, 2000: Cyanid spill at Baaia Mare Romania. Tech. Rep., United Nations Environment Programme, UNEP / Office for the Co-ordination of Humanitarian Affairs, OCHA.

USCE, 1986: CE-QUAL R1: Anumerical one-dimensional model of reservoir water quality, user's manual. Department of the Army, U.S. Corps Engineers, Washington DC, environmental and water quality operational studies instruction report e-82-1 edn.
van Straten, G., 1983: Maximum likelihood estimation of parameters and uncertainty in phytoplankton models. In: M. Beck \& G. van Straten (eds.), Uncertainty and forecasting of water quality., 157-171, Springer-Verlag.

Vollenweider, R. A. \& J. Kerekes, 1980: OECD cooperative programme for monitoring of inland waters. (Eutrophication control). Synthesis report, OECD, Paris.

Walter, M., F. Recknagel, C. Carpenter, \& M. Bormans, 2001: Predicting eutrophication effects in the burrinjuck reservoir (australia) by means of the deterministic model salmo and the recurrent neural network model anna. Ecological Modelling 146: 97-113.

Walther, J., 2003: Gewässergütebewirtschaftung im Spreegebiet mit dem Langfristbewirtschaftungsmodell WBalMo $®$. In: Moderne Methoden und Instrumentarien für die Wasserbewirtschafzung und den Hochwasserschutz, Dresden, WASY GmbH, Deutsch-Chinesische-Fachtagung: Moderne Methoden und Instrumentarien für die Wasserbewirtschafzung und den Hochwasserschutz.

Wasson, J.-M., M.-H. Tusseau-Vuillemin, V. Andreassian, C. Perrin, J.-B. Faure, O. Barreteau, M. Bousquet, \& B. Chastan, 2003: What kind of water models are needed for the implementation of the European Water Framework Directive? examples from france. Intl. J. River Basin Management 1(2): 125-135.

WASY GmbH, 2003: WBalMo® - Interaktives Simulationssystem für Planung und Bewirtschaftung in Flussgebieten. .

Werbos, P., 1974: Beyond Regression: New Tools for Prediction and Analysis in the Behavioral Sciences. Ph.D. thesis, Harvard University, Cambridge, MA.

Werner, F. und M. MüLler, 2003: Aufbau eines gekoppelten oberflächenwassergrundwassermodells und seine reduktion zu einem konzeptionellen blockmodellsystem am beispiel bärwalde. In: Abschlussbericht des Teilprojektes 5.3 im Projektverbund: Üntersuchung der Gewässerbeschaffenheitsentwicklung der Spree"(BMBF-FKZ 02WB9971/4), Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V.

Wüest, A., G. Piepke, \& D. van Senden, 2000: Turbulent kinetic energy balance as a tool for estimating vertical diffusivity in wind-forced stratified waters. Limnology and Oceanography 45: 1388-1400.

Wetzel, M., 2002: Einfluss von Trockenlegung und Wiedereinstau auf Sedimentresuspension und Wassergüte der Talsperre Bautzen. In: Tagungsband der Jahrestagung der DGL, Deutsche Gesellschaft für Limnologie.

Willmitzer, H., H. Planke, und K. Hövel, 1998: Einsatz des Simulationsmodells SALMO für die Bewirtschaftung von Trinkwassertalsperren. GWF - Wasser - Abwasser ATT Special 139(15): 42-46.

Wolf, A. T., J. A. Natharius, J. J. Danielson, B. S. Ward, \& J. K. Pender, 1999: International river basins of the world. Water Resource Development 15(4): 387-427.

WÜST, A., 1987: Ursprung und Größe von Mischungsprozessen im Hypolimnion natürlicher Seen. Dissertation, ETH Zürich, Switzerland.

Zielke, W., 1998: Modellierung, Kalibierung, Validierung. Dissertation, Mitteilungen BfG.

## A Talsperre Bautzen

Die statistische Auswertung der berücksichtigten Gütekriterien werden an ausgewählten Beipielen in Abschnitt 4.2 beschrieben. Hier sind die Boxplots aller Größen für Zufluss und Hauptsperre, unterschieden nach ihrer Weitergabe im Gütemodul als:

- Jahresmittel (Abb. A.1, A.2, A.3),
- Monatsmittel (Abb. A.4),
- empirisch abgeleitet (Abb. A.5, A.6) oder
- modelliert (Abb. A.7)
zusammengeführt.
Weiterhin dargestellt sind die abgeleiteten Übertragungsfunktionen (Abb. A.8), Ergebnisse der reduzierten SALMO Simulationen für zusätzliche Referenzjahre (Abb. A.9) sowie Boxplots der aggregierten Simulation mit ANN im Vergleich zur stochastischen Simulation mit SALMO (Abb. A.10).

