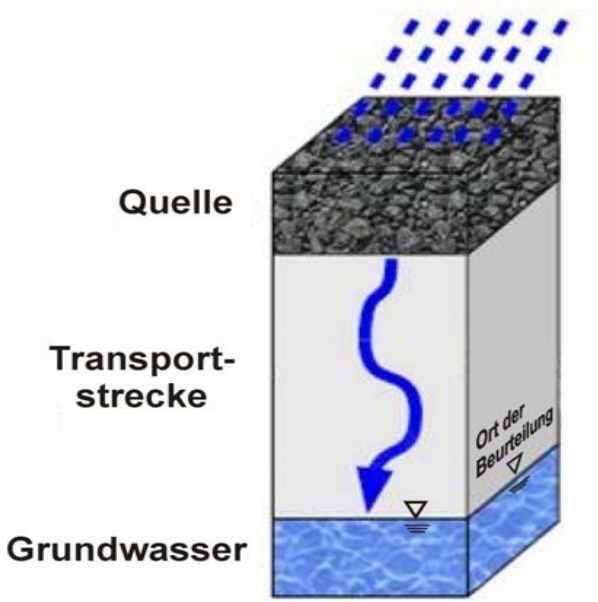
Sickerwasserprognose in der Altlastenbearbeitung mit ALTEX-1D

Teil 2:
Kernelemente der Sickerwasserprognose

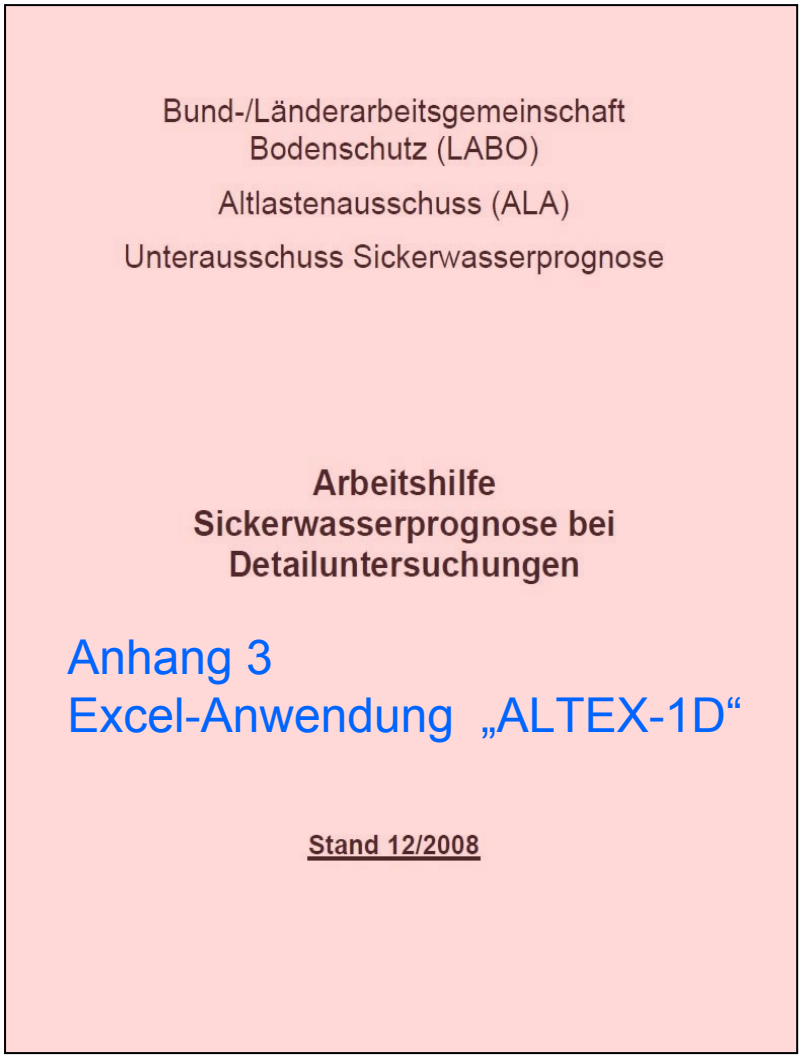
- Standortbeschreibung
- Quelltermcharakterisierung
- Transportbetrachtung



Dipl.-Ing. B. Engeser (LBEG)

Stand Februar 2010

Arbeitshilfe „Sickerwasserprognose bei Detailuntersuchungen“



Zielsetzung der Arbeitshilfe DU ist die **quantifizierende Abschätzung** des durch Sickerwasser verursachten Stoffeintrages in das Grundwasser bzgl. Konzentrationen $c_{si}(t)$ und Frachten $E_{si}(t)$

Die Arbeitshilfe DU enthält als Anhang die Excel-Anwendung ALTEX-1D

ALTEX-1D

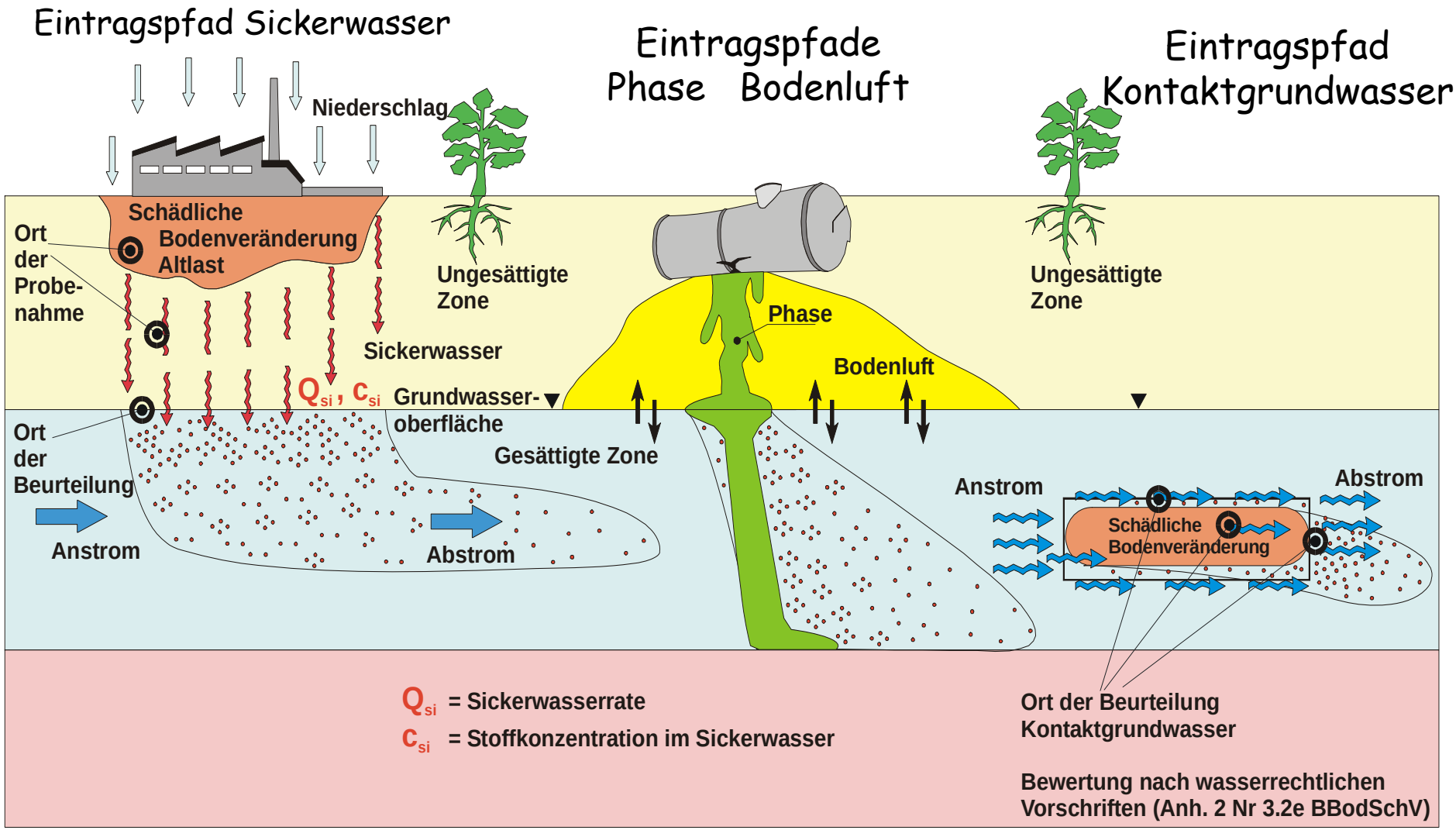
Analytische **L**ösung der
1D - Transportgleichung mit **Ex**cel

ALTEX-1D ist ein Transportprognosemodell auf der Grundlage der analytischen Lösung der eindimensionalen Advektions-Dispersions-Transportgleichung

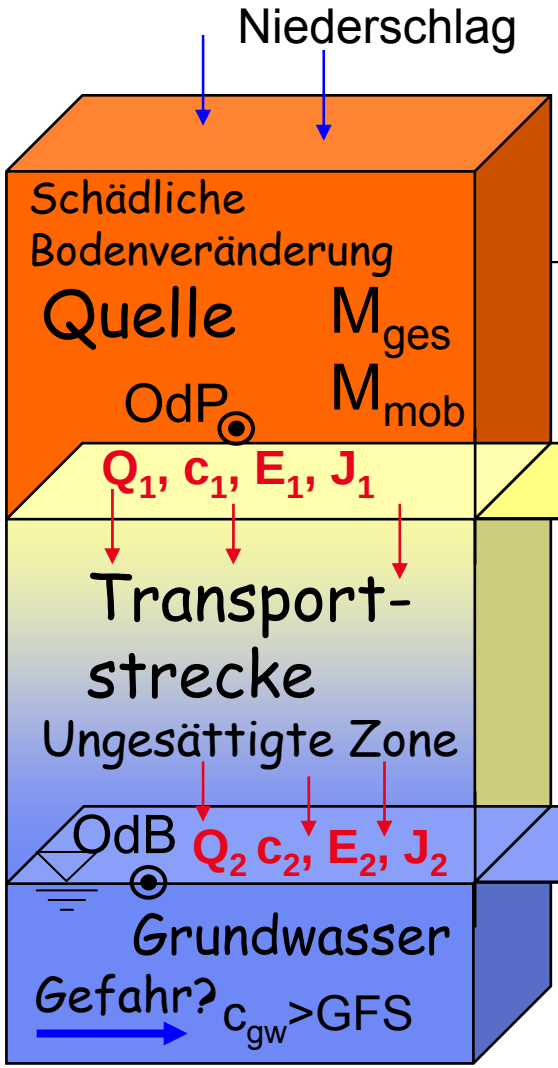
Fallgestaltungen bei der bodenschutzrechtlichen Gefahrenbeurteilung für den Wirkungspfad Boden-Grundwasser

Standardfall

Sonderfälle



Sickerwasserprognose - Konzeptionelle Modellvorstellung für den Standardfall



Beschreibung der Quelle

Schadstoffinventar → M_{ges}

Schadstofffreisetzung → M_{mob}

- derzeit
- zukünftig

1 Austrittsfläche F_1

$c_1(t), E_1(t), J_1(t)$

$J_1(t)$: Quellstärke

Transportbetrachtung

Quantifizierung Schadstoffminderung

z_s

Dispersion

Sorption

Abbau

→ $c_2(t) <= c_1(t)$

2 Eintrittsfläche F_2

$c_2(t), E_2(t), J_2(t)$

$J_2(t)$: Emissionsstärke

ALTEX-1D

Q: Sickerwasserrate

c: Schadstoffkonzentration im Sickerwasser

E: Fracht = Q*c

J: Quell- bzw. Emissionsstärke = Fracht/Fläche = E/F

OdP: Ort der Probenahme

OdB: Ort der Beurteilung

Kernelemente der Sickerwasserprognose

Standortbeschreibung

- Definition der Transport-strecke (OdB)
- Wasserhaushalt
  - Sickerwasserrate/
  - Grundwasserneubild.
- Parametrisierung der Transportstrecke
  - Schichtenprofil
  - Bodenkennwerte
- Wasserhaushalt
  - Sickerwasserrate/
  - Grundwasserneub.

Beschreibung der Quelle

- Schadstoffinventar
  - Art
  - Gesamtmasse
  - Verteilung (hor./vert)
- Schadstofffreisetzung
  - Konzentration am OdB
    - aktuell
    - zukünftig
  - mobilisierbare Masse

Transportbetrachtung

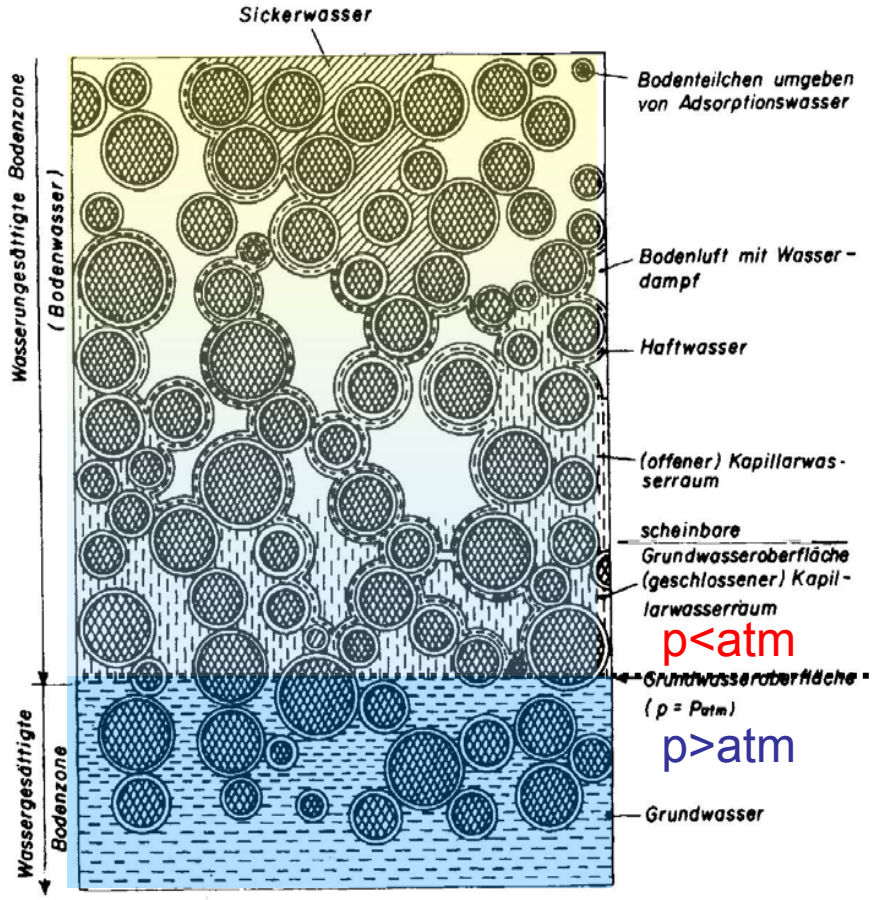
- Schadstoffminderung in der Transportstrecke
  - -Analytisch (ALTEX-1D)
  - -numerisch
  - -Massenbilanz/ Laboruntersuchungen

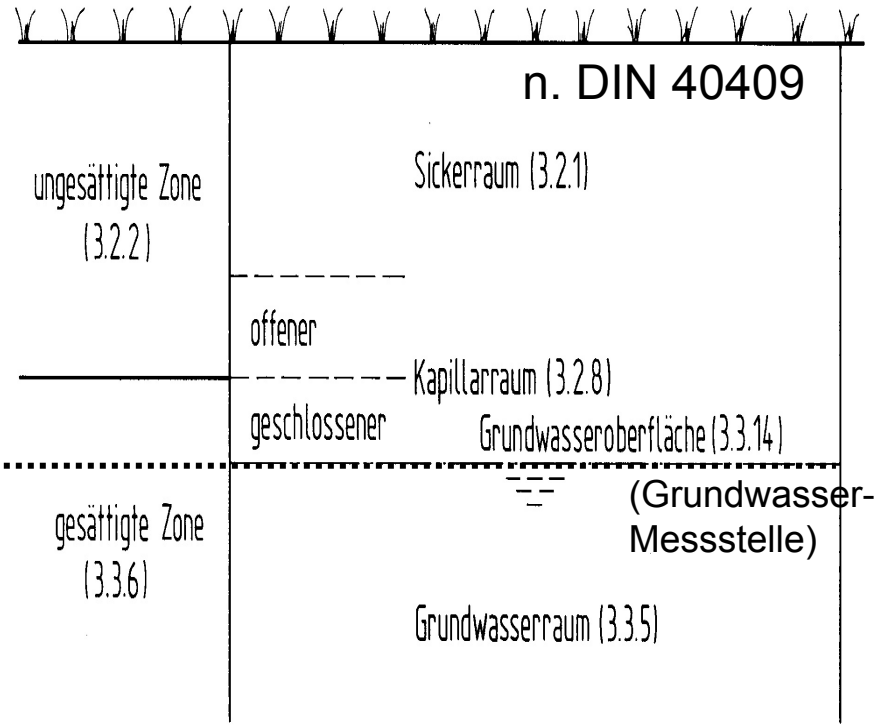
Workflow

Der Übergangsbereich ungesättigte/gesättigte Zone (OdB) aus fachlicher Sicht

Mächtigkeiten geschl. Kapillarraum n. KA5 →

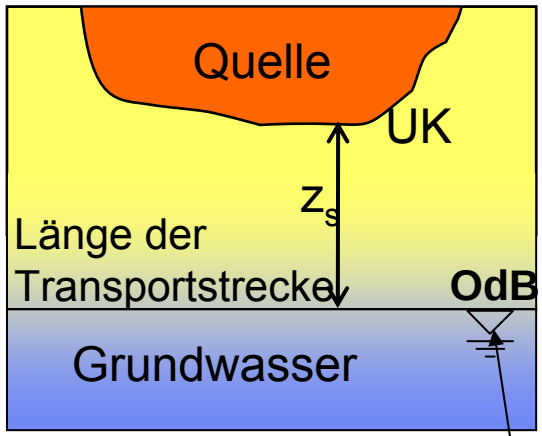
Boden-/Gesteinsart	Mächtigkeit (m)
Grobsand (gS)	<0,1
Mittelsand (mS)	± 0,1
Feinsand (fS)	± 0,2
schluffiger Sand (Su2)	± 0,3
stark lehmiger Sand (Sl4)	± 0,4
mittel toniger Schluff (Ut3)	± 0,5

