

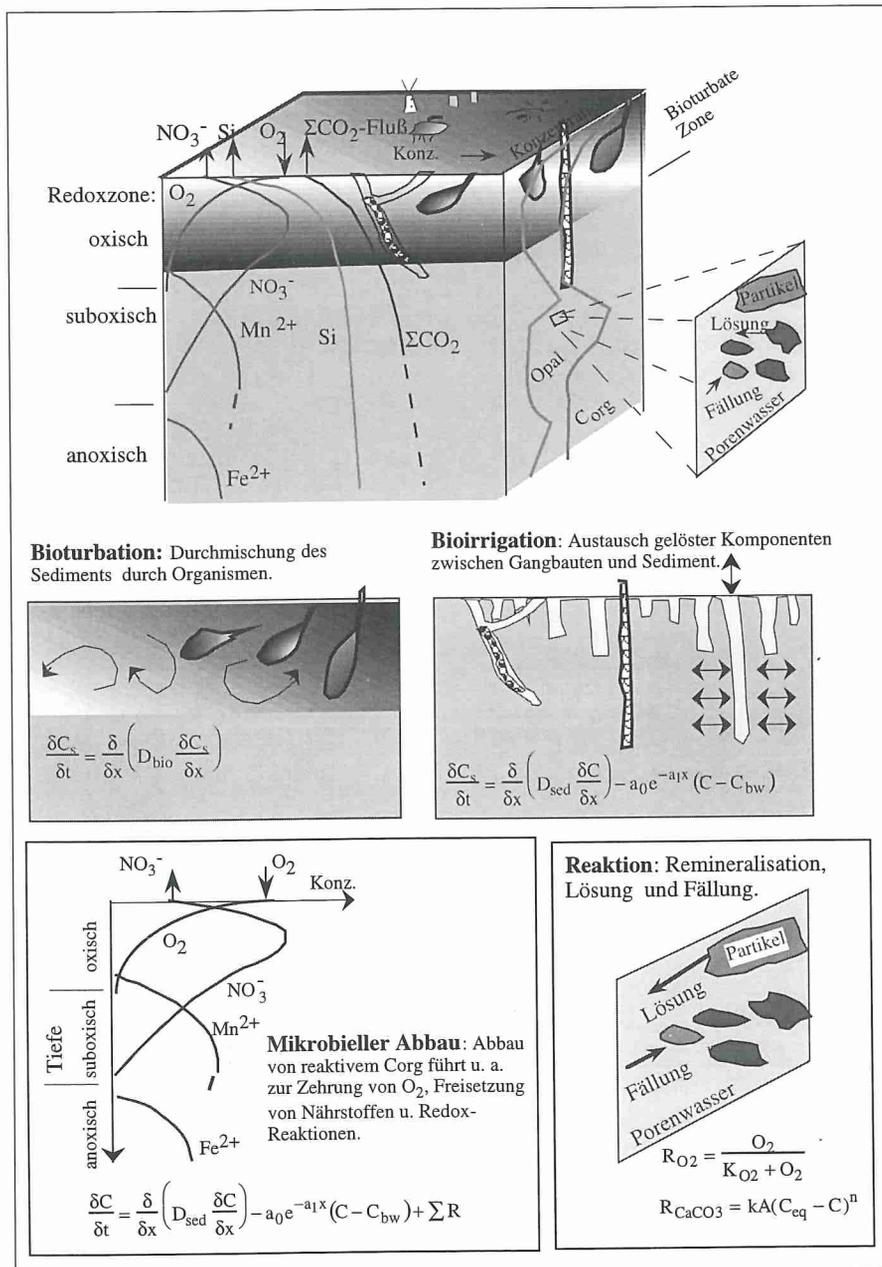
# Prozessorientierte Modellierung frühdiaogenetischer Reaktionen in Tiefsee- und Flachwassersedimenten

## Abstract

Diagenetic processes in surface sediments are important for the burial efficiency of primary produced organic carbon and further interpretation of paleo-environments based on geochemical proxies. Application of nu-

merical models allows the quantitative description of these processes. The models provide a means for evaluating the complex biological and geochemical interactions at the seafloor and allow the computation of organic carbon degradation rates and fluxes.

