

Mehrdimensionale Simulationen der Gewässergüte in Ästuaren - Aufbau und Überprüfung

Jens Wyrwa

Beim Aufbau eines mehrdimensionalen Simulations-Systems für die Gewässergüte von Ästuaren konnten durch ein Konzept der offline-Kopplung mittels Transportmatrizen Einsparungen bei der Erstellung des Simulationssystems und Verkürzungen der Simulationslaufzeiten erzielt werden. Zur Überprüfung der Approximationsgüte wird eine Methodenkombination eingesetzt, die eine differenzierte Aufklärung der Ursachen für Abweichungen zwischen Berechnungsergebnis und Messwert erlauben.

Stichworte: Gewässergüte, Ästuar, Aufbau Simulationssystem, Überprüfung Approximation, Hydroinformatik

1 Aufgabenstellung

Zentraler Parameter der Gewässergüte ist der Sauerstoffgehalt, der hauptsächlich von der im Wasser treibenden Pflanzenbiomasse bestimmt wird, deren Lebensbedingungen einer Vielzahl von Einflüssen unterworfen sind.

Durch die deutschen Nordsee-Ästuare führen wirtschaftlich bedeutsame Wasserstraßen. Güteprobleme in diesen Ästuaren stehen im Zusammenhang u. a. mit der Fahrrinntiefe. Da im Ästuar ein Nebeneinander von Fahrrinne, Nebenrinne und Wattfläche in einem Querschnitt auftritt, baut die Bundesanstalt für Gewässerkunde (BfG) z. Z. ihre bisherigen querschnittsgemittelten Simulationmöglichkeiten zu einem mehrdimensionalen System aus. Dieser Beitrag beschäftigt sich mit den Hydroinformatik-Aspekten dieses Ausbaus.

Die Bundesanstalt für Gewässerkunde (BfG) berät die Wasser- und Schifffahrtsverwaltung des Bundes u. a. in Fragen der Wasserqualität. Dazu gehört es, die Gewässergüte der Bundeswasserstraßen zu vermessen und zu dokumentieren, Ursachen für Güteprobleme aufzuklären und die Ausführungsverwaltung bei ihrer Tätigkeit in bezug auf die Gewässergüte zu beraten. Seit über 20 Jahren sind dabei auch numerische Modelle im Einsatz.

Die numerischen Modelle dienen zum Einen dazu, bei der Ursachenaufklärung ein quantitatives Systemverständnis zu entwickeln; d.h. erst wenn es gelingt, die gemessene Gewässergüte richtig zu modellieren, kann davon ausgegangen wer-

den, dass die beteiligten Prozesse auch in ihrer Größenordnung richtig beschrieben wurden. Zum anderen werden Modelle zur Prognose eingesetzt, um vorherzusagen, wie sich Eingriffe ins Gewässer auf die Güte auswirken.

2 Einführung Gewässergütemodellierung

Ein deterministisches Gütemodell wie QSim fasst im Wasser lebende Organismen zu sog. funktionalen Gruppen zusammen und modelliert sie als gleichmäßig im Wasser gelöste Konzentrationen. (Kirchesch und Schöl, 1999)

Als wichtigste Prozesse seien hier angesprochen: Sauerstoff wird von den im Wasser treibenden Algen produziert. Deren Wachstum wird vom Vorhandensein von Licht, Wärme und Nährstoffen limitiert; planktische und benthische Organismen konsumieren lebende Algen, Bakterien zersetzen abgestorbene Biomasse. Letztere beiden Prozesse sind entscheidend für die Abnahme des Sauerstoffgehalts im Wasser. Zudem findet ein Gasaustausch über die Gewässeroberfläche statt.

Zur Beschreibung dieser hier nur sehr grob skizzierten bio-chemischen Prozesse werden im Modell 70 planktische d.h. transportierte Konzentrationen benötigt. Die Prozesse sind in 16 Module untergliedert, welche 100 empirische Parameter verwenden.

3 System-Aufbau

3.1 Konzept

Zwei Besonderheiten zeichnet numerische Modelle zur Simulation der Gewässergüte aus:

- Sie werden, verglichen mit anderen IT-Werkzeugen der Gewässerplanung, nur von einem sehr kleinen Kreis von Experten eingesetzt. Mit der Entwicklung befassen sich an der BfG zwei Mitarbeiter.
- Für die Simulation der Gewässergüte ist es erforderlich, lange Zeiträume (mindestens ein Jahresgang) und große Gebiete (z.B. Elbe von Schmilka bis Cuxhaven) zu berechnen.

