Computerprogramm zur Bekanntgabe aktueller Seedaten

Von H. BÜHRER

Eidg. Anstalt für Wasserversorgung, Abwasserreinigung und Gewässerschutz

Manuskript eingegangen am 12. Juni 1975

ABSTRACT

Computer Program for Presenting Actual Lake Data

Data concerning lake surveys are processed in a computer program. New are: formulas for calculating conductivity at 20°C, oxygen saturation and temperature corrections in the inorganic carbon equilibrium system; furthermore an approximation of the oxygen demand in lakes and an estimation of the solubility of calcite.

1. Einleitung

Die Überwachung des chemisch-physikalisch-biologischen Zustandes eines Sees erfordert eine routinemässige Untersuchung seines Wasserkörpers in regelmässigen zeitlichen Intervallen und in einer Reihe von Tiefenstufen. Die Liste der zu analysierenden Parameter umfasst neben den traditionellen physikalischen und physiko-chemischen Parametern in erster Linie die Nährstoffe N und P, Erdalkalien, einzelne Schwermetalle und biochemische Parameter. Soll das Programm auch die Bearbeitung spezifischer wissenschaftlicher Fragestellungen erlauben, so wird dadurch die Parameterliste entsprechend länger. Der Datenanfall, der qualitative Veränderungen eines dreidimensionalen Systems im zeitlichen Ablauf, somit in einer vierten Dimension, dokumentieren soll, ist gross und erfordert allein schon zur reinen Bekanntgabe, noch ohne wissenschaftliche Verarbeitung, einen beträchtlichen Arbeitsaufwand für Prüfung und Aufbereitung der Labordaten, für die Berechnung theoretischer Werte (Sättigungswerte, Temperaturkorrekturen, Differenz- und Mittelwerte usw.) sowie für deren Tabellierung.

Die Aufgabe, die Daten einzelner Programme jeweils unverzüglich nach der Untersuchung bekanntzugeben, hat uns dazu bewogen, diese Arbeiten mit Hilfe eines Computers zu erledigen.

Die Vorbereitung von Analysendaten für ihre weitere Auswertung ist ein ständiges Problem, das denn auch von manchen Instituten bearbeitet wird (z.B. [4, 5]).

Die hier vorgelegte Lösung ist nur einer von vielen möglichen Wegen. Das Programm überschreitet jedoch in mehreren Punkten die Grenzen einer blossen Bekanntgabe, weshalb sich eine Veröffentlichung rechtfertigt.

2. Aufgabenstellung

Die Aufgabe lautet: Die aus der Felduntersuchung und dem analytischen Laboratorium gelieferten Daten sollen durch ein Computerprogramm in Tabellenform ausgedruckt werden. Das Programm soll die Datenaufbereitungen, welche bisher von Hand gemacht wurden, übernehmen. Die Daten sollen vom Laborjournal ohne weitere Zwischentabellierung direkt auf den Datenträger übertragen werden. Das fertige Tabellenformat soll ordnungsgerecht sein; Programmierung in FORTRAN, Ausführung auf dem Rechner CDC 6500-6400 und dem ETHOS-Betriebssystem des Rechenzentrums der Eidg. Technischen Hochschule Zürich.

3. Codierung der Daten, Analysenmethoden, Aufnahme auf Datenträger

Gewässer und Probestelle innerhalb des Gewässers werden mit einem je zweistelligen Code angegeben. Im Hinblick auf deren spätere Ablochung auf 80stelligen IBM-Lochkarten werden die Resultate der Feldmessungen und die Labordaten ohne vorherige Zwischentabellierung auf Vordrucke eingetragen, deren Einteilung den Lochkarten konform ist. Eingetragen werden Konzentrationswerte (mval/l, mg/l, $\mu\text{g/l}$) bzw. Aktivitätswerte und Keimzahlen pro Volumen und nicht etwa Ablesungswerte des Labors (Extinktion, Titratverbrauch usw.), da einerseits sämtliche Werte aus spektralphotometrischen Messungen vom Gerät als finale Konzentration angezeigt werden (Ausnahme: Pigmente) und man andererseits bei Titrationen (Erdalkalien, CO_2 , SBV), welche andere Messeinheiten ergeben, oft Korrekturen anzubringen hat.

Die Kurzbezeichnungen in den Eingabefeldern Chemie 1 und 2 (Abb. 1) entsprechen den in Tabelle 1 zusammengestellten Parametern.

Die *Pigmente* erfordern ein besonderes Eingabeformular (Abb. 1). Hier werden die Extinktionswerte bei den verlangten Spektralbereichen in 90% Azeton normal und mit Säurezusatz für die Berechnung mit der trichromatischen Formel von RICHARDS [7], STRICKLAND-PARSON [11] und SCOR-UNESCO [15] sowie die Extinktionen in Methanol für die Berechnung nach IWAMURA [3] eingetragen. – f = Verdünnungsfaktor (jeweils zu berechnen aus Küvettenlänge, Extraktionsvolumen und Extraktvolumen).

Bakterien

Die mikrobiologischen Daten werden auf einem besonderen Eingabeformular eingetragen (Abb. 1). Erläuterungen dazu:

Temp.	Die Bebrütungstemperatur wird mit einem Zahlencode angegeben: 20°C = 1, 37°C = 2, 44°C = 3
μl	Zehnerexponent des filtrierten Probevolumens

E. coli	<i>Escherichia coli</i> auf Endo-LES-Agar
Colif.	Coliforme Keime auf Endo-Agar
n. id.	Nichtidentifizierbare Keime auf Endo- oder Endo-LES-Nährböden
P. C.	Pepton-Glukose-Agar-Kolonienzahl (Plate Count Agar)
Strept.	<i>Streptococcus faecalis</i>
weiss	Weisse Kolonien auf m- <i>Enterococcus</i> agar (n. id.)
lachsbraun	Lachsbraune Kolonien auf m- <i>Enterococcus</i> agar (<i>Str. faecalis</i>)

Die Zählwerte (Keime/100 ml) werden mit zwei signifikanten Ziffern und Zehner-exponent eingetragen.