Modeling seasonal variations of early diagenetic processes are promising for an improved understanding of the response of the seafloor to short term natural variations or anthropogenic impacts to this marine environment. Recycling of nutrients or alterations of the redox zonation in the sediment can be predicted by application of numerical models.



## 1 Einführung

Der Meeresboden stellt ein dynamisches System dar, dessen Energieversorgung an den Eintrag von organischem Kohlenstoff (C<sub>org</sub>) gekoppelt ist. Der C<sub>org</sub>-Eintrag, der in Relation zur Primärproduktion und damit zur Fixierung von Nährstoffen und CO<sub>2</sub> im Oberflächenwasser steht, hat eine Vielzahl biologischer und physikochemischer Prozesse zur Folge, die im unmittelbaren Bereich der Sediment-Wasser-Grenzfläche ablaufen (Abbildung 1). Zahlreiche dieser Prozesse sind direkt oder indirekt mit der Remineralisation von organischem Kohlenstoff verknüpft. Die Remineralisation führt beispielsweise zur Rückführung gelöster Nährstoffe in die vergleichsweise kurzskaligen Stoffkreisläufe der Hydro- und Biosphäre und dokumentiert sich in der Redoxzonierung, die im Sediment zu beobachten ist (Abbildung 1). Als Folge des intensiven mikrobiellen Abbaus von organischem Kohlenstoff und der physikochemischen Lösungsprozesse geht nur ein kleiner Anteil des die Sedimentoberfläche erreichenden Flusses an biogenen organischen und anorganischen Komponenten in die geologische Überlieferung ein.

Das prozessorientierte Verständnis frühdiaogenetischer Reaktionen ist daher von zentraler Bedeutung für Interpretationen ehemaliger Produktionsbedingungen anhand der im Sediment überlieferten Signale sowie für quantitative Aussagen über die Sauerstoffzehrung des Sediments oder Verände-

292 **Abb. 1.** Schematische Darstellung frühdiaogenetischer Prozesse in Oberflächensedimenten und Beispiele für deren mathematische Formulierung in numerischen Modellen.

rungen der Redoxzonierung als Folge natürlicher Veränderungen oder anthropogener Beeinflussungen des Ökosystems Meeresboden. Die Bearbeitung solcher Fragestellungen und Zielsetzungen erfordert die numerische Modellierung frühdiagenetischer Prozesse, um statistisch abgesicherte quantitative Abschätzungen und prädiktive Aussagen über die Folgen dieser Beeinflussungen zu erstellen.

## 2 Frühdiagenetische Prozesse

Aus prozessorientierter Sicht läßt sich die Summe der frühdiagenetischen Abläufe in Transport- und Reaktionsprozesse gruppieren (Abbildung 1). Biologische Transportprozesse werden in die Bioturbation (Sedimentdurchmischung) und die Bioirrigation (das Einstrudeln von Bodenwasser in das Sediment) untergliedert. Entsprechend der unterschiedlichen Lebensstrategien benthischer Organismen wurden verschiedene Modellansätze zur Beschreibung biologischer Transportprozesse entwickelt [1, 2, 3]. Für die Quantifizierung des Stofftransports im Sediment und durch die Sediment-Wasser Grenzfläche sind weiterhin physikalische Transportprozesse wie die molekulare Diffusion und die Porenwasseradvektion zu berücksichtigen.

Zu den Reaktionsprozessen gehören der mikrobielle Abbau von organischem Kohlenstoff, die daran gekoppelten Folgereaktionen wie die Mangan- und Eisen-Reduktion, die Methanbildung, Änderungen des pH-Werts sowie physikochemische Reaktionen wie die Lösung von Kalziumkarbonat oder biogenem Opal. In frühdiagenetischen Modellen werden unterschiedliche Ansätze zur Beschreibung der Kinetik mikrobieller und physikochemischer Reaktionen verwendet. Hierzu zählen die Monod-Kinetik, die Michaelis-Menden Gleichung oder Reaktionen 0. oder 1. Ordnung [2].