Weitergabe als Jahresmittel


Abbildung A.1: TS Bautzen - Monatsboxplots K, Na und SO4, Epilimnion (schwarz), Hypolimnion (grau), $\mathrm{n}=$ Anzahl der Werte je Monat

## Weitergabe als Jahresmittel







Abbildung A.2: TS Bautzen - Monatsboxplots $\mathrm{Al}, \mathrm{Cl}$ und $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}$, Epilimnion (schwarz), Hypolimnion (grau), $\mathrm{n}=$ Anzahl der Werte je Monat

Weitergabe als Jahresmittel


Abbildung A.3: TS Bautzen - Monatsboxplots Mg und Ca, Epilimnion (schwarz), Hypolimnion (grau), n=Anzahl der Werte je Monat

Weitergabe als Monatsmittel


Abbildung A.4: TS Bautzen - Monatsboxplots pH , Mn und BSB5, Epilimnion (schwarz), Hypolimnion (grau), n=Anzahl der Werte je Monat

## Weitergabe als empirische Übertragungsfunktionen







Abbildung A.5: TS Bautzen - Monatsboxplots T, $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ und Chl - a, Epilimnion (schwarz), Hypolimnion (grau), $\mathrm{n}=$ Anzahl der Werte je Monat

## Weitergabe als empirische Übertragungsfunktionen





Abbildung A.6: TS Bautzen - Monatsboxplots NH4-N, NO3-N und NO2-N, Epilimnion (schwarz), Hypolimnion (grau), n=Anzahl der Werte je Monat

## Simulation mit einem Gütemodell



Abbildung A.7: TS Bautzen - Monatsboxplots O2, P - SRP und Phytoplankton, Epilimnion (schwarz), Hypolimnion (grau), n=Anzahl der Werte je Monat

## Empirische Übertragungsfunktionen



Abbildung A.8: TS Bautzen - Ableitungen von $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ in Abhängigkeit von $\mathrm{P}-\mathrm{SRP}$ und $\mathrm{Chl}-\mathrm{a}$ in Abhängigkeit von Phytoplankton

## Reduzierte Gütemodellierung

Tiefe (m)


| Legende |
| :---: |
| tägliche Eingangsdaten |
| _ - Epilimnion <br> - - Hypolimnion |
| monatliche Eingangsdaten |
| - Epilimnion <br> - Hypolimnion |

Tiefe (m)



Phytoplankton ( $\mathrm{mgFM} \mathrm{I}^{-1}$ )
P.SRP ( $\mathrm{mg} \mathrm{I}^{-1}$ )

P.SRP (mg lis


Phytoplankton ( $\mathrm{mgFM} \mathrm{I}^{-1}$ )

N.ges (mg ${ }^{-1}$ )

$\mathrm{O} 2\left(\mathrm{mg} \mathrm{l}^{-1}\right)$

N.ges (mg $\mathrm{l}^{-1}$ )

$\mathrm{O} 2\left(\mathrm{mg} \mathrm{l}^{-1}\right)$


Abbildung A.9: TS Bautzen - Simulation mit kompletter (täglicher) und reduzierter (monatlicher) Eingangsdatenmatrix für die Jahre 1996 und 1998

## Aggregierte Gütemodellierung - ANN

Epilimnion


Hypolimnion


Abbildung A.10: TS Bautzen - Gegenüberstellung der von stochastischen SALMOSimulationen (hell) mit dem Netzausgabe (dunkel). Boxplot von Median, Quartilen (Boxen), Minimum, Maximum (Striche) und Ausreißern (Punkte).

## B Talsperre Quitzdorf

Die statistische Auswertung der berücksichtigten Gütekriterien werden an ausgewählten Beispielen in Abschnitt 4.2 beschrieben. Hier sind die Boxplots aller Größen für Zufluss und Hauptsperre, unterschieden nach ihrer Weitergabe im Gütemodul als:

- Jahresmittel (Abb. B.1, B. 2 und B.3),
- Monatsmittel (Abb. B.4),
- empirisch abgeleitet (Abb. B.5, B.6) oder
- modelliert (Abb. B.7)
zusammengeführt.
Weiterhin dargestellt wurden die abgeleiteten Übertragungsfunktionen, Ergebnisse der reduzierten (Abb. B.8) SALMO Simulationen für zusätzliche Referenzjahre sowie Boxplots der aggregierten Simulation mit ANN mit und ohne Gedächtnis im Vergleich zur stochastischen Simulation mit SALMO (Abb. B.9).