Tabelle 1. Abkürzungen der Eingabewerte und Dimensionen.

Table 1. Abbreviations of input values and their dimensions.

t	Temperatur (gemessen in situ [1]) °C	
κ_{20}	Leitfähigkeit in situ [1], umgerechnet auf 20 °C (Formel 1)	$\mu\text{S}/\text{cm}^{-1}$
O ₂	Sauerstoffgehalt	mg/l
pH	pH (vgl. 4.6)	
CO ₂	Azidität bis pH 8.1	mg/l
SBV	Alkalinität bis pH 4.5	mval/l
ges. H.	Gesamthärte (komplexometrisch)	mval/l
Ca	Kalzium (komplexometrisch)	mval/l
SiO ₂	Silikate	mg/l
PO ₄ -P	Phosphatphosphor	$\mu\text{g}/\text{l}$
Ges-P filtr.	Gesamtphosphor im Filtrat	$\mu\text{g}/\text{l}$
Ges-P roh	Gesamtphosphor im unfiltrierten Wasser	$\mu\text{g}/\text{l}$
NO ₂ -N	Nitritstickstoff	$\mu\text{g}/\text{l}$
NO ₃ -N	Nitratstickstoff	mg/l
NH ₄ -N	Ammonium	mg/l
Kjeldahl-N	filtr.	mg/l
	roh	mg/l
PN	Partikulärer Stickstoff	mg/l
Cl-	Chlorid	mg/l
SO ₄ --	Sulfat	mg/l
Fe	Eisen total (Atomabsorptions-SpePho)	$\mu\text{g}/\text{l}$
Mn	Mangan total (Atomabsorptions-SpePho)	$\mu\text{g}/\text{l}$
Cd	Kadmium total (Atomabsorptions-SpePho)	$\mu\text{g}/\text{l}$
Cu	Kupfer total (Atomabsorptions-SpePho)	$\mu\text{g}/\text{l}$
Zn	Zink (Atomabsorptions-SpePho)	$\mu\text{g}/\text{l}$
Pb	Blei (Atomabsorptions-SpePho)	$\mu\text{g}/\text{l}$
Cr	Chrom (Atomabsorptions-SpePho)	$\mu\text{g}/\text{l}$
Hg	Quecksilber (Atomabsorptions-SpePho)	$\mu\text{g}/\text{l}$
Na	Natrium (Flammen-SpePho)	mg/l
K	Kalium (Flammen-SpePho)	mg/l
TOC-f.	Total organischer Kohlenstoff	mg/l
TOC-roh	Total Rohwasser	mg/l
C ass.	Assimilierter Kohlenstoff [10]	mg/m ³ h
S	Sulfide	mg/l
KMnO ₄	Kaliumpermanganat-Verbrauch	mg/l
CSB	Chemischer Sauerstoffbedarf (Dichromatmethode)	mg/l
Trueb	Trübung (Internationale Einheiten)	
UV	UV-Extinktion bei 240 nm	
Sicht	Sichttiefe (wird nur bei 0 m Tiefe gelocht)	m

4. Im Programm vorgesehene Berechnungen

4.1 Summen und Differenzen

«Magnesium»	Gesamthärte – Kalzium
P partikulär	Gesamt-P roh – Gesamt-P filtriert
P hydrolysierbar	Gesamt-P filtriert – $\text{PO}_4\text{-P}$
N partikulär	Kjeldahl-N roh – Kjeldahl-N filtriert (dieser Parameter wird nur berechnet, wenn der partikuläre Stickstoff nicht direkt bestimmt wurde [9]; im letzteren Fall wird der berechnete Wert im Ausdruck mit einem Stern gekennzeichnet).
N total	$\text{NO}_3\text{-N} + (\text{fakultativ}) \text{NO}_2\text{-N} + \text{Kjeldahl-N roh}$
N organ. filtr.	Kjeldahl-N filtriert – $\text{NH}_4\text{-N}$

Wenn einer dieser Summanden nicht bestimmt wurde, wird die Summe bzw. Differenz nicht berechnet.

4.2 Elektrische Leitfähigkeit; Korrektur auf 20°C

Die Leitfähigkeit wird in situ gemessen [1], allerdings ohne Korrektur auf die Einheitstemperatur von 20°C. Da diese Messungen in sehr engen Tiefenstufen erfolgen und zudem Geräte in Aussicht stehen, welche die Korrektur automatisch vornehmen, wurde darauf verzichtet, die Korrektur ins Programm aufzunehmen. Sie wird auf einem programmierbaren Tischrechner ausgeführt. Als Basis dienen Messungen an Wasser aus dem Bodensee–Untersee [14], aus denen durch Regression folgende Korrekturformel berechnet wurde:

$$f = 1,721183 - t \cdot 0,05413696 + t^2 \cdot 0,0011484224 - t^3 \cdot 0,00001226563. \quad (1)$$

Leitfähigkeit bei 20°C = Aktuelle Leitfähigkeit $\cdot f(t)$.