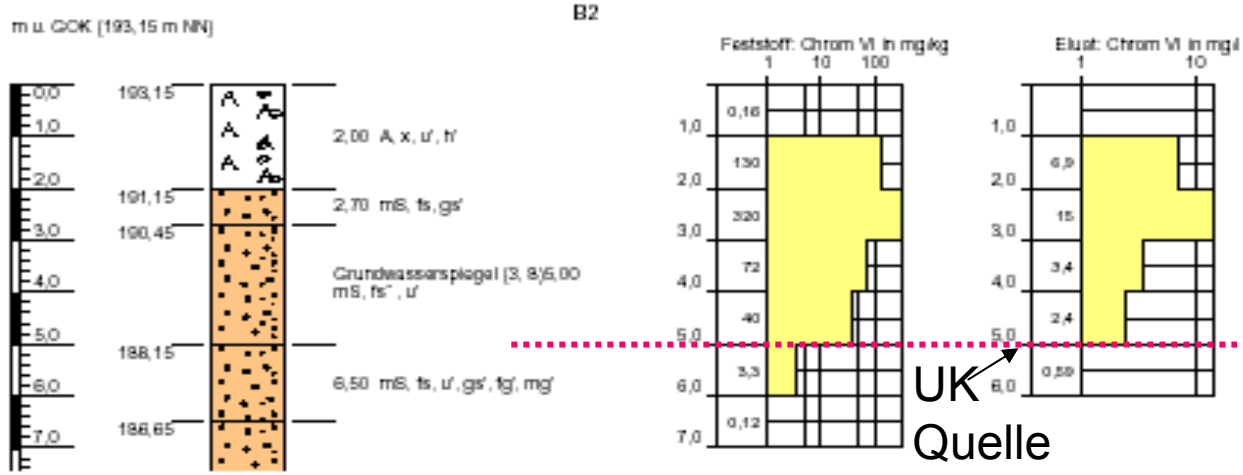


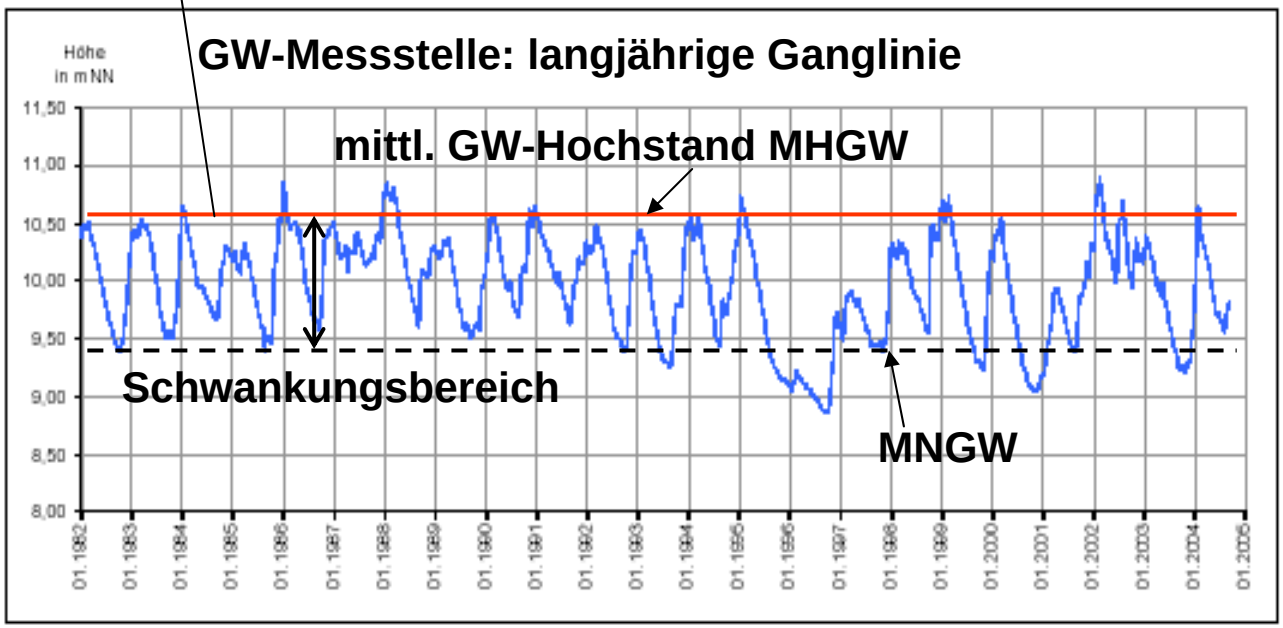


Standortbeschreibung - Definition der Transportstrecke/Ort der Beurteilung (OdB)

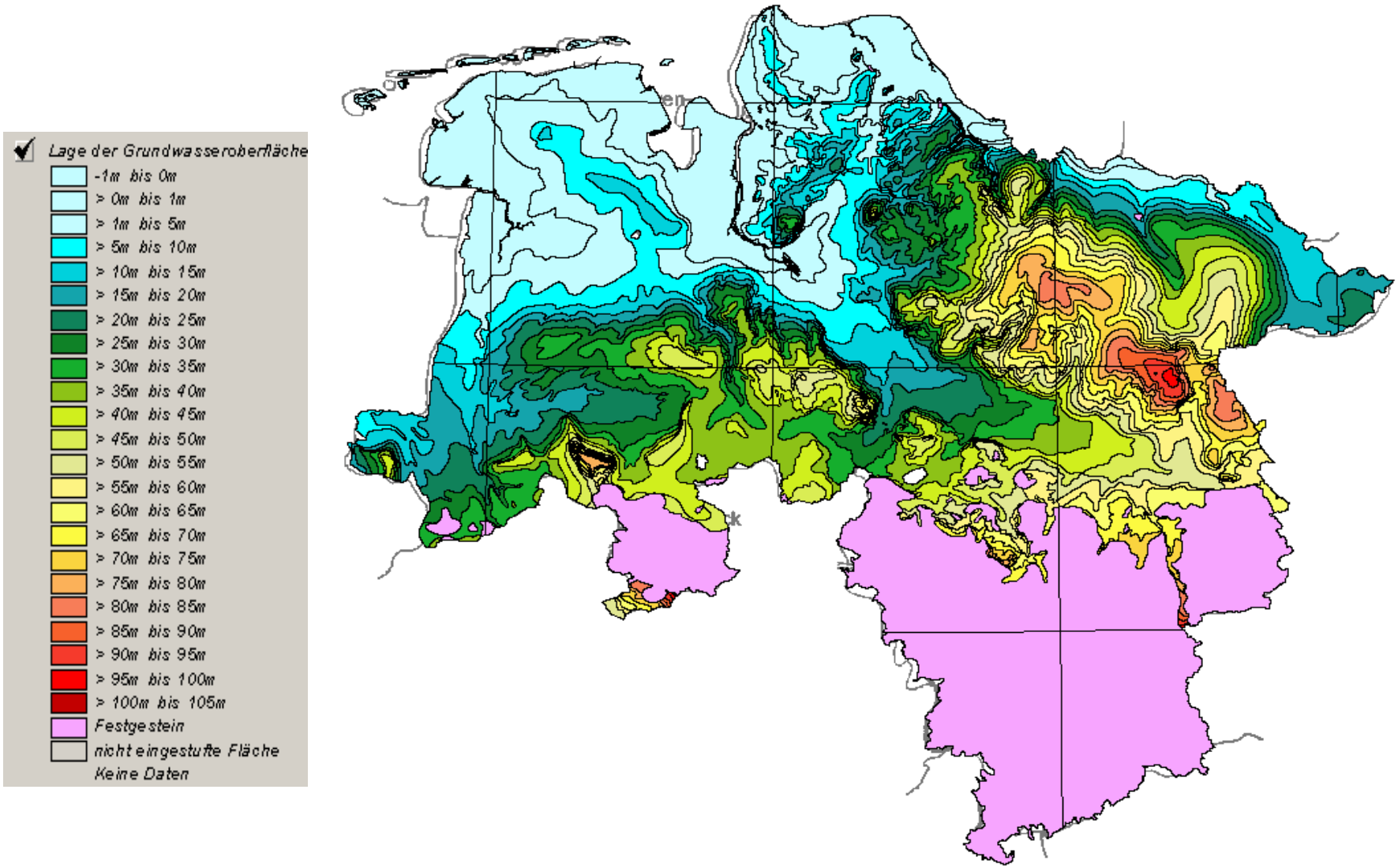
Vertikales Kontaminationsprofil aus Beschreibung der Schadstoffquelle



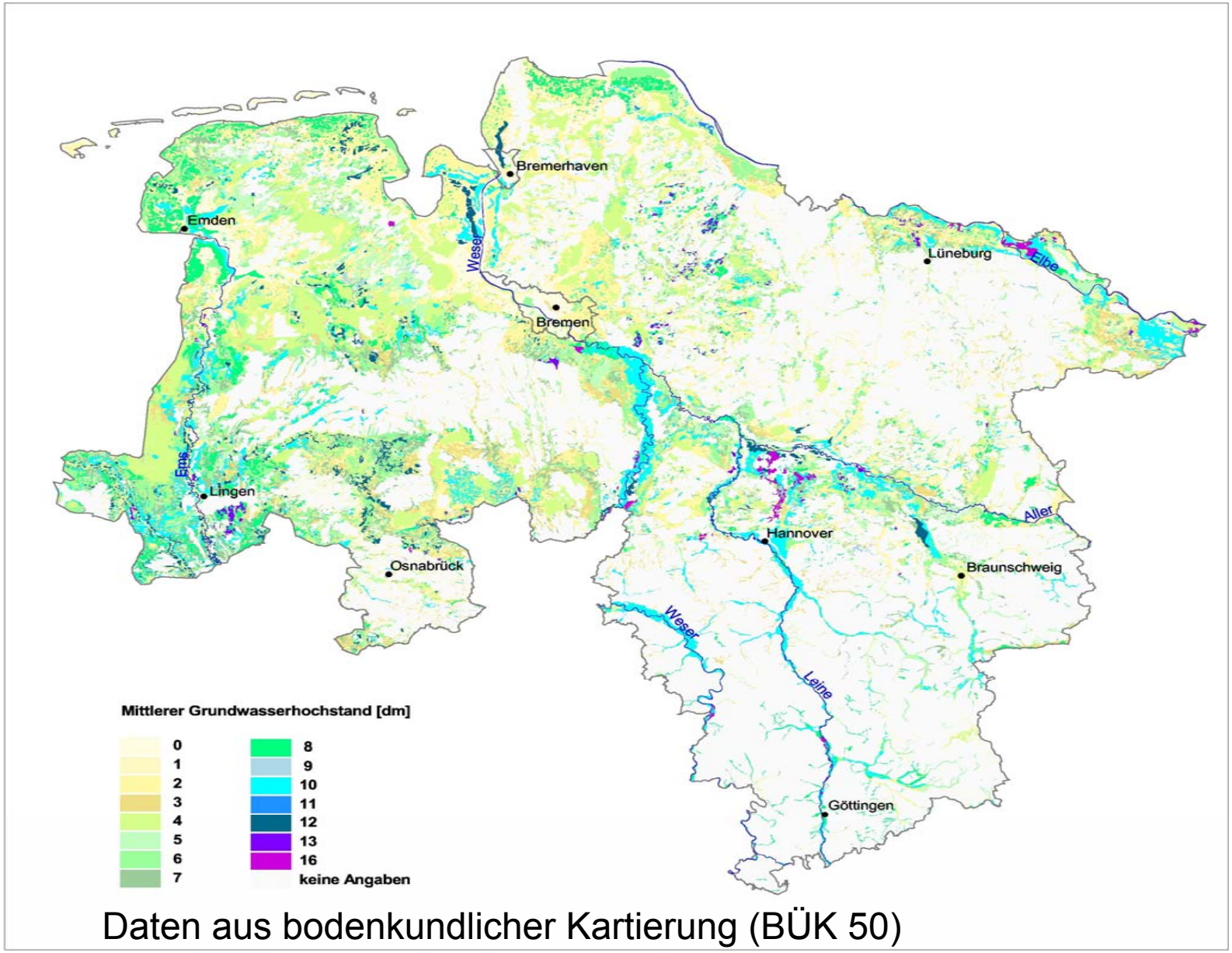




Lage der Grundwasseroberfläche in Niedersachsen (HÜK200)

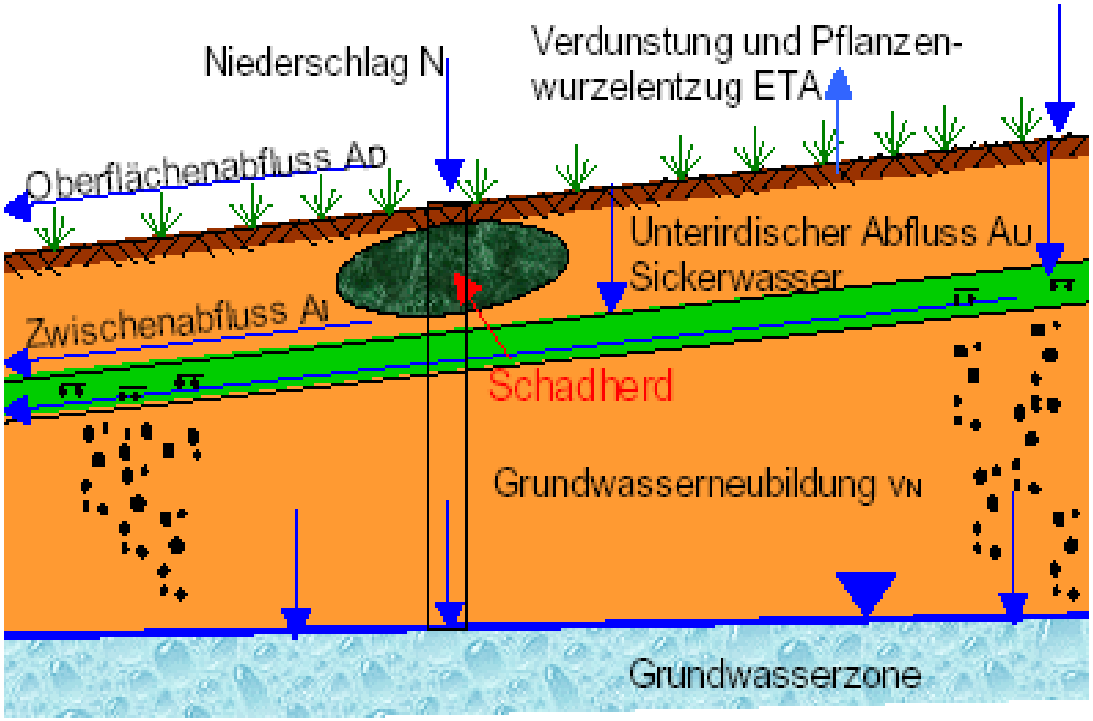


Karte des mittleren Grundwasserhochstandes in Niedersachsen



Daten aus bodenkundlicher Kartierung (BÜK 50)

Standortbeschreibung – Abschätzung der Sickerwasserrate/GWN



Einflussgrößen

-Klimadaten (DWD)
-Nutzung
-Versiegelung
-Bewuchs
-Lage
-Höhe
-Exposition
-Hangneigung

