

# Fachliche Grundlagen

## Konzept der äquivalenten Parameter

Schulung ALTEX-1D Version 3  
Februar 2019

Das Konzept der äquivalenten Parameter wird für 2 unterschiedliche Erweiterungen verwendet:

- 1) Einbeziehung des Transport von flüchtigen Schadstoffen über die Bodenluft
- 2) Einbeziehung von Bodenschichtungen innerhalb der Transportstrecke

Herleitungen:

*SCHNEIDER, W. (2008): Erweiterung des Modells-1d für Sickerwasserprognosen für flüchtige Schadstoffe im geschichteten Bodenprofil, Altlastenspektrum (Oktober 2008)*

## 1) Erweiterung

Einbeziehung des Transport von flüchtigen  
Schadstoffen über die Bodenluft

# Transportgleichung mit 3 zusätzlichen Termen zur Erfassung des Transports über Bodenluft

Stoffmasse in sorbierter Phase

pro m<sup>3</sup> SW-Zone

$$\frac{\partial(\rho_d c_{sorb})}{\partial t}$$

Stoffmasse in Wasser

pro m<sup>3</sup> SW-Zone

$$+ \frac{\partial(\theta_w c)}{\partial t}$$

Stoffmasse in Bodenluft

pro m<sup>3</sup> SW-Zone

$$+ \frac{\partial(\theta_{Luft} c_{Luft})}{\partial t} =$$

Zusätzliche Terme

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \theta_w D_w \frac{\partial c}{\partial z} + \theta_{Luft} D_{Luft} \frac{\partial c_{Luft}}{\partial z} - q_w c - q_{Luft} c_{Luft} \right)$$

Hydrody. Dispersion in Wasser

Hydrody. Dispersion in Bodenluft

Advektion in Wasser

Advektion in Bodenluft

## Symbolerläuterung für Transportgleichung

$c$  Stoffkonzentration im Wasser [ $\text{mg}^{\text{Stoff}}/\text{m}^3_{\text{Wasser}}$ ]

$c_{\text{sorb}}$  Stoffkonzentration in sorbierter Phase [ $\text{mg}^{\text{Stoff}}/\text{kg}_{\text{Boden}}$ ]

$c_{\text{Luft}}$  Stoffkonzentration in der Bodenluft [ $\text{mg}^{\text{Stoff}}/\text{m}^3_{\text{Bodenluft}}$ ]

$\rho_d$  Trockenraumdichte des Bodens [ $\text{kg}_{\text{Boden}}/\text{m}^3_{\text{Boden}}$ ]

$\theta_W$  Wassergehalt [ $\text{m}^3_{\text{Wasser}}/\text{m}^3_{\text{Boden}}$ ]

$\theta_{\text{Luft}}$  Luftgehalt [ $\text{m}^3_{\text{Bodenluft}}/\text{m}^3_{\text{Boden}}$ ]

$D_W$  Hydro. Dispersionskoeffizient im Wasser [ $\text{m}^2_{\text{Boden}}/\text{Jahr}$ ]

$D_{\text{Luft}}$  Hydro. Dispersionskoeffizient in der Bodenluft [ $\text{m}^2_{\text{Boden}}/\text{Jahr}$ ]

$q_W$  Sickerwasserrate [ $\text{m}^3_{\text{Wasser}}/(\text{m}^2_{\text{Boden}} \cdot \text{Jahr})$ ]

$q_{\text{Luft}}$  Bodenluftflussrate [ $\text{m}^3_{\text{Bodenluft}}/(\text{m}^2_{\text{Boden}} \cdot \text{Jahr})$ ]

# Bei linearer Sorption und Verflüchtigung gelten folgende Gleichungen

$$c_{sorb} = K_d \cdot c \qquad c_{Luft} = H \cdot c$$

- $c$  Stoffkonzentration im Wasser [ $\text{mg}/\text{m}^3_{\text{Wasser}}$ ]
- $c_{sorb}$  Stoffkonzentration in sorbierter Phase [ $\text{mg}/\text{kg}$ ]
- $c_{Luft}$  Stoffkonzentration in der Bodenluft [ $\text{mg}/\text{m}^3_{\text{Luft}}$ ]
- $K_d$  linearer Verteilungskoeffizient [ $\text{m}^3/\text{kg}$ ]
- $H$  Henry – Koeffizient [ $\text{m}^3_{\text{Wasser}}/\text{m}^3_{\text{Luft}}$ ]

eingesetzt in die Transportgleichung ergibt:

Einsetzen von  $c_{sorb} = K_d \cdot c$  und  $c_{Luft} = H \cdot c$  in

$$\frac{\partial(\theta_w c)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_d c_{sorb})}{\partial t} + \frac{\partial(\theta_{Luft} c_{Luft})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta_w D_w \frac{\partial c}{\partial z} + \theta_{Luft} D_{Luft} \frac{\partial c_{Luft}}{\partial z} - q_w c - q_{Luft} c_{Luft} \right)$$

$$\theta_w \frac{\partial c}{\partial t} + \rho_d k_d \frac{\partial c}{\partial t} + \theta_{Luft} H \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta_w D_w \frac{\partial c}{\partial z} + \theta_{Luft} D_{Luft} H \frac{\partial c}{\partial z} - q_w c - q_{Luft} H c \right)$$

durch Ausklammern vereinfacht sich die **linke Seite** der Gleichung

$$\theta_w \frac{\partial c}{\partial t} \underbrace{\left( 1 + \frac{k_d \rho_d}{\theta_w} + \frac{\theta_{Luft} H}{\theta_w} \right)}_{R_{\text{äqui,flü}}} = \theta_w R_{\text{äqui,flü}} \frac{\partial c}{\partial t}$$

rechte Seite der Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \theta_w D_w \frac{\partial c}{\partial z} + \theta_{Luft} D_{Luft} \frac{\partial(H c)}{\partial z} - q_w c - q_{Luft} H c \right)$$

Im Klammersausdruck der **rechten** Seite der Gleichung kann ebenfalls eine Ausklammerung vorgenommen werden, so dass folgende Gleichung entsteht:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \theta_w \frac{\partial c}{\partial z} \right) \underbrace{\left( D_w + \frac{\theta_{Luft} D_{Luft} H}{\theta_w} \right)}_{D_{\ddot{a}qui,fl\u00fc}} - q_{\ddot{a}qui,fl\u00fc} \cdot c \right]$$

$D_{\ddot{a}qui,fl\u00fc}$

mit

$$q_{\ddot{a}qui,fl\u00fc} = q_w + q_{Luft} H$$

in Altex-1D:  $q_{Luft} = 0$

Zusammengefasst lautet die Stofftransportgleichung für flüchtige Schadstoffe unter Berücksichtigung der Diffusion in der Bodenluft sowie des Phasengleichgewichts zwischen Bodenwasser und Bodenluft

Mathematisch formal identisch mit Ausgangsgleichung, deshalb gilt weiterhin van Genuchten & Alves Lösung

$$\theta_w R_{\text{äqui,flü}} \frac{\partial c}{\partial t} = \theta_w D_{\text{äqui,flü}} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - q_{\text{äqui,flü}} \frac{\partial c}{\partial z}$$

Gleichung  
[1]

Mit den äquivalenten Parametern zur Berücksichtigung der Verflüchtigung und dem Transport in der Bodenluft:

$$R_{\text{äqui,flü}} = \left( 1 + \frac{k_d \rho_d}{\theta_w} + \frac{\theta_{Luft} H}{\theta_w} \right) \Rightarrow \text{Zusätzliche Verzögerung der Stoffbewegung im Sickerwasser}$$

$$D_{\text{äqui,flü}} = \left( D_w + \frac{\theta_{Luft} D_{Luft} H}{\theta_w} \right) \Rightarrow \text{Zusätzliche Beschleunigung der Stoffbewegung im Sickerwasser}$$