4.3 Sauerstoffsättigung

Die Sauerstoffsättigung wird durch die Temperatur und den aktuellen O_2 -Partialdruck beeinflusst; der sehr geringe Einfluss des Salzgehaltes wurde nicht berücksichtigt. Der Temperatureinfluss wird auf Grund der Daten von MONTGOMERY et al. [6] mit Hilfe eines Polynoms, das mit der Gaußschen Methode gewonnen wurde, kompensiert (Formel 2). Der O_2 -Partialdruck der Atmosphäre wird mit der Barometerformel von SCHMASSMANN [8] erfasst; diese gilt für die normalen Wetterlagen der Alpennordseite (Formel 3):

$$S_0 = 14,60307 - t \cdot 0,4021469 + t^2 \cdot 0,00768703 - t^3 \cdot 0,0000692575 \quad (2)$$

$$p_m = 10^{[\log(760) - m/18400]} \quad (3)$$

$$S_m = S_0 \cdot p_m/760, \quad (4)$$

wobei S_0 = Sättigung bei 760 Torr

S_m = Sättigung auf m Metern ü.M.

p_m = Luftdruck auf m Metern ü.M. in Torr

4.4 Pigmente

Die Pigmente werden nach der Formel von GOLTERMAN [2] direkt aus den Extinktionswerten berechnet:

$$\text{CHLORO} = (E_{663} - E_{700} + E_{700_g} - E_{663_g}) \cdot 2,43 \cdot f/0,089. \quad (5)$$

CHLORO entspricht ungefähr dem Chlorophyll a.

$$\text{PHAEO} = (E_{663} - E_{700} - [E_{663} - E_{700} + E_{663_g} - E_{700_g}] \cdot 2,43) \cdot f/0,0056. \quad (6)$$

PHAEO entspricht dem Phäophytingemisch.

Zur Berechnung nach den Formeln von RICHARDS [7], STRICKLAND und PARSON [11], IWAMURA [3] und SCOR [15], welche die Pigmente in Chlorophyll a, b, c und evtl. die Carotinoide in astacin- und nichtastacinartige aufteilen, wurde ein spezielles Programm geschrieben, das aber nicht in diesem Bekanntgabeprogramm integriert ist und gesondert angefordert werden muss.

4.5 Bakterienzahlen

Zur Bestimmung der Bakterienzahlen werden die Aussaaten als gleiche Typenproben in 2 dekadischen Verdünnungsstufen ermittelt. Das Programm gibt die Bakterienzahlen als gewogene Mittelwerte der Zählungen:

$$B = \frac{Z_1 + 10^{(\mu_1 - \mu_2)} \cdot Z_2}{1 + 10^{(\mu_1 - \mu_2)}}, \quad (7)$$

wobei Z_1 = Zählung 1

Z_2 = Zählung 2

μ_1 = Zehnerexponent des Probevolumens 1

μ_2 = Zehnerexponent des Probevolumens 2
(Probevolumen bzw. Aussaat in μl)

Sind die Membranfilter auf den Nährböden überwachsen oder liegen die Bakterienkolonien so dicht, dass eine Differenzierung unsicher ist, so wird dafür die Zahl $99 \cdot 10^9$ eingegeben. Diese Zahl dient als Symbol; für die Berechnung des Mittelwertes wird sie nicht verwendet.

4.6 Anorganischer Kohlenstoff

Die grössten Analysenfehler innerhalb des Gleichgewichtssystems des anorganischen Kohlenstoffs stammen aus der pH-Messung, namentlich aus der Temperaturdifferenz zwischen der Elektrode (Einstab-Messkette) und dem Probewasser [16]. Um dieser Schwierigkeit, welche beim schwach gepufferten Seewasser beträchtlich sein kann, auszuweichen, wird der pH-Wert bei 20°C thermostatiert gemessen. Die Alkalinität (SBV) wird in der gleichen Wasserprobe gemessen bzw. titriert.

Die Aziditätstiteration auf pH 8,0–8,6 ist wegen des schleppenden und stets neu zu bestimmenden Endpunkts bei den üblicherweise sehr geringen Gehalten chronisch ungenau; sie wird im Programm deshalb durch eine Rechnung ersetzt.

Die Temperaturkorrekturformeln wurden durch Polynomregression aus den Tabellendaten von STUMM und MORGAN [12] berechnet:

$$\text{Ionale Stärke: } I_1 = 2 \cdot \text{Gesamthärte} - 0,5 \cdot \text{Alkalinität} \quad (8a)$$

$$\text{Korrektur: } I = \frac{\sqrt{I_1}}{1 + 1,4 \sqrt{I_1}} \quad (8b)$$

$$pK_{\text{Wasser}} = 4058,359/t_K - 3,3421 + 0,01250852 \cdot t_K \quad (9)$$

$$pK_0 = (-0,00005714 \cdot t + 0,015314)t + 1,124 + 0,1 \cdot I \quad (10)$$

$$pK_1 = (0,0001607143 \cdot t + 0,0130921)t + 6,5788 - 0,5 \cdot I \quad (11)$$

$$pK_2 = (0,0001114286 \cdot t - 0,0146714)t + 10,6259 - 2,0 \cdot I \quad (12)$$

$$pK_{\text{SO}} = 0,0126 \cdot t + 8,027 - (3,62 - 0,02 \cdot t) I, \quad (13)$$

wobei t Temperatur in Grad Celsius

t_K Temperatur in Grad Kelvin

Die Gleichungen 10, 11 und 12 beschreiben das Karbonat-Bikarbonat-Kohlensäure-Gleichgewicht. Gleichung 13 beschreibt die Abhängigkeit des Kalzitlöslichkeitsprodukts von der Temperatur und der ionalen Stärke.