Wasserhaushaltsgleichung

$$N = A_o + A_u + ET_{real}$$

$$A_u = A_i + GWN = SWR$$

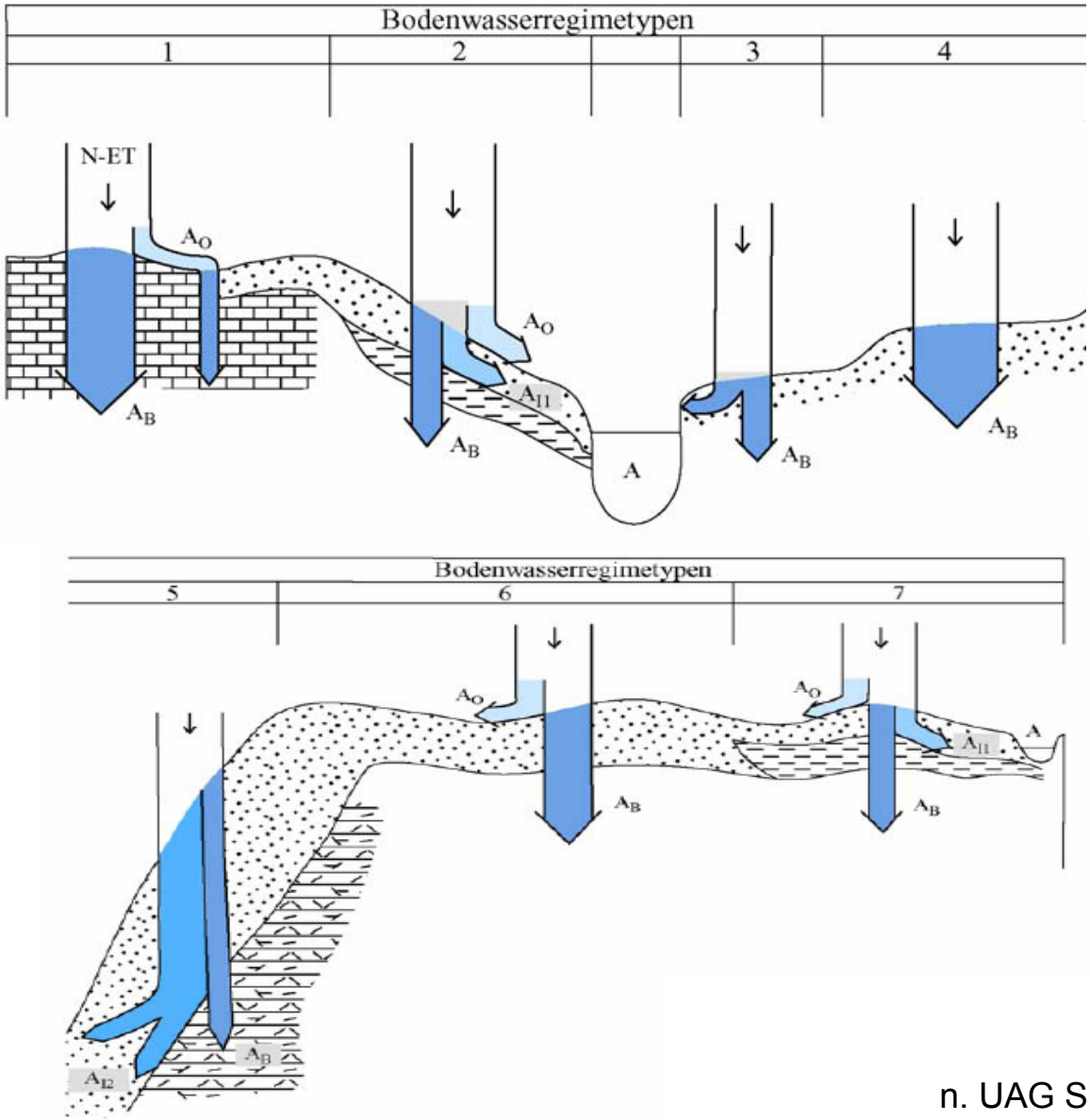
Informationsquellen für SWR/GWN

- Kartenwerke SGD (bspw. GROWA/Niedersachsen)
- Berechnungs-/Abschätzungsverfahren
  - Sickerwasserrate:
    - DIN 19687
    - TUB-BGR
    - BAGLUVA
  - Grundwasserneubildung: Beims & Gutt

Grobe Abschätzung: GWN ca. 1/3 des Niederschlages

N: Niederschlag
ET_{real}: tats. Verdunstung
A_o: oberirdischer Abfluss
A_u: unterirdischer Abfluss
A_i: Zwischenabfluss (Interflow)
GWN: Grundwasserneubildung
SWR: Sickerwasserrate
aus dem Boden

Beurteilung des Zwischenabflusses mit Hilfe von Bodenwasserregimetypen



N = Niederschlag

ET = Evapotranspiration

A = Gesamtabfluss im Vorfluter

A_O = Oberflächenabfluss

A_{I1} = Oberflächennaher Zwischenabfluss

A_{I2} = tieferer Zwischenabfluss

A_B = Grundwasserabfluss = GWN

wasserdurchlässige Bodenhorizonte

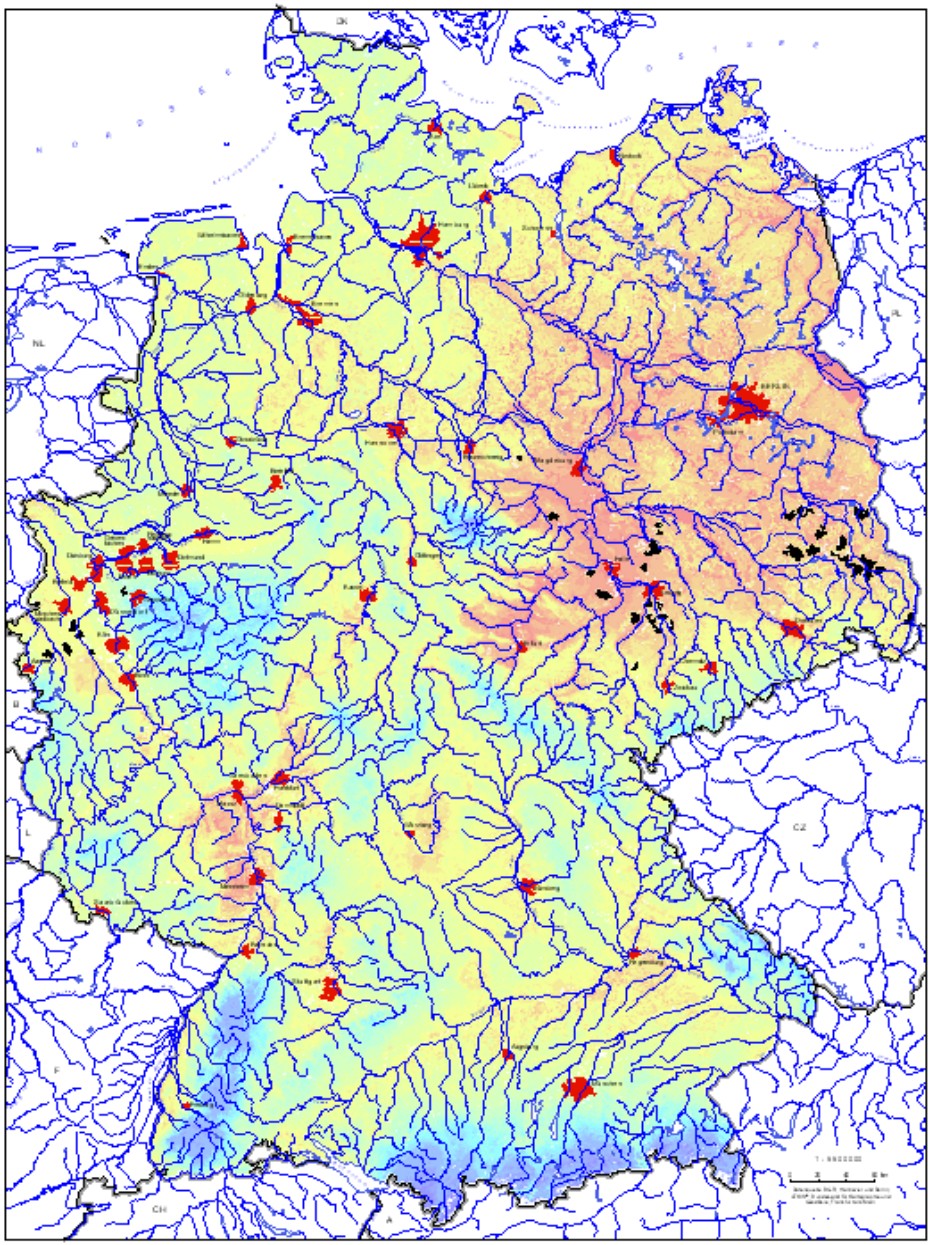
gering wasserdurchlässige Bodenhorizonte

gering wasserdurchlässiger Untergrund

Karst

n. UAG Sickerwasserprognose/BLA-GEO (2008)

Karte der mittleren jährlichen Sickerwasserrate aus dem Boden für Deutschland



© Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover

Mittlere Sickerwasserrate aus dem Boden in mm/Jahr

0
50
100
150
200
300
400
500
600
700
800
900
1000
1500
2000

nicht bewertete Flächen

Versiegelte Flächen in größeren Städten

Technogen gestaltete Böden, große Abbauflächen und Halden

HYDROLOGISCHER ATLAS VON DEUTSCHLAND

Herausgegeben vom Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit

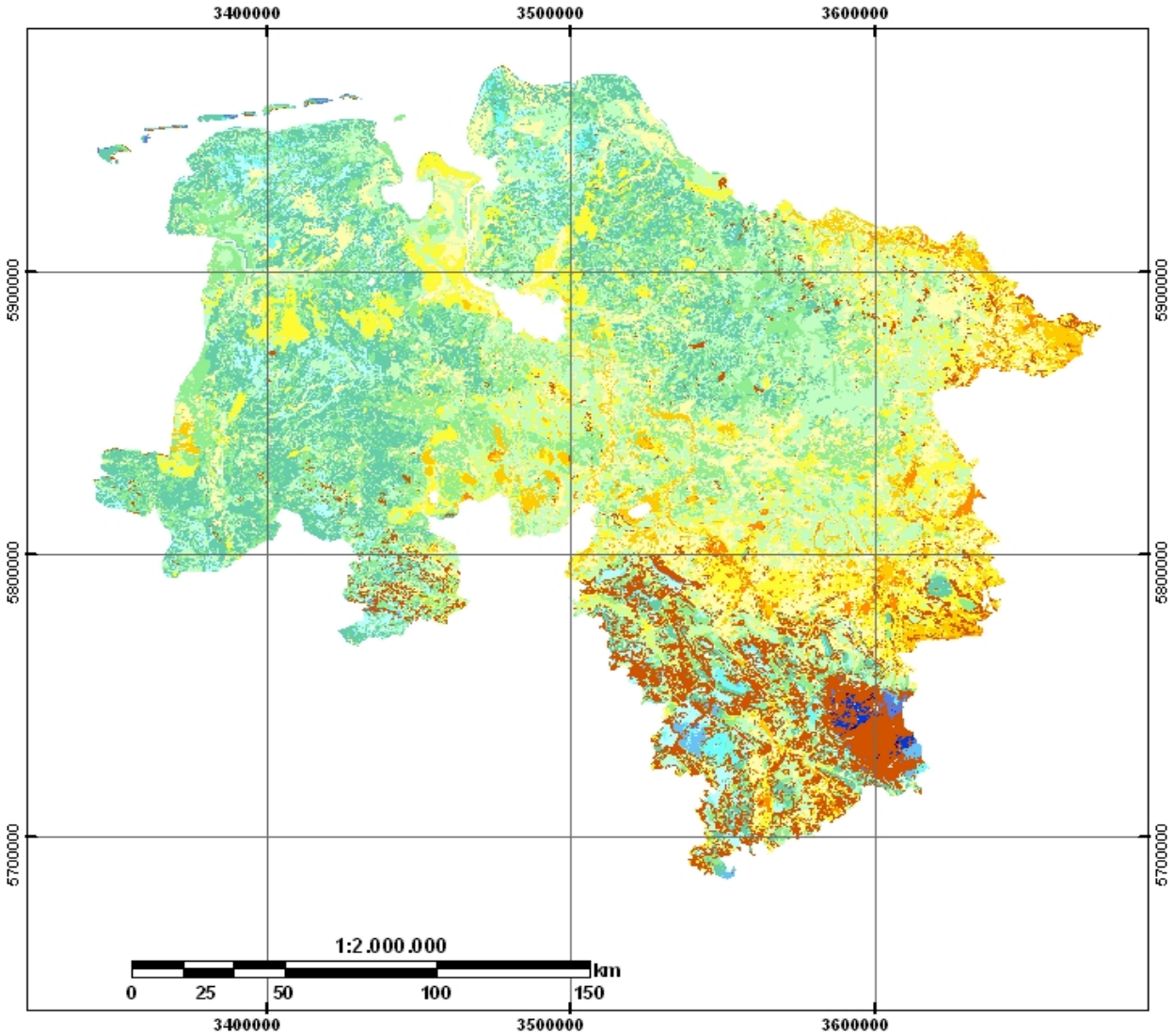
4.5 Sickerwasserrate aus dem Boden

Autoren: W. Duijnisveld, V. Henninga, W. Stolz, N. Martin, A. Richter, J. Behrens
Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover / Berlin

Wissenschaftliche Beratung: W. Eckelmann, W. Struckmeier (BGR), F.-J. Kern (IHF), G. Wessolek (TU Berlin)

Kartographie: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe, Hannover (U. Stegger)
Institut für Hydrologie, Universität Freiburg i. Br.

Standortbeschreibung – Sickerwasserrate in Niedersachsen



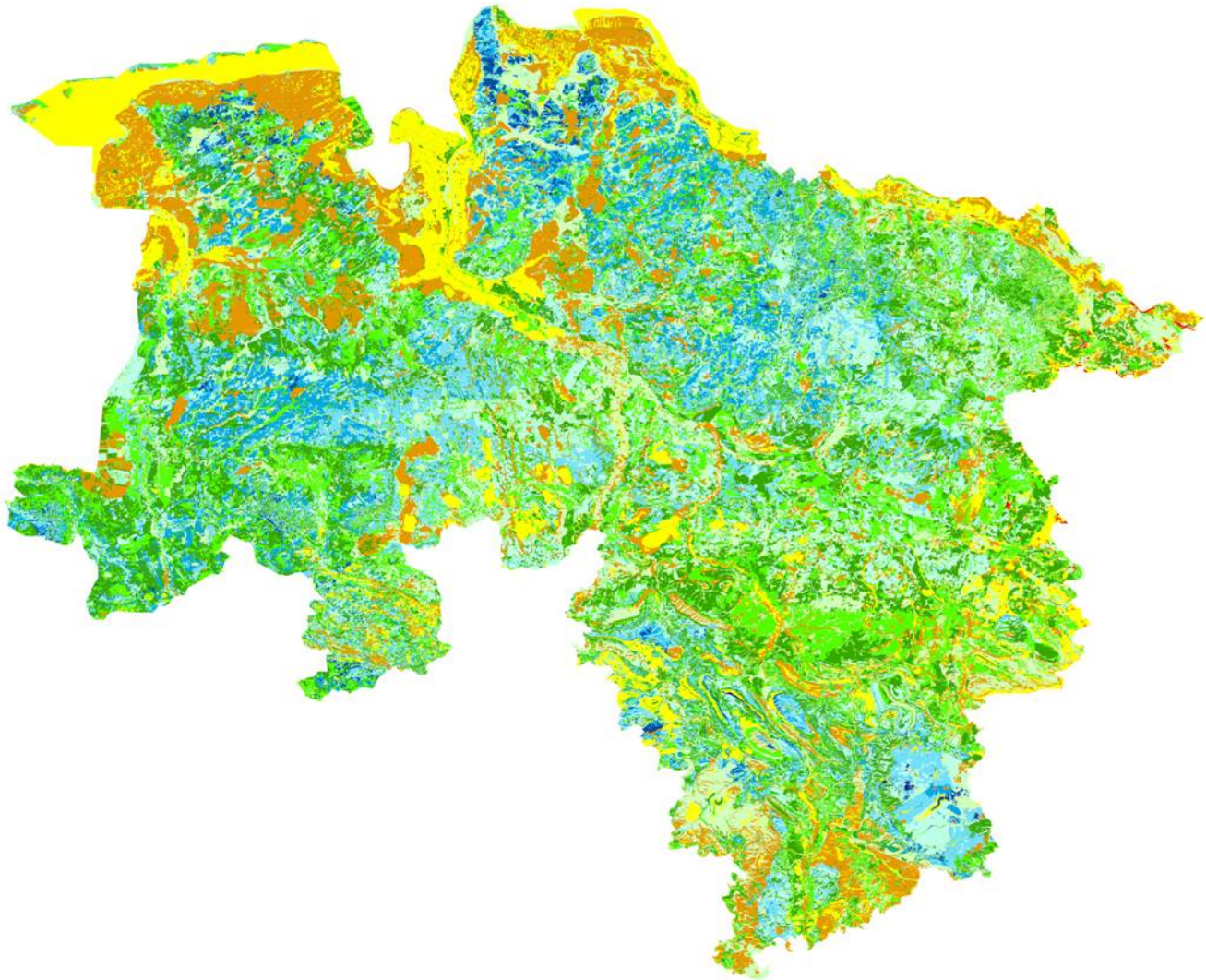
Sickerwasserrate nach DIN 19687

(erstellt mit MEMAS/LBEG)