D. h. beim Aufbau eines Modellierungs-Systems muss in besonderem Maße darauf geachtet werden, existierende Komponenten zu verwenden und Computer-Ressourcen optimal zu nutzen.

Der Aufbau eines numerischen Werkzeugs zur mehrdimensionalen Gütesimulation geschieht in der BfG durch die Implementierung, Kopplung und Anpassung vorhandener Modelle und Module. Bei der Kopplung von Stoffumsatz und Stofftransport werden neue Wege beschritten.

Das bei den 1-D Simulationen bewährte Konzept der offline-Kopplung, d.h. der Trennung von Berechnung der Hydraulik und der Gewässergüte wird übernommen. Neu ist, dass die Kopplung nicht mehr mittels der Strömungsfelder (Verteilungen von Wasserstand und Strömungsgeschwindigkeit), wie im 1D-Modell stattfindet, sondern die im folgenden näher erläuterten Transportinformationen verwendet werden.

Die als hydraulische Treiber verwendeten Programme zur Simulation mehrdimensionaler Strömungsfelder im Gewässer (casu, SELFE und HAMSOM sind z. Z. im Gebrauch) verfügen bereits über Komponenten zur Lösung der Advektions-Diffusions-Gleichung, die sie für hydraulisch wirksame Wasserinhaltsstoffe (Salz, Suspensierte Sedimente) und für den Transport von Turbulenzgrößen von (2-Gleichungs-) Turbulenzmodellen benötigen.

In der Koppelung an ein Gewässergüte-Modell eröffnet dies die Möglichkeit, die Lösung der Advektions-Diffusions-Gleichung einzusparen indem die Transportinformation in Form von Matrizen übergeben werden. Im Gütemodell wird der Transport dann dadurch realisiert, dass die als Konzentrationsfelder modellierten Größen, welche die Gewässergüte beschreiben und als Vektoren vorliegen, mit diesen (schmalbandigen) Matrizen multipliziert werden. Das führt dazu, dass das Gütemodell das gleiche explizite numerische Verfahren verwendet. (Falls ein numerisches Schema allerdings einen Fluxlimiter zur Stabilisierung benötigt, müsste dieser auf der Seite des Gütemodells realisiert werden, da erst dort das Konzentrationsfeld, das transportiert wird, bekannt ist.)

Das folgende Schema skizziert den so erzeugten (gekoppelten) numerischen Algorithmus. Die Konzentration an einem Ort x im nächsten Zeitschritt ($t+\Delta t$) ergibt sich aus der Konzentration, die das betrachtete „Wassertröpfchen“ auf seiner Bahnlinie hatte, als es sich zum Zeitpunkt t noch am Ort x_{orig} befand (Advektion). Auf seinem Weg in diesem Zeitschritt hat es Konzentrationsänderungen erfahren infolge von Diffusion und infolge von Reaktion (Stoffumsatz).

Die gesamte Konzentrationsänderung wird im Gütemodell dann in einem fractional-step Verfahren ermittelt, indem zuerst der Stoffumsatz berechnet wird, dann die Diffusion und zum Schluss die Advektion. Letztere beide werden unter Zuhilfenahme der vom hydraulischen Treiber offline abgelegten Transportmatrizen berechnet. Der Stoffumsatz wird im Gütemodell selbst ermittelt. Dabei ist

es möglich, dass jeder fractional Step mit einem eigenen sub-Zeitschritt arbeitet; wobei QSim(3d) nur ganzzahlige Anzahlen an Subzeitschritten erlaubt.