Zur prozessorientierten Modellierung frühdiagenetischer Abläufe wurde bereits von Berner [1] eine Transport-Reaktionsgleichung aufgestellt, die auch als diagenetische Grundgleichung bezeichnet wird:

$$\frac{\delta C}{\delta t} = \frac{\delta}{\delta t} \left( D_s \frac{\delta C}{\delta x} \right) - w \frac{\delta C}{\delta x} + \Sigma R$$

Die diagenetische Grundgleichung beschreibt die zeitliche Änderung der Konzentration einer gelösten oder par-

tikulären Spezies ( $\delta C/\delta t$ ) als Folge der molekularen Diffusion ( $D_s$ ) bzw. der Bioturbation ( $D_{bio}$ ), die in erster Näherung als diffusionsanaloger Prozess betrachtet werden kann, der Sedimentation ( $w$ ) und der Summe der mikrobiellen bzw. physikochemischen Reaktionen ( $\Sigma R$ ), denen die betrachtete Spezies unterliegt. Die Lösung dieser partiellen Differentialgleichung setzt die Vorgabe von Anfangs- und Randbedingungen voraus, wobei numerische Methoden wie das Crank-Nicholson-Verfahren, Anwendung finden [2, 4]. Des Weiteren ist zwischen steady state Bedingungen ( $\delta C/\delta t = 0$ ), bei denen keine zeitliche Veränderung der Konzentration zu beobachten ist, und Non-steady-state-Bedingungen ( $\delta C/\delta t \neq 0$ ) zu unterscheiden. Für die Beschreibung diagenetischer Abläufe in Tiefseesedimenten ist die Annahme von Steady-state-Bedingungen eine zwar vereinfachende aber dennoch realistische Näherung, wohingegen in Flachwasser- oder Küstensedimenten Non-steady-state-Bedingungen aufgrund der starken saisonalen Änderungen der Primärproduktion und des Kohlenstoffflusses zu erwarten sind.

Aufgrund der Bedeutung von Sauerstoff als Oxidationsmittel für den Kohlenstoffabbau und die Lebens- und Redoxbedingungen im Sediment ist die Modellierung der  $O_2$ -Konzentration des Porenwassers eine wichtige Zielsetzung frühdiagenetischer Arbeiten. Neben der Modellierung des mikrobiellen Abbaus von organischem Kohlenstoff und der daran gekoppelten

Folgereaktionen ermöglicht die quantitative Betrachtung von  $O_2$ -Profilen die Bestimmung des Kohlenstoffflusses, der die Sedimentoberfläche erreicht und daher für regionale und globale Bilanzierungen des Kohlenstoffkreislaufs relevant ist.

## 3 Frühdiagenetische Prozesse in Tiefseesedimenten

Anhand von Untersuchungen, die an Proben aus Sinkstofffallen durchgeführt wurden, konnten Suess [5] und Berger et al. [6] zeigen, dass bereits in der Wassersäule ein intensiver mikrobieller Abbau von organischem Kohlenstoff stattfindet und in der Regel nur ein geringer Anteil der Primärproduktion den Meeresboden erreicht. Nichtsdestoweniger findet im Bereich der Sediment-Wasser Grenzfläche eine ausgeprägte Sauerstoffzehrung statt, die mit *In-situ*-Messungen [7, 8, 9] belegt werden kann. Abbildung 2 gibt ein Beispiel für Sauerstoffprofile, die im Rahmen der Arbeiten des SFB 313 im Europäischen Nordmeer gemessen wurden. Aufgrund der hohen vertikalen Auflösungen (100–400  $\mu m$ ), mit der diese *In-situ*-Messungen durchgeführt werden, ist es möglich, den Kohlenstofffluss, der die Sedimentoberfläche erreicht zu quantifizieren und Abbauraten zu modellieren.

Hierfür wurde eine modifizierte Form der diagenetischen Grundgleichung für Steady-state-Bedingungen numerisch gelöst. Unter Verwendung numerischer Optimierungsverfahren

