

Gholamreza Shiravani & Andreas Wurpts

## PLAWES

Abschlussbericht



## Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung .....	5
1.1	Problemstellung.....	5
1.2	Zielsetzung .....	6
2	Hydrodynamisches Modell .....	7
2.1	Aufbau des hydrodynamischen Modells .....	7
2.2	Randsteuerung .....	8
3	Kalibrierung und Validierung des hydrodynamischen Modells .....	12
4	Kalibrierung und Validierung des morphodynamischen Modells .....	16
5	MP-Transportmodellierung.....	20
5.1	Aufbau des MP-Transportmodells .....	20
5.2	Kalibrierung und Validierung des MP-Transport-Modells .....	25
6	Zusammenfassung und Ausblick .....	29
7	Literatur.....	30

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1: Rechengitter des Untersuchungsgebietes mit Beprobungsorten (gelbe Symbole). .....	7
Abb. 2.2: Vertikaler Längsschnitt durch das Rechengitter entlang der tiefen Rinne der Weser. ....	8
Abb. 2.3: Modellumriss, Tiefenverteilung im Modellgebiet und seeseitiger Modellrand (weiß). Dargestellt ist nur der seeseitige Teil des Gebiets. Flussaufwärts erstreckt sich das Modell bis zum Weserwehr in Bremen-Hemelingen. ....	9
Abb. 2.4: Modellkaskade (Nesting); CSM: Continental Shelf Modell (Verboom et al., 1992), DBM: Deutsche Bucht-Modell (WL Delft Hydraulics 1997) und JWM: Jade-Weser-Modell (Hartsuiker, 2003 ; Knaack et al. 2006). (die roten Linien zeigen die entsprechenden dynamisch eingesteuerten Modellränder). ....	9
Abb. 2.5: Abflusszeitreihe der Weser am Pegel-Intschede für den hydrodynamischen Validierungszeitraum. ....	10
Abb. 2.6: WSV-Pegel im Untersuchungsgebiet (rot), die für die hydrodynamische Kalibrierung des Modells herangezogen werden.....	11
Abb. 3.1: Kalibrierung und Validierung des hydrodynamischen Modells anhand des gemessenen Wasserstandes bei den Pegeln in Bremerhaven (Bhv), Brake und Oslebshausen.....	13
Abb. 3.2: Validierung des hydrodynamischen Modells anhand des gemessenen Salzgehaltes an den Pegeln in Bremerhaven (Bhv) und Nordenham im Bereich der ästuarinen Trübungszone (MTZ) .....	14
Abb. 3.3: Kalibrierung und Validierung des hydrodynamischen Modells anhand des gemessenen Wassertemperatur bei den Pegeln in Bremerhaven (Bhv) und Nordenham in der Maximum Trübungszone(MTZ).....	15
Abb. 4.1: Prozentualer Anteil des Feinsediments im Bodenmodell für das Modellgebiet Tideweser.....	17
Abb. 4.2: Kalibrierung und Validierung des morphodynamischen Modells anhand des gemessenen Schwebstoffkonzentrationen bei den Messstellen in Bremerhaven (Bhv) und Robensüdsteert(Rsst).....	18
Abb. 4.3: Modellergebnisse für die Sinkgeschwindigkeit von PE – Partikeln in St. 34 (vor Bhv. WK 66) unter Berücksichtigung der Feinsedimentinteraktion (Aggregatbildung) und Biofouling.....	19
Abb. 4.4: Exemplarische Modellergebnisse für die berechnete Feinsedimentkonzentration an St. 34 (vor Bhv. WK 66) zur Verdeutlichung des Zusammenhangs mit der MP-Sinkeschwindigkeit.....	19

Abb. 5.1: MP-Quellen im Untersuchungsgebiet: Kläranlagen (rote Symbole) und atmosphärische Deposition (blaue Symbole), die als punktförmige MP-Quellen und diffuse MP-Quellen berücksichtigt werden. Hinzu kommt der Zufluss über das Weserwehr in Bremen-Hemelingen.....	21
Abb. 5.2: Stationen zur Messung der MP-Last aus der atmosphärischen Deposition (Modifizierte Abb. von Sarmite Kernchen, AP. 2, Universität Bayreuth) .....	21
Abb. 5.3: Windrose für die MP-Last aus der atmosphärischen Deposition, die jeweilige schwarze Linie zeigt die lokale Ausrichtung des Weserufers .....	22
Abb. 5.4: Messwerte für MP-Fraktionen $>500\mu\text{m}$ (links) und $<500\mu\text{m}$ (rechts) aus Mintenig et al. (2017) für ausgewählte KA entlang Tideweser und Jade. ....	23
Abb. 5.5: Abgeschätzte MP-Konzentrationen als Eingaben für das MP-Modell; MP-Fraktionen $>500\mu\text{m}$ .....	24
Abb. 5.6: Abgeschätzte MP-Konzentrationen als Eingaben für das MP-Modell; MP-Fraktionen $<500\mu\text{m}$ .....	24
Abb. 5.7: Abgleich der Modellergebnisse (blau) mit den gemessenen MP-Konzentrationen aus der Pyrolyse GC/MS (rot) für MP $<500\mu\text{m}$ . Zur Lage der Stationen siehe Abb. 2.1.....	25

## **Tabellenverzeichnis**

Tabelle 1: Modellergebnisse für MP( $<500\mu\text{m}$ )-Konzentrationen im Vergleich zu den Messwerten. ....	28
--	----

# 1 Einleitung

## 1.1 Problemstellung

Mikroplastik (MP, Partikel  $< 5$  mm) wird durch Wind/Strömung/Seegang transportiert. Als MP-Quellen die mittelbar in die Flüsse eingetragen werden, kommen u.a. die in der Landwirtschaft verwendeten Klärschlämme, Reifenabrieb, und der Abfluss von Kläranlagen in die Vorflut in Betracht. MP-Partikel können wegen ihrer geringen Größe von den Lebewesen im Wasserkörper aufgenommen werden. Für oft tödliche Verdauungsprobleme verschiedener Arten konnten direkte Verbindungen zu im Körper der betroffenen Lebewesen nachgewiesenem MP belegt werden. Außerdem verfügt MP über eine sehr große spezifische Oberfläche, die eine hohe Schadstoffaufnahmefähigkeit zur Folge hat.

Die Modellierung von MP-Transport und -Ausbreitung kann dabei helfen, die entsprechenden Transportmechanismen und Aggregationsbereiche besser zu verstehen. Im Gegensatz zur umfangreichen Literatur über die physikalischen Methoden zur Erkennung von MP gibt es kaum numerische Modelle, die seinen Transport und – mit Blick auf Ästuare - die Wechselwirkung mit anderen SPM (Suspendierte Partikuläre Materialien) abbilden können.

Da das gesamte System aus unterschiedlichen Medien (Fluid mit suspendierten partikulären Substanzen) besteht, sind verschiedene Formulierungen für deren Impulserhaltungs-/Massenerhaltungsgleichungen unter Berücksichtigung Ihrer Wechselwirkungen möglich. Dazu gibt es drei Diskretisierungsansätze: (i) Lagrangesche-Lagrangesche (ii) Lagrangesche-Eulersche (iii) Eulersche-Eulersche.

Der Lagrangesche-Lagrangesche Ansatz berücksichtigt die Medien als begrenzte, diskrete Anzahl von Partikeln, deren Impulsaustausch durch Interaktion mit der Umgebung (andere Partikel, Wand) erfolgt. Die Wechselwirkungen zwischen den Medien werden hierbei zwangsläufig vereinfacht in der Berechnung berücksichtigt. Das Festmedium übernimmt die Geschwindigkeit des tragenden Mediums und seine Bahn wird durch Integration der Geschwindigkeit über die Zeit bestimmt. Aus Rechenzeitgründen ist die Anzahl der Partikel i. A. stark limitiert, was einerseits die Ausdehnung des Untersuchungsgebietes und vor allem die realistische Berücksichtigung der Partikelinteraktion begrenzt. Insbesondere für ein regionales Modell, mit Größe von  $1000 \text{ km}^2$  ist eine Lagrangesche Diskretisierung beider Medien nicht sinnvoll möglich.

Dieses Problem liegt ebenfalls beim gemischten Lagrange-Eulerschen Ansatz vor, insbesondere wenn der Transport in der 3.Dimension bzw. über die Wassertiefe berücksichtigt werden muss.

In der vollständig Eulerschen Form werden beiden Medien als Kontinuum berücksichtigt und die Verteilung des partikulären Stoffes (MP) wird als Konzentration des transportierenden Mediums (Wasser) durch gekoppelte Impulserhaltungs- und Advektions-Diffusions-Gleichungen beschrieben. Die vorgenannten Nachteile der Lagrangeschen Verfahren entfallen auf diese Weise. Darüber hinaus können alle drei Dimensionen des Mediums konsistent in der Modellierung berücksichtigt werden. Aus diesen Gründen wurde in PLAWES der Eulersche-Eulersche Ansatz gewählt.

Die zweite wichtige Voraussetzung eines Modells zur Abbildung des Transports einer gelösten oder suspendierten Masse ist deren Erhaltung auch über lange Berechnungszeiträume (Massenkonsistenz). Dieser insbesondere für Eulersche Modelle relevante Aspekt erfordert geeignete Modellformulierungen für die räumliche und zeitliche Integration (u.a. FV-Diskretisierung, TVD-Schemata für Advektion und Zeitintegration höherer Ordnung). Dazu soll das Modell in jedem Zeitschritt die transportierte Masse einer Rechenzelle mit den Flüssen über die Ränder abgleichen.

## 1.2 Zielsetzung

Dieses Konzept ist bereits im Wasserqualitätsmodul (D-Water Quality bzw. DELWAQ, Del-ares) implementiert, das allerdings auf Nährstoffbilanzen fokussiert und nicht direkt auf den MP-Transport angewendet werden kann.

Das DELWAQ-Modul fungiert hierbei als Postprozessor zum Ästuarhydrodynamik-Modul Delft 3D-Flow. DELWAQ ist als eine Art Rahmenwerk und Funktionsbibliothek formuliert, die vom Benutzer frei erweitert werden können. Aus diesen Gründen wurde DELWAQ als Werkzeug für die Implementierung des MP-Transportmodells ausgewählt.

DELWAQ liegt als „open-source“-Software vor, so dass die bestehenden Ansätze modifiziert/weiterentwickelt werden können, beispielsweise die Implementierung zusätzlicher physiko-chemischer Prozesse, wie die Wechselwirkung mit Sediment, Biofouling, Salzwasser oder auch Fragmentierung durch UV-Strahlung und Verwitterung.

Das Ziel in diesem Teilprojekt im Rahmen von PLAWES ist der Aufbau ein MP-Transportmoduls und dessen Kalibrierung bzw. Validierung. Die nachfolgenden Eigenschaften des MP-Transports sollen hierbei berücksichtigt werden:

- I.** Massenkonsistenter Transport verschiedener MP-Fraktionen unterschieden nach
  - *MP-Dichte* und
  - *Partikelgröße*
- II.** Formulierungen für die *MP-Sinkgeschwindigkeit/Auftrieb* nach
  - MP-Dichte
  - Partikelgröße
  - Berücksichtigung von *Biofouling* nach Kooi et al. (2017)
  - Berücksichtigung der *MP-Feinsediment Wechselwirkungen*
- III.** Ablagerung/Suspension/Resuspension basierend auf einer Formulierung zu Bewegungsbeginn (krit. Sohlschubspannung)
- IV.** Eintrag von MP ins System aus punktförmigen Quellen (Kläranlagen) sowie diffusen Quellen (atmosphärische Deposition)

Entsprechend der Dichte und Partikelgröße werden derzeit acht MP-Polymere für 2 Partikelfraktionen (größer/kleiner 500µm) berücksichtigt. Es handelt sich entsprechend der für das Modellgebiet analysierten Proben um (Polyethylen (PE), Polypropylen (PP), Polystyrol (PS), Polyvinylchloride(PVC), Polyurethane (PUR), Polyethylen terephthalate (PET), Polycarbonate (PC), Polymethylmethacrylat (PMMA)). Diese Klassifizierung kann bei Bedarf bzw. Vorliegen weiterer Daten erweitert werden.

Aufgrund der vorgenannten Prozesse und Interaktionen werden innerhalb des Modellansatzes neben der Hydrodynamik ein vollständig gekoppeltes morphodynamisches Modell

sowie Transportgleichungen für Salz, Temperatur und Schwebstoffe berechnet. Für das Biofouling wird zudem eine vereinfachtes Algenmodell (Diatomeen) betrieben.

## 2 Hydrodynamisches Modell

### 2.1 Aufbau des hydrodynamischen Modells

Zur Berücksichtigung der baroklinen Effekte in Ästuaren und ihren Auswirkungen auf Schwebstofftransport und Turbulenz in der Wassersäule wurde ein bereits bestehendes zweidimensionales Modell für den Jade-Weser-Bereich (Hartsuiker, 2003, Knaack et al., 2006) in ein dreidimensionales (3D) hydrodynamisches Modell weiterentwickelt (Shiravani et al., 2023). Das Modell besteht aus 68216 Rechenzellen und 10 vertikalen Schichten. Abb. 2.1 zeigt die Oberfläche des Rechengitters und Abb. 2.2 das vertikale Gitter (sigma-Koordinaten) des hydrodynamischen Modells. Um MP in der Nähe der Wasseroberfläche mit einer höheren Auflösung zu modellieren, da die dominanten MP, PE und PP leichter als Wasser sind, wurden die vertikalen Auflösung in der Nähe der Oberfläche erhöht. Ebenso wurde die Gitterauflösung in der Nähe der Gewässersohle erhöht, da die Resuspension der abgesunkenen MP eine wichtige Quelle für MP ist und hier aufgrund der Sohlreibung auch die vertikalen Gradienten des Strömung am größten sind.