Sickerwasserrate [mm/a]

SWR			
1	0	8	301 - 350
2	1 - 50	9	351 - 400
3	51 - 100	10	401 - 450
4	101 - 150	11	451 - 500
5	151 - 200	12	501 - 550
6	201 - 250	13	551 - 600
7	251 - 300	14	> 601

Standortbeschreibung – Mittlere Grundwasserneubildung in Niedersachsen



Mittlere GWNB-Rate nach Growa06v2 [mm/a]

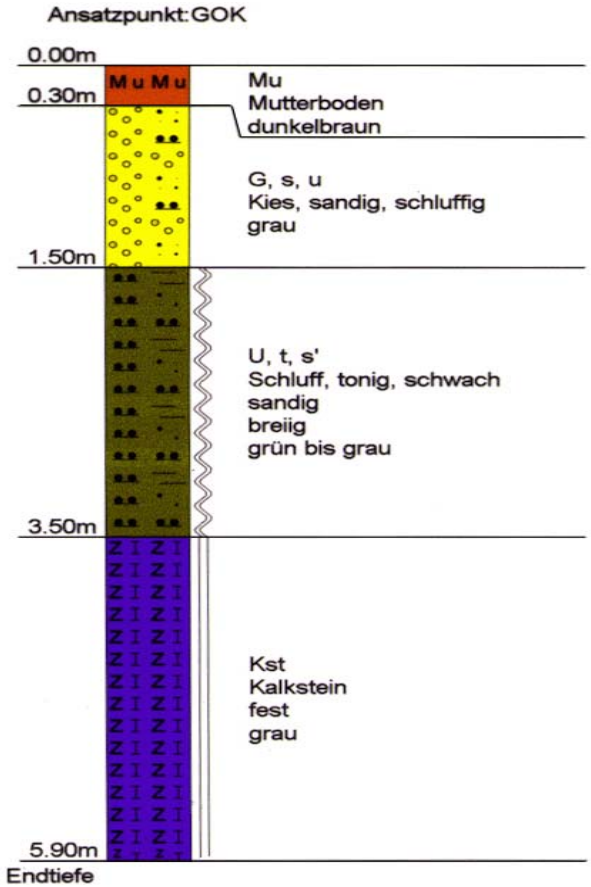
- Zehrgebiete
- 0 - 25 mm/a
- >25 - 50 mm/a
- >50 - 100 mm/a
- >100 - 150 mm/a
- >150 - 200 mm/a
- >200 - 250 mm/a
- >250 - 300 mm/a
- >300 - 350 mm/a
- >350 - 400 mm/a
- >400 - 450 mm/a
- >450 - 500 mm/a
- >500 - 550 mm/a
- >550 - 600 mm/a
- > 600 mm/a

0 30 60 120 Kilometer

Standortbeschreibung – Parametrisierung der Transportstrecke

Schichtenprofil

Boden (0 – 2 m): Bodenkundliche Kartieranleitung (KA 5)
Geologischer Untergrund (> 2 m): EN ISO 14688/89/(DIN 4022)



Für die Transportbetrachtung erforderliche Parameter

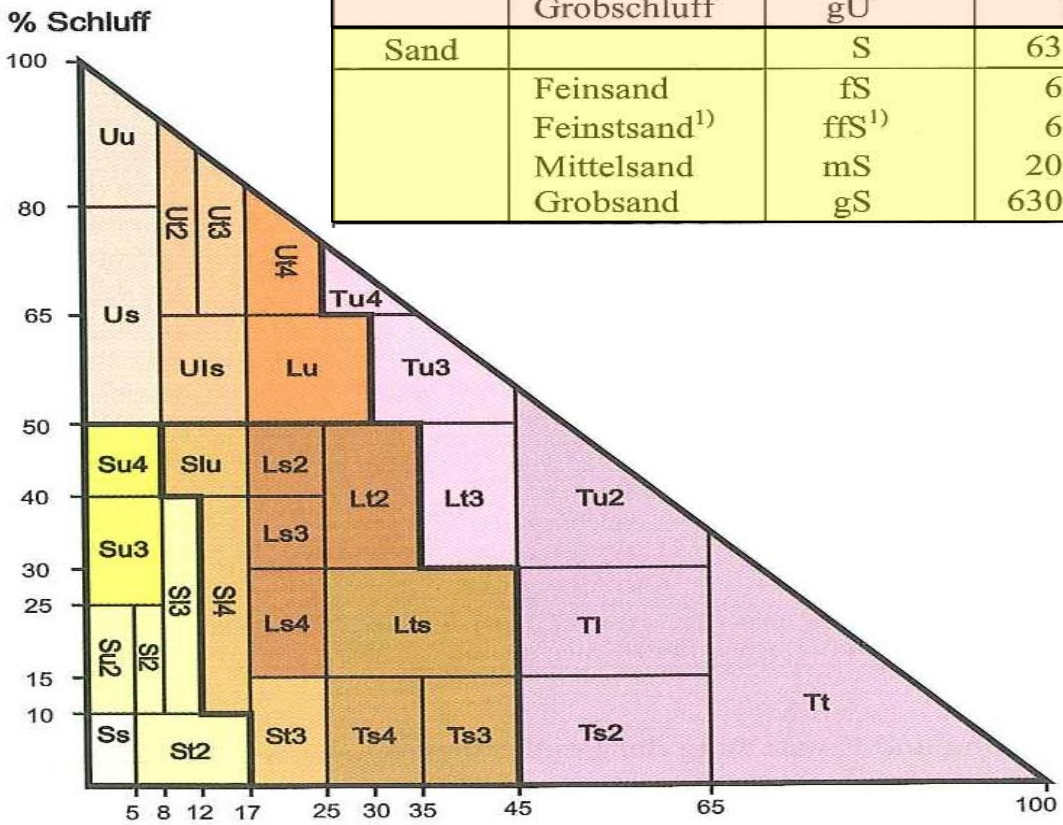
Schichtenverzeichnis/Bodenart (z. Bsp. Su3)

- Grobbodenanteil
- Humusgehalt
- Lagerungsdichte
- Trockenrohdichte
- Feldkapazität/eff. Porosität
- Luftkapazität
- C_{org}
- pH
- Karbonatgehalt
- Tongehalt

Parametrisierung aus Schichtenprofil (Bodenart) über Tabellen der KA 5

Bodenartenklassifikation nach KA 5

Fraktion	Unter-fraktion	Kurz-zeichen	Äquivalentdurchmesser in µm	Äquivalentdurchmesser in mm
Ton		T	< 2,0	< 0,002
	Feinton	fT	< 0,2	< 0,0002
	Mittelton	mT	0,2 bis < 0,63	0,0002 bis < 0,00063
	Grobton	gT	0,63 bis < 2,0	0,00063 bis < 0,002
Schluff		U	2 bis < 63	0,002 bis < 0,063
	Feinschluff	fU	2 bis < 6,3	0,002 bis < 0,0063
	Mittelschluff	mU	6,3 bis < 20	0,0063 bis < 0,02
	Grobschluff	gU	20 bis < 63	0,02 bis < 0,063
Sand		S	63 bis < 2000	0,063 bis < 2,0
	Feinsand	fS	63 bis < 200	0,063 bis < 0,2
	Feinstsand[1)]	ffS[1)]	63 bis < 125	0,063 bis < 0,125
	Mittelsand	mS	200 bis < 630	0,2 bis < 0,63
	Grobsand	gS	630 bis < 2000	0,63 bis < 2,0



Bodenarten-Hauptgruppe	Bodenarten-Gruppe		Bodenart
s Sande		ss Reinsande	Ss
		ls Lehmsande	St2, Su2, Sl2, Sl3
		us Schluffsande	Su3, Su4
l Lehme		sl Sandlehme	Slu, Sl4, St3
		ll Normallehme	Lt2, Ls2, Ls3, Ls4
		tl Tonlehme	Lts, Ts3, Ts4
u Schluffe		su Sandschluffe	Us, Uu
		lu Lehmschluffe	Ut2, Ut3, Uls
		tu Tonschluffe	Ut4, Lu
t Tone		ut Schlufftone	Tu3, Tu4, Lt3
		lt Lehmtone	Tt, Tu2, Tl, Ts2

Profilbeschreibung nach Mindestdatensatz der „Ad-hoc-AG“ Boden der SGD

Mindestdaten für Untersuchungen nach § 3 BBodSchV (Orientierende Untersuchung / Detailuntersuchung)
Flächenbezogene Daten

= obligatorisch = fakultativ

Katasterangaben	Versiegelungsart	Versiegelungsgrad / Anteilskl. (KA 5, Tab. 4, S. 53)	Nutzungsart	Anteilsklasse (KA 5, Tab. 4, S. 53)	Vegetation	Anteilsklasse (KA 5, Tab. 4, S. 53)
Flur 17, Flurstück 297	keine		Ödland, Industriebrache	f6	Staudenflur	f6

Punktbezogene Daten

Titeldaten

Projektbezeichn. 2	Profil-Nr. 3	Datum der Aufnahme Jahr Monat Tag 4	Bearbeiter 5	Rechtswert (in m) 6	Hochwert (in m) 7	Höhe ü. NN 8	Aufschlussart 9	Wasserstand unter GOF 53b	Bodenschätzung 56

Aufnahmesituation

Neigung 11	Exposition 12	Reliefbeschreibung 14/17	Bodenabtrag /-auftrag 18	Nutzungsart 19	Vegetation 20	Witterung 21	anthropogene Veränderungen / bautechnische Maßnahmen 22

Horizontbezogene Daten I und II

Lfd. Nr.	Unter- / Obergrenze 25	Horizontsymbol 27	Bodenfarbe / Substratfarbe 28	Geruch (Art und Intensität)	Humusgehalt 29	oxidative und reduktive Hydromorphiemerkmale 30 31	Bodenfeuchte 32	Konsistenz 33	Hohlräume 37 - 39	Tr.rohdichte o. eff. Lag.dichte / Substanzvol. u. Zers.stufe 40	Grob- / Feinwurzeln 41	Substratgenese 43	Feinboden / Torfart / Muddart 44a	Grobbodenfraktionen u. Anteilsklasse 44b	Σ Grobboden (%) 44c	Geogener C-Gehalt 45	Carbonatgehalt 46	Bodenausgangsgestein 47a	Beimengungen (substanzielle Substratinhomogenitäten) 47d	Proben-Nr.	Entnahmetiefe
1	15	Ah	1. 2. 3.	ölig	h4					Ld3			1. 2 Ut2 3.					1. 2. 3.	1. 2. 3.		
2	40	Al	1. 2. 3.	ölig	h0					Ld2			1. 2 Ut3 3.					1. 2. 3.	1. 2. 3.		
3	60	Bt1	1. 2. 3.		h0					Ld2			1. 2 Lu 3.					1. 2. 3.	1. 2. 3.		
4	80	Bt2	1. 2. 3.		h0					Ld3			1. 2 Ut3 3.					1. 2. 3.	1. 2. 3.		
5	350	Co	1. 2. 3.							Ld2			1. 2 Ut3 3.					1. 2. 3.	1. 2. 3.		
6	> 350	Cr	1. 2. 3.	stark ölig	h0					Ld3			1. 2 Ut3 3.					1. 2. 3.	1. 2. 3.		
7			1. 2. 3.										1. 2. 3.					1. 2. 3.	1. 2. 3.		

Bemerkungen:

© Ad-hoc-AG Boden

Arbeitsunterlagen zur Parametrisierung der Transportstrecke

DEUTSCHE NORM November 2008

DIN 4220

DIN

ICS 13.080.01

Ersatz für
DIN 4220:1998-07

**Bodenkundliche Standortbeurteilung –
Kennzeichnung, Klassifizierung und Ableitung von Bodenkennwerten
(normative und nominale Skalierungen)**

Pedologic site assessment –
Designation, classification and deduction of soil parameters
(normative and nominal scaling)

Assessment pédologique du site –
Désignation, classification et déduction du paramètres du sol
(graduation normatif et nominal)

Gesamtumfang 50 Seiten

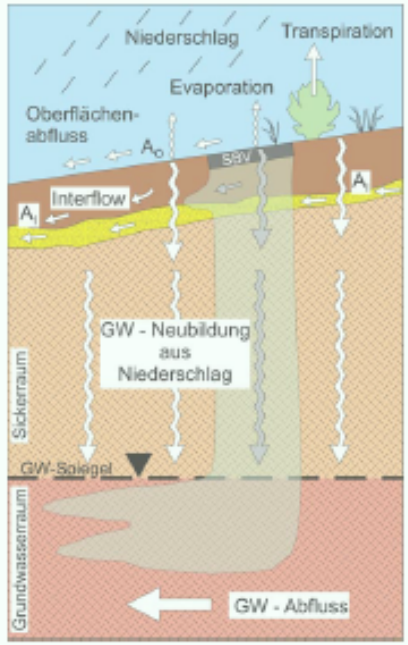
Normenausschuss Wasserwesen (NAW) im DIN

© DIN Deutsches Institut für Normung e.V. · Jede Art der Vervielfältigung, auch auszugsweise, nur mit Genehmigung des DIN Deutsches Institut für Normung e.V., Berlin, gestattet.
Alleinverkauf der Normen durch Beuth Verlag GmbH, 10772 Berlin

Preisgruppe 19
www.din.de
www.beuth.de
1436635

Bund-Länder-Ausschuss Bodenforschung (BLA-GEO)

Empfehlungen für die Charakterisierung und Parametrisierung des Transportpfades Boden-Grundwasser als Grundlage für die Sickerwasserprognose

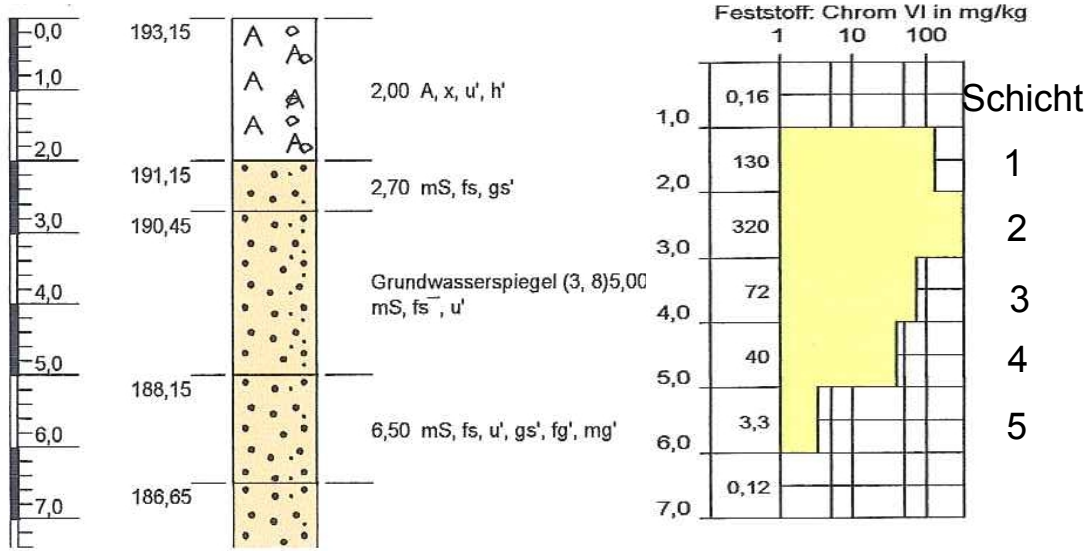


Version 2.0

September 2008

Beschreibung der Schadstoffquelle – Ermittlung des Schadstoffinventars (1)

Parameter Schadstoffinventar
- Art der Schadstoffe
- Gehalte (bez. auf Trockenmasse)
- Verteilung (horizontal, vertikal)
- kontaminierte Fläche
- Schadstoffmasse



1. Schichtprofilbezogene flächenspez. Schadstoffmasse

$$M_{Sch,P} = \sum_{i=1}^{n} \left(G_i \cdot LD_i \cdot Mä_i \right)$$

$M_{Sch,P}$: Schadstoffmasse pro Flächeneinheit im Bereich eines Bodenprofils aufsummiert über die Mächtigkeit der Schadstoffquelle [g/m²]

G_i : Schadstoffgehalt in der Bodenschicht *i* [mg/kg TM]

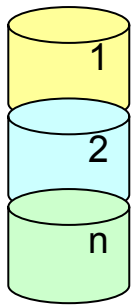
LD_i : Trockenrohdichte der Bodenschicht *i* [kg TM /dm³]

$Mä_i$: Mächtigkeit der kontaminierten Bodenschicht *i* [m²]

i Kontaminierte Bodenschicht [-]

n Anzahl der kontaminierten Bodenschichten [-]