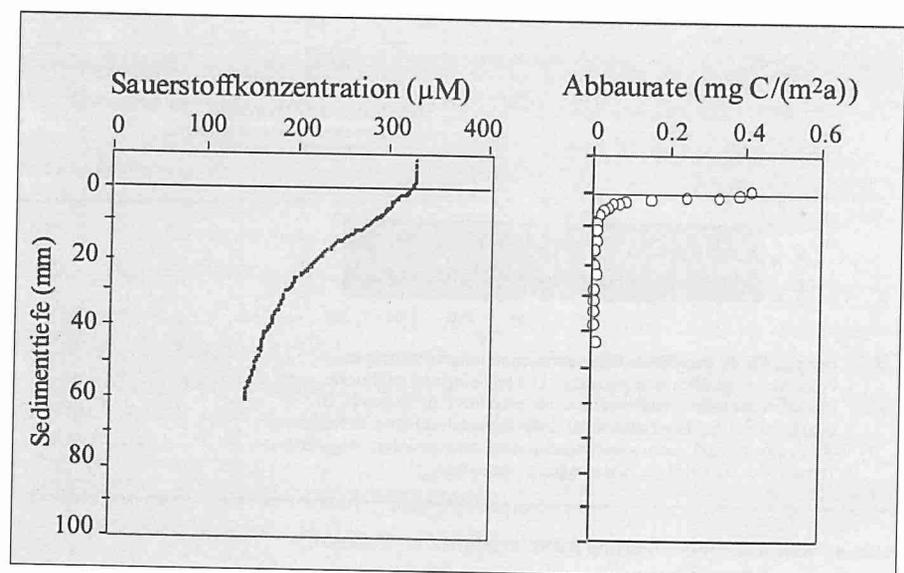


Abb. 2. Sauerstoffprofil, das im Europäischen Nordmeer mit einem *In-situ*-Gerät gemessen wurde. Aus der diagenetischen Modellierung des  $O_2$ -Profils läßt sich die Tiefenabhängigkeit der Abbaurate bestimmen.

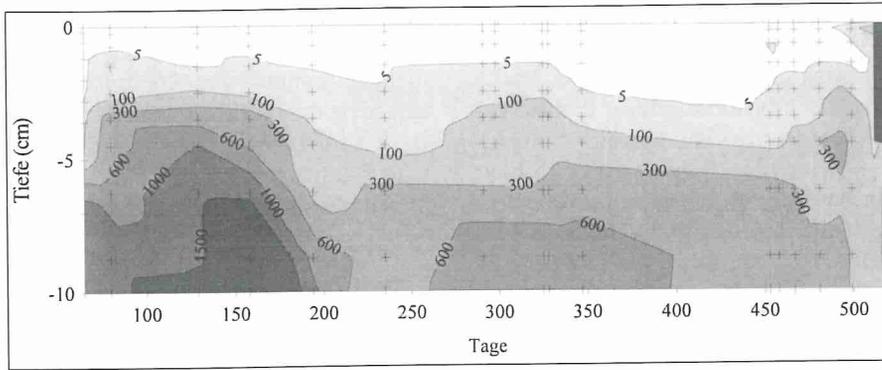


Abb. 3. Saisonale Variation der Porenwasserkonzentrationen von  $H_2S$  (in  $\mu M$ ) die in der Kieler Bucht (19 m Wassertiefe) im Zeitraum von 1994–1996 gemessen wurde.