$$q_{\text{äqui,flü}} = q_w + q_{Luft} H$$

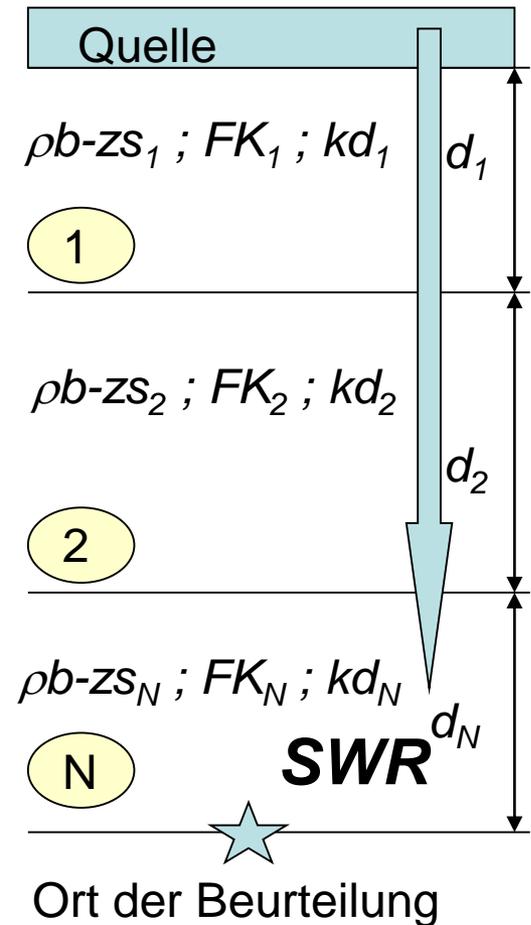
## 2) Erweiterung

Berücksichtigung unterschiedlicher  
Bodenschichten innerhalb der Transportstrecke

# Schichtung kann durch äquivalente Transportparameter erfasst werden

Die verwendete van Genuchten & Alves Lösung verlangt konstante Stofftransportparameter innerhalb der Transportstrecke.

Bei mehreren Bodenschichten müssen die einzelnen Stofftransportparameter zu äquivalenten Stofftransportparameter umgewandelt werden.



**Unterschiedliche Vorgehensweise** bei der Ermittlung der äquivalenten Parameter zur Berücksichtigung der Bodenschichtung notwendig.

Parameter in Massenflüssen	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Wassergehalt</li> <li>• Luftgehalt</li> <li>• Tortuosität Bodenwasser</li> <li>• Tortuosität Bodenluft</li> </ul>	Mächtigkeits-gemittelte Werte
Parameter in Speicherterm	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Retardationskoeffizient</li> </ul>	Aufsummierung der schichtspezifischen Daten

# Art der Mittelung für die schichtspezifischen Parameter in den **Massenflüssen**

Beispiel: Wassergehalt

$$\theta_w^{\text{äqui}} = \sum_{i=1}^n \frac{\theta_w^i \cdot d_i}{d}$$

$\theta_w^{\text{äqui}}$  äquivalenter Wassergehalt [ - ]

$d_i$  Mächtigkeit der Schicht  $i$  [m ]

$\theta_w^i$  Transportwirksamer Wassergehalt bei Feldkapazität der Schicht  $i$  [ - ]

$d$  Länge der Transportstrecke [m]

# Art der Mittelung für den schichtspezifischen Parameter Retardationskoeffizient im **Speicherterm**

$$R^{\text{äqui}} = \frac{t_{\text{Stoff}}}{t_{\text{Sick}}}$$

$$t_{\text{Stoff}} = \frac{\sum_{i=1}^n (d_i \cdot \theta_w^i \cdot R_{\text{äqui,flü}}^i)}{q_w}$$

$$t_{\text{Sick}} = \frac{\sum_{i=1}^n (d_i \cdot \theta_w^i)}{q_w}$$

$\theta_w^i$  mittlerer Wassergehalt bei Feldkapazität der Schicht  $i$  [-]

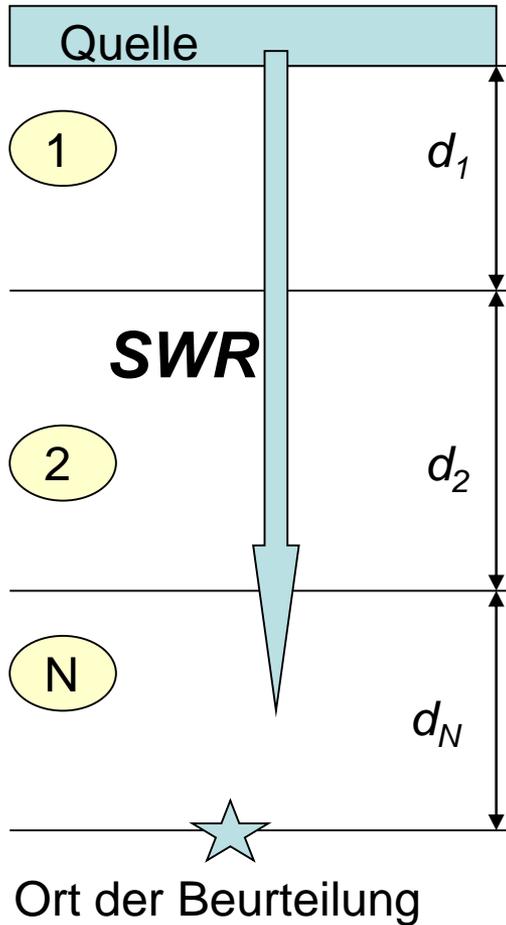
$R^{\text{äqui}}$  Äquivalenter Retardationskoeffizient [-]