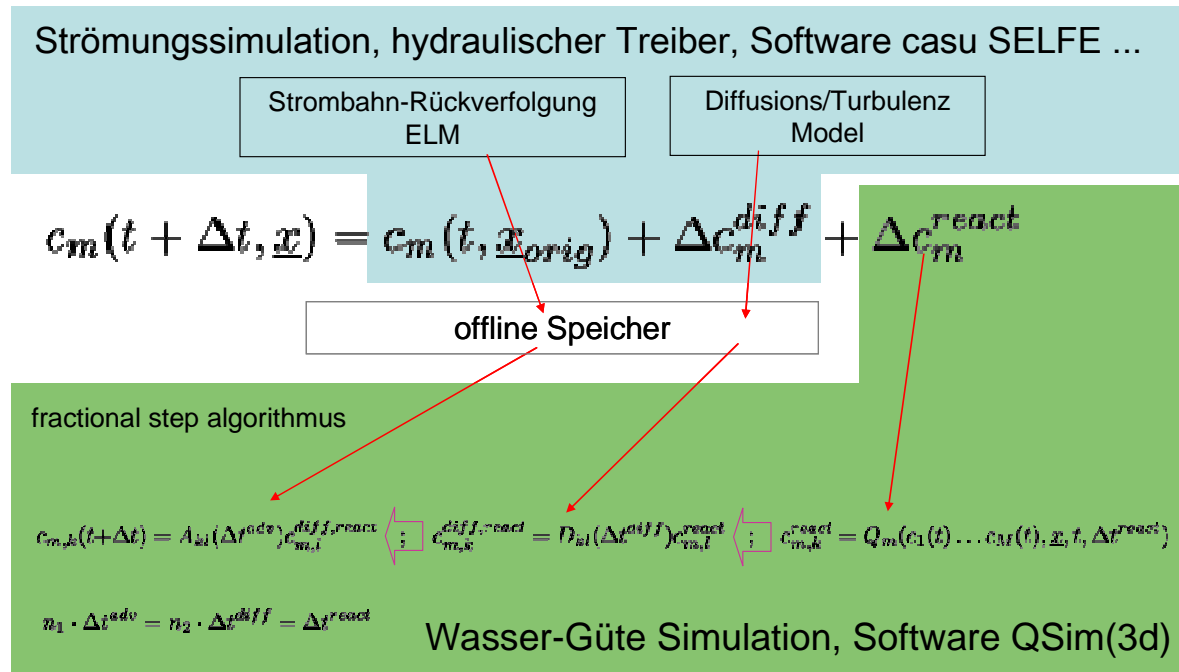


Abbildung 1: schematische Darstellung des gekoppelten Algorithmus

Die folgende Abbildung dient zur Illustration, wie das vorgenannte Konzept zum Aufbau von Qsim(3d) angewandt wird. Dabei sind das bewährte 1-D- Modell, links, dem in der Entwicklung befindlichen mehrdimensionalen, rechts, gegenübergestellt. Oben in blau die hydraulischen Treiber. QSim(1d) übernimmt von HYDRAX das Strömungsfeld und berechnet eine eigene Lösung der Advektions-Diffusions-Gleichung.

Der zentrale Bestandteil eines Gütemodells sind die Module, die den lokalen Stoffumsatz beschreiben. Z. B. der Verbrauch von Nährstoffen durch das Wachstum von im Wasser driftenden Algen. In einem deterministischen Gütemodell wie QSim werden diese Größen als im Wasser gleichmäßig verteilte Konzentrationen modelliert. Aber auch Prozesse wie der Gasaustausch mit der Atmosphäre werden als Stoffumsatz modelliert. Das an der Wasseroberfläche befindliche „Wassertröpfchen“, das natürlich einem Transport im Fließgeschehen des Gewässers unterliegt, erfährt lokal einen Zuwachs oder Abnahme von gelösten Gasen wie z. B. Sauerstoff oder Stickstoff.

Die als Fortran-Subroutinen organisierten Stoffumsetzungsmodule aus QSim(1d) werden in der 3d-Fassung im Original verwendet. D.h. das mehrdimensionale Modell wird aus derselben Programmquelle kompiliert wie das 1D-Modell.