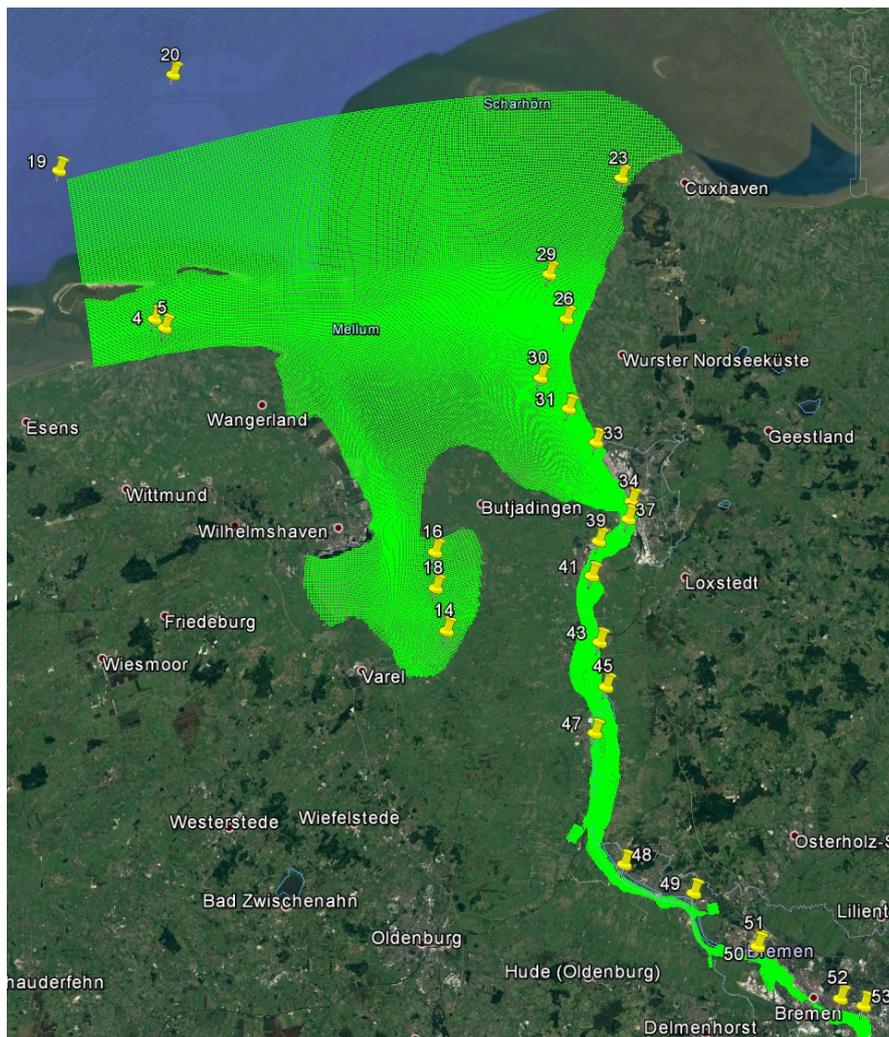


Abb. 2.1: Rechengitter des Untersuchungsgebietes mit Beprobungsorten (gelbe Symbole).

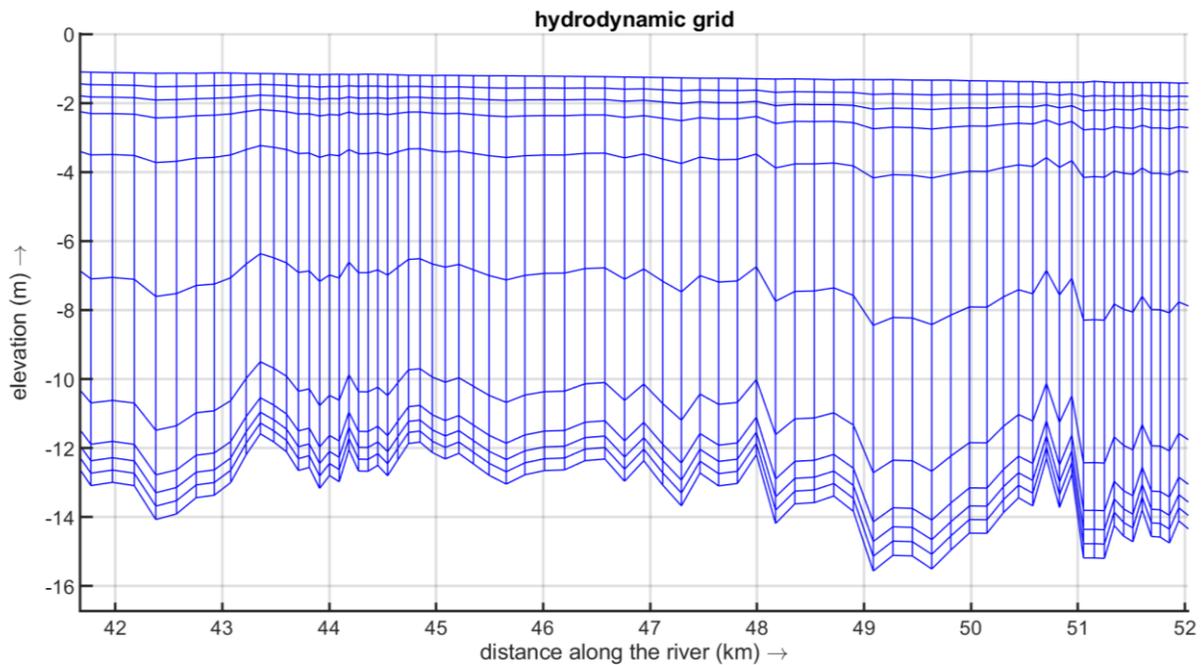


Abb. 2.2: Vertikaler Längsschnitt durch das Rechengitter entlang der tiefen Rinne der Weser.

## 2.2 Randsteuerung

Offene Modellränder bestehen am seeseitigen Rand und am Weserwehr in Bremen, wo der Oberwasserabfluss der Weser eingesteuert wird. Abb. 2.3 zeigt den seeseitigen Rand des Modells. Die Zeitreihe für Strömung und Wasserstand für jede Rechenzelle innerhalb des offenen See-Randes wird durch eine Modellkaskade (Nesting-Verfahren) aus übergeordneten Modellen ermittelt und eingesteuert.

Abb. 2.4 zeigt die Modellkaskade, wobei die Auflösung der Rechengitter in Richtung Untersuchungsgebiet zunimmt. Die Ergebnisse des übergeordneten Modells werden als Randwerte für das Jade-Weser-Modell verwendet. Die horizontale Auflösung des Untersuchungsgebiet variiert zwischen 20m im Ästuar und 400 m im Küstenvorfeld.

Die Randwerte aus den nachfolgend beschriebenen Quellen liegen in unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Auflösungen vor und werden entsprechend auf das Modellgitter bzw. den Rechenzeitschritt interpoliert. Der Modellzeitschritt beträgt 3 Sekunden.

Die verwendete Wasserstands-Datei für die Pegel innerhalb des Untersuchungsgebietes wurden über Pegelonline (<https://www.pegelonline.wsv.de/gast/start>) von der WSV (Wasserstraßen- und Schifffahrtsverwaltung des Bundes) bezogen. Abb. 2.6 zeigt die Pegel, an denen der Wasserstand für die Kalibrierung des Modells verwendet wird.

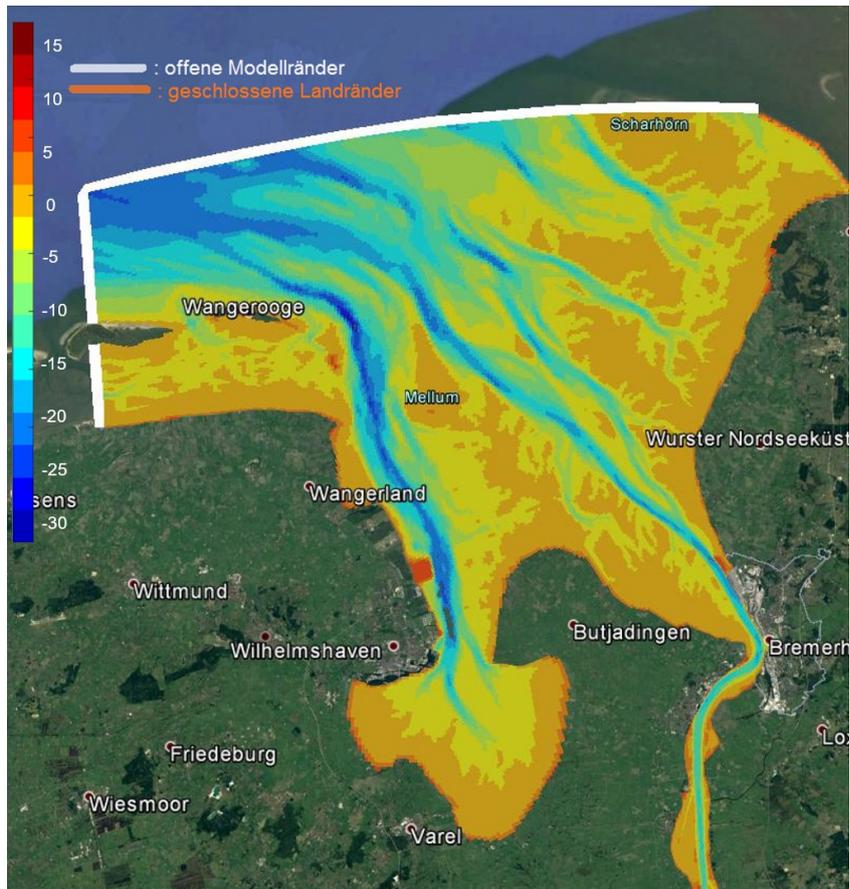


Abb. 2.3: Modellumriss, Tiefenverteilung im Modellgebiet und seeseitiger Modellrand (weiß). Dargestellt ist nur der seeseitige Teil des Gebiets. Flussaufwärts erstreckt sich das Modell bis zum Weserwehr in Bremen-Hemelingen (nicht abgebildet).

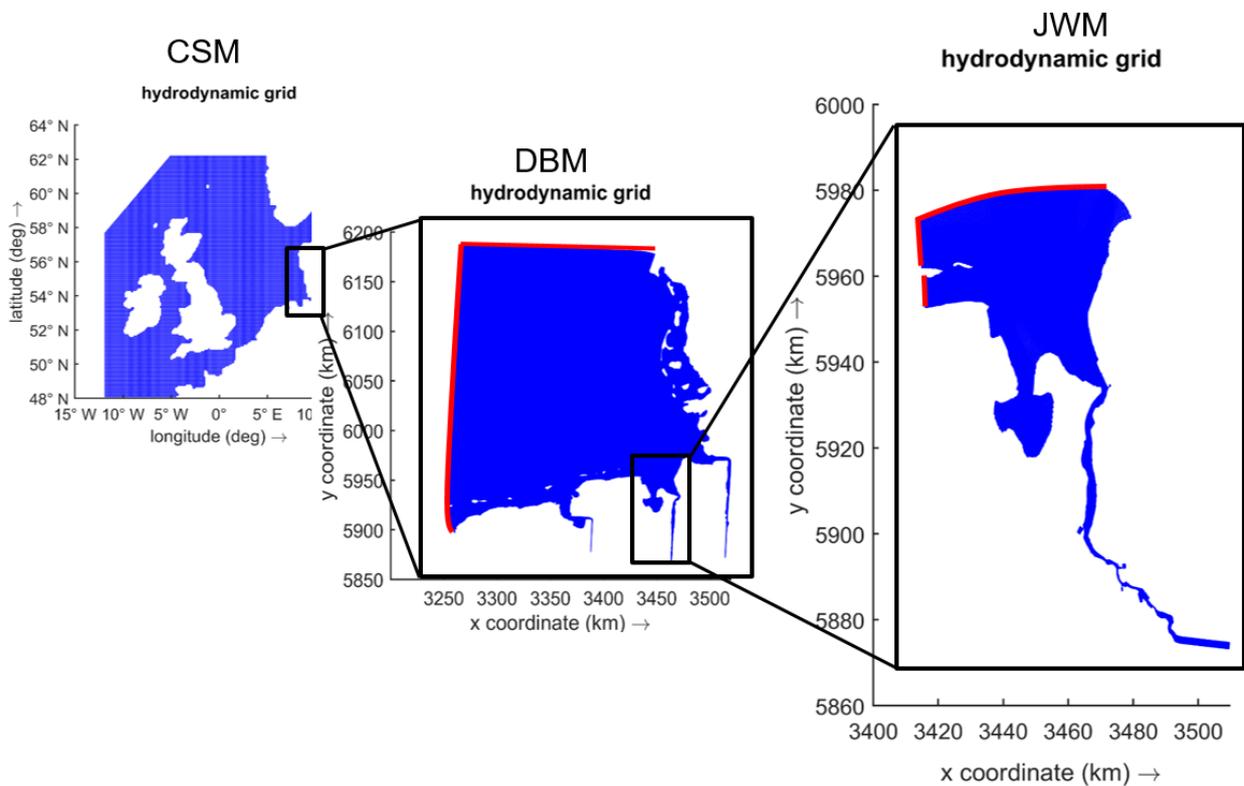


Abb. 2.4: Modellkaskade (Nesting); CSM: Continental Shelf Modell (Verboom et al., 1992), DBM: Deutsche Bucht-Modell (WL|Delft Hydraulics 1997) und JWM: Jade-Weser-Modell (Hartsuiker, 2003 ;

Knaack et al. 2006). (die roten Linien zeigen die entsprechenden dynamisch eingesteuerten Modellränder).

Der binnenlands gelegene offene Rand des Modells wird durch die gemessenen und extrapolierten Durchflussdaten des Pegel Intschede gesteuert. Abb. 2.5 zeigt den Durchfluss der Weser am Pegel Intschede. Die Weser hat ein Einzugsgebiet von 37.718 km<sup>2</sup> beim Pegel Intschede (<https://www.fgg-weser.de/die-weser-und-ihr-ezq/hydrologie>). Das Maximum des Durchflusses der Weser ( $Q_{\max}(\text{m}^3/\text{s})$ ) beträgt 1120 (m<sup>3</sup>/s) (07. Januar) und das Minimum ( $Q_{\min}(\text{m}^3/\text{s})$ ) ist 227 (m<sup>3</sup>/s) (03. März) in den ersten vier Monaten des Jahres 2018.