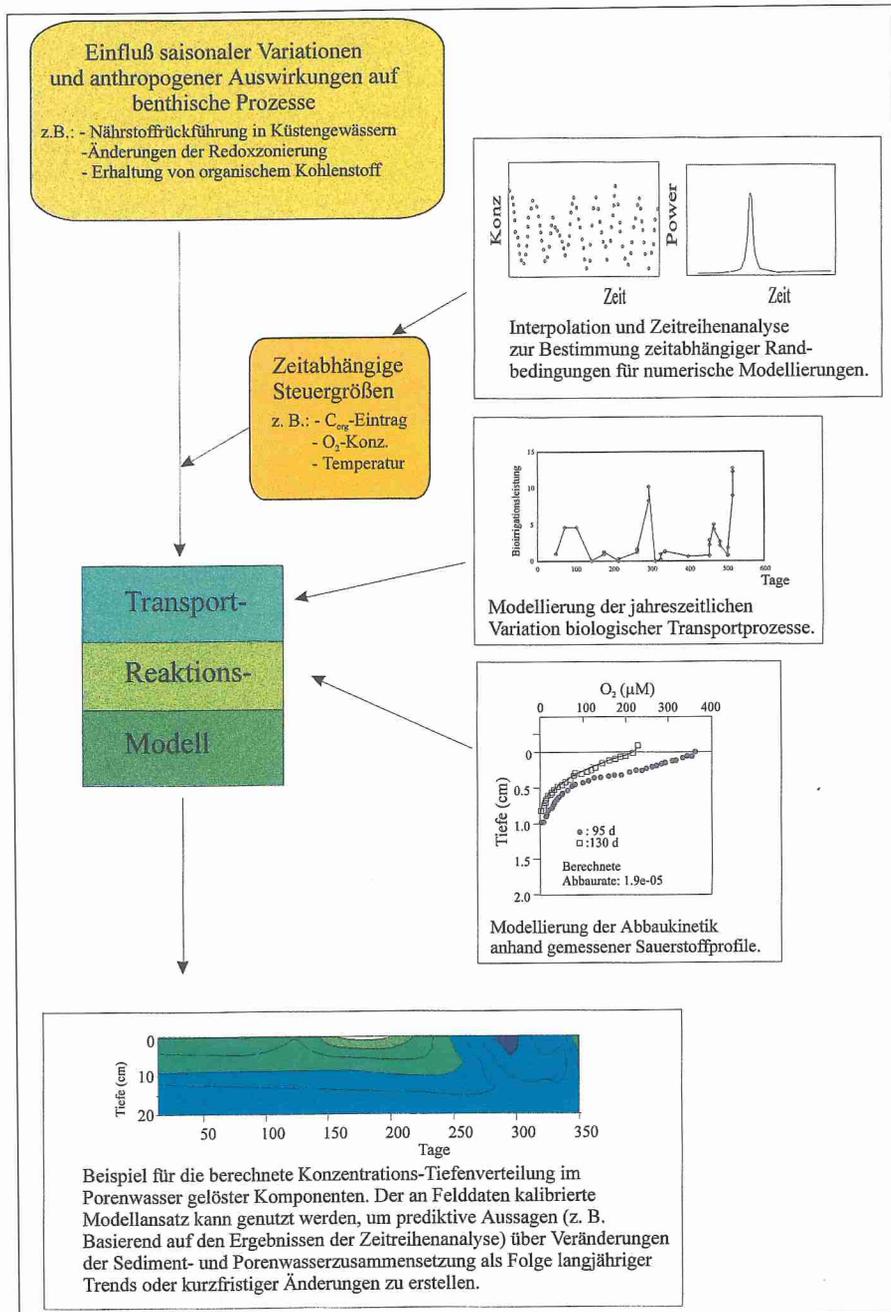


Abb. 4. Saisonale Modellierung frühdiagenetischer Prozesse.

ermöglicht die Anpassung des Modells an die Messwerte die Bestimmung der Tiefenabhängigkeit der mikrobiellen

Abbaukinetik (Abbildung 2). Die rasche Abnahme der Abbaurrate weist auf den hohen Anteil an reaktivem organi-

schon Kohlenstoff hin, der im unmittelbaren Bereich der Grenzfläche remineralisiert wird. Für das Europäische Nordmeer lassen sich anhand von *In-situ*-Messungen und Modellierungen Aussagen über die Reaktivität und regionale Unterschiede des Kohlenstoffflusses ableiten und in flächenbezogene Bilanzierungen des Kohlenstoffkreislaufs einbinden.

#### 4 Saisonale Änderungen in Flachwasser- und Küstensedimenten

Die ausgeprägten jahreszeitlichen Variationen der Primärproduktion, der  $O_2$ -Konzentration und der Temperatur des Bodenwassers, die zu den Steuerparametern benthischer Prozesse zählen, führen dazu, dass in Flachwasser- und Küstensedimenten starke saisonale Änderungen zu beobachten sind [10]. Im Bereich der Kieler Bucht dokumentiert sich dies beispielsweise im Jahresverlauf der Porenwasserkonzentrationen [11] von  $O_2$ ,  $NH_4$  oder  $H_2S$  (Abbildung 3). Die numerische Modellierung benthischer Prozesse hat dementsprechend der zeitlichen Änderungen dieser Steuerparameter Rechnung zu tragen.