Bodenprofil

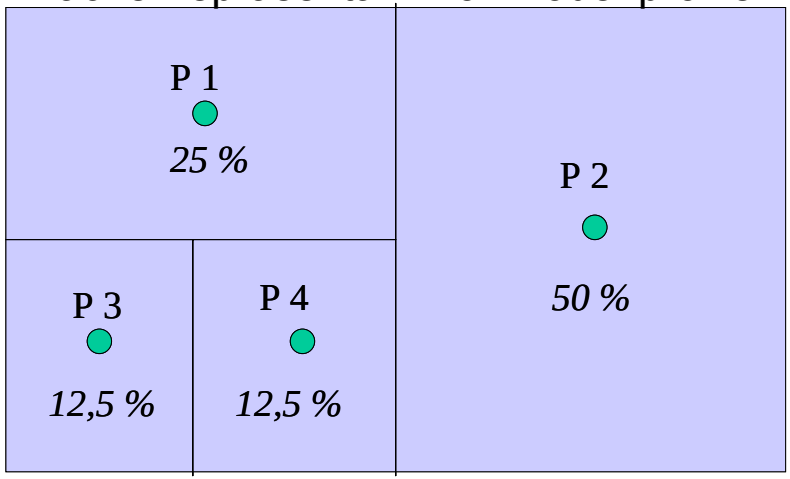


Kontaminierte Schichten

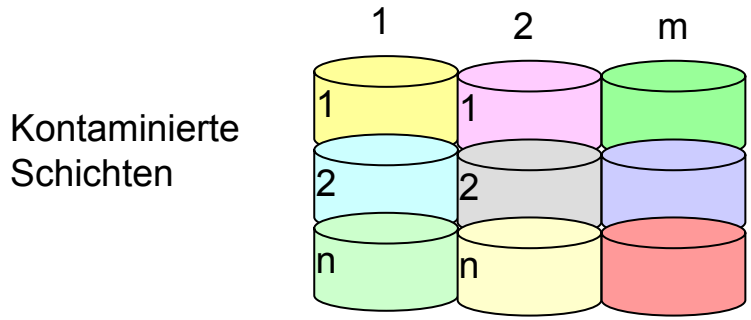
Beschreibung der Schadstoffquelle – Ermittlung des Schadstoffinventars (2)

2. Mittlere flächenrepräsent. Schadstoffmasse des kontaminierten Bodenvolumens

Flächenrepräsentanz von Bodenprofilen



Bodenprofile



$$M_{Sch,Bk} = \sum_{i=1}^{m} \left(M_{Sch,i} \cdot R_i \,/100 \right)$$

$M_{Sch,Bk}$: mittlere flächenrepr. Masse des kont. Bodenvolumens [g/m²]

$M_{Sch,i}$: flächenspez. Schadstoffmasse im kontaminierten Bodenprofil *i* [mg/m²]

R_i: Flächenrepräsentanz des Bodenprofils *i* [%]

i: kontaminiertes Bodenprofil [-]

m: Anzahl der zu berücksichtigenden kontaminierten Bodenprofile [-]

3. Gesamtschadstoffmasse der Quelle

$$M_{Sch,F} = M_{Sch,Bk} \cdot F$$

$M_{Sch,Bk}$: mittlere flächenrepr. Masse des kont. Bodenvolumens [g/m²]

$M_{Sch,F}$ Gesamte Schadstoffmasse der Quelle [g]

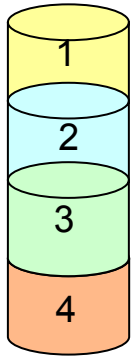
F Gesamte Emissionsfläche der Schadensquelle [m²]

Beschreibung der Schadstoffquelle – Ermittlung des Schadstoffinventars (3)

1. Schichtprofilbezogene flächenspez. Schadstoffmasse

Schicht-Nr	Mä (m)	LD (kg/dm³)	G (mg/kg)	$M_{Sch,P}$ (g/m²)
1	0,3	0,8	100	24
2	1	1,4	250	350
3	0,5	1,8	1000	900
4	0,4	1,5	20	12
				Σ 1286

Kontamination mit Blei



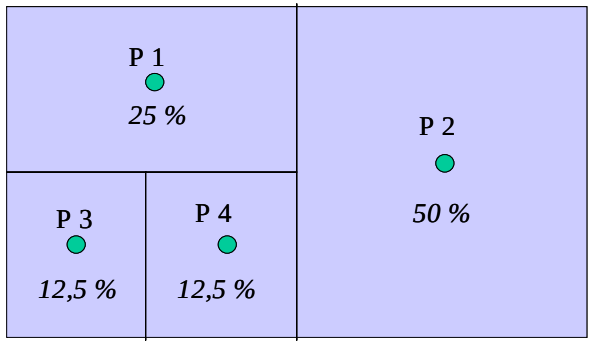
P1

Kontaminierte Schichten

2. Mittlere flächenrepr. Schadstoffmasse des kontaminierten Bodenvolumens

Profil-Nr	$M_{Sch,P}$ (g/m²)	R (%)	$M_{Sch,Bk}$ (g/m²)
P1	1286	25	322
P2	600	50	300
P3	1800	12,5	225
P4	2500	12,5	313
			Σ 1160

Gesamtfläche: 750 m²



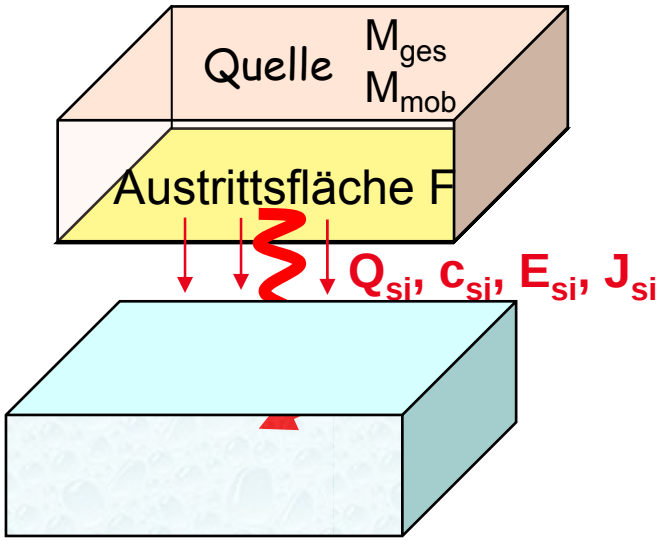
3. Gesamtschadstoffmasse der Quelle

$M_{Sch,F}$ = 750 m² * 1160 g/m² = 870000 g = 870 kg

Beschreibung der Schadstoffquelle – Schadstofffreisetzung

Standardfall:

Freisetzung von Schadstoffen aus einer schädlichen Bodenveränderung infolge der Durchsickerung mit Niederschlagswasser



Definition der Quellstärke

Unter der Quellstärke J versteht man die Schadstoff-Fracht *E*, die pro Flächeneinheit *F* aus der Quelle austritt.

$$J_{si}(t) = SWR \cdot c_{si}(t)$$

$J_{si}(t)$: Quellstärke an der Austrittsfläche der Quelle [mg/(m²/Jahr)]

$c_{si}(t)$: Schadstoffkonzentration im Sickerwasser an der Austrittsfläche der Quelle [mg/L]

SWR: Sickerwasserrate [mm/a] = [l/(m²*Jahr)]

Q_{si}: Sickerwasservolumenstrom = SWR* F [l/Jahr]

$E_{si}(t)$: Schadstoff-Fracht an der Austrittsfläche = Q_{si} * $c_{si}(t)$ [mg/Jahr]

Wichtige Parameter für die Quantifizierung des Freisetzungsverhaltens

- Zeitliche Entwicklung der Schadstoffkonzentration im Sickerwasser: $c_{si}(t)$
- Mobilisierbarer Anteil der Schadstoffmasse: M_{mob}

Ermittlung der Parameter durch Laborversuche

Labor ? Realität

Verfahren nach Anhang 1/3.3 BBodSchV

Anorganik

Gleichsetzung der Konzentrationen im Sickerwasser mit dem
Bodensättigungsextrakt (BSE)
W/F = 0,3

Andere Elutionsverfahren zulässig, wenn **Gleichwertigkeit** zum BSE nachgewiesen

DIN 38414-4 (S4-Eluat)
W/F = 10
DIN 19730 (AN-Extrakt)

Organik

Säulenversuch

(DIN V 19736 zurückgezogen)

Merkblatt Nr. 20/ LUA NRW

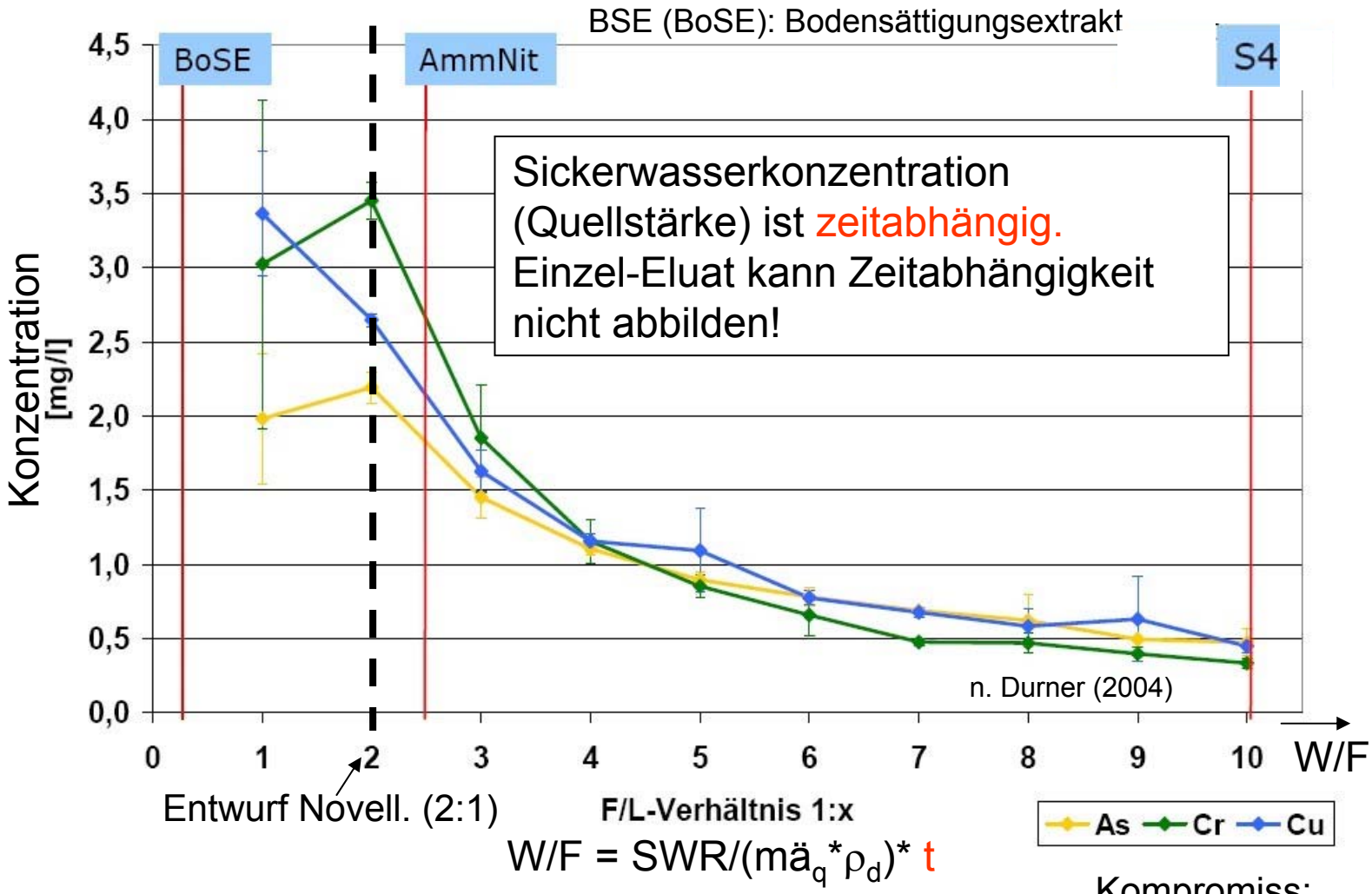
Eignung für PAK nachgewiesen

Geschwindigkeit mit der sich stoffspezifisch die **Gleichgewichtskonzentration** einstellt, ist zu beachten

Ergebnisse und Stand des BMBF-Projektverbundes Sickerwasserprognose Eberle et. al. 21.6.2005: „Eine brauch- und belastbare Umrechnung der Schüttelextraktergebnisse (S4) in den Bodensättigungsextrakt (BSE) ist nicht absehbar.“

Bestimmung der Sickerwasserkonzentration durch Laborversuche

Einfluss des W/F-Verhältnisses



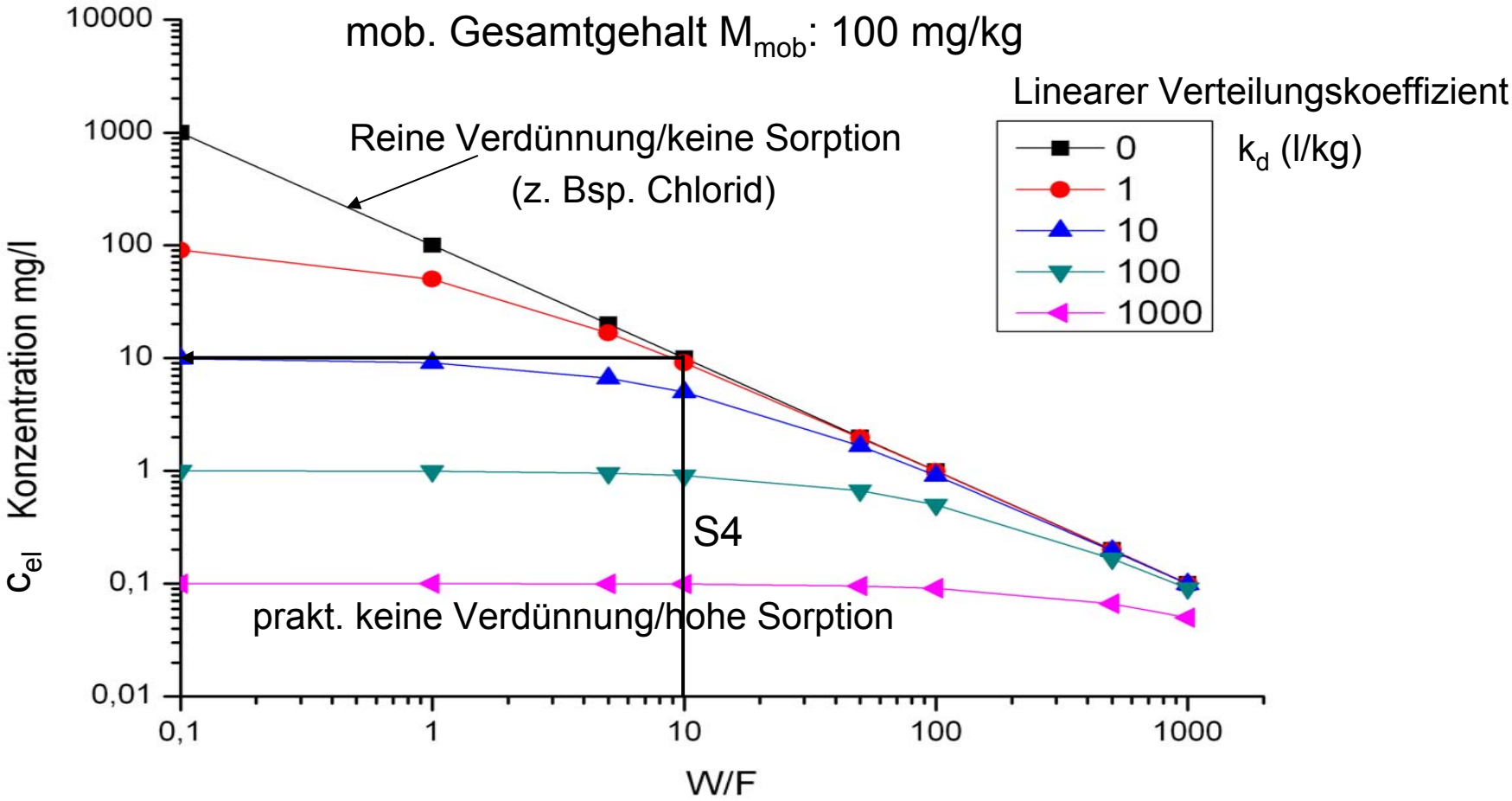
$$W/F = SWR/(mä_q * \rho_d) * t$$

BSE überschätzt die Quellkonzentration (hohe Anfangswerte)
S4 (W/F 10:1) unterschätzt die Quellkonzentration (Verdünnung)

Kompromiss:
Schüttelversuch W/F 2:1
(Novellierung BBodSchV)

Theoretische Eluatkonzentration in Abhängigkeit der Sorptionseigenschaften

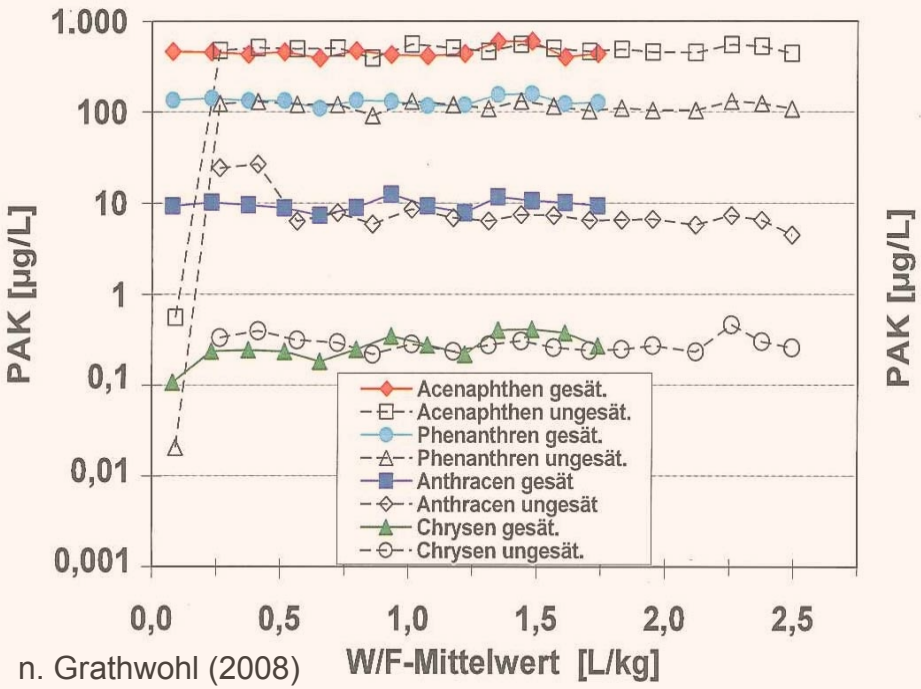
bei linearem Sorptionsgleichgewicht ($c_s = c_w * k_d$) gilt:
$c_{el} = M_{mob}/(WF+k_d)$



Je höher die Sorption desto weniger macht sich Verdünnung durch höheres W/F-Verhältnis bemerkbar!