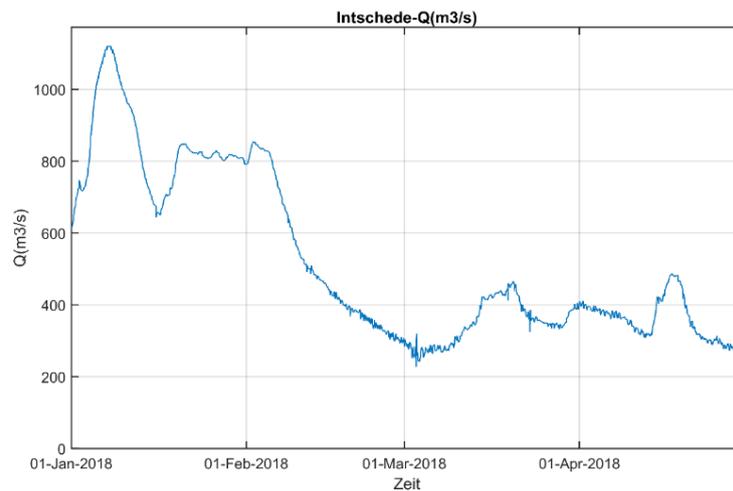


Abb. 2.5: Abflusszeitreihe der Weser am Pegel-Intschede für den hydrodynamischen Validierungszeitraum.

Die Windgeschwindigkeit sowie Windrichtung und Luftdruck als Randbedingung für die gesamte Kaskade wurden aus Daten des DWD Modells ICON ermittelt ([https://www.dwd.de/DE/forschung/wettervorhersage/num\\_modellierung/01\\_num\\_vorhersagemodelle/icon\\_beschreibung.html](https://www.dwd.de/DE/forschung/wettervorhersage/num_modellierung/01_num_vorhersagemodelle/icon_beschreibung.html)).

Windgeschwindigkeit und Windrichtung werden orts- und zeitvariabel für das gesamte Untersuchungsgebiet eingesteuert. Die Winddaten haben eine räumliche Auflösung von 0.25 x 0.25 Bogenminuten und eine zeitliche Auflösung von einer Stunde.

Die eingesteuerten Abflusszeitreihen am Oberlauf des Modells und der Wasserstand an den seeseitigen Modellrändern haben eine zeitliche Auflösung von einer Minute.

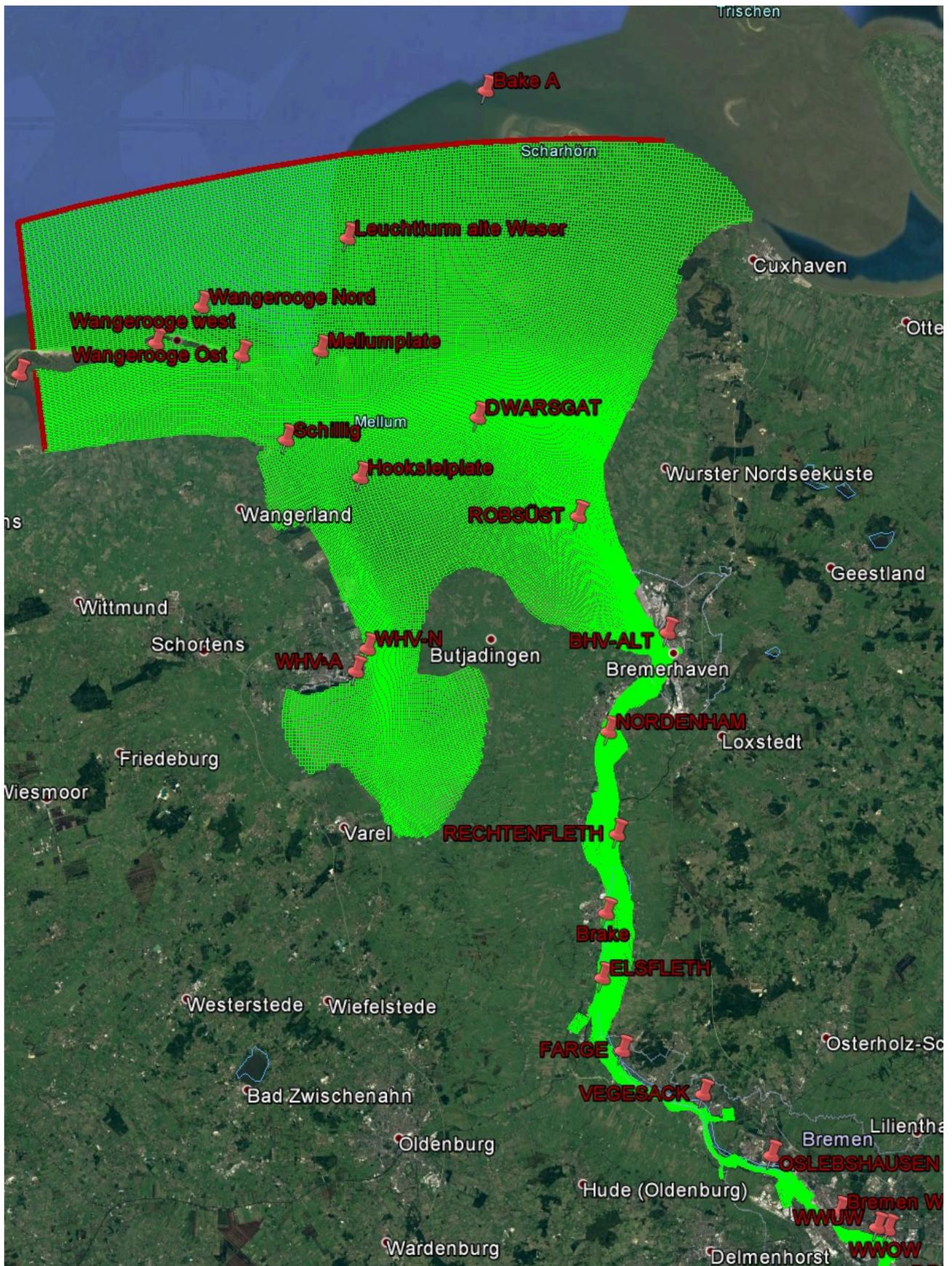


Abb. 2.6: WSV-Pegel im Untersuchungsgebiet (rot), die für die hydrodynamische Kalibrierung des Modells herangezogen werden.

### **3 Kalibrierung und Validierung des hydrodynamischen Modells**

Das FSK-MPTM wurde durch den Vergleich mit gemessenen Wasserständen entlang der Weser validiert. Dazu wurden die Messwerte der WSV (Wasserstraßen- und Schifffahrtsverwaltung des Bundes) für die Pegel in den unterschiedlichen Teilen des Untersuchungsgebiets ausgewählt. Abb. 3.1 zeigt die modellierten und gemessenen Werte für die Pegel in Bremerhaven (Bhv.), Brake und Oslebshausen, die in unterschiedlichen Abschnitten des Einzugsgebiets liegen. Das hydrodynamische Modell zeigt zusammenfassend eine plausible und gute Reproduktion der gemessenen Werte. Die Phasenlage und Amplitude der Gezeitenausbreitung werden durch die Ergebnisse des Modells reproduziert. Zeitweilig unterschätzen die Modellergebnisse die Messwerte (z.B. Pegel Oslebshausen). Als ursächlich wird der Einfluss der großräumigen Hydrodynamik überlagernden Winddaten angesehen. Diese werden aus dem ICON Vorhersagemodell des DWD mit einer Gitterauflösung von 13 km bezogen, während die größten Rechenzellen des hydrodynamischen Modells zwischen 600 m (seeseitiger Rand zur Nordsee) 30 m bei Oslebshausen beträgt.

Die Bodenrauheit wird durch die Formel von Van Rijn (1984) parametrisiert. Diese kann, weil über ein gekoppeltes morphodynamisches Modell die Sedimentbelegung der Sohle bekannt ist, die Höhe und Länge von Dünen durch empirische Formeln abschätzen (roughness prediction).

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die Abweichungen zwischen den gemessenen und modellierten Wasserständen für die Modellierung des Schwebstoff- und MP-Transports hinreichend gut (Shiravani et al., 2023).

Die durch das hydrodynamische Modell berechnete Strömungsgeschwindigkeit dient als Antrieb des FSK-MP-Transportmodell, welches den Transport des MP bzw. der entsprechenden MP-Konzentrationen auf Basis von Advektions-Diffusions-Gleichungen beschreibt. Außerdem werden Salzgehalt, Temperatur und Sedimentkonzentration im hydrodynamischen Modell berechnet. Da das aufgebaute Modell dreidimensional ist, werden über eine entsprechende Rückkopplung im Turbulenzmodell die baroklinen Effekte im Ästuar abgebildet. Der Modellierung des Salzgehaltes kommt im Anwendungsfall Ästuar große Bedeutung zu, da diese über die Einmischung des Süßwassers aus dem Binnenland die Ausbildung eines Salzkeils und mittelbar die Existenz einer Trübungszone bedingt. Abb. 3.2 zeigt die Modellergebnisse für den Salzgehalt im Vergleich zu Messwerten der Pegel Bhv. und Nordenham. Das Modell reproduziert diese gut. Der Salzgehalt hat Einfluss auf die Lage des Trübungsmaximums im Schwebstofftransport. Es ist eine leichte Unterschätzung der Maxima in der Salzgehaltsverteilung zu beobachten, die aber für die Lage der Trübungszone vernachlässigt werden kann.

Außerdem ist die Modellierung der Wassertemperatur wegen der Berechnung des Mikroorganismenaufwuchses im Zusammenhang mit dem Biofouling des MP wichtig (Shiravani et al., 2023). Abb. 3.3 stellt die kalibrierten Modellergebnisse für die Wassertemperatur im Vergleich zu Messwerten für zwei Stationen im Bereich der Trübungszone dar.

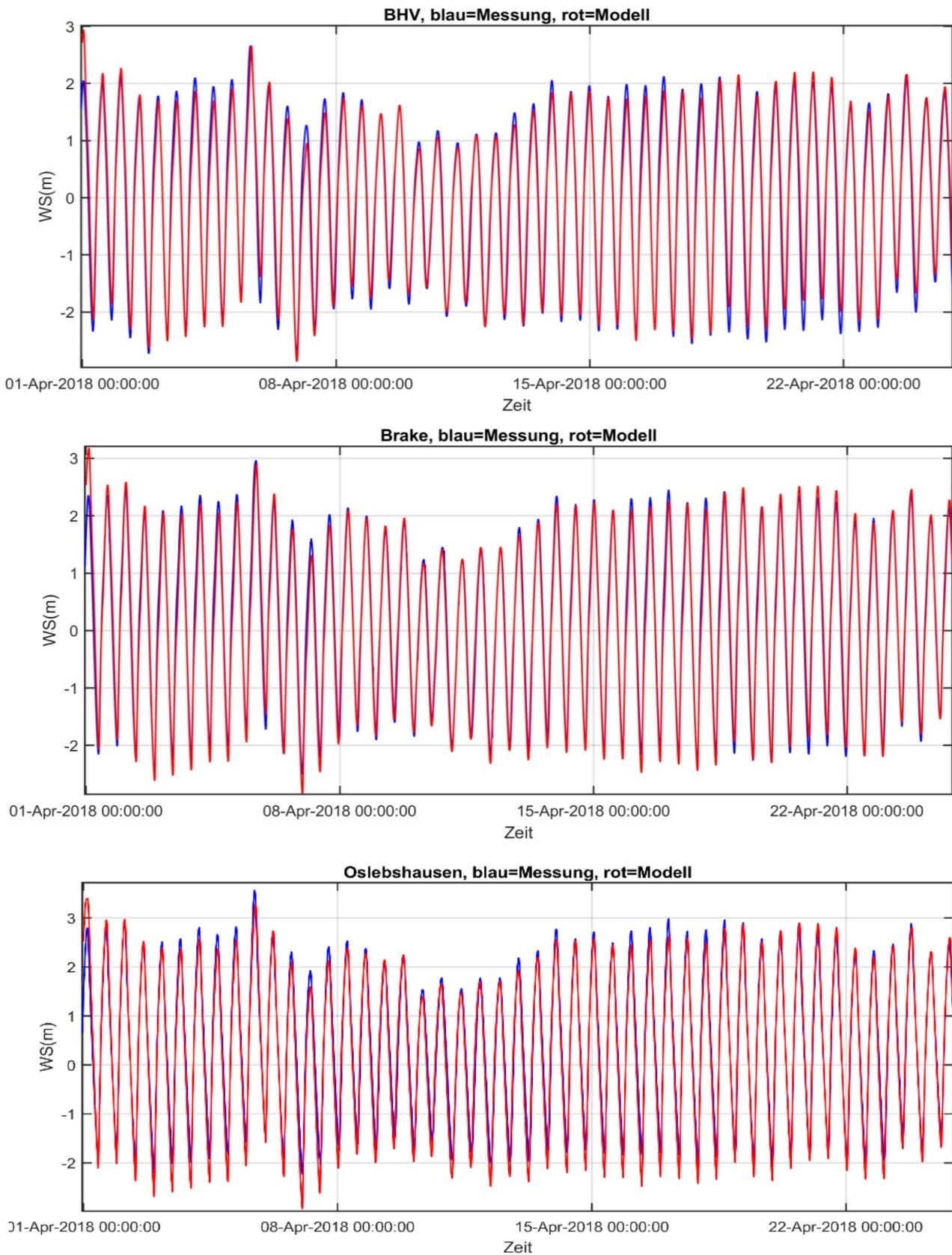


Abb. 3.1: Kalibrierung und Validierung des hydrodynamischen Modells anhand des gemessenen Wasserstandes bei den Pegeln in Bremerhaven (Bhv), Brake und Oslebshausen