Die Rechnung geht folgendermassen weiter:

- Bestimmung der Anteile von H_2CO_3 und HCO_3^- bei 20°C beim gemessenen pH-Wert. Daraus ergibt sich der anorganische totale C.
- Korrektur der pK-Werte von 20°C auf die gemessene Temperatur.
- Aus b folgt eine vollständige Bestimmungsgleichung für ein Polynom sechsten Grades, das über den ganzen pH-Bereich gilt. Die Nullstelle wird nach der bekannten Methode von Newton und Raphson iterativ gesucht, wobei der pH bei 20°C als erste Näherung genommen wird.
- Der korrigierte pH führt zu neuen Anteilen von $\text{H}_2\text{CO}_3:\text{HCO}_3:\text{CO}_3$. Das CO_3 wird in das Löslichkeitsprodukt eingesetzt und daraus das lösliche Kalzium berechnet.
- Wenn die Löslichkeit überschritten ist, wird der Überschuss als fester Kalzit betrachtet, was zu einer Korrektur der ionalen Stärke und somit zur Wiederholung der Schritte b bis e führt, so lange, bis kein Kalzitüberschuss mehr resultiert. (Punkt e konvergiert nur bei pH-Werten von $< 11,5$.)

Wie aus den Gleichungen 8 bis 13 zu sehen ist, wurden Silikate, Sulfate usw. in diesem Gleichgewichtssystem nicht berücksichtigt. Im übrigen wurden die Gleichungen von STUMM und MORGAN [12] benutzt.

4.7 Ionenbilanz

Die Berechnung der Ionenbilanz wird nach folgenden Formeln durchgeführt:

$$\text{Kationen} = \text{Gesamthärte} + \frac{\text{NH}_4^+}{14} + \frac{\text{Na}^+}{23} + \frac{\text{K}^+}{39} + \left(\frac{\text{Zn}}{65} + \frac{\text{Fe}}{56} + \frac{\text{Mn}}{55} \right) / 1000. \quad (14)$$

Eisen wird nur berücksichtigt, wenn der Sauerstoffgehalt $< 0,5$ mg/l beträgt, Mangan nur bei Sauerstoffgehalten von < 2 mg/l.

$$\text{Anionen} = \text{SBV} + (\text{NO}_2 + \text{NO}_3)/14000 + \text{Cl}/35,5 + \text{SO}_4/48,05. \quad (15)$$

Die Berechnung wird auch dann durchgeführt, wenn Summanden fehlen; der Entscheidung, ob die Ionensummen plausibel sind, ist dem Bearbeiter überlassen.

4.8 Restsauerstoff

Aus den Analysendaten des normalen Programms lässt sich berechnen, wieviel Sauerstoff im Wasser noch vorhanden wäre, wenn alle anorganischen gelösten Komponenten in ihrer höchsten Oxidationsform vorhanden wären.

$$\text{Rest-O}_2 \text{ anorg.} = \text{O}_2 - 32 \cdot (\text{S}^-/16,05 + \text{NO}_2^-/28000 + \text{NH}^+/7000). \quad (16)$$

Diese Berechnung liefert z.B. in Fällen von stärkerer Reduktion Werte über den Sauerstoffbedarf des Wassers. Diese Zahlen geben aber nicht den gesamten Sauerstoffbedarf wieder. Da TOC oder CSB bei dem Seeprogramm üblicherweise nicht bestimmt werden, liegt keine Messzahl für den totalen Sauerstoffbedarf (inklusive des partikulären Materials) vor. Diese Lücke lässt sich einigermaßen schliessen, wenn der partikuläre P und N nach der Bruttoformel der Algenbiomasse nach STUMM [13]

$$\text{Biomasse} = \text{C}_{106}\text{H}_{269}\text{O}_{110}\text{N}_{16}\text{P}_1 \quad (17)$$

in Biomasse umgerechnet und daraus der mögliche O_2 -Verbrauch berechnet wird. Auf die Formel für Rest- O_2 angewandt, ergibt sich

$$\text{Rest-O}_2 \text{ total} = \text{Rest-O}_2 \text{ anorg.} - 8,528 \left(\frac{\text{P part.}}{61,94} + \frac{\text{N part.}}{448} \right) / 2 \quad (18)$$

= theoretischer Sauerstoffgehalt nach Oxidierung aller anorganischen gelösten und näherungsweise aller organischen partikulären Komponenten.

Die gelösten organischen Komponenten wurden mit Absicht nicht in die Rechnung einbezogen, da ihre Oxidationsdauer schlecht abzuschätzen ist und ihr Sauerstoffbedarf schwankt.

5. Kontrolle der Eingabedaten

Die Daten der einzelnen Analysen werden bereits vor dem Eintragen in die Formblätter (Abb. 1) durch das Laborpersonal und später gesamthaft durch den Laborchef auf ihre Plausibilität überprüft. (Prinzipiell hat diese Überprüfung zu erfolgen, solange die Analyse noch repetiert werden kann.) Eine Übernahme dieser Arbeit durch ein Programm wäre zwar denkbar, aber wenn nicht Jahres- und Tagesgänge und andere bekannte Eigenschaften mit benutzt werden, müssen die Interventionsgrenzen so weit gesteckt werden, dass kleinere (und grössere) Analysenfehler durchschlüpfen würden. Auf eine Kontrolle der Eingabedaten durch das Programm wurde deshalb bewusst verzichtet. Mögliche Fehler sind nur noch Schreibfehler, die beim Lochen entstehen. Diese werden auf den Ausdrucken kontrolliert.

6. Nichtvorhandene Daten

Ein datenverarbeitungstechnisches Problem bilden die fehlenden Daten (Fehlmessungen, Ausfälle von Proben, verunglückte Analysen). Das Programm sieht vor, dass sie auf den Eingabeformularen, die gleichzeitig das Laborjournal darstellen,

leer gelassen werden; bei der Übertragung auf Lochkarten werden sie nicht abgelocht. Der benützte Compiler (RUN-FORTRAN) gibt nichtgelochte Felder als Zahlenwert -0 aus. Eine Multiplikation von -0 mit 1 würde $+0$ ergeben, was sich nicht mehr vom Eingabewert 0 unterscheiden liesse. Aus diesem Grund werden die vier Grundoperationen über eine besondere Funktion gerechnet, welche den Wert -0 nicht eliminiert.