Weitergabe als Jahresmittel


Abbildung B.1: TS Quitzdorf - Monatsboxplots K, Na und SO4, n=Anzahl der Werte je Monat

Weitergabe als Jahresmittel


Abbildung B.2: TS Quitzdorf - Monatsboxplots Al und Cl und $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}$, $\mathrm{n}=$ Anzahl der Werte je Monat

## Weitergabe als Jahresmittel



Abbildung B.3: TS Quitzdorf - Monatsboxplots Mg und $\mathrm{Ca}, \mathrm{n}=$ Anzahl der Werte je Monat

Weitergabe als Monatsmittel


Abbildung B.4: TS Quitzdorf - Monatsboxplots pH , Mn und BSB5, $\mathrm{n}=$ Anzahl der Werte je Monat

## Weitergabe als empirische Übertragungsfunktionen



Abbildung B.5: TS Quitzdorf - Monatsboxplots T, $\mathrm{P}_{\text {ges }}$ und $\mathrm{Chl}-\mathrm{a}, \mathrm{n}=$ Anzahl der Werte je Monat

## Weitergabe als empirische Übertragungsfunktionen







Abbildung B.6: TS Quitzdorf - Monatsboxplots NH4-N, NO3-N und NO2 - N, n=Anzahl der Werte je Monat

## Simulation mit einem Gütemodell





Abbildung B.7: TS Quitzdorf - Monatsboxplots O2, P - SRP und Phytoplankton, $\mathrm{n}=$ Anzahl der Werte je Monat

## Reduzierte Gütemodellierung



Abbildung B.8: TS Quitzdorf - Simulation mit kompletter (täglicher) und reduzierter (monatlicher) Eingangsdatenmatrix für die Jahre 1994 und 1999

## Aggregierte Gütemodellierung - ANN

ohne „Gedächtnis"


Abbildung B.9: TS Quitzdorf - Gegenüberstellung der von stochastischen SALMO-Simulationen (hell) mit dem Netzausgabe (dunkel). Boxplot von Median, Quartilen (Boxen), Minimum, Maximum (Striche) und Ausreißern (Punkte).

## C Parametrisierung von SALMO

Darstellung der für Modellanpassung modifizierten SALMO Parameter. Alle hier nicht benannten Parameter entsprechen der Standardeinstellung.

Tabelle C.1: Einstellungen der SALMO-Modellparameter; die mit * gekennzeichen Werte enstprechenden den Standarteinstellungen

| Parameter | Einheit | Steuerwort | TS Bautzen | TS Quitzdorf |
| :--- | :--- | :--- | :--- | :--- |
| Extinktionskoeffzient des <br> planktonfreien Wassers $m^{-1}$ Gewässer  <br> Spezieller Scenario- <br> Parameter für Hartwasser- <br> seen - KPSED $0,0^{*}$ | 0,05 |  |  |  |

Zoo- und Phytoplankton

| Phytoplanktongruppen <br> (Typen) | - | phyto1 | Oscillatoria, <br> Asterionella | Oscillatoria, <br> Scene- <br> desmus/ |
| :--- | :--- | :--- | :--- | :--- |
| Zooplanktonmortalitätsrate <br> bei $0^{\circ} \mathrm{C}$ | $\mathrm{d}^{-1}$ | MOMIN | 0,005 | $0,0015^{*}$ |
| Funktionsparameter (Stei- <br> gung) zur Beschreibung der | ${ }^{\circ} \mathrm{C} \mathrm{d}^{-1}$ | MOT | 0,002 | $0,006^{*}$ |
| T-abängigen Mortatilätsraten |  |  |  |  |$\quad$| Cyclotella |
| :--- |

Denitifikation am Sediment

| Startzeitpunkt | d im Jahr | NDSSTART | 0 | 60 |
| :--- | :--- | :--- | :--- | :--- |
| Endzeitpunkt | d im Jahr | NDSEND | 365 | 270 |
| Anteil der Photosynthese- <br> Energie für Denitrifikation | - | NFIX1 | $0,0001^{*}$ | 0,24 |
| Minimale Sauerstoffkonzen- <br> tration für Denitrifikation | $\mathrm{gO}_{2} \mathrm{~m}^{-3}$ | LINDEN | $1,0^{*}$ | 0,3 |
| Minimale Denitrifikatrionsra- <br> te bei $0^{\circ} \mathrm{C}$ | $\mathrm{gN} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$ | ANSFMIN | 0,0 | 0,0 |
| Maximale Denitrifikatrions- <br> rate | $\mathrm{mgN} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}$ | NDSMAX | 0,085 | 0,09 |
| Halbsättigungskonstante <br> Basis der Temperaturkorrek- <br> turfunktion <br> Steigung der Temperaturkor- <br> rekturfunktion <br> $\mathrm{mgN} \mathrm{L}^{-1}$ | $\mathrm{gN} \mathrm{m}^{-2} \mathrm{~d}^{-1}{ }^{\circ} \mathrm{C}$ | KNDS | 0,005 | 0,01 |