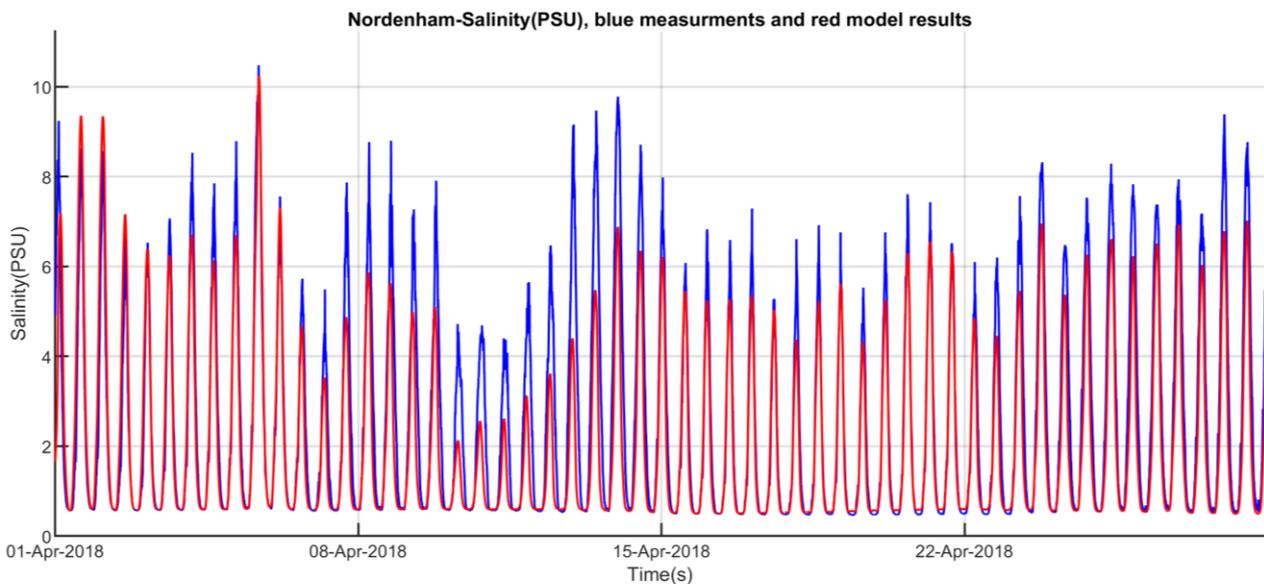
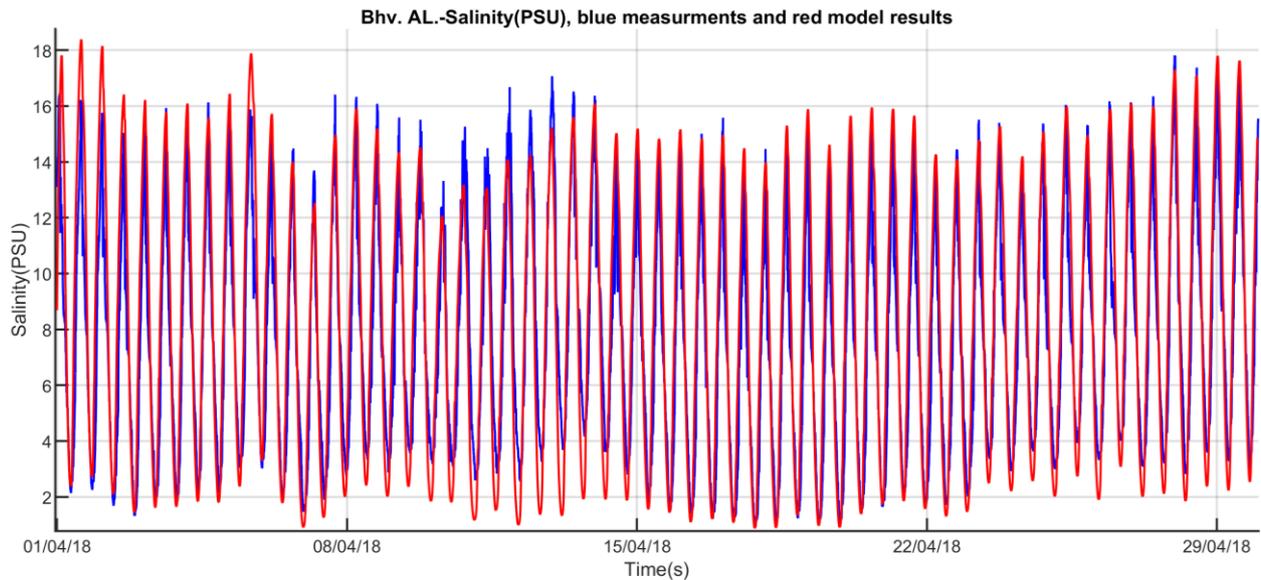


Abb. 3.2: Validierung des hydrodynamischen Modells anhand des gemessenen Salzgehaltes an den Pegeln in Bremerhaven (Bhv) und Nordenham im Bereich der ästuarinen Trübungszone (MTZ)

Es gibt eine gute Übereinstimmung zwischen den Modellergebnissen und Messwerten, wobei die maximale Differenz kleiner als 2K ist. Die Wassertemperatur und der Salzgehalt sind erforderlich für den Biofouling-Ansatz zur Berechnung der entsprechenden Wasserdichte, Wasserviskosität, und kinematische Diffusivität von MP sowie der Wachstumsrate der Mikroorganismen. Die kinematische Viskosität wird durch die Gleichung von IAPWS (International Association for the Properties of Water and Steam) (2008) wie beschrieben von Sharqawy et al. (2010) berechnet:

$$\mu_w = 4.2844 \times 10^{-5} + (0.157(T + 64.993)^2 - 91.296)^{-1} \quad \text{Gleichung 1}$$

wobei  $\mu_w$  die Viskosität in Abhängigkeit zur Wassertemperatur (T) ist. Darüber hinaus wird die Viskosität entsprechend des Salzgehalts entsprechend der von Isdale et al. (1972) vorgeschlagenen Gleichung modifiziert.

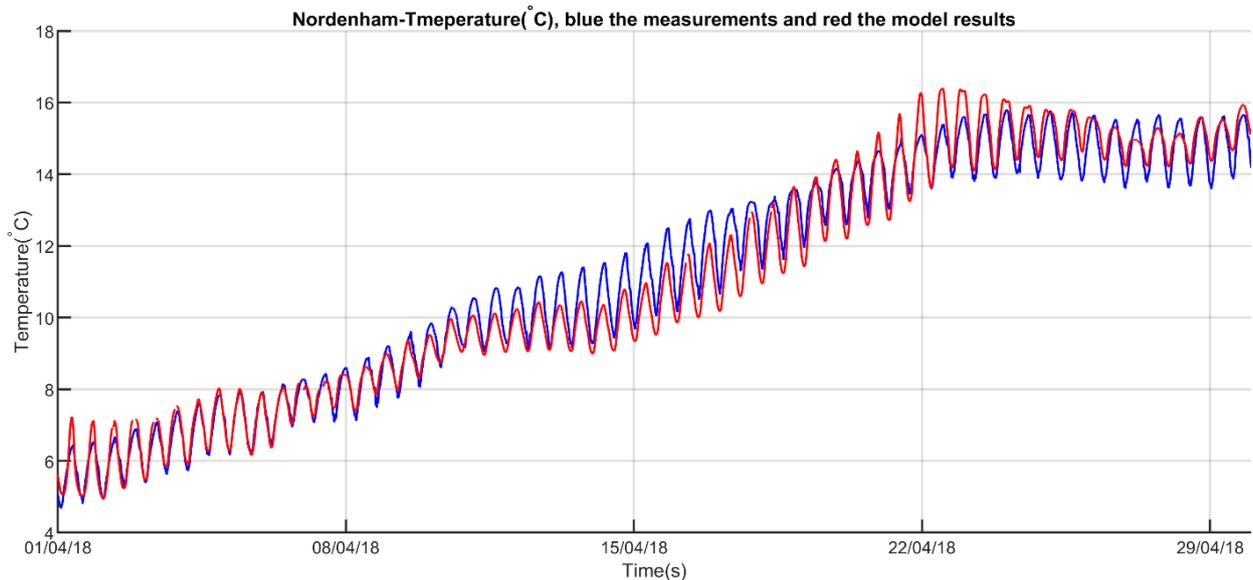
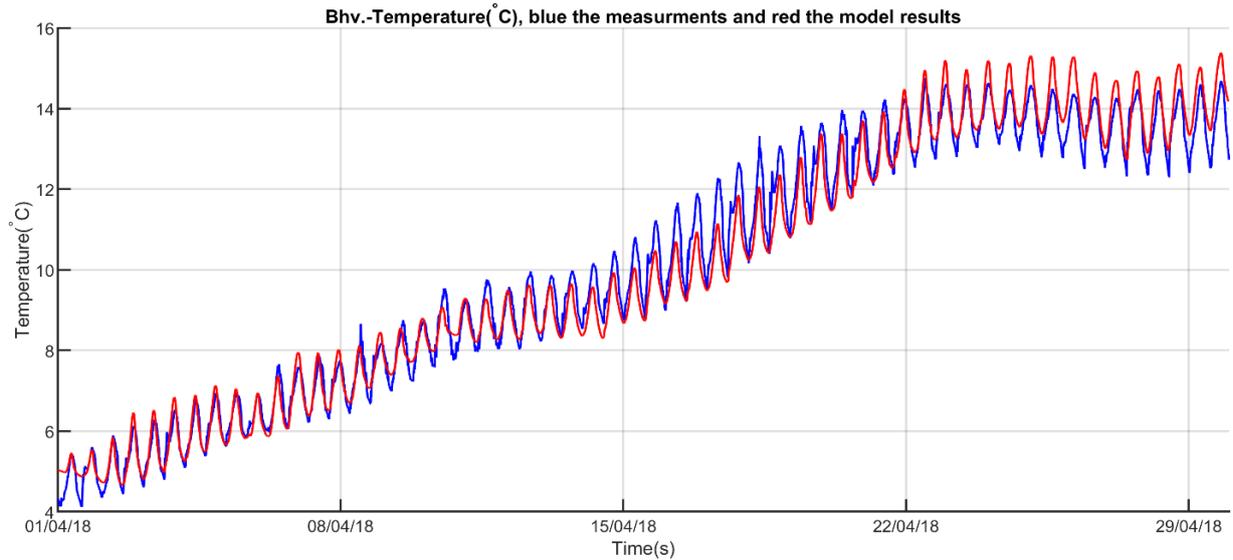


Abb. 3.3: Kalibrierung und Validierung des hydrodynamischen Modells anhand des gemessenen Wassertemperatur bei den Pegeln in Bremerhaven (Bhv) und Nordenham in der Maximum Trübungszone(MTZ)

Die Gleichung für die Viskosität ergibt sich als:

$$\mu_{sw} = \mu_w(1 + AS + BS^2) \quad \text{Gleichung 2}$$

wobei S der Salzgehalt, und A, B die Beiwerte sind, die wieder von der Wassertemperatur abhängig sind und berechnen als:

$$A = 1.474 \times 10^{-3} + 1.5 \times 10^{-5} \times T - 3.927 \times 10^{-8} \times T^2 \quad \text{Gleichung 3}$$

und B:

$$B = 1.073 \times 10^{-5} - 8.5 \times 10^{-8} \times T + 2.23 \times 10^{-10} \times T^2 \quad \text{Gleichung 4}$$

Die kinematische Viskosität wird zur Berechnung von der kinematischen Diffusivität von MP und von Mikroorganismen eingesetzt:

$$D_{MP} = \frac{k(T+273.16)}{6\pi\mu_{sw}r_{tot}} \text{ und } D_{Mikroorganism} = \frac{k(T+273.16)}{6\pi\mu_{sw}r_{mikroorganism}} \quad \text{Gleichung 5}$$

wobei  $k$  die Boltzmann-Konstant ist ( $k= 1.0306 \times 10^{(-13)} \text{ m}^2\text{kg/d}^2\text{K}$ ),  $r_{tot} = r_{MP}+t_{bio}$  und  $r_{mikroorganism}$  der Radius von den Mikroorganismen ist. Diese Diffusivitäten sind für die Berechnung der Kollisionen/Kontakte zwischen MP und Mikroorganismen erforderlich (Kooi et al., 2017).

Die Wasserdichte wird durch die Wassertemperatur und Salzgehalt in der Gleichung von Lewis und Perkin (1978) modifiziert:

$$\rho_{S,T} = (a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4) + (b_1S + b_2ST + b_3ST^2 + b_4ST^3 + b_5S^2T^2) \quad \text{Gleichung 6}$$

wobei  $a_n(n=1, \dots, 5)$  und  $b_n(n=1, \dots, 5)$  Beiwerte sind, die den Einfluss von der Wassertemperatur und Salzgehalt auf die Wasserdichte durch einen polynomischen Ansatz approximieren:

$$a_1=999.9, a_2=2.034 \times 10^{(-2)}, a_3=-6.162 \times 10^{(-3)}, a_4=2.251 \times 10^{(-5)}, a_5=-4.657 \times 10^{(-8)}$$

$$b_1=8.020 \times 10^2, b_2=-2.001, b_3=1.677 \times 10^{(-2)}, b_4=-3.060 \times 10^{(-5)}, b_5=-1.613 \times 10^{(-5)}$$

Die Wassertemperatur geht zudem in die Differenzialgleichung für die Berechnung der Mikroorganismenaufwuchsrate auf dem MP ein, wie von Kooi et al. (2017) formuliert:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\beta_A A_A}{\theta_{pl}} + \mu_A(T, I)A - m_A A - Q_{10}^{(T-20)/10} R_{20} A \quad \text{Gleichung 7}$$

Hier sind  $A$  die Mikroorganismen-Anzahl auf der MP-Oberfläche,  $t$  Zeit,  $\beta_A$  die Kollisionsrate zwischen den Mikroorganismen und MP,  $A_A$  die gesamte vorhandenen Mikroorganismenanzahl Konzentration,  $\theta_{pl}$  die Oberfläche von MP-Partikel,  $\mu_A$  die Aufwuchsrate der Mikroorganismen,  $m_A$  die Mortalitätsrate,  $Q_{10}$  der Temperatur-Beiwert und  $R_{20}$  die Respirationsrate.

#### 4 Kalibrierung und Validierung des morphodynamischen Modells

In diesem Teilprojekt von PLAWES wurde für das erstmals die Wechselwirkung zwischen dem ästuarinen Feinsediment und MP (Shiravani und Wurpts, 2019, Shiravani et al., 2023) implementiert. Zu diesem Zweck wurde ein kalibriertes und validiertes hydrodynamisches Modell mit morphodynamischen Modul gekoppelt und die Feinsediment Konzentration im gesamten Wasserkörper berechnet. Die Bodenzusammensetzung besteht aus dem kohäsivem Feinsediment, feinem, mittlerem und grobem Sand in lokal variierender und durch das Modell dynamisch ändernder Zusammensetzung. Abb. 4.1 stellt exemplarisch die Verteilung des Feinsediments im Modellgebiet dar. Wie aus dieser Abbildung ersichtlich ist, befindet sich das Feinsediment im Bereich des Maximums der Trübungszone (MTZ) zwischen Weser-Kilometer 40 (Brake) bis Weser-Kilometer 70 (Bremerhaven). Zudem ist das Feinsediment im Mündungsbereich viel dominanter als in den übrigen Bereichen der Unterweser vorhanden. Es befindet sich Feinsediment auch in den Wattflächen des westlichen bis südlichen Jadebusens.