Typische Zeitverläufe der Quellkonzentration bei Elutions-/Säulenversuchen

Konstante Quellkonzentration

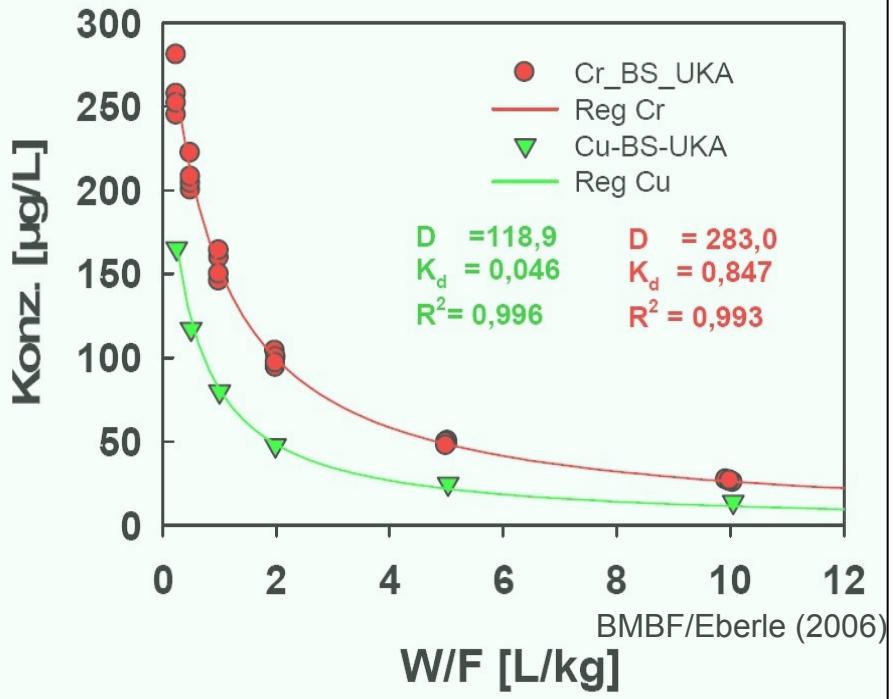


n. Grathwohl (2008)

mit Teeröl (Phase) verunreinigter Boden

Quellkonzentration entspricht der Sättigungskonzentration (Lösungsgleichgewicht) der Einzelstoffe im Teeröl

Exponentiell abfallende Quellkonzentration



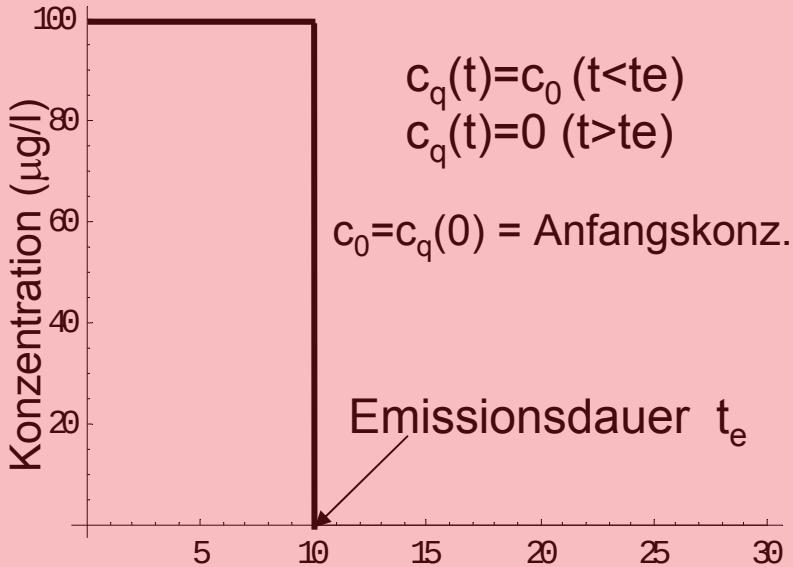
BMBF/Eberle (2006)

Verunreinigung mit sorptiv gebundenen Schwermetallen

Quellkonzentration entspricht dem Sorptionsgleichgewicht (Regressionsfunktion auf Grundlage einer linearen Sorptionsisotherme)

Beschreibung der Quelle – Zeitverhalten der Schadstofffreisetzung

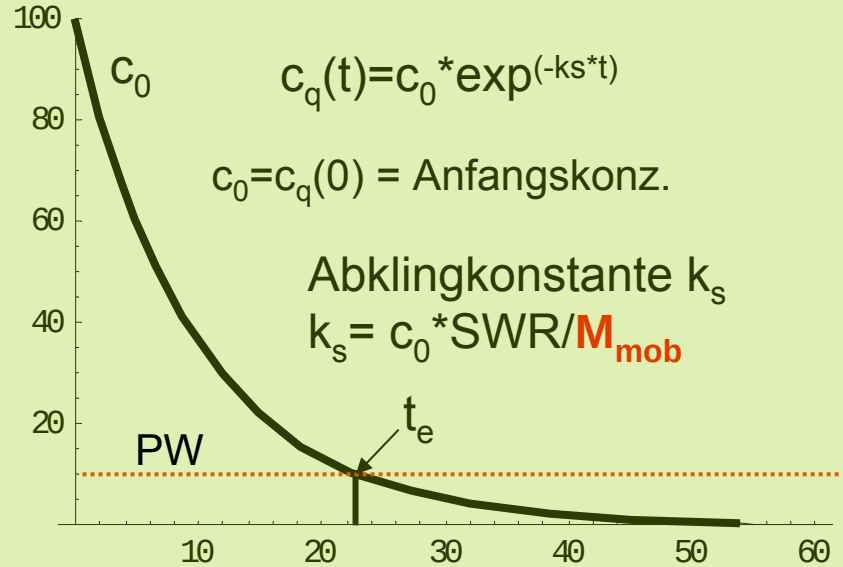
Fallkonstellation A
konstante Quellkonzentration



$c_q(t)=c_0$ (t<te)
$c_q(t)=0$ (t>te)

$c_0=c_q(0)$ = Anfangskonz.

Fallkonstellation B
exponentiell abklingende Quellkonzentration



$c_q(t)=c_0*\exp^{(-ks*t)}$

$c_0=c_q(0)$ = Anfangskonz.

Abklingkonstante k_s
$k_s= c_0*SWR/M_{mob}$

Lösungslimitierte Freisetzung
-org. Schadstoffe in Phase
-leicht lösliche Salze

Emissionsdauer t_e
$t_e=M_{mob}/(SWR*F*c_0)$

Desorptionslimitierte Freisetzung
-sorbierte Schadstoffe

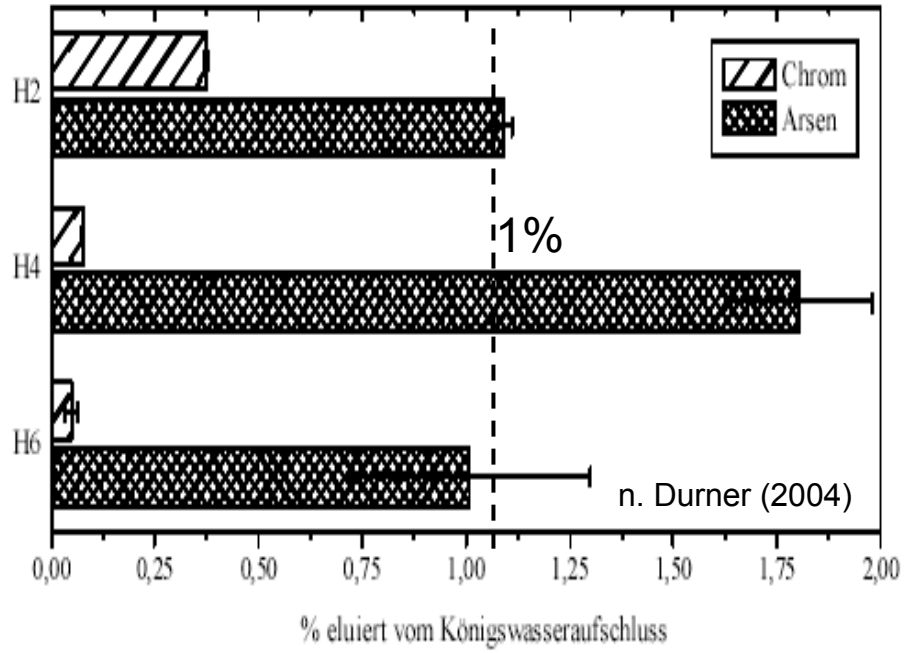
Emissionsdauer t_e
$t_e=(\ln(c_0)-\ln(PW))/k_s$

M_{mob}: mobilisierbare Masse, F: Emissionsfläche der Quelle, SWR: Sickerwasserrate

Beschreibung der Schadstoffquelle – Ermittlung der mobilisierbaren Masse (1)

Die Abschätzung der **mobilisierbaren Masse** ist Voraussetzung für die Bestimmung der Emissionsdauer und hat große Auswirkung auf das Ergebnis der Transportbetrachtung

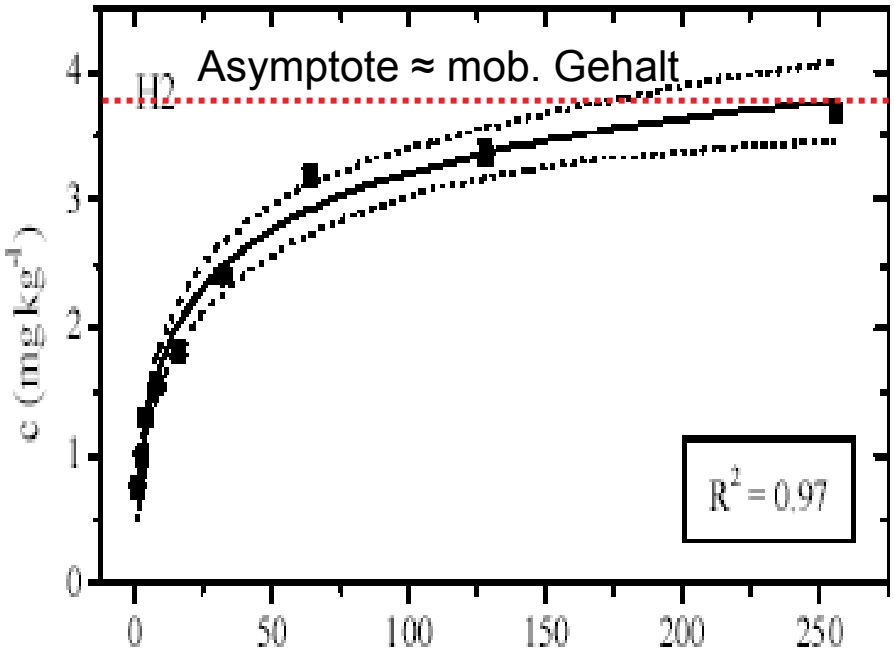
Worst Case Annahme
M_{mob} ≈ Gesamtgehalt KW-Extrakt



in vielen Fällen M_{mob}<< KW-Extrakt !!

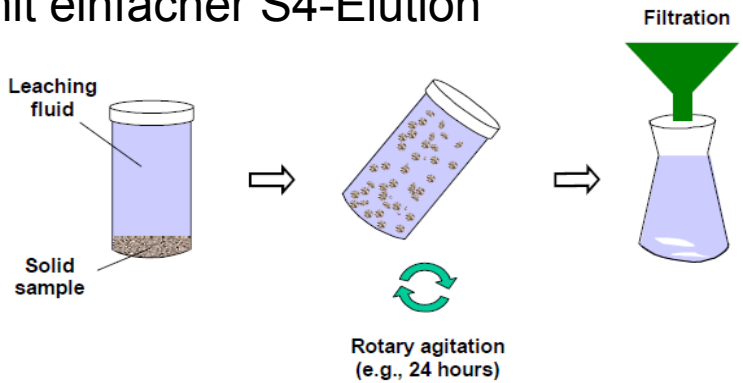
Alternative Verfahren für M_{mob}-Bestimmung
- Säulenversuch
- Sequentielle Extraktion
- pH_{stat}

M_{mob} – Bestimmung durch Mehrfach-Elution mit Variation des W/F-Verhältnisses
- parallel
- konsekutiv (Kaskadentest)



Beschreibung der Schadstoffquelle – Ermittlung der mobilisierbaren Masse (2)

Abschätzung des mobilisierbaren Anteils mit einfacher S4-Elution



Beispiel zur Berechnung des Verhältnisses „eluierbarer Anteil" zum „Gesamtgehalt":

Elutions-/Extraktionsverfahren:	**S4-Verfahren**	
Wasser-Boden-Verhältnis (WBV):	10 l/kg	(1 l H_2O / 0,1 kg TS)
Konzentration im Eluat:	120 µg/l	(Messwert im Eluat)
Gesamtgehalt der Bodenprobe:	4.800 µg/kg	(Messwert in der Bodenprobe)

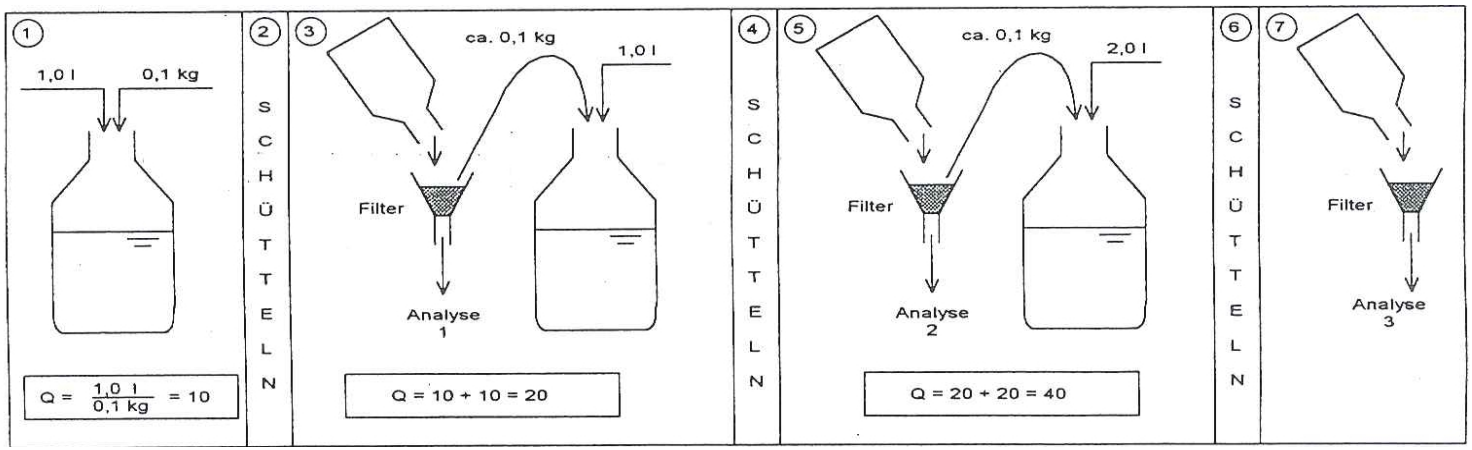
$$\text{Verhältnis} = \frac{\text{Konzentration im Eluat [µg/l]}}{\text{Gesamtgehalt [µg/l]}} \bullet \text{WBV [l/kg]} \bullet 100\ \%$$

$$= \frac{120}{4800} \bullet 10 \bullet 100\ \% = \mathbf{25\ \%}$$

Im Beispiel wurden mit dem S4-Verfahren 25 % der in der Bodenprobe vorliegenden Schadstoffe eluiert !