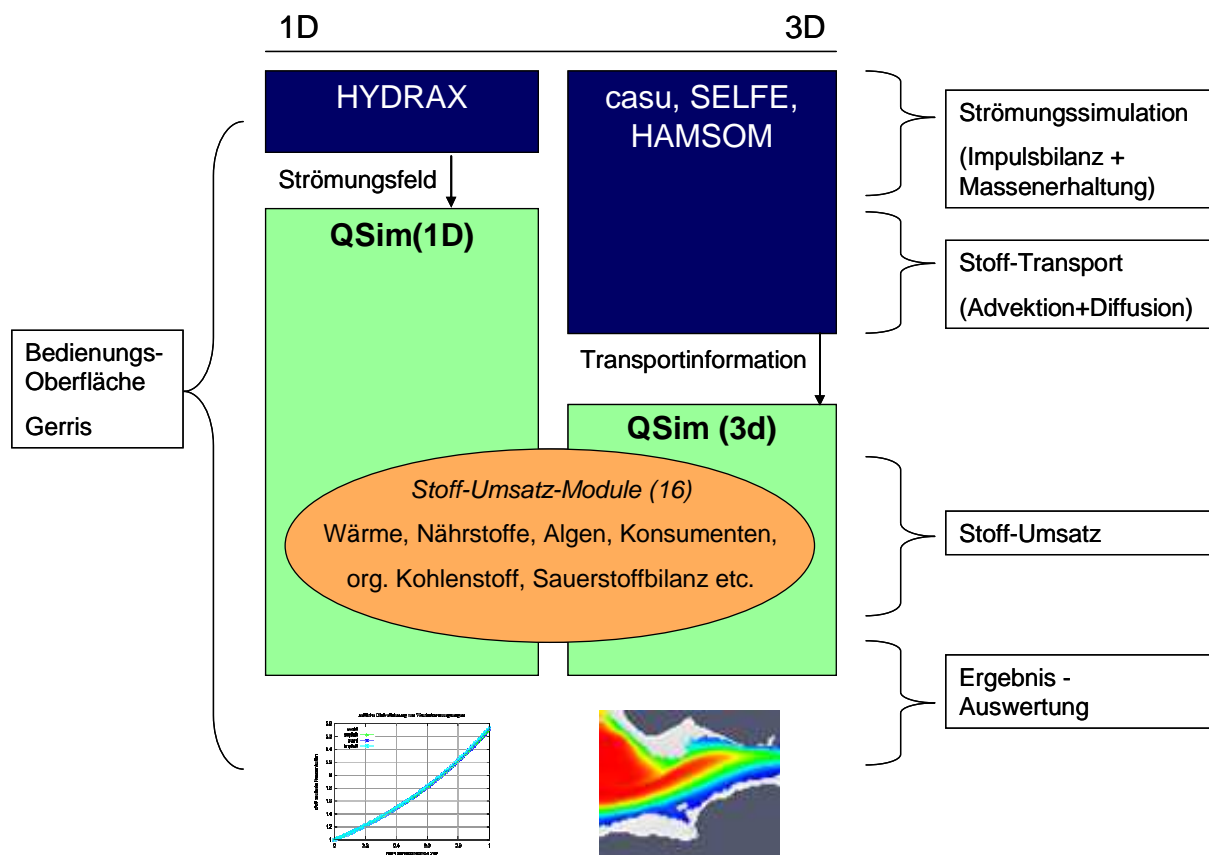


Abbildung 2: schematischer Aufbau ein- und mehrdimensionaler Gütemodell-Systeme

Die eigentlichen Programmierarbeiten zur Schaffung mehrdimensionalen Modells bestanden dann darin, die Verbindungen der oben besprochenen Komponenten zu schaffen, die Anbindungen an Randbedingungen und Benutzerschnittstelle herzustellen und die parallele Bearbeitung der Berechnungsvorgänge zu organisieren.

Ein großer Teil der aufgewendeten Arbeitszeit ist dabei in die Aufklärung und Dokumentation der Datenschnittstellen geflossen.

Parallel zur Erstellung der Berechnungssoftware wurde die Überarbeitung der graphischen Benutzeroberfläche in Auftrag gegeben, so dass auch bei der Bearbeitung von mehrdimensionalen Modellen, die bei den 1D-Modellen bewährten Abläufe angewendet werden können.

3.2 Ergebnisse

Die Übergabe der Transportmatrizen hat sich innerhalb weniger Tage codieren lassen. Dies ist ein Bruchteil des Aufwandes, der für die Neuschaffung eines kompletten Transportmoduls erforderlich gewesen wäre. Voraussetzung war, dass der Hydraulische Treiber quelloffen vorlag und dem Entwickler bekannt war.