Abb. 4.2 zeigt die Modellergebnisse im Vergleich zu den Messwerten aus WSV für Schwebstoffkonzentration. Es wird deutlich, dass das Modell sowohl den Trend als auch die Konzentration der Schwebstoffe gut reproduzieren kann. Die Schwebstoffkonzentration wird im entwickelten Modell verwendet die Wechselwirkungen zwischen MP und Feinsediment zu modellieren. Dazu wird angenommen, dass MP einer bestimmten Feinsediment

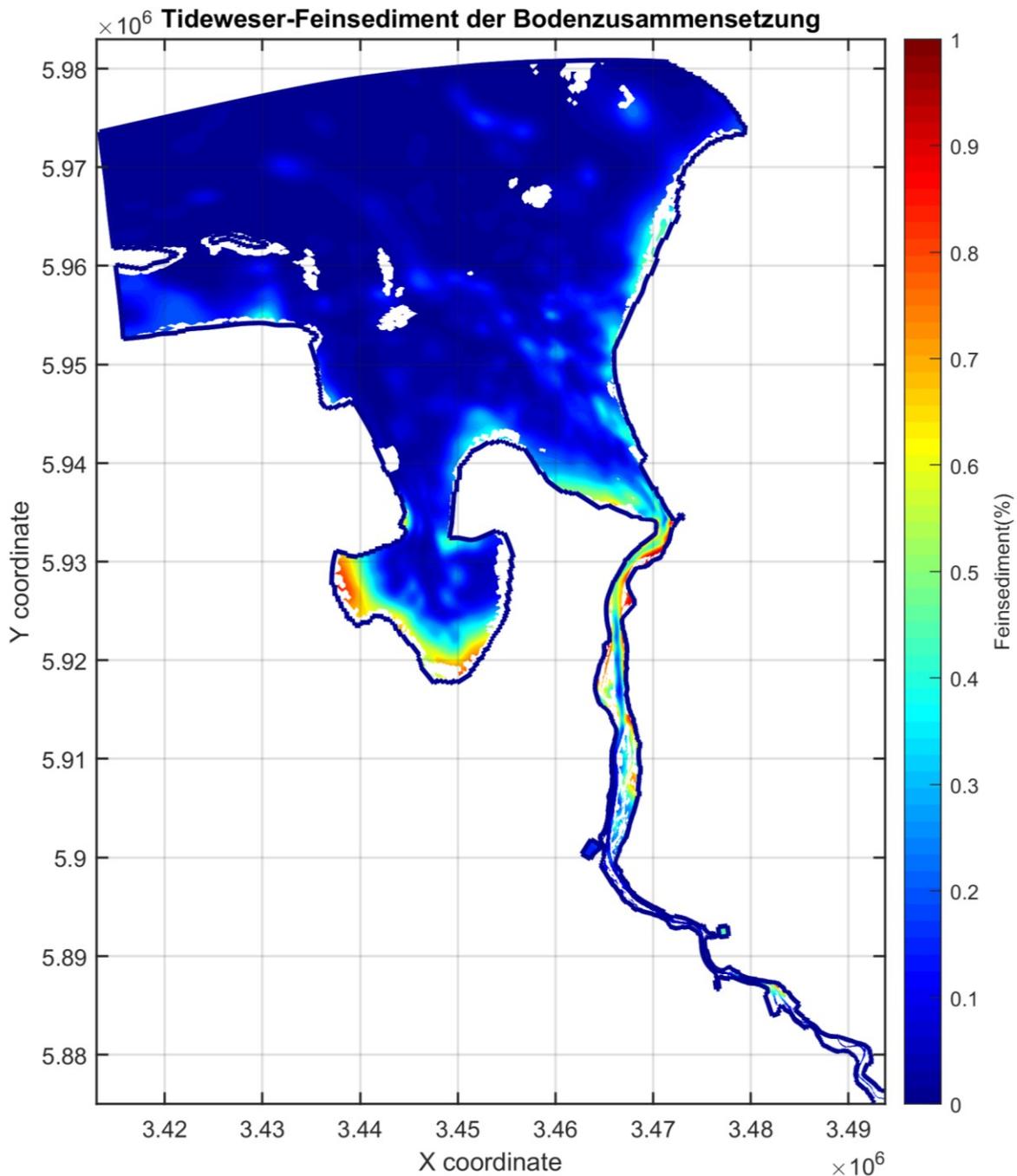


Abb. 4.1: Prozentualer Anteil des Feinsediments im Bodenmodell für das Modellgebiet Tideweser.

Konzentration mit den bestehenden Feinsedimenten interagiert. Diese aggregieren bei zunehmenden Schwebstoffkonzentrationen (Flokkulation) und es wird davon ausgegangen, dass MP in diese Aggregate mit aufgenommen wird und dann folglich mit der variablen Sinkgeschwindigkeit der Feinsediment-MP-Aggregate absinkt.

Abb. 4.3 zeigt die Sinkgeschwindigkeit für PE auf der Messstation 34 in WK 66 (vor Bhv.). Es wird deutlich, dass PE als eine MP-Polymersorte, die eine Dichte kleiner als Wasser aufweist ( $\rho_{PE} = 910 \text{ (kg/m}^3\text{)}$ ), dennoch absinken kann, wenn die vorgenannten Prozesse berücksichtigt werden. Außerdem ist die Variabilität der Sinkgeschwindigkeit sehr ähnlich zum zeitlichen Verlauf der Feinsediment-Konzentration, da deren Sinkgeschwindigkeit auf

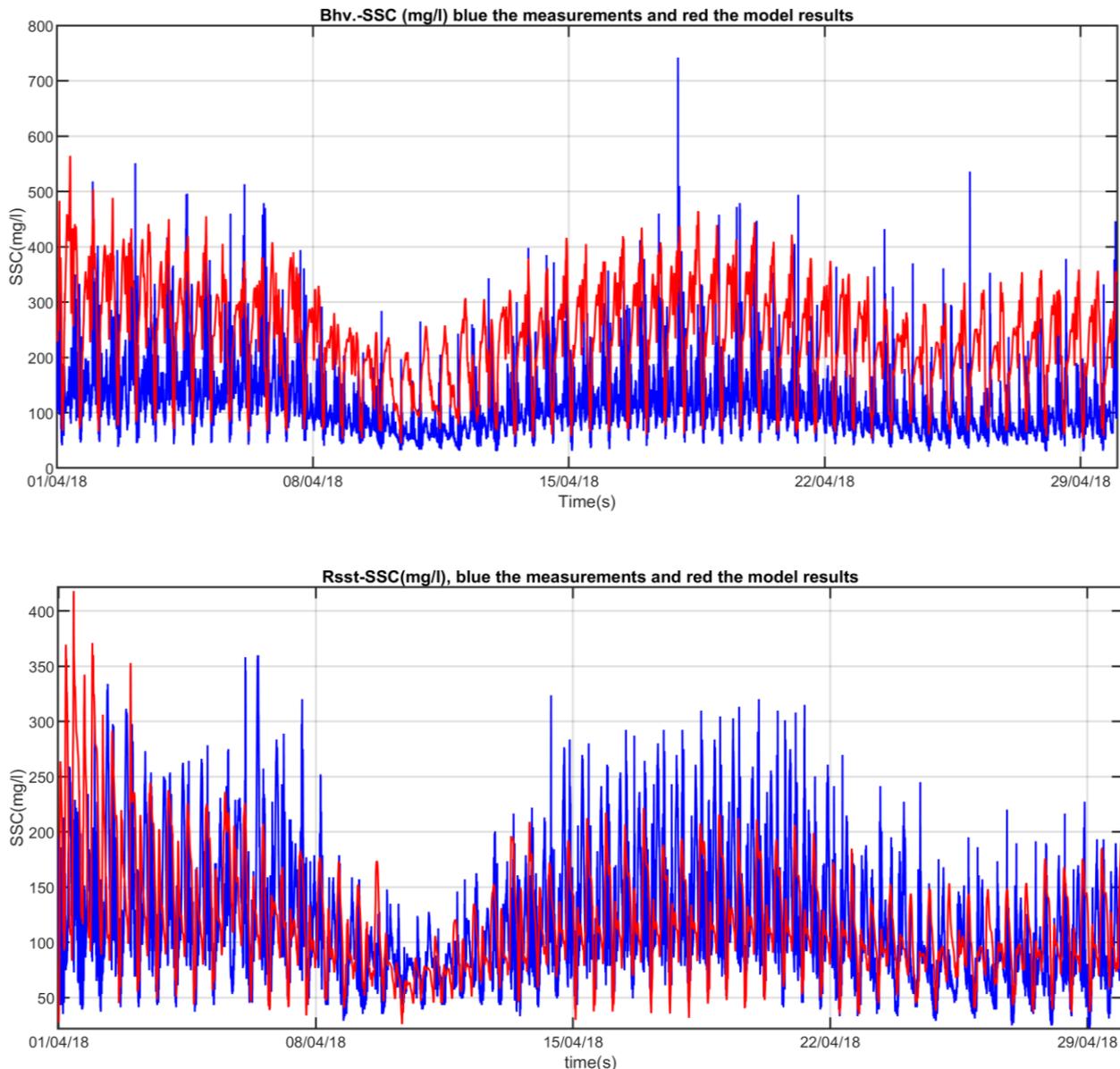


Abb. 4.2: Kalibrierung und Validierung des morphodynamischen Modells anhand des gemessenen Schwebstoffkonzentrationen bei den Messstellen in Bremerhaven (Bhv) und Robensüdsteert (Rsst).

grund der Flockenbildung und Aggregation für die PE-Sinkgeschwindigkeit in der Modellierung berücksichtigt wird.

Der Zusammenhang mit der Sinkgeschwindigkeit von Feinsediment wurde als eine Funktion von der Feinsediment-Konzentration definiert als:

$$w_s = \varphi \left( \frac{C}{C_{max}} \right)^\alpha \quad \text{Gleichung 8}$$

wobei  $W_s$  die Sinkgeschwindigkeit vom Feinsediment ist,  $C_{max}$  die Maximum-Feinsedimentkonzentration, ab der Hindered Settling stattfindet und die Sinkgeschwindigkeit durch hohe Feinsedimentkonzentration zunehmend wieder reduziert wird.  $\varphi$  und  $\alpha$  sind Kalibrierungsbeiwerte, wobei  $\varphi$  von der konstanten Sinkgeschwindigkeit in der Literatur abhängig ist. In dieser Studie wurden für  $\varphi$ ,  $\alpha$ ,  $C_{max}$  bzw.  $35 \times 10^{-3}$ , 0.9 und  $8 \text{ (kg/m}^3\text{)}$  die besten Übereinstimmung zwischen den Modellergebnissen und Messwerten für die Feinsedimentkonzentrationen erzielt. Außerdem ist die Auswirkungen von Biofouling in der MTZ sehr gering, da die Licht-Intensität durch die Feinsedimentkonzentration gedämpft wird und deshalb die Konzentration der Mikroorganismen in der MTZ im Vergleich zu oberstrom gelegenen Bereichen gering ist.

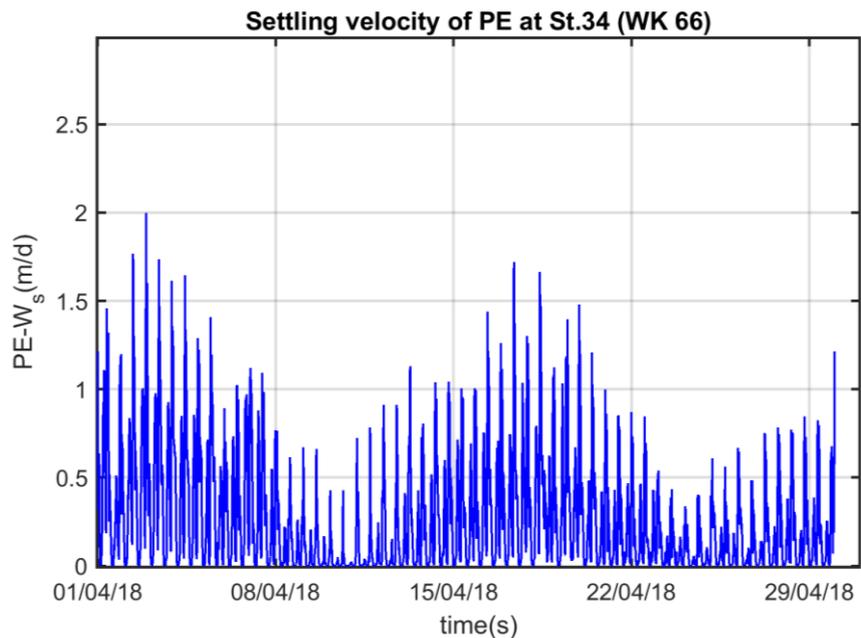


Abb. 4.3: Modellergebnisse für die Sinkgeschwindigkeit von PE – Partikeln in St. 34 (vor Bhv. WK 66) unter Berücksichtigung der Feinsedimentinteraktion (Aggregatbildung) und Biofouling

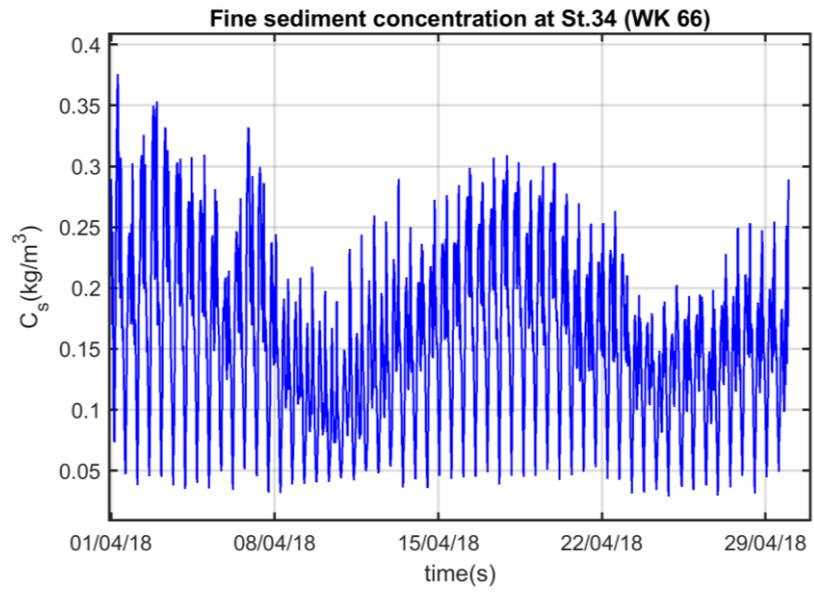


Abb. 4.4: Exemplarische Modellergebnisse für die berechnete Feinsediment-Konzentration an St. 34 (vor Bhv. WK 66) zur Verdeutlichung des Zusammenhangs mit der MP-Sinkeschwindigkeit

## **5 MP-Transportmodellierung**

### **5.1 Aufbau des MP-Transportmodells**

Die Ergebnisse des hydro-morphodynamischen Modells werden als Eingangsdaten für das auf Basis der instationären Advektions-Diffusionsgleichung formulierte MP-Transportmodells verwendet. Zur detaillierteren Dokumentation des Transport- und Bilanzansatzes siehe D-Water Quality, user manual, Kapitel 10.3, Seite 290.