$\rho_d^i$  Trockenraumdichte der Schicht  $i$  [kg/m<sup>3</sup>]

$t_{\text{Sick}}$  Aufenthaltszeit des Sickerwassers [Jahre]

$t_{\text{Stoff}}$  mittlere Aufenthaltszeit des Schadstoffes [Jahre]

$q_w$  Sickerwasserrate [m/Jahr]



## Verweilzeit des Sickerwassers

$$t_{Sick,1} = \frac{d_1 \cdot \theta_{FK1}}{SWR}$$

$$t_{Sick,2} = \frac{d_2 \cdot \theta_{FK2}}{SWR}$$

$$t_{Sick,N} = \frac{d_N \cdot \theta_{FKN}}{SWR}$$

$$t_{Sick} = \frac{\sum_{i=1}^N (d_i \cdot \theta_{FK,i})}{SWR}$$

## Verweilzeit des Schadstoffes

$$t_{Stoff,1} = \frac{d_1 \cdot \theta_{FK1} \cdot R_{\ddot{a}aui,fl\ddot{u}1}}{SWR}$$

$$t_{Stoff,2} = \frac{d_2 \cdot \theta_{FK2} \cdot R_{\ddot{a}aui,fl\ddot{u}2}}{SWR}$$

$$t_{Stoff,N} = \frac{d_N \cdot \theta_{FKN} \cdot R_{\ddot{a}aui,fl\ddot{u}N}}{SWR}$$

$$t_{Stoff} = \frac{\sum_{i=1}^n (d_i \cdot \theta_{FK}^i \cdot R_{\ddot{a}aui,fl\ddot{u}})}{SWR}$$

$$R_{\text{äqui}} \frac{\partial c}{\partial t} = D_{\text{äqui}} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v_{\text{Sick}}^{\text{äqui}} \frac{\partial c}{\partial z}$$

$$R_{\text{äqui}} = \frac{t_{\text{Stoff}}}{t_{\text{Sick}}}$$

$$t_{\text{Stoff}} = \frac{\sum_{i=1}^n (d_i \cdot \theta_w^i \cdot R_{\text{äqui,flü}}^i)}{q_w}$$

$$t_{\text{Sick}} = \frac{\sum_{i=1}^n (d_i \cdot \theta_w^i)}{q_w}$$

$$R_{\text{äqui,flü}}^i = \left( 1 + \frac{k_d^i}{\theta_w^i} + \frac{\theta_{\text{Luft}}^i H}{\theta_w^i} \right)$$

$$D_{\text{äqui}} = \left( D_w^{\text{äqui}} + \frac{\theta_{\text{Luft}}^{\text{äqui}} D_{\text{Luft}}^{\text{äqui}} H}{\theta_w^{\text{äqui}}} \right)$$

$$v_{\text{Sick}}^{\text{äqui}} = \frac{d}{t_{\text{Sick}}}$$

$$D_w^{\text{äqui}} = f_d \cdot d \cdot v_{\text{Sick}}^{\text{äqui}} + D_0 \cdot \tau_w^{\text{äqui}}$$

$$D_{\text{Luft}}^{\text{äqui}} = D_{\text{Luft}} \cdot \tau_G^{\text{äqui}}$$

$$\theta_{\text{Luft}}^{\text{äqui}} = \sum_{i=1}^n \frac{\theta_{\text{Luft}}^i \cdot d_i}{d}$$

$$\theta_w^{\text{äqui}} = \sum_{i=1}^n \frac{\theta_w^i \cdot d_i}{d}$$

$$\tau_w^{\text{äqui}} = \sum_{i=1}^n \frac{\tau_w^i \cdot d_i}{d}$$

$$\tau_G^{\text{äqui}} = \sum_{i=1}^n \frac{\tau_G^i \cdot d_i}{d}$$

$$\tau_w^i = \frac{(\theta_w^i)^{7/3}}{(\theta_w^i + \theta_{\text{Luft}}^i)^2}$$

$$\tau_G^i = \frac{(\theta_{\text{Luft}}^i)^{7/3}}{(\theta_w^i + \theta_{\text{Luft}}^i)^2}$$

# Fachliche Grundlagen

## Erstellung von Konzentrationsprofilen

Schulung ALTEX-1D Version 3  
Februar 2019

Die in ALTEX-1D verwendeten analytischen Lösungsgleichungen von van Genuchten & Alves gelten in der Originalversion nur für **nicht flüchtige Stoffe** für den **Ein-Schicht-Fall**.