In den ausgedruckten Tabellen wird dieses -0 nicht gedruckt, sondern durch eine entsprechende Anzahl Leerstellen wiedergegeben.

7. Summe unter 1m^2 Seefläche (sog. Quadratmeterwert)

Diese Summation ist für viele Anwendungen nützlich. Sie wird mit einer einfachen und raschen Routine ausgeführt und in einer besonderen Tabelle ausgedruckt. Aus den Analysenwerten der oberen und der unteren Tiefe wird das arithmetische Mittel berechnet und dann mit der Tiefendifferenz multipliziert (sog. Trapezformel); schliesslich werden diese Werte summiert. Es ist dabei zu beachten, dass diejenige Säule summiert wird, welche durch die oberste und tiefste Probe (pro Parameter) begrenzt ist. Oft kann nun die tiefste Probe nicht genau auf der vorgeschriebenen Tiefe erhoben werden, besonders wenn die Probestelle, die zumeist dem tiefsten Punkt des Sees entspricht, nicht in einem grösseren horizontalen Areal liegt und schlechtes Wetter eine genaue Positionierung verunmöglicht; ferner sind Seespiegelschwankungen zu berücksichtigen. Sollen nun die Quadratmeterwerte mehrerer Untersuchungen untereinander verglichen oder verarbeitet werden, so ist die Berechnung zu wiederholen, nachdem die Maximaltiefe normiert worden ist.

8. Der Tabellenausdruck

Neben den analytischen Labordaten druckt das Programm zusätzlich die Resultate der auf Seiten 336 ff. erläuterten Berechnungen aus. Ein Beispiel eines solchen Tabellenausdrucks ist in Abb. 2 wiedergegeben.

Diejenigen Parameterbezeichnungen, welche nicht mit den entsprechenden Bezeichnungen der Eingabewerte in Tabelle 1 übereinstimmen bzw. welche hier erstmals erscheinen, sind in Tabelle 2 zusammengestellt.

Tabelle 2. Abkürzungen auf dem Ausdruck (Abb. 2).
Table 2. Abbreviations on output (Fig. 2).

O2S	Sauerstoffsättigung	%
CO2F	Azidität	mval/l
CIT	Anorganischer Kohlenstoff total	mval/l
P-FIL	Gesamtphosphor im Filtrat	mg/m ³
PHYDR	Hydrolysierbarer Phosphor	mg/m ³
N-KJF	Kjeldahl-Stickstoff im Filtrat	mg/m ³
N-KJR	Kjeldahl-Stickstoff im Rohwasser	mg/m ³
N-ORF	Organischer Stickstoff im Filtrat	mg/m ³
COLI	Coliforme Keime Endo-LES 37°C	Keime/100 ml
STREPT	<i>Streptococcus faecalis</i>	Keime/100 ml
S-	Sulfide	mg/l

STELLE : NIEDERUSTER - MAUR

DATEN ERHOSEN DURCH : E.A.W.A.G.

PROBENAHME VOM : 19. 8.1974 UM 9 UHR 30

SICHTTIEFE : 1.6 M

TIEFE M	TEMP °C	LEITF MIKS20	PH	O2 MG/L	O2S 0/0	CO2F MV/L	SBV MV/L	CIT MV/L	GH MV/L	CA MV/L	MG MV/L	SiO2 MG/L	PO4-P MG/M3	P-FIL MG/M3	P-TOT MG/M3	P-PART MG/M3	PHYDR MG/M3
0.0	22.8	254	8.90	18.80	231	0.000	1.96	1.88	2.47	1.00	1.47		0	15	44	29	15
1.0	22.9	252	8.90	18.82	231	0.000	1.95	1.87	2.47	1.20	1.27		2	8	53	45	6
2.5	22.5	254	8.95	19.22	234	0.000	1.99	1.90	2.47	1.13	1.34		1	20	41	21	19
5.0	19.4	312	7.90	5.98	69	.036	2.68	2.74	3.25	1.96	1.29		1	13	51	38	12
10.0	9.2	438	7.50	.51	5	.259	4.20	4.48	4.58	3.30	1.28		487	487	544	57	0
20.0	6.0	439	7.42	.20	2	.332	4.18	4.52	4.65	3.36	1.29		589	589	615	26	0
30.0	5.1	445	7.35	.59	5	.370	4.21	4.62	4.71	3.38	1.33		677	677	718	41	0

TIEFE M	NH4-N MG/M3	NO2-N MG/M3	NO3-N MG/M3	N-KJF MG/M3	N-KJR MG/M3	N-PART MG/M3	N-ORF MG/M3	N-TOT MG/M3	CHLORO MG/M3	PHAEO MG/M3	COLI KEIME	STREPT PRO 100ML	CL MG/L	SO4 MG/L	S- MG/L
0.0	60	29	90	360	870	510*	300	989	40.79	-8.90			19.5		
1.0	30	30	80	340	890	550*	310	1000	37.84	-7.14			20.5		
2.5	50	30	80	320	760	440*	270	870	32.76	-3.64			20.4		
5.0	160	64	500	430	710	280*	270	1274	54.06	-7.92			20.1		
10.0	780	279	850	880	1110	230*	100	2239	23.13	-1.75			20.4		
20.0	970	150	950	1100	1290	190*	130	2390	8.87	-.80			22.6		0.00
30.0	1450	235	320	1570	1650	80*	120	2205	4.78	-.18			21.1		0.00

TIEFE M	FE MG/M3	MN MG/M3	CO MG/M3	CU MG/M3	ZN MG/M3	PB MG/M3	CR MG/M3	HG MG/M3	NA G/M3	K G/M3	TOC-F G/M3	TOC-R G/M3	C-ASS MG/M3H	KMNO4 MG/L	CSB MG/L	UV 240NM	TRUEB ITU
0.0	13	0	0.0	1	1	0			11.0	3.3	3.9		133.00				
1.0	8	1	0.0	1	1	0			11.1	3.3	4.0		56.25				
2.5	10	1	0.0	1	2	0			11.1	3.3	3.9		16.71				
5.0	6	2	0.0	1	2	0			10.9	3.4	3.8		2.42				
10.0	18	78	0.0	1	2	0			11.1	3.7	3.7						
20.0	31	126	0.0	1	4	0			11.0	3.6	3.6						
30.0	78	156	.1	1	10	1			11.0	3.5	3.7						

Abb. 2. Ausdruck der physikochemischen Parameter.