Alle MP-Fraktionen werden durch den Biofouling-Effekt beeinflusst. Dazu wurde für die MP-Fraktionen die jeweilige Oberfläche berechnet und die entsprechende Sinkgeschwindigkeit nach Kooi et al. (2017) ermittelt. Außerdem wird die Aggregation von MP in Feinsediment durch den Konzentrations-Grenzwert gesteuert. Daher ist die Sinkgeschwindigkeit von MP kein konstanter Wert, sondern eine zeitliche wie auch räumlich variierende Funktion der Parameter Salzgehalt, Temperatur und Feinsedimentkonzentration. Darüber hinaus wird die Resuspension von abgesunkenem MP am Boden durch die empirische Gleichung nach Waldschläger und Schüttrumpf (2019) für vorrangig sandige Sohlbeschaffenheit angewendet. Für gemischte Sedimente (Sand mit relevanten Schlickanteilen) wurde die kritische Bodenschubspannung nach Wu et al. (2018) für MP modifiziert.

Die Massenkonsistenz der MP-Gesamtmenge wird in jedem Modell-Zeitschritt explizit sichergestellt.

Das MP-Transportmodell benötigt seinerseits Randbedingungen. Hierzu werden MP-Zulaufkonzentrationen aus MP-Quellen (z.B. Abwasserkläranlagen für die punktförmigen Quellen und die atmosphärische Deposition für die diffuse Quelle) berücksichtigt. MP aus punktförmigen Quellen umfasst die Vorflut von Abwasserkläranlagen in den Fluss, sowie die MP-Konzentration am binnenseitigen Weser-Zufluss und am offenen Seerand, wo über eingesteuerte Messwerte im Gezeitenrhythmus Ein- und Austrag erfolgt.

Die seitlichen und Zuflüsse aus dem Binnenbereich können zukünftig durch die in den AP3.1 und 3.2 aufgebauten Modellierungen bezogen werden. Da zum Zeitpunkt der Erstellung dieses Berichts die in PLAWES zu erhebenden Messergebnisse für MP noch nicht verfügbar sind, wurden als Zwischenschritt bereits veröffentlichte Literaturdaten verwendet, wo solche verfügbar sind (Mentenig et al., 2017, Schneider et al., 2017 und Haun et al. 2017).

Abb. 5.1 zeigt die Lage der Kläranlagen aus den Bundesländern Niedersachsen und Bremen mit Vorflut in die Weser.



Abb. 5.1: MP-Quellen im Untersuchungsgebiet: Kläranlagen (rote Symbole) und atmosphärische Deposition (blaue Symbole), die als punktförmige MP-Quellen und diffuse MP-Quellen berücksichtigt werden. Hinzu kommt der Zufluss über das Weserwehr in Bremen-Hemelingen.

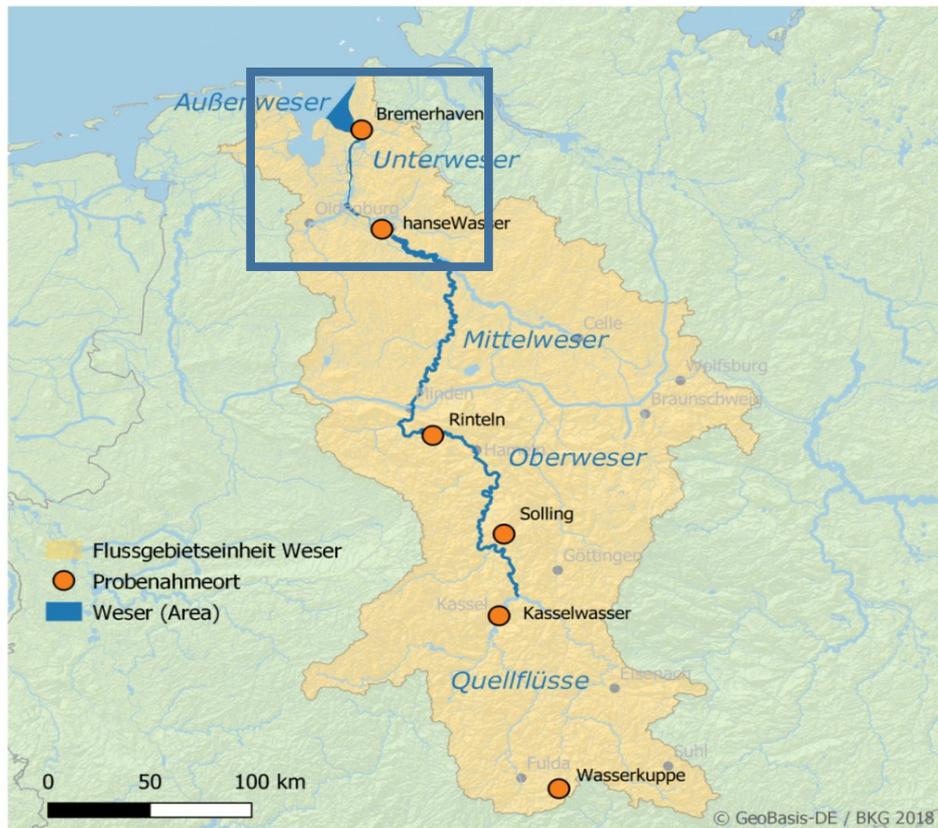


Abb. 5.2: Stationen zur Messung der MP-Last aus der atmosphärischen Deposition (Modifizierte Abb. von Sarmite Kernchen, AP. 2, Universität Bayreuth)

Darüber hinaus wird durch den Wind aus dem Binnenland (Bhv., Nordenham, Brake, Elsfleth, Wilhelmshaven (Whv.), Bremen, Farge) transportiertes MP über die Wasseroberfläche eingetragen. Dies erfolgt entsprechend der Windstärke und Windrichtung im Modell als zusätzliche diffuse Quelle (atmosphärischer Diffusionsfluss(g/m<sup>2</sup>/d)).

Für die MP-Last aus der atmosphärischen Deposition waren insgesamt sechs Messstationen im PLAWES-Vorhaben vorhanden, wobei sich zwei im Ästuarbereich ( Seehausen und Bhv) befinden. Deshalb wurde die MP-Last für die anderen Städte (Häfen) über die Bevölkerungsdichte interpoliert. Der diffuse Eintrag erfolgt über einen Ansatz, der unter Zugrundelegung repräsentativer Windrichtung und –stärke über eine Transportlänge berechnet wird. Hierzu wurde zunächst auf Literaturwerte (Wang und Lai, 2014) zurückgegriffen und eine Analyse der Daten von DWD für Windstärke und Windgeschwindigkeit (Abb. 5.3) durchgeführt. Mit dem Vorliegen besser aufgelöster Messwerte kann dieser Ansatz entsprechend angepasst werden (Shiravani et al., 2023).

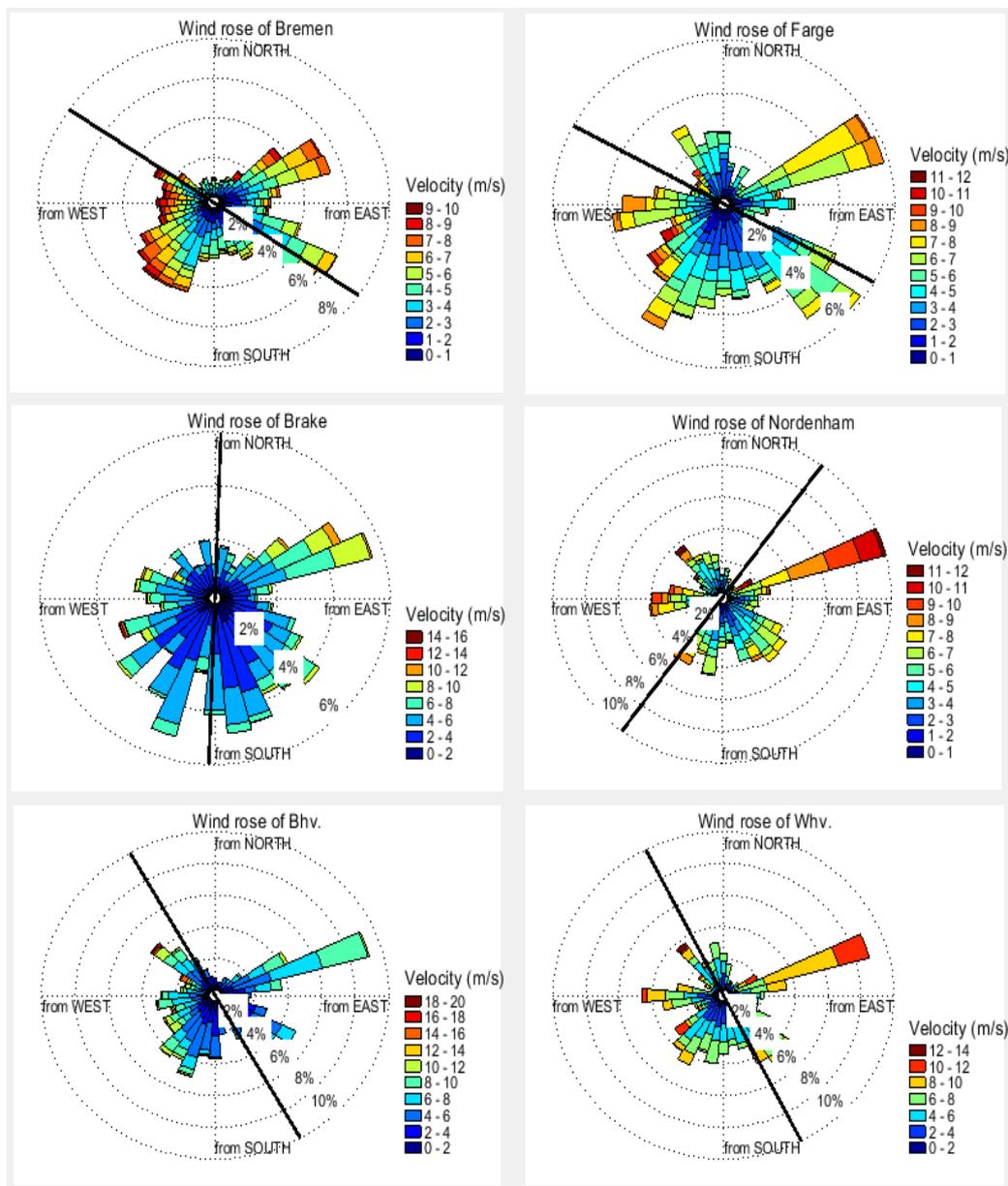


Abb. 5.3: Windrose für die MP-Last aus der atmosphärischen Deposition, die jeweilige schwarze Linie zeigt die lokale Ausrichtung des Weserufers

Abb. 5.4 zeigt die gemessenen MP-Konzentrationen (MP-Partikel-Anzahl/m<sup>3</sup>) für MP-Fraktionen  $</>500 \mu\text{m}$  aus dem Beitrag von Mintenig et al. (2017). Aus diesen Angaben in Ergänzung mit den Lageberichten zur kommunalen Abwasserbeseitigung der Bundesländer Niedersachsen und Bremen wurden die in Abb. 5.5 und 5.6 dargestellten MP-Konzentrationen im Modell eingesteuert. Es ist auffällig, dass die MP-Menge aus den Bremer-KA deutlich höher ist als die aus Niedersachsen. Die KA-Seehausen ist die mit Abstand größte Anlage an der Weser. Die Einteilung der Größenklassen folgt aus analytischen Erwägungen und wurde hier übernommen. Die MP-Modellierung wurde für beide Fraktionen (MP  $<500 \mu\text{m}$  und (MP  $>500 \mu\text{m}$ ) durchgeführt.

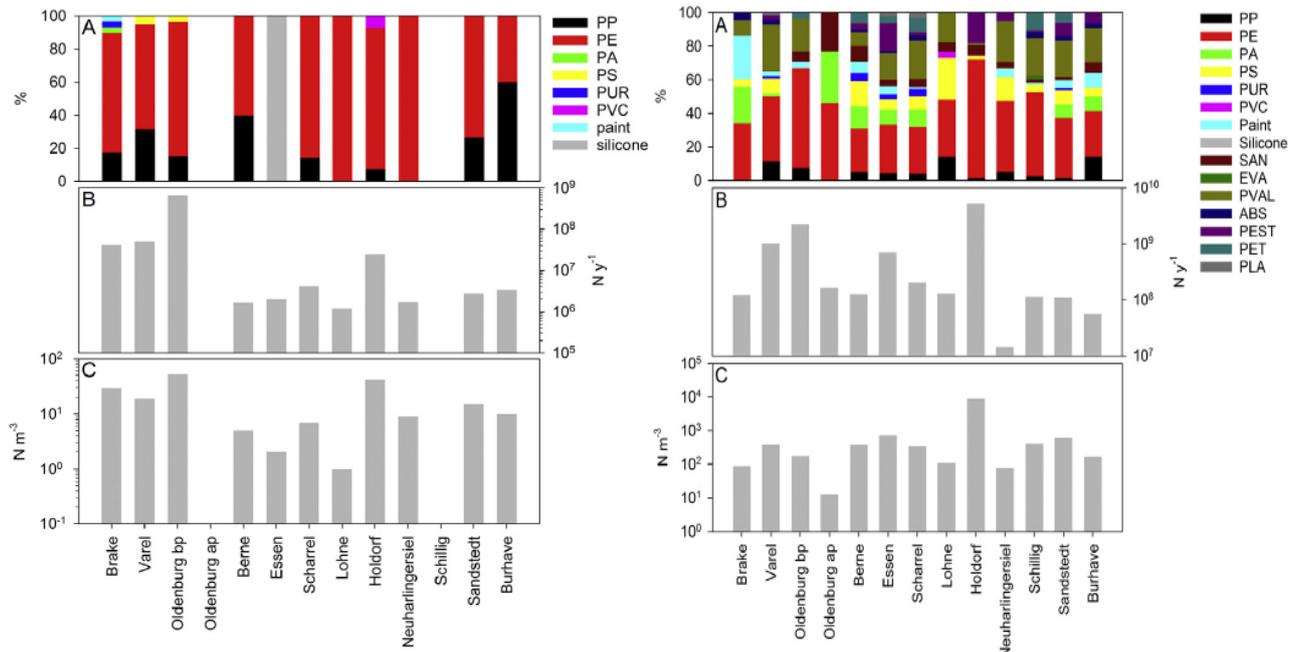


Abb. 5.4: Messwerte für MP-Fraktionen  $>500 \mu\text{m}$  (links) und  $<500 \mu\text{m}$  (rechts) aus Mintenig et al. (2017) für ausgewählte Kläranlagen entlang Tideweser und Jade.