M_{mob} nur für kaum sorbierende Stoffe (leicht lösliche Salze) repräsentativ, nicht immer konservativ!

Prinzipskizze einer 3 Stufen-Mehrfachelution



Ermittlung M_{mob} über nichtlineare Regressionsanpassung mit $c_{el} = M_{mob}/(WF+kd)$

Transportbetrachtung – konzeptionelle Grundlage -

Transportprozesse in der ungesättigten Zone sind hochgradig komplex (nichtlinear, instationär)

n. BUWAL (2004)

Sickerwasserprognose DU

Im Vordergrund steht nicht die hoch aufgelöste räumliche und zeitliche Beschreibung der Transportprozesse sondern eine integrative Betrachtung auf der Grundlage einer einfach parametrisierbaren Modellvorstellung

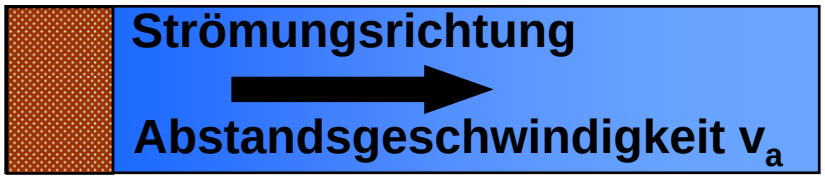
ALTEX-1D ist ein Instrument zur vereinfachenden quantifizierenden Beschreibung auf der Grundlage der analytischen Lösung der 1D-Advektions-Dispersions-Transportgleichung

Relevante Prozesse

- -Advektion
- -Dispersion/Diffusion
- -Sorption
- -Abbau

Wirkungsweisen der Stofftransportprozesse

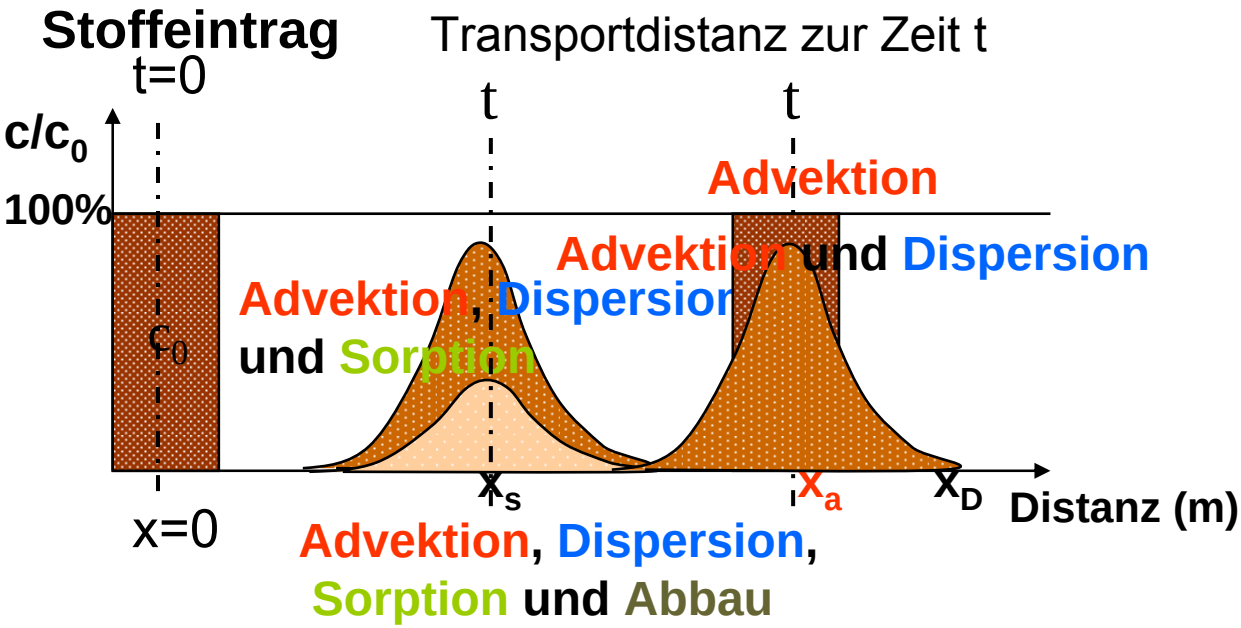
1D-Modell



Sickerwasser

$$v_a = \frac{GWN}{\theta_{Feld}}$$

v_a Mittlere Sickerwassergeschwindigkeit [m/s]
GWN Grundwasserneubildungsrate [$m^3/(m^2 \cdot a)$]
θ_{Feld} Volumetrischer Wassergehalt bei Feldkapazität [m^3/m^3]



Advektion (Strömung)
$x_a = v_a/t$ $c=c_0$

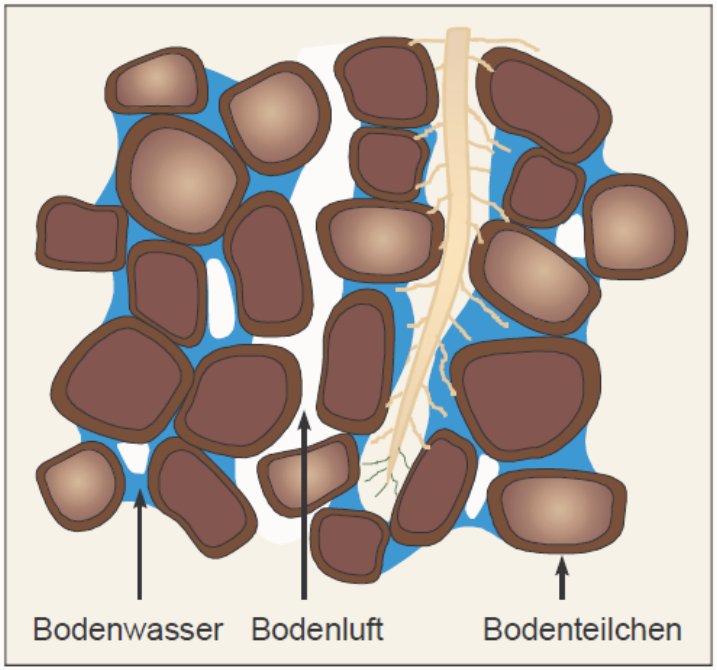
Dispersion (Verdünnung)
$x_D > x_a$ $c<c_0$

Sorption (Rückhaltung)
$x_s=x_a/R$ $c<c_0$
R: Retardationsfaktor

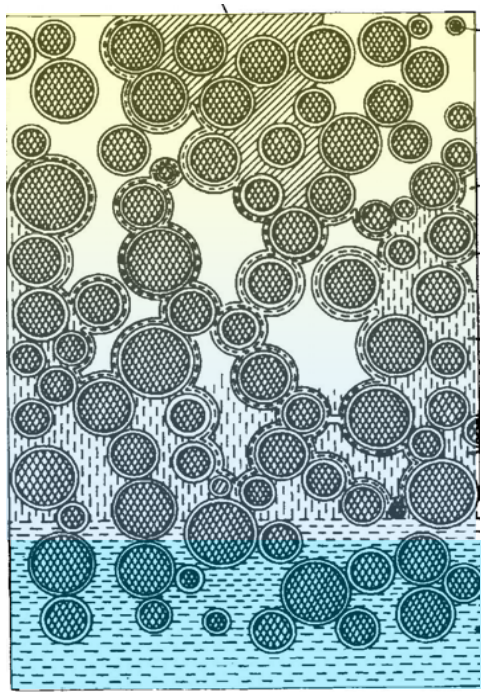
Abbau
x_s $c<<c_o$

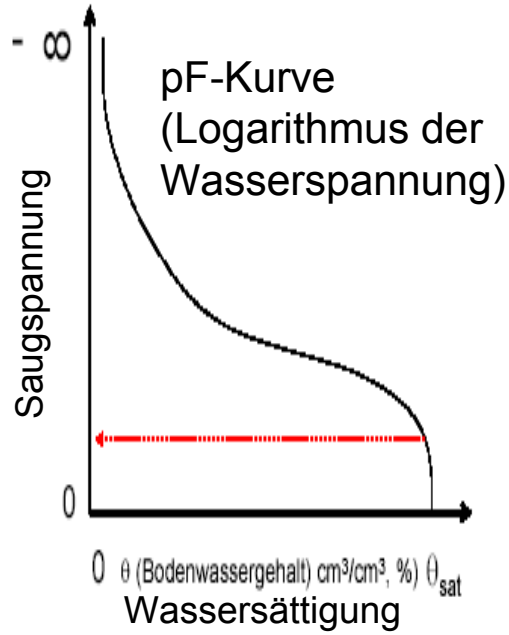
Transportprozesse in der ungesättigten und gesättigten Zone

3-Phasensystem Boden



Wassersättigung in der ungesättigten Zone





Boden (ungesättigte Zone) ist ein Dreiphasensystem aus den Phasen:

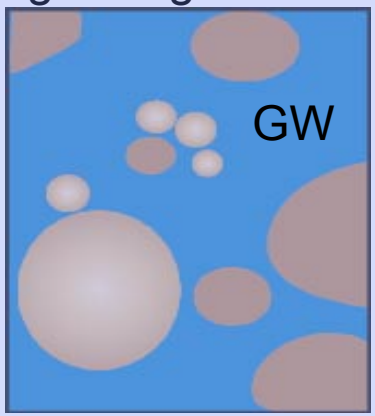
- Bodenkorn
- Bodenwasser
- Bodenluft

Wassersättigung in der ungesättigten Zone ist vertikal und zeitlich variabel

Problem: wie kann die Strömungsgeschwindigkeit (Advektion) in der ungesättigten Zone berechnet werden?

Transportprozesse in der ungesättigten und gesättigten Zone

gesättigte Zone: konstante Wassersättigung (100%)

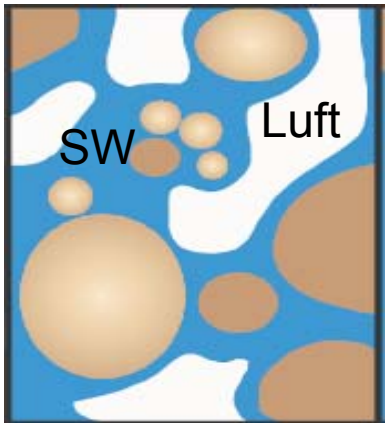


$$q = -k \times \frac{\partial H}{\partial z}$$

Darcy-Gesetz

k: gesättigte Wasserleitfähigkeit (m/s)

ungesättigte Zone: variable Wassersättigung



$$q = -k(\theta) \times \frac{\partial H}{\partial z}$$

Massenerhaltung

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial z}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[K(\theta)\left(\frac{\partial h}{\partial z}\right)\right]$$

Richards-Gleichung

$$C(\theta)\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[K(\theta)\left(\frac{\partial \psi}{\partial z}+1\right)\right]$$

$C(\theta)$	Spezifische Wasserkapazität [1/s]
θ	Volumetrischer Wassergehalt [m^3/m^3]
ψ	Matrixpotential oder Wasserspannung [m]
t	Zeit [s]
z	Tiefe unter GOK [m] (positiv nach unten)
$K(\theta)$	Ungesättigte Wasserleitfähigkeit [m/s]

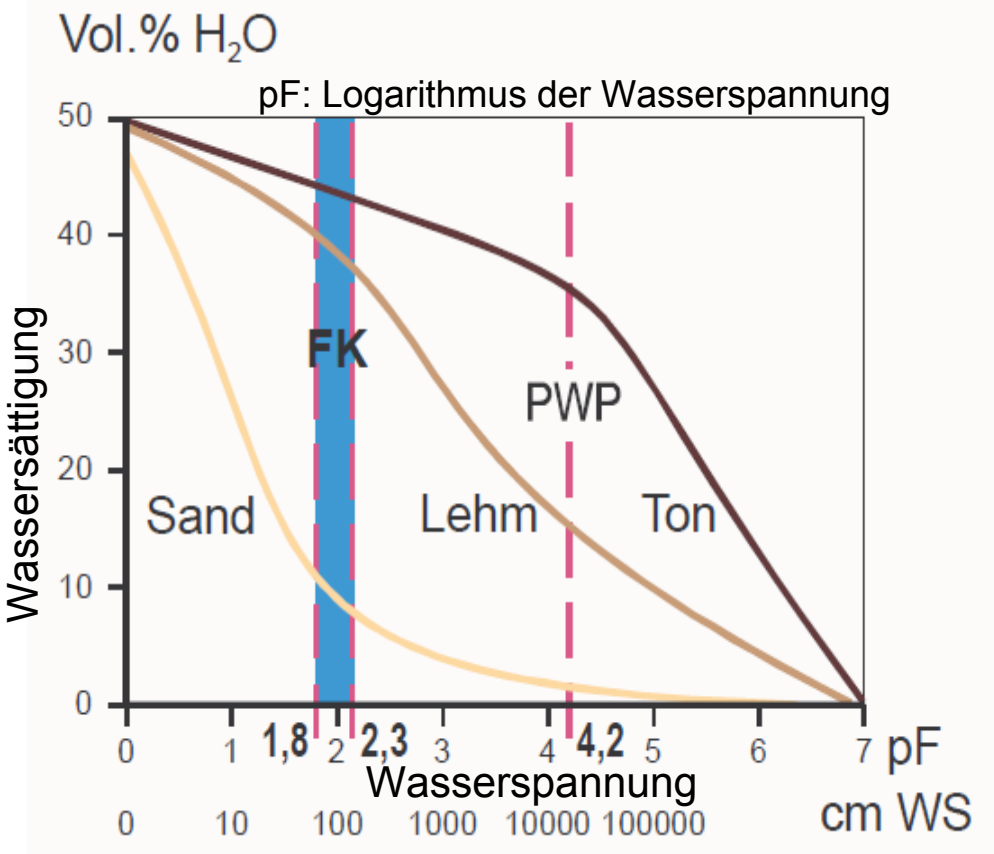
k(θ): ungesättigte Wasserleitfähigkeit (m/s) abhängig von θ

θ: volumetrischer Wassergehalt abhängig von Wasserspannung ψ

Wasserspannung/Wassergehalt zeitlich variabel

Sickerwassergeschwindigkeit hochgradig instationär

Mittlere Sickerwassergeschwindigkeit in der ungesättigten Zone



<u>vereinfachende Annahme:</u>

mittlere Sickerwassergeschwindigkeit entspricht der jährlichen Sickerwasserrate bzw. Grundwasserneubildung bei einem volumetrischen Wassergehalt entsprechend der Feldkapazität

$$v_a = \frac{GWN}{\theta_{Feld}}$$ (DIN 19732)

stationäre Strömung

v_a Mittlere Sickerwassergeschwindigkeit [m/s]
GWN Grundwasserneubildungsrate [$m^3/(m^2 \cdot a)$]
θ_{Feld} Volumetrischer Wassergehalt bei Feldkapazität [m^3/m^3]

Werte der Feldkapazität für Bodenarten in Tab. 70/KA5

Die **Feldkapazität** entspricht der Wassermenge, die ein Boden gegen die Schwerkraft halten kann

KA 5: Feldkapazität entspricht dem Wassergehalt bei pF 1,8 (= 60 hPa)

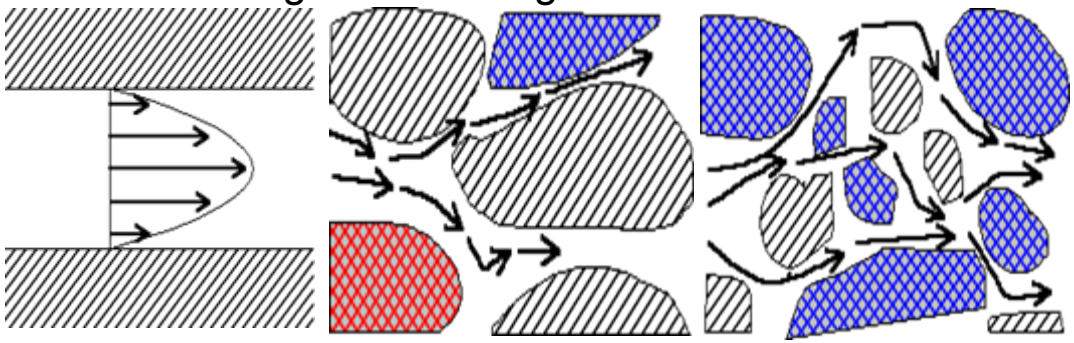
Tabelle 70: Luftkapazität, nutzbare Feldkapazität, Feldkapazität und Totwasser in Volumen-% in Abhängigkeit von Bodenart und Trockenrohdichte ρt