Die Zeitabhängigkeit der Steuerparameter kann durch die Anwendung von Interpolationsverfahren und der Zeitreihenanalyse [4] auf gemessene Jahressgänge berücksichtigt werden. Hierdurch können statistisch abgesicherte Relationen als Randbedingungen für numerische Modellierungen frühdiagenetischer Prozesse genutzt werden. Ein entsprechender Modellansatz ist in Abbildung 4 skizziert. Dieser Modellansatz lässt sich an Felddaten verifizieren und ermöglicht beispielsweise die Quantifizierung der jahreszeitlichen Variation biologischer Transportprozesse und deren Kopplung an den Kohlenstoffeintrag. In Verbindung mit gemessenen Sauerstoffprofilen ermöglicht dies beispielsweise die Modellierung des Sauerstoffbedarfs des Sediments, eine Größe, die für die ökologische Charakterisierung von Natursystemen relevant ist.

Zur weiteren prediktiven Modellierung frühdiagenetischer Prozesse können Langzeit-Datensätze der Bodenwasserzusammensetzung dienen, die zum Beispiel von Hansen [12] im Rahmen des Ostsee-Monitoring-Projekts erhoben wurden. Die Anwendung der Zeitreihenanalyse auf solche Da-

tensätze ermöglicht eine erste Generalisierung des saisonalen Grundmusters der Steuerparameter. In Verbindung mit zeitabhängigen, prozessorientierten Modellen, die an Felddaten verifiziert wurden, können Aussagen über zu erwartende Veränderungen, zum Beispiel als Folge anthropogener Änderungen des zeitlichen Grundmusters abgeleitet werden.

#### Literatur

- [1] R. A. Berner: Early Diagenesis. A Theoretical Approach. – Princeton University Press, Princeton 1980, S. 241.  
[2] B. P. Boudreau: Diagenetic Models and Their Implementation. Springer, Heidelberg, 1997, S. 414.  
[3] W. Balzer: Particle mixing processes of Chernobyl fallout in deep Norwegian Sea sediments: Evidence for seasonal effects; *Geochim. Cosmochim. Acta* 60 (1996) 3425–3433.

- [4] M. Schlüter: Einführung in geomathematische Verfahren und deren Programmierung. Enke, Stuttgart, 1996, S. 326.  
[5] E. Suess: Particulate organic carbon flux in the oceans-surface productivity and oxygen utilization; *Nature* 288 (1980) 260–263.  
[6] W. H. Berger, V. Smetacek & G. Wefer (Hrsg.): Productivity in the Ocean: Past and Present, Wiley, New York, 1989, S. 417.  
[7] R. N. Glud, J. K. Gundersen, B. B. Jørgensen, N. P. Revsbech, H.-D. Schulz: Diffusive and total oxygen uptake of deep-sea sediments in the eastern South Atlantic Ocean: *in situ* and laboratory measurements; *Deep-Sea Res.* 4 (1994) 1767–1788.  
[8] O. Pfannkuche: Benthic response to the sedimentation of particulate organic matter at the BIOTRANS station, 47°N-20°W; *Deep-Sea Research II* 40 (1993) 135–150.  
[9] E. Sauter: Eintrag, Akkumulation und Überlieferung von organischem Kohlenstoff in Oberflächensedimenten des Europäischen Nordmeers: SFB Report, 1997, S. 115.  
[10] H. Rasmussen & B. B. Jørgensen: Microelectrode studies of seasonal oxygen

uptake in a coastal sediment: role of molecular diffusion. *Mar. Ecol. Prog. Ser.* (81) 289–303.

[11] B. Lapp & W. Balzer: Early diagenesis of trace metals used as an indicator for past productivity changes in coastal sediments; *Geochim. Cosmochim. Acta* 57 (1992) 4639–4652.

[12] H.-P. Hansen: Saisonale und langzeitliche Veränderungen chemisch-hydrographischer Parameter in der Kieler Bucht. In: J. Duinker (Ed.): *Das Biologische Monitoring der Ostsee im Institut für Meereskunde Kiel*, Ber. Inst. Meereskunde, Kiel, (1993) 2–31.

#### Anschrift der Verfasser:

Dr. Michael Schlüter, Dr. Eberhard Sauter, Dr. Klaus Wallmann, Dr. Olaf Pfannkuche, GEOMAR Forschungszentrum für Marine Geowissenschaften, Wischhofstraße 1–3, D-24148 Kiel.