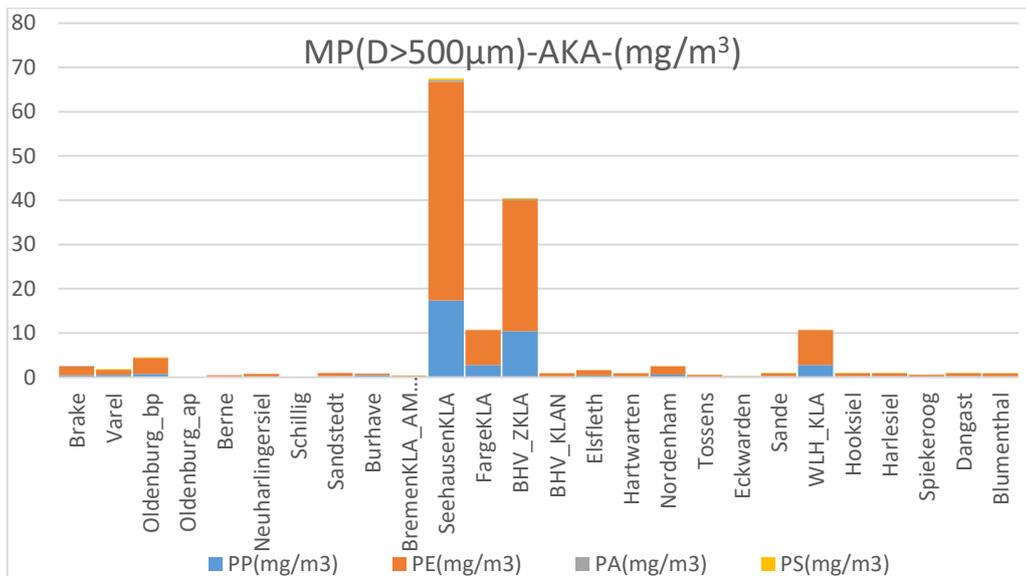


Abb. 5.5: Abgeschätzte MP-Konzentrationen als Eingaben für das MP-Modell; MP-Fraktionen >500 µm.

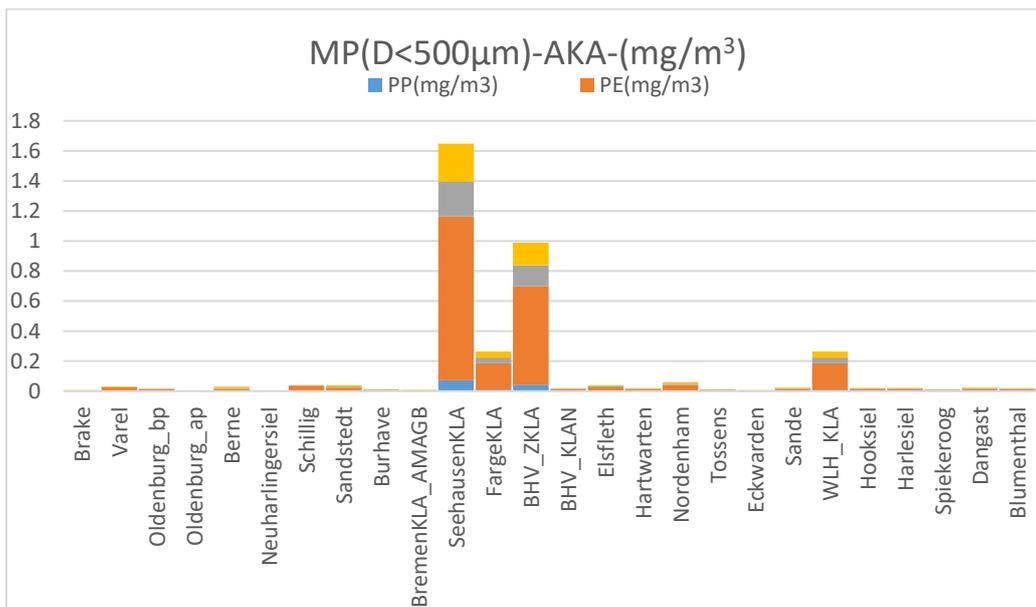


Abb. 5.6: Abgeschätzte MP-Konzentrationen als Eingaben für das MP-Modell; MP-Fraktionen <500 µm.

## 5.2 Kalibrierung und Validierung des MP-Transport-Modells

Zur Kalibrierung und Validierung des Modells wurde 26 Messstationen vorgeschlagen und durch die ersten Modellergebnisse optimierte Probenpositionen für die Messkampagnen ermittelt. Die Messkampagnen konnten auf diese Weise vorab gezielt verfeinert werden. Die Probenahme in der Außenweser erfolgte durch das Alfred-Wegener-Institut (AWI) und in der Unterweser durch Institut für Chemie und Biologie des Meeres (ICBM) der Universität Oldenburg.

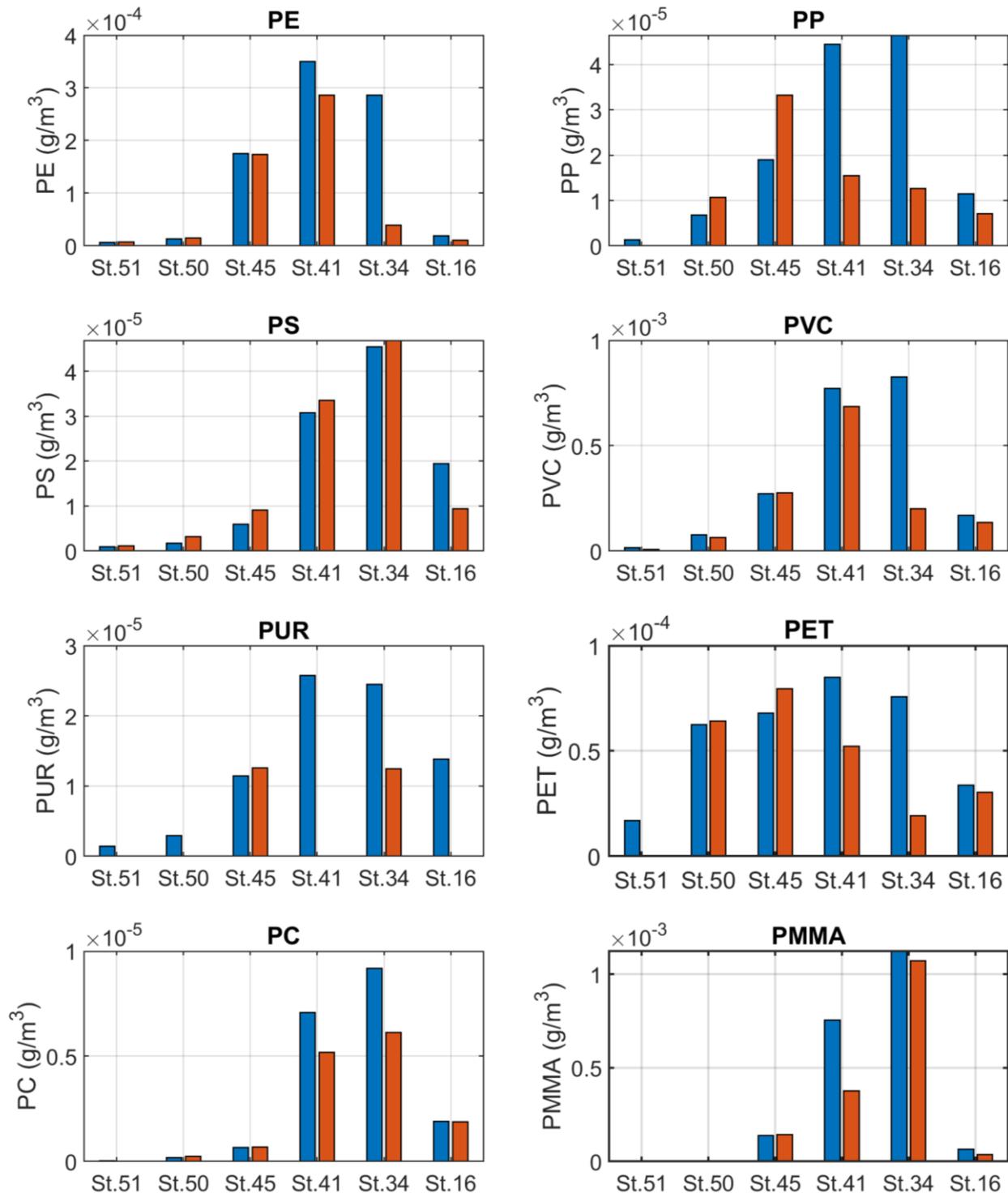


Abb. 5.7: Abgleich der Modellergebnisse (blau) mit den gemessenen MP-Konzentrationen aus der Pyrolyse GC/MS (rot) für MP<500  $\mu\text{m}$  (Shiravani et al., 2023). Zur Lage der Stationen siehe Abb. 2.1

Die Messwerte wurden auch hier aufgrund analytischer Erwägungen in die Größenklassen ( $</>500\ \mu\text{m}$ ) geteilt. Für  $\text{MP}>500\mu\text{m}$  wurden  $\mu\text{FTIR}$ -Analyse am AWI durchgeführt (Roscher et al., 2021), für  $\text{MP}<500\mu\text{m}$  wurden die Proben halbiert und hälftig per  $\mu\text{FTIR}$  am AWI und durch Pyrolyse-GC/MS am ICBM analysiert.

Da das Modell in Massenkonzentrationen formuliert ist und die Umrechnungen von MP-Partikeln zu MP-Massen zu viele Unsicherheiten aufweisen (Partikelform, Partikeldicke und Dichte), wurde entschieden, die Kalibrierung und Validierung des Modells anhand der Messwerte aus der Pyrolyse-GC/MS vorzunehmen. Daher wurden die Modellergebnisse für acht MP-Polymere mit Pyrolyse-GC/MS-Ergebnissen verglichen und das Modell anhand dieser kalibriert.

Da die gemessenen MP nicht individuell den MP-Quellen wie Kläranlagen oder atmosphärischer Deposition zugeordnet werden können, sondern als integrale Parameter das gesamt-MP in der Weser zum Beprobungszeitpunkt an der Probenahmeposition darstellen, wurden die punktförmigen MP-Quellen und die kritischen Bodenschubspannungen für Sedimentation und Resuspension als Kalibrierungsparameter verwendet.

Abb. 5.7 zeigt die Modellergebnisse im Vergleich zu den Messwerten des ICBM für acht Polymercluster (PE, PP, PS, PVC, PUR, PET, PC, und PMMA)(Shiravani et al., 2023).

Es wird deutlich, dass das Modell den räumlichen Trend sowie einzelne Messwerte gut reproduziert. Allerdings überschätzen die Modellergebnisse die MP-Konzentration auf den Stationen innerhalb der Trübungszone. Ein Grund dafür kann die ebenfalls leicht überschätzte Schwebstoffkonzentration in diesem Bereich sein. Außerdem ist in der Literatur kein Grenzwert für den Beginn der MP-Feinsediment-Aggregation dokumentiert, so dass hier zunächst Annahmen auf Basis der schwebstoffdynamischen Prozesse zu treffen waren. Laborversuche zur Validierung der Interaktion von MP in der Wassersäule mit unterschiedlichen Schwebstoffkonzentrationen wären in diesem Zusammenhang hilfreich.

Das ästuarine Trübungsmaximum beinhaltet auch erhöhte Schwierigkeiten für die Probenanalytik, weil die Probenfilter mit der hohen Schwebstoffkonzentration zur frühzeitigen Sättigung neigen und deshalb möglicherweise weniger MP in der Probe gesammelt werden kann, als tatsächlich dort vorhanden ist. Es besteht hier Bedarf an weiterer Beprobung und Überprüfung der Methodik an sich.

Der genannte Unterschied wird für Polyurethan (PUR) auf der Messstation 41 besonders deutlich, wo in der Natur kein PUR auf dieser Station gefunden wurde, während das Modell eine hohe PUR-Konzentration prognostiziert. Weiterhin wird deutlich, dass PUR-Konzentration insgesamt nur an den Positionen 34 und 45 gefunden wird, was ebenfalls den Schluss zuließe, dass es sich bei den dortigen Stationen um lokale Quellen handelt. Das Modell wiederum berücksichtigt PUR Einträge in Ermangelung belastbarer Messwerte basiert auf Literaturdaten auch über weitere Quellen und berechnet daher eine Verteilung entlang des Flusses, die im Gegentum auch Messfehler hinsichtlich der PUR-Detektion möglich erscheinen lässt. Die vorgenannten Aspekte zeigen den weiteren Bedarf an Beprobungen und Weiterentwicklung der Analytik auf, sowie das Potential des hier entwickelten Modellsystems, diese gezielt zu optimieren.

Tabelle 1 zeigt die in der Abb. 5.7. dargestellten Werte der MP-Konzentrationen ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) als Zahlenwerte. Es wird deutlich, dass das Modell grundsätzlich gut geeignet ist, die Ausbreitung von MP unter den komplexen Bedingungen im Ästuar zu beschreiben, dass aber wei-

tere Kalibrierung anhand von belastbaren Messwerten erforderlich ist. Das Modell kann aufgrund seiner guten Reproduktion der großräumigen Transporte einen wertvollen Beitrag liefern zur Identifikation relevanter Probenahmepositionen. Weiterhin sollten auch die hier aufgrund von Literaturwerten basierend auf einzelnen Beprobungen extrapolierten MP-Quellen (punktförmige und diffuse) durch Messungen belegt werden. Von diesen Schritten wird eine deutliche Verbesserung der Modellgenauigkeit und verbesserte Belastbarkeit der Ergebnisse erwartet.