Für Laufzeittests, wurde das Schreiben und Lesen der Transportmatrizen im hydraulischen Treiber und im Gütemodell abgeschaltet. Die Summe wurde als Anhaltspunkt für die Laufzeit eines online gekoppelten Modells genommen. Daraus ergibt sich, dass die Simulation eines Güte-Ereignisses (meistens ein Jahresgang), wenn das zugehörige hydraulische Ereignis vorab berechnet wurde, nur ein Drittel der Zeit benötigt, die ein online-gekoppeltes Modell für das erneute Mitlaufen der Hydraulik verbraucht. In der Summe eines Projektes, in dem typischerweise 2 hydraulische Ereignisse und 20 Güte-Ereignisse simuliert werden, beträgt die Rechnerlaufzeit bei der offline-Kopplung ca. die Hälfte.

4 Überprüfung Approximationsgüte

4.1 Konzept

Der Wert einer simulationsgestützten Beratungsleistung hängt vielfach nicht vom absoluten Maß der Approximationsgüte ab, sondern von der genauen Einschätzung der möglichen Abweichungen. Daher ist das Ziel der folgenden Darstellung auch nicht die Verkleinerung von Abweichungen, sondern deren Ermittlung.

Dieser Beitrag betrachtet Modellierung als dreistufiges Vorgehen:

1. Die mathematische Modellierung der physikalischen Vorgänge in Form partieller Differentialgleichungen,
2. der numerische Algorithmus zur näherungsweise Lösung dieser partiellen Differentialgleichungen und
3. die datentechnische Realisierung der Näherungslösung in Form von Software.

Die mathematischen Modellannahmen als erste Stufe der Modellierung lassen sich nur durch den Vergleich mit Naturmessungen überprüfen. Für einen solchen Vergleich muss sich aber eingrenzen lassen, in wie weit die evt. Abweichungen von den Stufen 2 und 3 erzeugt werden, womit sich die folgenden Abschnitte befassen.

Zuerst werden im folgenden Abschnitt zwei a-posteriori-Fehlerschätzer vorgestellt, die Einblicke in die Güte der numerischen Approximation erlauben. Im übernächsten Abschnitt wird dann ein Konzept der Verkettung von schematischen Testfälle als Möglichkeit zur Überprüfung der Codierung (3. Stufe) diskutiert.

4.2 a-posteriori-Fehlerschätzer zur Überprüfung der numerischen Näherung

Das eingesetzte ELM(Euler-Lagrange-Methode)-Verfahren zur Advektionsmodellierung berechnet von jedem Knoten ausgehend die Strombahn zurück an den Punkt, an dem sich das Fluid-Partikelchen zum vorangegangenen Zeitpunkt befunden hat. Dort wird dann mittels einer Interpolation aus den Knoten in der Umgebung des Strombahnursprungs die advektierte Konzentration ermittelt. Damit steht fest, welcher Knoten von welchen anderen Knoten wieviel Masse erhält. Damit kann dann a-posteriori auch umgekehrt verzeichnet werden, wieviel jeder Knoten an unterstromige Knoten abgegeben hat. In der nachstehenden Abbildung, die einen Ausschnitt aus dem Netz eines Teilmodells des Elbe-Ästuars zeigt, sind die Knoten entsprechend dem Verhältnis von abgegebener zu ursprünglich vorhandener Masse koloriert. Die grünen Knoten haben genau die Masse weitergegeben, die sie im vorangegangenen Zeitschritt repräsentierten. Die Roten haben mehr abgegeben als vorhanden und die Blauen weniger.