Fig. 2. Output of physico-chemical parameters.

Die *Quadratmeter-Summenwerte* werden in einer anschliessenden Tabelle (dargestellt in Abb. 3) ausgedruckt; diese umfasst sämtliche Parameter der Konzentrationstabelle (Abb. 2) mit den gleichen Dimensionen. Einzelne Parameter erfordern eine besondere Behandlung (gewichtete Mittel, andere Dimensionen, Bezug auf eine andere Seeflächeneinheit). Diese Abweichungen sind in Tabelle 3 zusammengefasst.

Tabelle 3. Abkürzungen der Summenwerte pro Quadratmeter (Abb. 3).

Table 3. Abbreviations of the values calculated per square meter of lake surface (Fig. 3).

WAERM	Wärmeinhalt der Säule (Wärmekapazität sei konstant 1)	Mcal/m ²
-G- KAP	Gewichteter Mittelwert der Leitfähigkeiten	μS
PH	Gewichteter Mittelwert der pH-Werte (bei 20 °C)	
O2	Sauerstoff	g/m ²
-G- O2S	Gewichteter Mittelwert der O ₂ -Sättigungen	%
CO2F	Aziditätssumme	val/m ²
SBV	Alkalinitätssumme	val/m ²
CITOT	Anorganischer Kohlenstoff total	mol/m ²

Die *aufgearbeiteten Werte* sind in einem weiteren Tabellenausdruck untergebracht (Abb. 4). Diese Tabelle enthält die Ionenbilanz, Kalzitsättigung, die berechnete CO₂, HCO₃⁻ und den korrigierten pH-Wert, ferner den «Restsauerstoff» und mikrobiologische Daten. Die hier verwendeten Abkürzungen und Dimensionen sind in Tabelle 4 zusammengestellt.

Tabelle 4. Abkürzungen der zusätzlichen Werte (Abb. 4).

Table 4. Abbreviations of supplementary calculated values (Fig. 4).

ANION	Summe der Anionen (Formel 14)	mval/l
KATION	Summe der Kationen (Formel 15)	mval/l
CACO3	Kalzitsättigung	%
SAETT		
CO2	Gleichgewichts-CO ₂	mval/l
HCO3	[HCO ₃ ⁻]	mval/l
PH KORR	pH bei aktueller Temperatur (vgl. 4.6)	
REST-O2	Restsauerstoff nach Oxidation der anorganischen	mg/l
MG/L IN	Komponenten (Formel 16)	
REST-O2	Restsauerstoff (Formel 18)	mg/l
MG/L TOT		
N.ID.	Nichtidentifizierbare Keime auf Endo	Keime/100 ml
MICRO	Kokken ausser <i>Str. faecalis</i>	Keime/100 ml

Der gesamte Ausdruck wird vom Programm so gestaltet, dass für die 2 bis 28 möglichen Tiefenstufen automatisch einigermaßen gefüllte DIN-A4-Formate entstehen; die Anzahl der Tabellen richtet sich nach der Anzahl der Tiefenstufen. Diese

GREIFENSEE

STELLE : NIEDERUSTER - MAUR

DATEN ERHOSEN DURCH : E.A.W.A.G.

PROBENAHME VOM : 19. 8.1974 UM 9 UHR 30 SICHTTIEFE : 1,6 M

WAERM	-G-	--	O2	-G-	C02F	SBV	CITOT	GH	CA	MG	SiO2	PO4=P	P-FILT	P-TOT	P-PART	P-MYDR
MCAL/M2	KAP	PH	G/M2	O2S	V/M2	V/M2	V/M2	V/M2	V/M2	V/M2	G/M2	MG/M2	MG/M2	MG/M2	MG/M2	MG/M2
312,3	401	7,68	103	40	7,25	111,8	119,3	125,85	86,9	39,0	-0,0	12936	13034	14181	1148	98

NH4-N	NO2-N	NO3-N	N-KJF	N-KJR	N-PART	N-ORF	N-TOT	CHLORO	PHAEO	COLI	STREPT	CL	SO4	S-	N.I.	MIC.
G/M2	G/M2	G/M2	G/M2	G/M2	G/M2	G/M2	G/M2	G/M2	G/M2	KEIME	PRO MM2	G/M2	G/M2	G/M2	KEIME	MM2
23,57	5,12	19,65	28,31	35,20	6,90	4,74	59,98	.6220	.0724	-0,00	-0,000	.64	-0,00	0,00	-0,00	-0,00

FE	MN	CD	CU	ZN	PB	CR	HG	NA	K	TOC-F	TOC-R	C-ASS	KMNO4	CSB	UV	TRUEB
MG/M2	MG/M2	MG/M2	MG/M2	MG/M2	MG/M2	MG/M2	MG/M2	G/M2	G/M2	G/M2	G/M2	MG/M2H	G/M2	G/M2	240NM	ITU
894,0	2635,7	.5	30,0	118,2	5,0	-0,0	-0,0	330,7	106,4	111,2	-0,0	173,3	-0,0	-0,0	-0,0	-0,0

GREIFENSEE

STELLE : NIEDERUSTER - MAUR

DATEN ERHOSEN DURCH : E.A.W.A.G.