Phosphorrücklösung

| Quantifizierung der Phos- <br> phorrücklösung über sedi- <br> mentnahe N-Konzentration | - | nps fmode | - | Ja |
| :--- | :--- | :--- | :--- | :--- |
| Halbsättigungskonstante | $\mathrm{gO}_{2} \mathrm{~m}^{-3}$ | KAPSF | $1,25^{*}$ | 0,38 |
| Basis der Temperaturkorrek- <br> turfunktion | - | APSFT | - | 1,03 |

## D Datenübergabe an WBaIMo

Darstellung der für die einzelnen Gütekriterien an das Kernmodell übergebenen Werte.

Tabelle D.1: Parametrisierung Monatsmittel

| Monat | TS Bautzen |  |  | TS Quitzdorf |  |
| :---: | :---: | :---: | :---: | :---: | :---: |
|  | Epilimnion | Hypolimnion | Grundablass | Epilimnion | Grundablass |
| pH [-] |  |  |  |  |  |
| 1 | 7.789 | 7.789 | 7.689 | 7.801 | 7.8 |
| 2 | 8.003 | 8.003 | 7.901 | 8.391 | 8.315 |
| 3 | 8.316 | 8.316 | 8.157 | 8.126 | 8.08 |
| 4 | 8.822 | 8.641 | 8.44 | 8.335 | 8.244 |
| 5 | 8.245 | 7.738 | 7.484 | 8.252 | 7.882 |
| 6 | 8.35 | 7.499 | 7.307 | 8.332 | 7.637 |
| 7 | 9.032 | 7.861 | 7.542 | 9.312 | 8.569 |
| 8 | 9.312 | 8.372 | 7.85 | 9.143 | 8.782 |
| 9 | 9.078 | 9.078 | 8.738 | 8.668 | 8.518 |
| 10 | 8.376 | 8.376 | 8.339 | 8.571 | 8.551 |
| 11 | 7.974 | 7.974 | 7.924 | 8.073 | 8.046 |
| 12 | 7.867 | 7.867 | 7.864 | 7.951 | 7.88 |


| 1 | 2.929 | 2.929 | 1.38 | 3.45 | 3.10 |
| :---: | :---: | :---: | :---: | :---: | :---: |
| 2 | 3.434 | 3.434 | 2.63 | 4.05 | 2.75 |
| 3 | 5.256 | 5.256 | 4.752 | 4.17 | 4.42 |
| 4 | 5.603 | 4.741 | 3.563 | 2.85 | 4.86 |
| 5 | 2.767 | 1.983 | 1.558 | 2.81 | 3.03 |
| 6 | 2.824 | 1.758 | 1.405 | 3.38 | 3.11 |
| 7 | 3.95 | 2.79 | 2.291 | 2.80 | 3.31 |
| 8 | 4.931 | 3.832 | 3.762 | 2.80 | 4.62 |
| 9 | 4.075 | 4.075 | 3.752 | 2.58 | 4.00 |
| 10 | 2.847 | 2.847 | 2.62 | 6.54 | 3.45 |
| 11 | 2.177 | 2.177 | 1.99 | 3.78 | 3.54 |
| 12 | 2.225 | 2.225 | 2.12 | 3.94 | 2.54 |