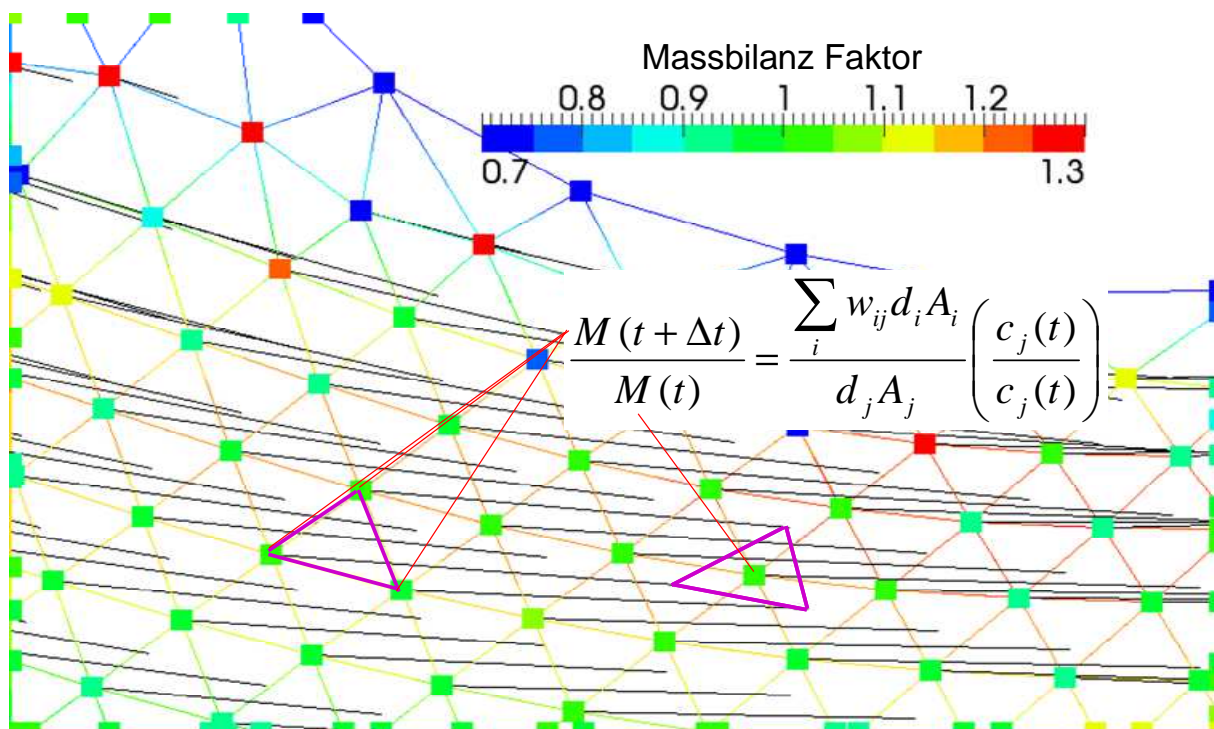


Abbildung 3: A-posteriori Fehlerschätzer Massenerhaltung

Daran ist nun zu erkennen, dass die Massenerhaltung in der gleichmäßigen Strömung der ebenmäßig diskretisierten Hauptrinne gut erfüllt wird, es sich aber in den flacheren, gröber aufgelösten Randbereichen Abweichungen ergeben.

Für ELM-Verfahren mit linearer Interpolation lässt sich die numerische Diffusivität abschätzen. Für unstrukturierte Netze ist sie kleiner als das Quadrat der Ortsschrittweite geteilt durch die Zeitschrittweite. Wird dies nun mit einem er-

proben Ansatz für die reale Diffusivität in tiefengemittelter Betrachtungsweise wie dem Elder-Ansatz verglichen, der die Diffusion als Faktor mal Sohlschubspannungsgeschwindigkeit mal Wassertiefe angibt, so läßt sich nach der Strömungssimulation die maximal mögliche numerische Diffusion zu einer realistischen Abschätzung ins Verhältnis setzen.

In der nachstehenden Abbildung wird wieder ein Ausschnitt aus einem Teilmodell des Elbe-Ästuars gezeigt. Die Darstellung läßt erkennen, dass die numerische Diffusion im Hauptstrom in der gleichen Größenordnung liegen kann wie die reale. In langsam durchflossenen flachen Seitenbereichen auch darüber.