PROBENAHME VOM : 19. 8.1974 UM 9 UHR 30

TIEFE	ANION	KATION	CAC03	CO2	HC03	PH	REST-02	REST-02	N.ID.	MICRO.
M	MV/L	MV/L	SAETT	GAS	MV/L	KORR	MG/L	IN	MG/L	TOT KEIME/100ML
0,0	2,52	3,04	431,2	.000	1,45	8,87	18,49	11,64		
1,0	2,54	3,04	488,4	.000	1,36	8,86	18,65	10,32		
2,5	2,57	3,04	525,5	.000	1,40	8,92	18,96	13,32		
5,0	3,29	3,82	125,8	.003	2,45	7,91	5,18	.11		
10,0	4,86	5,21	92,6	.016	4,18	7,59	-3,37	-9,49		
20,0	4,90	5,29	69,0	.021	4,17	7,55	-4,41	-8,00		
30,0	4,84	5,38	57,5	.025	4,20	7,49	-6,31	-9,89		

TIEFE	ANION	KATION	CAC03	CO2	HC03	PH	REST-02	REST02	N.ID.	MICRO.
M	V/M2	V/M2	SAETT	GAS	G/M2	KORR	G/M2	IN	G/M2	TOT KEIME/MM2
30,0	131,46	144,69	134,0	.465	108,045	7,762	-11,023	-155,684	-0	-0

Abb. 3 (oben). Ausdruck der Summenwerte pro Quadratmeter Seefläche.
Fig. 3 (above). Output of integral values per square meter of lake surface.

Abb. 4 (unten). Ausdruck der aufgearbeiteten Werte.
Fig. 4 (below). Output of calculated and supplementary values.

Tabellenblätter können mit normalen Kopiermethoden vervielfältigt und in normalen Ordnern abgelegt werden.

9. Weitere limnologische Computerprogramme

Das beschriebene Programm behandelt jeweils nur die Daten ein und derselben Probenahme; zeitliche Zusammenhänge zwischen mehreren Untersuchungen können damit nicht bearbeitet werden. Das Programm dient primär der aktuellen Dokumentation und Bekanntgabe der Daten.

Zur Bearbeitung spezifischer wissenschaftlicher Fragestellungen wurden weitere Programme entwickelt. Diese basieren, soweit sie chemisch-physikalische Parameter verarbeiten, auf den Eingabeformaten des vorstehend beschriebenen Bekanntgabeprogramms:

- 9.1 Programm zur Berechnung von Quadratmeter- und See-Totalwerten während längerer Zeitreihen (vgl. Kap. 7).
- 9.2 Berechnung der Basistabellen für die Herstellung von Isoplethendarstellungen: Die Daten werden in tiefen- und zeitlinearer Anordnung ausgedruckt. Es wäre zwar möglich, auch die Zeichnungsarbeit vom Computer ausführen zu lassen. Da aber sowohl die Zeichnung als auch die Interpretation allfälliger Fehlbestimmungen recht viel limnologisches Wissen erfordern, wurde auf eine solche (zweifellos sehr aufwendige) Programmierung bzw. Erarbeitung eines Algorithmus mit Ausgabe durch einen Plotter verzichtet.
- 9.3 Korrelationen der chemischen Komponenten in Seen: Die chemischen Komponenten werden jede gegen jede mit einer Häufigkeitsdarstellung graphisch dargestellt. Dabei werden lineare Korrelationen, Abweichungen von linearen und nichtlineare Korrelationen direkt ersichtlich.
- 9.4 Mehrjahresmittel-Isoplethen: Isoplethendarstellungen gewinnen an Klarheit, wenn die Untersuchungen mehrerer Jahre durch Mittelwertsbildung zusammengefasst werden.
- 9.5 Gleitende Mittelwerte über längere Zeitreihen: Im Gegensatz zu den Mehrjahresmittel-Isoplethen lassen sich hier langfristige Trends klarer herausarbeiten.
- 9.6 Ein Programmsatz für die Behandlung von Phytoplanktondaten, bestehend aus
 - Listenprogramm für die Kontrolle der Eingabedaten,
 - Berechnung des Rechenvolumens (Biomasse), mit Aufteilung nach den systematischen Stämmen,
 - Listenauszügen und deren graphischer Darstellung als Histogramme,
 - Programm, welches die Häufigkeit des Auftretens einzelner Arten, Gattungen und systematischer Gruppen in einer graphischen Jahr-Monat-Matrix über beliebig lange Zeiträume ausdruckt.

Der Verfasser ist dankbar für die Zusammenarbeit mit dipl. chem. E. Szabó, dem Chef des chemischen Labors der Abteilung Limnologie der EAWAG, der auch die Formulare für die chemischen Parameter entworfen hat. Ohne die steten Bemühungen und die Unterstützung von Prof. H. Ambühl wäre dieses Manus nie entstanden.

10. Zusammenfassung

1. Zur Dokumentierung und aktuellen Bekanntgabe der Resultate routinemässiger physikalisch-chemisch-mikrobiologischer Seeuntersuchungen wurde ein Computerprogramm entwickelt. Dieses stellt die Analysendaten sowie eine Reihe weiterer, daraus zu berechnender Werte, für welche Unterprogramme geschaffen wurden, in Tabellenform DIN A4 zusammen.

2. Die Temperaturkorrektur der Leitfähigkeit auf 20°C und die Berechnung der Sauerstoffsättigung wurden in eine analytische Form gebracht.

3. Zur Berechnung des Kohlensäuregleichgewichts wurden die Temperaturkorrekturen errechnet und in die aktivitätskorrigierten Formeln eingesetzt.