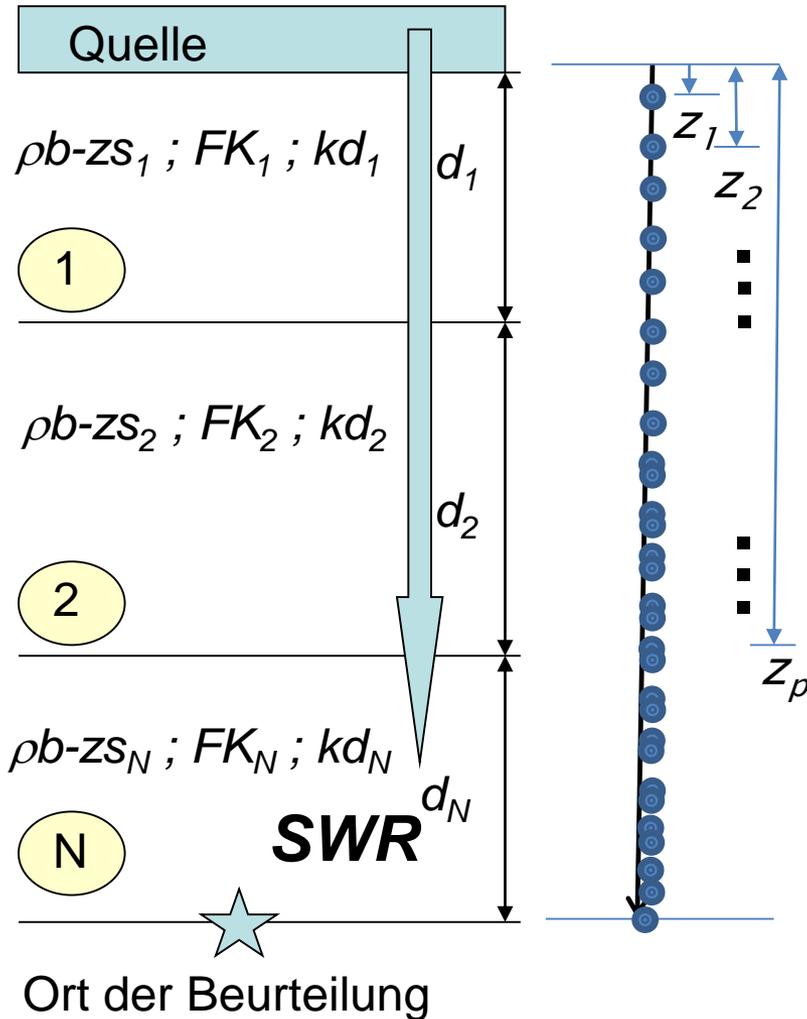
Durch **äquivalente Parameter** werden diese Einschränkungen umgangen. In den vG-Lösungsgleichungen werden insgesamt 3 Stofftransportparameter verwendet, die als äquivalente Parameter definiert werden müssen:

Abstandsgeschwindigkeit  $v_z$

Dispersionskoeffizient  $D_z$

Retardationskoeffizient  $R$

Die äquivalenten Parameter ändern sich für jeden Berechnungspunkt  $z$  (Tiefe unter Schadensquelle) und müssen somit für jeden Berechnungspunkt mit der van Genuchten & Alves Gleichung neu bestimmt werden.



Für beliebigen Zeitpunkt  $t$  wird

für jeden Punkt  $z_p$  die Stoffkonzentration berechnet,

wobei sukzessiv die Transportstrecke von UK Quelle in mm Schritten (Version 3: 5 mm) bis zum Erreichen vom OdB verlängert wird und

jeweils für die Teilstrecken  $z_1, z_2 \dots z_p$

die äquivalenten Parameter verwendet werden.