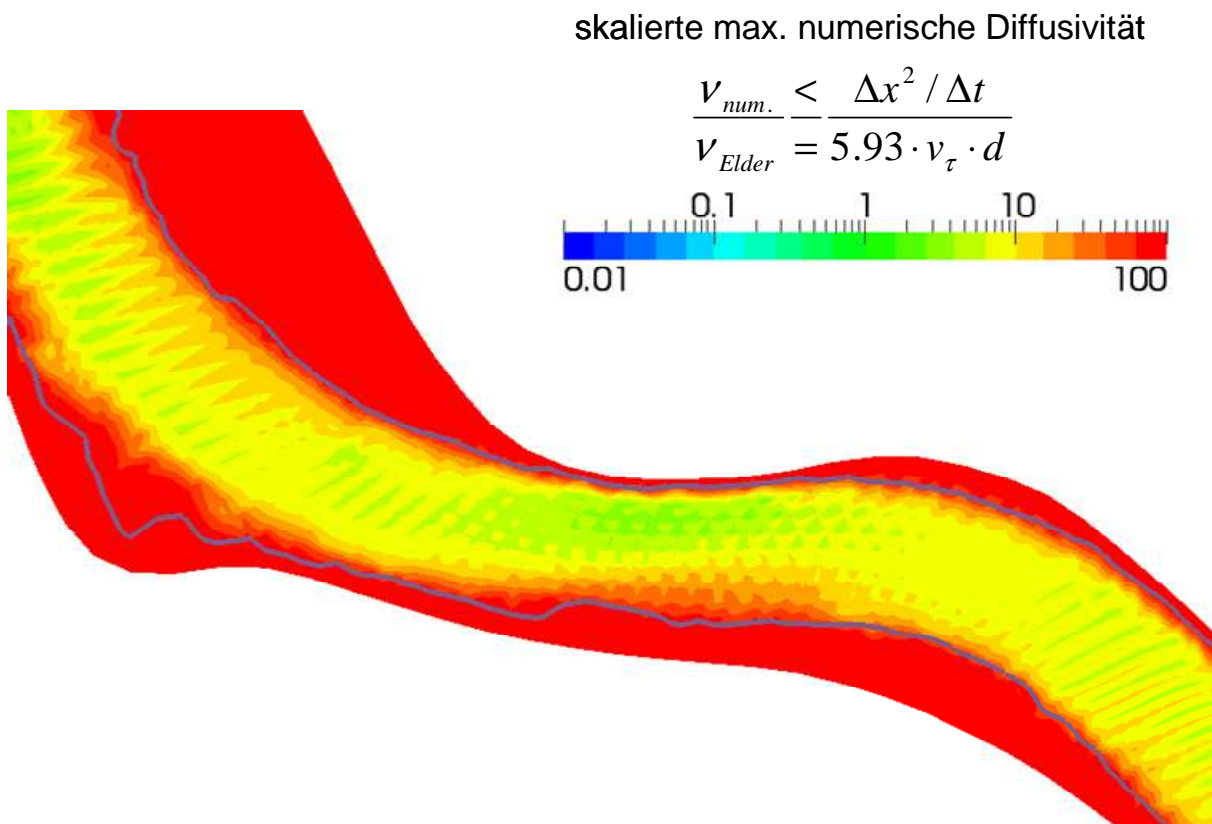


Abbildung 4: A-posteriori Fehlerschätzer numerische Diffusion

Dies erlaubt die Schlußfolgerung, dass dann, wenn biogeochemische Stoffumsetzungs-Prozesse in flachen Randbereichen große und scharfe Konzentrationsunterschiede erzeugen, Maßnahmen zur Verminderung der numerischen Diffusion ergriffen werden müssen; dies können feinere Diskretisierungen oder diffusionsärmere Advektions-Algorithmen sein.

4.3 Überprüfung der datentechnischen Realisierung

Bei der Überprüfung der datentechnischen Realisierung (Stufe 3) wurde auf den modularen Aufbau des Simulationssystems zurückgegriffen. Da die Funktion

des Gesamtsystems sich nicht anhand eines Testfalles umfassend klären lässt, wurde die Aufgabe in Teile zerlegt und der Versuch unternommen, zu zeigen, dass das einzelne Modul im Kontext des Systems richtig funktioniert.

„Keine Rückwirkung“ Am einfachsten lassen sich Module testen, die nicht von anderen abhängig sind.

„Isolation durch 2 Testfälle“ Zwei verschiedene analytische Testfälle werden so konstruiert, dass eine Komponente einmal einen Beitrag zum Ergebnis leistet, im anderen Testfall ist sie nicht aktiv. Daraus, dass beide numerischen Berechnungen mit den Erwartungen an den Algorithmus übereinstimmen, wird dann geschlossen, dass diese Komponente korrekt implementiert wurde. (Wyrwa 2003)

„Abschalten“ Einige Module lassen sich nur überprüfen, wenn andere Module abgeschaltet werden. Der Eingriff in die Software ist selbst fehleranfällig, weshalb dies eine weniger sichere Testmethode darstellt.