4. Es wurde eine Methode zur Berechnung der Kalzitsättigung erprobt und in das Programm eingebaut.

5. Der Sauerstoffbedarf des Sees wird mit einer einfachen Formel aus den analytischen Daten berechnet; diese Berechnung ist im Programm integriert.

6. Im Programm eingeschlossen ist die Berechnung der Summenwerte unter 1 m² Seefläche für sämtliche Parameter.

7. Das Problem der fehlenden Daten und deren Behandlung wird diskutiert.

8. Für die weitere wissenschaftliche Verarbeitung der Analysendaten wurde eine Reihe von Spezialprogrammen entwickelt.

SUMMARY

Computer Program for Presenting Actual Lake Data

1. A computer program was developed for filing and prompt presentation the results of physico-chemical-microbial lake surveys. It prints data of analyses as well as values to be calculated on the basis of these analyses by means of specially developed subroutines in sheet sizes of DIN A4.

2. Conductivity corrections from actual temperature to 20°C and oxygen saturation were expressed analytically.

3. The temperature corrections in the inorganic carbon equilibria system were calculated and inserted in the formulas which are corrected for ionic strength.

4. An iterative algorithm for calcite solubility was found.

5. Approximate oxygen demand is calculated by means of a simple formula with estimated data.

6. The calculation of the sum of all parameters under 1 m² lake surface is included in the program.

7. The problem of missing data and their treatment is discussed.

8. Some special programs were written for further scientific data processing.

RÉSUMÉ

Programme d'ordinateur pour communiquer les données d'analyse d'un lac

1. Un programme d'ordinateur a été développé pour la documentation et la publication actuelle des résultats de recherches lacustres physico-chimico-microbiologiques de routine. Il assemble les données d'analyse, aussi bien que leurs résultats calculés, sur un tableau de format DIN A4.

2. La correction de température de la conductibilité à 20°C et le calcul de la saturation en oxygène ont été mis sous forme analytique.
3. Pour le calcul de l'équilibre du gaz carbonique, les corrections de température ont été calculées et employées dans les formules corrigées pour l'activité.
4. On a mis à l'épreuve une méthode pour le calcul de la saturation du calcite, puis on l'a insérée dans le programme.
5. Le besoin en oxygène du lac a été calculé avec une formule simple, à partir de données analytiques.
6. Le calcul de la somme des valeurs, pour tous les paramètres, sous 1 m² de la surface du lac, est inclus dans le programme.
7. Le problème des données manquantes et leur traitement a été discuté.
8. Une série de programmes spéciaux a été développée pour les prochaines données d'analyse scientifiques.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] AMBÜHL, H., *Die praktische Anwendung der elektrochemischen Sauerstoffbestimmung im Wasser*, Schweiz. Z. Hydrol. 22, 23–39 (1960).
- [2] GOLTERMAN, H. L., und THOMPSON, T. G., *Methods for Chemical Analysis of Freshwaters*, IBP-Handbook 8 (1960).
- [3] IWAMURA, T., NAGAI, H., und ICHIMURA, S., *Improved Methods for Determining Contents of Chlorophyll, Protein, Ribonucleic Acid and Desoxyribonucleic Acid in Planktonic Populations*, Int. Rev. Ges. Hydrobiol. 55, 131–147 (1970).
- [4] JÖNSSON, ELSY, *Descriptions of Computer Programs for Physical-Chemical Water Quality Data*, Scr. Limnol. upsal. Coll. 10B, Scr. 392 (1974).
- [5] MARELIUS, INGRID, *Descriptions of Computer Programs for Biological Water Quality Data II*, Scr. Limnol. upsal. Coll. 10B, Scr. 393 (1974).
- [6] MONTGOMERY, H. A. C., THOM, N. S., und COCKBURN, A., *Determination of Dissolved Oxygen in Pure Water and Seawater*, J. appl. Chem. 14, 280 (1964).
- [7] RICHARDS, F. A., und THOMPSON, T. G., *The Estimation of Plankton Populations by Pigment Analyses. II. A Spectrophotometric Method for the Estimation of Plankton Pigments*, J. Mar. Res. 11, 156–172 (1952).
- [8] SCHMASSMANN, H., *Die Sauerstoffsättigung natürlicher Wässer, ihre Ermittlung und ihre Bedeutung in der Hydrologie*, Schweiz. Z. Hydrol. 11, 430 (1949).
- [9] STADELMANN, P., *Stickstoffkreislauf und Primärproduktion im mesotrophen Vierwaldstättersee (Horwer Bucht) und im eutrophen Rotsee, mit besonderer Berücksichtigung des Nitrats als limitierenden Faktors*, Schweiz. Z. Hydrol. 33, 1–65 (1971).
- [10] STEEMANN NIELSEN, E., *The Use of Radioactive Carbon (¹⁴C) for Measuring Organic Production in the Sea*, J. Cons. 18, 117 (1952).
- [11] STRICKLAND, J. H. D., und PARSONS, T. R., *A Practical Handbook of Seawater Analysis*, Bull. Fish. Res. Board Can. 167 (1968).
- [12] STUMM, W., und MORGAN, J. J., *Aquatic Chemistry* (Wiley-Interscience N.Y. 1970).
- [13] STUMM, W., Vorlesung EAWAG/ETH (1971).
- [14] TOGGENBURGER und SZABÓ, E., unveröffentlicht (1971).
- [15] UNESCO, *Determination of Photosynthetic Pigments in Seawater. Monographs on Oceanographic Methodology 1*, United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization, Paris (1966).
- [16] WEBER, W., und STUMM, W., *Mechanism of Hydrogen Ion Buffering in Natural Waters*, J. Am. Wat. Wks Ass. 55, 1553–1578 (1963).

Adresse des Autors:

H. Bühner, dipl. rer. nat., EAWAG, CH-8600 Dübendorf.