PE(<500µm)-Konzentration (g/m <sup>3</sup> )			
Messstationen	WK	Modellergebnisse	Messwerte (Py-GC/MC)
51	8(West)	6.03x10 <sup>(-6)</sup>	7.27x10 <sup>(-6)</sup>
50	8(Ost)	1.33x10 <sup>(-5)</sup>	1.48x10 <sup>(-5)</sup>
45	45	1.75 x10 <sup>(-4)</sup>	1.73 x10 <sup>(-4)</sup>
41	56	3.50 x10 <sup>(-4)</sup>	2.86 x10 <sup>(-4)</sup>
34	66	2.86 x10 <sup>(-4)</sup>	3.90 x10 <sup>(-5)</sup>
16	Jadebusen	1.86 x10 <sup>(-5)</sup>	1.05x10 <sup>(-4)</sup>
PP(<500µm)-Konzentration (g/m <sup>3</sup> )			
Messstationen	WK	Modellergebnisse	Messwerte (Py-GC/MC)
51	8(West)	1.33x10 <sup>(-6)</sup>	0.0
50	8(Ost)	6.80 x10 <sup>(-6)</sup>	1.07 x10 <sup>(-5)</sup>
45	45	1.90 x10 <sup>(-5)</sup>	3.32x10 <sup>(-4)</sup>
41	56	4.44 x10 <sup>(-5)</sup>	1.55 x10 <sup>(-5)</sup>
34	66	4.65 x10 <sup>(-5)</sup>	1.26 x10 <sup>(-5)</sup>
16	Jadebusen	1.14 x10 <sup>(-5)</sup>	7.12 x10 <sup>(-6)</sup>
PS(<500µm)-Konzentration (g/m <sup>3</sup> )			
Messstationen	WK	Modellergebnisse	Messwerte (Py-GC/MC)
51	8(West)	9.22x10 <sup>(-7)</sup>	1.14x10 <sup>(-6)</sup>
50	8(Ost)	1.73x10 <sup>(-6)</sup>	3.17x10 <sup>(-6)</sup>
45	45	6.00 x10 <sup>(-6)</sup>	9.14 x10 <sup>(-6)</sup>
41	56	3.08 x10 <sup>(-5)</sup>	3.36 x10 <sup>(-5)</sup>
34	66	4.55 x10 <sup>(-5)</sup>	4.69 x10 <sup>(-5)</sup>
16	Jadebusen	1.95 x10 <sup>(-5)</sup>	9.38x10 <sup>(-6)</sup>
PVC(<500µm)-Konzentration (g/m <sup>3</sup> )			
Messstationen	WK	Modellergebnisse	Messwerte (Py-GC/MC)
51	8(West)	1.50x10 <sup>(-5)</sup>	7.01x10 <sup>(-6)</sup>
50	8(Ost)	7.57x10 <sup>(-5)</sup>	6.48x10 <sup>(-5)</sup>
45	45	2.71 x10 <sup>(-4)</sup>	2.76 x10 <sup>(-4)</sup>
41	56	7.73 x10 <sup>(-4)</sup>	6.86 x10 <sup>(-4)</sup>
34	66	8.27 x10 <sup>(-4)</sup>	2.00 x10 <sup>(-4)</sup>
16	Jadebusen	1.69 x10 <sup>(-5)</sup>	1.35x10 <sup>(-4)</sup>
PUR(<500µm)-Konzentration (g/m <sup>3</sup> )			
Messstationen	WK	Modellergebnisse	Messwerte (Py-GC/MC)
51	8(West)	1.41x10 <sup>(-6)</sup>	0.0
50	8(Ost)	2.91x10 <sup>(-6)</sup>	0.0
45	45	1.15 x10 <sup>(-5)</sup>	1.26 x10 <sup>(-5)</sup>
41	56	2.58 x10 <sup>(-5)</sup>	0.0
34	66	2.45 x10 <sup>(-5)</sup>	1.24 x10 <sup>(-5)</sup>
16	Jadebusen	1.38 x10 <sup>(-5)</sup>	0.0
PET(<500µm)-Konzentration (g/m <sup>3</sup> )			

Messstationen	WK	Modellergebnisse	Messwerte (Py-GC/MC)
51	8(West)	$1.69 \times 10^{-5}$	0.0
50	8(Ost)	$6.24 \times 10^{-5}$	$6.42 \times 10^{-5}$
45	45	$6.79 \times 10^{-5}$	$7.96 \times 10^{-5}$
41	56	$8.50 \times 10^{-5}$	$5.22 \times 10^{-5}$
34	66	$7.57 \times 10^{-5}$	$1.92 \times 10^{-5}$
16	Jadebusen	$3.37 \times 10^{-5}$	$3.03 \times 10^{-5}$
PC(<500µm)-Konzentration (g/m <sup>3</sup> )			
Messstationen	WK	Modellergebnisse	Messwerte (Py-GC/MC)
51	8(West)	$2.85 \times 10^{-8}$	0.0
50	8(Ost)	$1.77 \times 10^{-7}$	$2.31 \times 10^{-7}$
45	45	$6.70 \times 10^{-7}$	$6.90 \times 10^{-7}$
41	56	$7.06 \times 10^{-6}$	$5.18 \times 10^{-6}$
34	66	$9.17 \times 10^{-6}$	$6.13 \times 10^{-6}$
16	Jadebusen	$1.90 \times 10^{-6}$	$1.88 \times 10^{-6}$
PMMA(<500µm)-Konzentration (g/m <sup>3</sup> )			
Messstationen	WK	Modellergebnisse	Messwerte (Py-GC/MC)
51	8(West)	$1.24 \times 10^{-6}$	$2.34 \times 10^{-7}$
50	8(Ost)	$2.78 \times 10^{-6}$	$3.86 \times 10^{-6}$
45	45	$1.39 \times 10^{-4}$	$1.44 \times 10^{-4}$
41	56	$7.56 \times 10^{-4}$	$3.77 \times 10^{-4}$
34	66	$1.12 \times 10^{-3}$	$1.07 \times 10^{-3}$
16	Jadebusen	$6.59 \times 10^{-5}$	$3.57 \times 10^{-5}$

Tabelle 1: Modellergebnisse für MP(<500µm)-Konzentrationen im Vergleich zu den Messwerten (Shiravani et al., 2023).

## **6 Zusammenfassung und Ausblick**

Das im Rahmen von PLAWES zu für den Antrieb des MP-Transportmodells aufgesetzte ästuarine Strömungs- und Sedimenttransportmodell wurde anhand von umfangreichen Messdaten kalibriert und validiert.

Zur Kalibrierung und Validierung des in PLAWES erstellten MP-Transportmodells wurden Messwerte aus Pyrolyse-GC/MS aus ICMB für  $MP < 500 \mu m$  verwendet. Das Modell zeigt sehr gute grundsätzliche Übereinstimmung mit den Messwerten, was der hier erstmals erfolgten Berücksichtigung wesentlicher Transportprozesse und Wechselwirkungen zuzurechnen ist. Damit liefert das Modell bereits heute einen wesentlichen Mehrwert zur Beschreibung der MP-Transports im Ästuar und damit zum Systemverständnis hinsichtlich der dortigen Ausbreitung. Aufgrund seiner hier nachgewiesenen Eignung selbst für die extrem komplexen Bedingungen teilgeschichteter Ästuarare ist das Modell damit auf praktisch jedes Küstengewässer anwendbar.

Allerdings sind die Modellergebnisse für die Messstationen im Bereich des ästuarinen Trübungsmaximums tendentiell überschätzt. Als Ursache kommen verschiedene, sowohl modelltechnische aber auch Probenahme- und Analytikaspekte in Betracht. Hier ist weitere Forschung, sowohl zur Probenanalytik als auch labortechnisch zur MP-Schwebstoff-Interaktion wünschenswert. Eine Rekalibrierung zur Verbesserung dieser Ergebnisse wäre auf Basis der hier gewählten Methodik möglich, aber angesichts der insgesamt zu dünnen Datenlage nicht sinnvoll.

Die Modellergebnisse bestätigen insbesondere die in den Analyseergebnissen erfassten Maxima der MP-Konzentrationen innerhalb des Gewässers (Roscher et al., 2021).

Das implementierte Modellwerkzeug beinhaltet einen strikt massenkonsistenten Gesamtansatz, einen hervorragenden, den anspruchsvollen Bedingungen im Ästuar genügenden Antrieb und eine realistische, auch quantitativ belastbare Abbildung der Sedimentdynamik. Diese Eigenschaften erlauben bereits realistische Ergebnisse zur MP-Verteilung, auch wenn derzeit für die MP-Quellen sowie zur Kalibrierung/Validierung nur ein absolutes Minimum an gemessenen Daten zur Verfügung steht. Es ist also einerseits auf die Erhebung weiterer Messdaten zu drängen und die Analytik zielgerichtet weiterzuentwickeln.

Auch fußt das Modellsystem in Teilen auf Annahmen zum physikalischen und chemischen Verhalten der MP-Polymere, soweit es beispielsweise die Interaktion der verschiedenen Klassen untereinander und mit Sedimenten und Hydrodynamik sowie Übergänge zwischen den Größenklassen betrifft.

Soweit das Schrifttum Prozessbeschreibungen für die vorgenannten Wechselwirkungen enthält, wurden diese in das Modell implementiert (u.a. bio-fouling, Sinkgeschwindigkeiten im inerten Zustand). Wo solche nicht existieren (z.B. Fraktionierung der Partikel) sind bislang Annahmen zu treffen, die einerseits der massenkonsistenten Formulierung genügen und andererseits durch geeignete Anpassung der jeweiligen Koeffizienten anhand der Beprobungsergebnisse aus den beiden Kampagnen getrimmt werden sollen, um eine möglichst gute Übereinstimmung zu erzielen. Sobald neue Erkenntnisse zu diesen Prozessen, beispielsweise aus Laboruntersuchungen, vorliegen, können und sollen diese in das Modellsystem implementiert werden.

## 7 Literatur

- D-Water Quality, User Manual, 2018. Version 5.06, SVN Revision: 57242, Deltares, The Netherlands.
- Hartsuiker, G., 2003. Tidal model Weser estuary. Alkyon Report A 589 (unveröff.).
- Haun, W., Bellack, E., Knölke, L. und Steinhoff, U., 2017. Die Beseitigung kommunaler Abwässer in Niedersachsen - Lagebericht 2017 -, NLWKN-Hannover, Hrsg.: MU-Niedersachsen, Hannover, Deutschland.
- International Association for the Properties of Water and Steam, release on IAPWS formulation 2008 for the viscosity of ordinary water substance, 2008.
- Isdale, J. D., Spence, C. M., Tudhope, J. S., 1972. Physical properties of sea water solutions: viscosity, Desalination, 10(14), 319-328.
- Knaack, H., Kaiser, R., Hartsuiker, G., Mayerle, R. und Niemeyer, H. D., 2006. Ermittlung der Bemessungswasserstände für die Unterweser mit mathematischen Modellen, Forschungsbericht 01/06 NLWKN-Forschungsstelle Küste (unveröff.).
- Kooi, M., van Nes, E.H., Scheffer, M. und Koelmans, A.A., 2017. Ups and Downs in the Ocean: Effects of Biofouling on Vertical Transport of Microplastics. Environ. Sci. Technol. 51, 7963–7971.
- Lewis, E.L., Perkin, R.G., The Practical Salinity Scale 1978: conversion of existing data. 1981, Deep-Sea Research. 28A, pp 307, 1981.
- Mintenig, S.M., Int-Veen, I., Löder, M.G.J., Primpke, S. und Gerdts, G., 2017. Identification of microplastic in effluents of waste water treatment plants using focal plane array-based micro-Fourier-transform infrared. Water Res. 108, 365-372.
- Rijn, L.C. van, 1984. Sediment transport, Part III: bed form and alluvial roughness. Journal of Hydraulic Engineering 110 (12): 1733-1754.
- Roscher, L., Fehres, A., Reisel, L., Halbach, M., Scholz-Böttcher, B., Gerriets, M., Badewin, T. H., Shiravani, G., Wurpts, A., Primpke, S., Gerdts, G., 2021. Microplastic pollution in the Weser estuary and the German North Sea. Environmental Pollution (288), 117681.
- Sharqawy, M. H., John, H. L. V., Sayed, M. Z. 2010. The thermophysical properties of sea-water: A review of existing correlation and data. Desalination and Water Treatment, 16, 354-380.
- Shiravani, G., Oberrecht, D., Roscher, L., Kernchen, S., Halbach, M., Gerriets, M., Scholz-Böttcher, B.M., Gerdts, G., Badewien, T.H., & Wurpts, A. (2023). Numerical modeling of microplastic interaction with fine sediment under estuarine conditions. Water Research, 119564.
- Shiravani, G., Wurpts, A., 2019. Numerische Modellierung der Ausbreitung von Mikroplastik im Weser-Ästuar und angrenzenden Wattenmeer. Wasser und Abfall, Ausgabe 10/2019, Springer.
- Schneider, B., Hinterbauer, S., Gatzemeier, M. und Kleiner, T., 2017. Kommunale Abwasserentsorgung im Bundesland Bremen -Lagebericht 2017- Hrsg.: Senator für Umwelt, Bau und Verkehr der Freien Hansestadt Bremen. Bremen, Deutschland.

- Verboom, G.K., de Ronde, J.G., und van Dijk R.P. A, 1992. Fine grid tidal flow and storm surge model of the north sea. *Continental Shelf Research*, 12(2-3):213-233.
- Waldschläger, K., Schüttrumpf, H., 2019. Erosio Behaviour of Different Microplastic Particles in Comparison to Natural Sediments. *Environmental Science & Technology*, 53, 13219-13227.
- Wang, Z-T., Lai, Z-P., 2014. A theoretical model on the relation between wind speed and grain size in dust transportation and its paleoclimatic implications. *Aeolian Research* (13), 105-108.
- WL|Delft Hydraulics (1997): Set-up and Calibration of Tidal Flow Models Deutsche Bucht und Dithmarschen Bucht. Rapp. H 1821 (unveröff.).
- Wu, W., Perera, C., Sanchez, A., 2018. Critical shear stress for erosion of sand and mud mixtures. *Journal of Hydraulic Research* Vol. 56, No.1, pp. 96-110.