Bodenart	Luftkapazität Poren > 50 µm (pF < 1,8)			nutzbare Feldkapazität Poren 0,2 bis 50 µm (pF 4,2 bis 1,8)			Feldkapazität Poren ≤ 50 µm (pF ≥ 1,8)			Totwasser Poren ≤ 0,2 µm (pF ≥ 4,2)		
Kurzzeichen	ρt1+2	ρt3	ρt4+5	ρt1+2	ρt3	ρt4+5	ρt1+2	ρt3	ρt4+5	ρt1+2	ρt3	ρt4+5
Ss	36	32	27	9	7	7	14	11	10	5	4	3
Sl2	23	18	13	20	18	17	28	25	23	8	7	6
Sl3	18	15	10	22	18	17	34	27	25	12	9	8
Sl4	18	12	8	22	18	15	36	30	26	14	12	11
Slu	14	10	7	23	21	19	38	33	30	15	12	11
St2	24	20	15	18	16	13	26	22	18	8	6	5

Konzentrationsminderung durch Dispersion – Einfluss der Quelle

Ursachen der Dispersion

Geschwindigkeitsinhomogenitäten im Porenraum



$D = \alpha_L * v$

D: Dispersionskoeffizient

α_L: long. Dispersivität

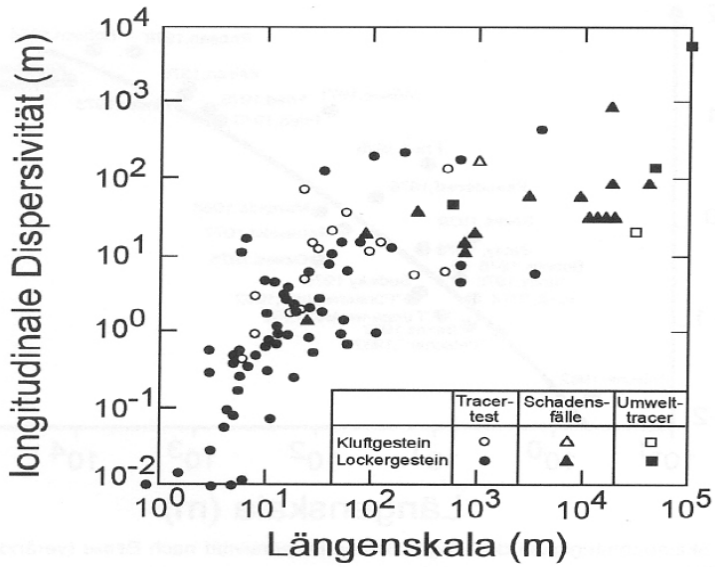
v: Geschwindigkeit

Standardannahme

$\alpha_L = 0{,}1 * z$

z: Länge Transportstrecke

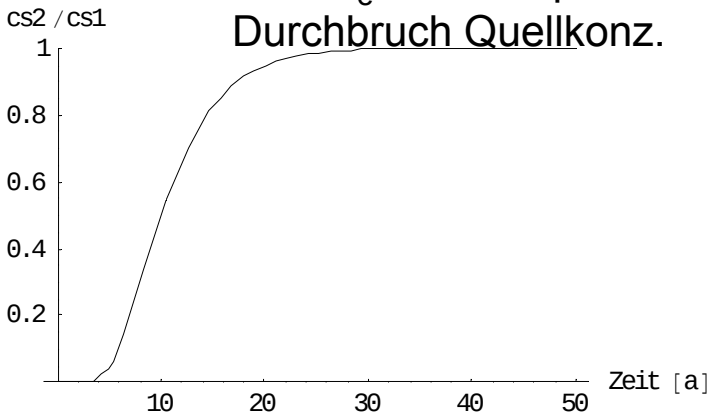
Dispersion ist skalenabhängig



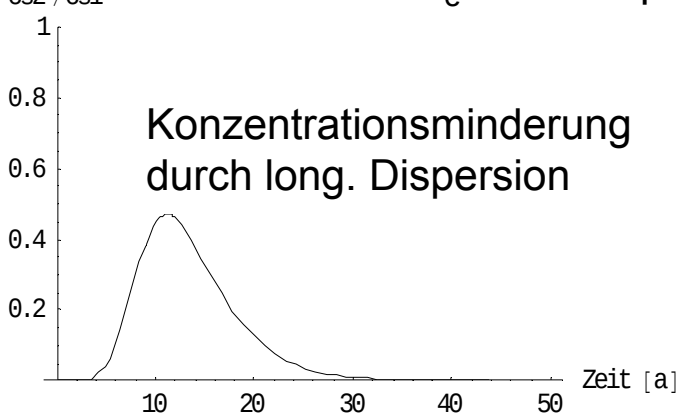
Einfluss der Emissionsdauer der Quelle auf die dispersive Konzentrationsminderung

Emissionsdauer t_e >> Transportzeit

Durchbruch Quellkonz.



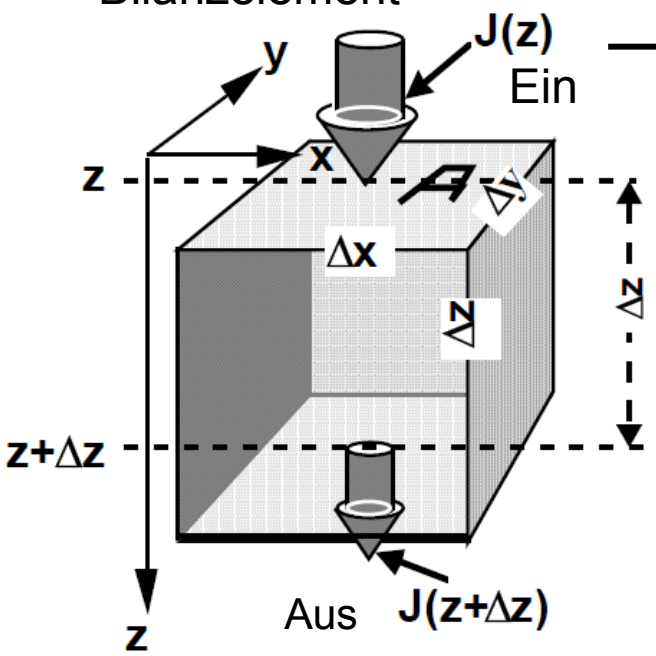
Emissionsdauer t_e <= Transportzeit



Konzentrationsminderung durch long. Dispersion

Die eindimensionale Advektions-Dispersions-Transportgleichung

Bilanzelement



Massenbilanz
Darcy-Strömung

c:Konzentration
z: Ortskoordinate
t: Zeit

Partielle Differentialgleichung

$$R*\delta c/\delta t = D_z*\delta^2 c/\delta z^2 - v_z*\delta c/\delta z - \lambda*c$$

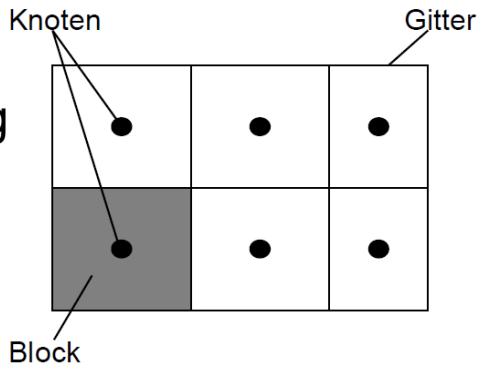
Dispersion/Diffusion | Advektion | Abbau

Lösungen der Differentialgleichung

numerisch

Diskretisierung (FE-Methode)

aufwendig



analytisch

Ergebnis

Konzentration als Funktion von Ort und Zeit

c(z,t)

Beispiel: „Ogata-Banks-Gl.“

$$c(x,t) = \frac{c_0}{2}\,\mathrm{erfc}\left(\frac{x - vt}{\sqrt{4Dt}}\right)\exp\left(-\frac{\lambda x}{v}\right)$$

Analytische Lösung der 1D-Transportgleichung

1D-Advektions-Dispersions-Transportgleichung

$$R*\delta c/\delta t = D_z*\delta^2 c/\delta z^2 - v_z*\delta c/\delta z - \lambda*c$$

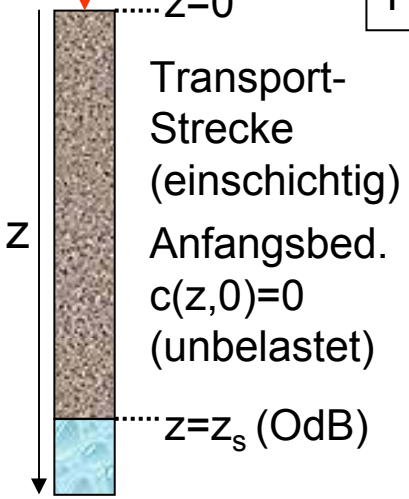
Definition der Parameter v_z, R, D_z, λ

Definition der Rand-/Anfangsbedingungen

oberer Rand
(UK Quelle)
$c(0,t)=c_0(t)$

Beschreibung der Quelle

Fall A: $c_0(t)$ = const ($t<t_e$)
Fall B: $c_0(t) = c_0*\exp^{(-ks*t)}$



unterer Rand
$\delta c/\delta z$ (t, z=∞)=0
(halbunendliche Säule)

SWR: Sickerwasserrate (m/a)
FK: Feldkapazität (-)
K_d: Sorptionskoeffizient (l/kg)
K_{oc}:Verteilungskoeff. C_{org}
C_{org}: organ. Kohlenstoff (-)
c_{sorb}:sorbierte Konzentration (mg/kg)
c_{gel}:gelöste Konzentration (mg/l)
K_{fr}: Freundlich-Koeffizient
n: Freundlich-Exponent
α_z: long. Dispersivität (m)
f_d: Skalenfaktor (Annahme: 0.1)
t_e: Emissionsdauer Quelle (a)
ks: Abklingkonstante Quelle (1/a)
λ: biol. Abbaukoeffizient (1/a)

v_z = stationäre mittl. Sickergeschw.
= SWR/FK

R = Retardationsfaktor = $1+ \rho_b*K_d/FK$
lineares Sorptionsgleichgewicht
$c_{sorb}=K_d*c_{gel}$

Anorganik: $K_d=f(K_{fr},n)$ Pedotransfer-funktionen
$c_{sorb}=K_{fr}*c_{gel}^{n}$ (Freundlich) → Linearisierung

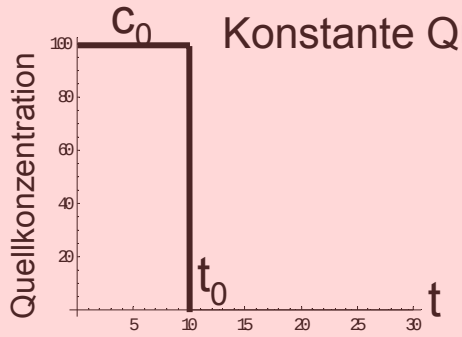
Organik: $K_d=K_{oc}* C_{org}$

D_z = long. Dispersionskoeff.
$= \alpha_z * v_z = f_d * z_s * v_z$

λ = biol. Abbaukoeffizient
$c=c_0*e^{-(\lambda*t)}$
(Abbaukinetik 1. Ordnung)

Grundlage für ALTEX-1D

Fall A
Konstante Quellk.



$$c(x,t) = \begin{cases} \frac{\gamma}{\mu} + (C_i - \frac{\gamma}{\mu})\, A(x,t) + (C_o - \frac{\gamma}{\mu})\, B(x,t) & 0 < t \leq t_o \\ \frac{\gamma}{\mu} + (C_i - \frac{\gamma}{\mu})\, A(x,t) + (C_o - \frac{\gamma}{\mu})\, B(x,t) - C_o\, B(x,t-t_o) & t > t_o \end{cases}$$

where

$$A(x,t) = \exp(-\mu t/R) \left\{ 1 - \frac{1}{2}\, \mathrm{erfc}\left[\frac{Rx - vt}{2(DRt)^{1/2}}\right] - \left(\frac{v^2 t}{\pi DR}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(Rx - vt)^2}{4DRt}\right] + \frac{1}{2}\left(1 + \frac{vx}{D} + \frac{v^2 t}{DR}\right) \exp(vx/D)\, \mathrm{erfc}\left[\frac{Rx + vt}{2(DRt)^{1/2}}\right] \right\}$$

$$B(x,t) = \frac{v}{(v+u)} \exp\left[\frac{(v-u)x}{2D}\right] \mathrm{erfc}\left[\frac{Rx - ut}{2(DRt)^{1/2}}\right] + \frac{v}{(v-u)} \exp\left[\frac{(v+u)x}{2D}\right] \mathrm{erfc}\left[\frac{Rx + ut}{2(DRt)^{1/2}}\right] + \frac{v^2}{2\mu D} \exp\left(\frac{vx}{D} - \frac{\mu t}{R}\right) \mathrm{erfc}\left[\frac{Rx + vt}{2(DRt)^{1/2}}\right]$$

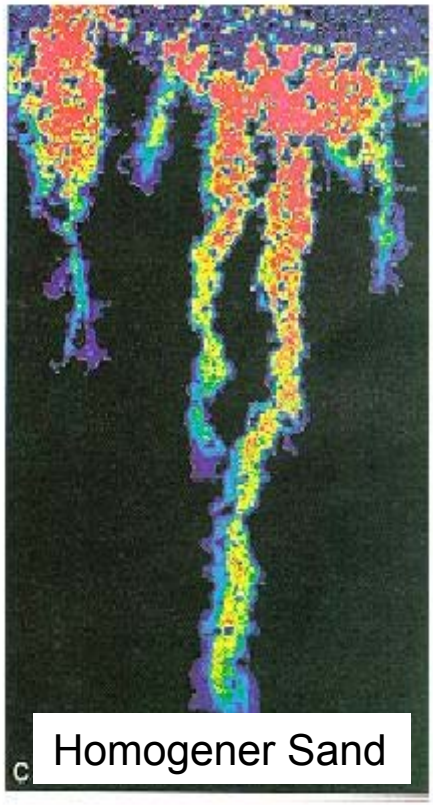
and

$$u = v \left(1 + \frac{4\mu D}{v^2}\right)^{1/2}$$

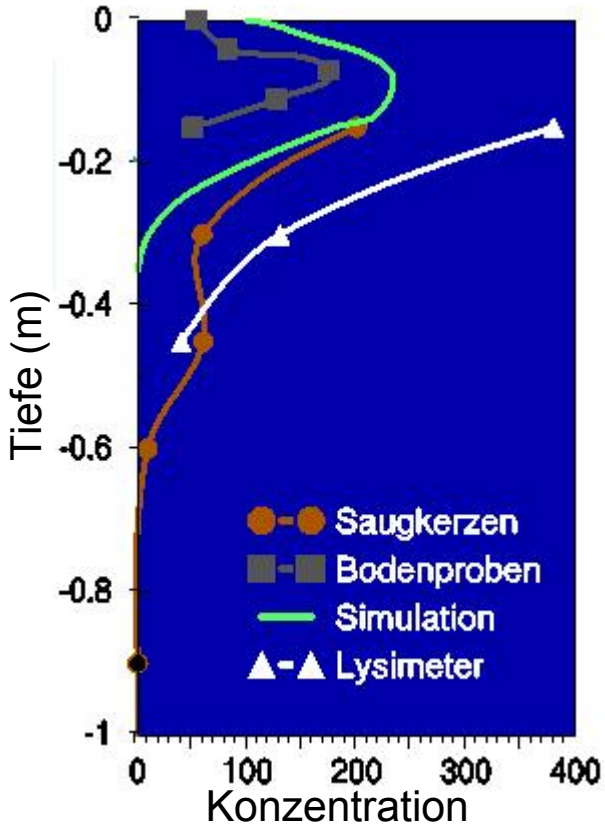
Sonderfälle bei der Transportbetrachtung

- Präferenzielle Fließwege
-Transport in Phase und über die Bodenluft
- Schadstoffquelle in der gesättigten Zone

Fingering-Phänomen



Transport von Bromid



Definition Präferenzieller Fluss

Ungleichgewichtstransport durch den reaktive Stoffe im Boden **schneller** transportiert werden als nach der **AD-Transportgleichung bei Sorptionsgleichgewicht** zu erwarten wäre

Erfahrung:
präferenzieller Fluss kann für den kurzfristigen Konzentrationsverlauf am OdB relevant sein, ist für die längerfristige Entwicklung der Schadstofffrachten eher von untergeordneter Bedeutung