„Testumgebung“ Einige sehr stark verknüpfte Module, lassen sich nur dann testen, wenn das Verhalten der mit ihnen zusammenwirkenden Module überbrückt wird. Die so codierten Testumgebungen sind der unsicherste Fall in der Überprüfung.

Die nachstehende Tabelle listet beispielhaft auf, welche Strategie bei welchen Modulen angewendet wurde. Alle schematischen Tests wurden basierend auf dem Strömungsfeldes eines Kreisgerinnes getestet, weil dann der Transportbaustein mitlaufen kann, ohne einen Beitrag zur Konzentrationsänderung abzugeben.

Modul	Keine Rückwirkung	Isolation mittels 2 Testfällen	Abschalten	Testumgebung
Temperaturbaustein	x			
Zehrung organischer Kohlenstoff			x	
Sauerstoffbilanz			x	
Nährstoffe N, P, Si				x
ph-Wert		x		

Hier soll nicht der Eindruck erweckt werden, dass ein Weg gefunden worden wäre, die Fehlerfreiheit von Software mathematisch exakt nachzuweisen. Auch gelingt kein Nachweis völliger Lückenlosigkeit des Testschemas. Das geschilderte Vorgehen hat sich aber in der Fehlerdetektierung bei der Programmentwicklung bewährt.

5 Resümee

Nachdem seit Jahresanfang ein lauffähiges System zu Testzwecken zur Verfügung steht, läßt sich schlußfolgern, dass durch das hier angewandte Erstellungs-Konzept die erwarteten Einsparungen beim Entwicklungsaufwand realisiert werden konnten.

Erste Laufzeittests belegen die durch die offline-Kopplung erzielbaren Laufzeitvorteile.

Die eingesetzten a-posteriori-Fehlerschätzer erlauben Einsichten in die Güte der numerischen Approximation, die sich in Empfehlungen bezüglich Diskretisierung und Verfahrensauswahl umsetzen lassen.

Der Wert der hier angewandten Testschemata zur Überprüfung der Implementierung einzelner Komponenten wird sich in der jetzt anstehenden Praxis-Erprobung des Gesamtsystems erweisen.

6 Ausblick

Zum einen scheint ein Wandel des Berufsfeld des Hydroinformatikers im Gange zu sein. Der Weg geht offensichtlich weg vom Einzelentwickler hin zum Komponenten-Entwickler und/oder Systemintegrator, der in interdisziplinären Teams tätig ist. Bei diesem Wandel des Tätigkeitsfeldes bekommen Modularisierung, Dokumentation und systematische Erprobung ein immer größeres Gewicht.

Zum anderen werden die Vorteile, die sich durch große Anwender- und Nutzer-Gemeinschaften erzielen lassen, bei komplexen Modellierungs-Systemen immer offensichtlicher. Open-source-communities sind bewährte Einrichtungen um ortsunabhängig und institutsübergreifend Anwendungs- und Entwicklungsarbeiten in Bezug auf numerische Modelle zu verbinden.

7 Literatur

Casulli, V.; Cheng, R.T. (1992) Semi-implicit finite difference methods for three-dimensional shallow water flow , Int. J. Num. Meth. Fluids, Vol. 15, pp 629-648

Kirchesch, V. & A. Schöl (1999) Das Gewässergütemodell QSim - Ein Instrument zur Simulation und Prognose des Stoffhaushaltes und der Planktondynamik von Fließgewässern. - Hydrologie und Wasserbewirtschaftung, 43: 302-309.

Wyrwa, J (2003) Turbulenzmodellierung für stabil dichtegeschichtete Strömungen bei der Simulation des Transports von kohäsiven Sedimenten in Ästuaren, Diss. TU Berlin

Autor:

Dr.-Ing. Jens Wyrwa

Bundesanstalt für Gewässerkunde

Referat U2, ökologische Wirkungszusammenhänge

Am Mainzer Tor 1

56068 Koblenz

Tel: +49(0)261 1306-5254

E-Mail: wyrwa@bafg.de