$\mathrm{Mn}\left[m g L^{-1}\right]$

| 1 | 0.4072 | 0.4072 | 0.411 | 0.2191 | 0.2243 |
| :---: | :---: | :---: | :---: | :---: | :---: |
| 2 | 0.4384 | 0.4384 | 0.439 | 0.2403 | 0.27 |
| 3 | 0.2683 | 0.2683 | 0.274 | 0.2535 | 0.2613 |
| 4 | 0.2034 | 0.2095 | 0.2188 | 0.2064 | 0.21 |
| 5 | 0.1263 | 0.2426 | 0.3352 | 0.3323 | 0.352 |
| 6 | 0.2365 | 0.4535 | 0.6373 | 0.3989 | 0.3956 |
| 7 | 0.1648 | 0.6346 | 0.775 | 0.2688 | 0.2975 |
| 8 | 0.1689 | 0.2754 | 0.4168 | 0.3787 | 0.3867 |
| 9 | 0.2348 | 0.2348 | 0.2492 | 0.3754 | 0.3733 |
| 10 | 0.3139 | 0.3139 | 0.3258 | 0.315 | 0.305 |
| 11 | 0.4503 | 0.4503 | 0.4805 | 0.2851 | 0.2938 |
| 12 | 0.4503 | 0.4503 | 0.4805 | 0.1862 | 0.21 |

Tabelle D.2: Parametrisierung Jahresmittel; alle Konzentrationen in $\mathrm{mg} \mathrm{L}^{-1}$

|  | TS Bautzen |  |  | TS Quitzdorf |  |
| :---: | :---: | :---: | :---: | :---: | :---: |
| Güteparameter | Epilimnion | Hypolimnion | Grundablass | Epilimnion | Grundablass |
| $\mathrm{SO}_{4}$ | 68.79 | 68.95 | 68.41 | 89 | 89.35 |
| $\mathrm{Fe}_{\text {ges }}$ | 0.2641 | 0.2856 | 0.3244 | 0.06102 | 0.0765 |
| Cl | 29.57 | 29.49 | 28.95 | 37.26 | 36.73 |
| Al | 0.01832 | 0.0181 | 0.02222 | 0.03986 | 0.02727 |
| K | 4.396 | 4.415 | 4.413 | 8.599 | 8.623 |
| Na | 18.83 | 18.79 | 18.57 | 18.33 | 18.38 |
| Mg | 9.055 | 8.939 | 8.923 | 11.36 | 11.15 |
| Ca | 41.97 | 42.06 | 41.51 | 54.53 | 54.4 |

## Danksagung

Mein Dank gilt in besonderer Weise Prof. J. Benndorf. Seiner steten Unterstützung in sowohl praktischer als auch fachlicher Hinsicht verdanke ich die Entstehung dieser Arbeit. Vor allem schätze ich an ihm seine hilfreichen und ermutigenden Ratschläge zur rechten Zeit.

Bei Thomas Petzoldt möchte ich mich für die gute Zusammenarbeit während der Projektlaufzeit bedanken. Als meinen ersten Kollegen habe ich durch ihn wichtiges Handwerkszeug gelernt, sich gegenseitig unterstützend auf ein gemeinsames Ziel hinzuarbeiten. Seinem Wissen und seine Erfahrungen auf dem Gebiet der Modellierung und Programmierung verdanke ich, dass ich wichtige fachliche Hürden auf dem Weg zu dieser Arbeit nehmen konnte.

Meiner Freundin und Kollegin Susanne Rolinski gilt mein besonderer Dank. Ihr unermüdliches Anfeuern, Ermutigen und Korrekturlesen hat großen Anteil an der Entstehung dieser Arbeit.

Der Arbeitsgruppe Limnologie, der ich mich bis heute sehr verbunden fühle, möchte für die kollegiale Zusammenarbeit und offene Atmosphäre auch gegenüber fachfremden Problemen danken. In vielen Diskussionen konnte ich einen kleinen Einblick in die bis heute für mich spannende Welt der Limnologie gewinnen.

Bei Prof. B. Nixdorf und Prof. D. Borchardt bedanke ich mich für Ihre Bereitschaft zur kurzfristigen Begutachtung.

Prof. Ch. Bernhofer danke ich, dass er mir während der äußerst komprimierten Endphase den Rücken freigehalten und Zeit gegeben hat, meine Arbeit zum Abschluss zu bringen.

Meine Freunde und Kollegen haben mich in schwierigen Zeiten unermüdlich unterstützt. Für Ihren großen persönlichen Einsatz bin ich sehr dankbar.

Meinen Eltern, meinem Mann Christian und meiner Familie danke ich für die jahrelange Unterstützung und ihr Engagement während der letzten Wochen.


[^0]:    ${ }^{1}$ Fließ- und Standgewässer, dem Spreewald sowie diffuse und punktuelle Stoffeinträge aus dem Einzugsgebiet

[^1]:    ${ }^{1}$ Simulation by an Analytical Lake MOdel

[^2]:    ${ }^{1}$ Ein flaches künstliches Standgewässer im Spreeeinzugsgebiet, welches ebenfalls als Teilgewässer im Managementmodell berücksichtigt wird.

