

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 Stoffmasse in Wasser Stoffmasse in Bodenluft

pro m³ SW-Zone pro m³ SW-Zone pro m³ SW-Zone

$$\frac{\partial(\rho_d c_{sorb})}{\partial t} + \frac{\partial(\theta_w c)}{\partial t} + \frac{\partial(\theta_{Luft} c_{Luft})}{\partial t} =$$

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_{sorb}	Stoffkonzentration in sorbierter Phase [$\text{mg}^{\text{Stoff}}/\text{kg}_{\text{Boden}}$]
c_{Luft}	Stoffkonzentration in der Bodenluft [$\text{mg}^{\text{Stoff}}/\text{m}^3_{\text{Bodenluft}}$]
ρ_d	Trockenraumdichte des Bodens [$\text{kg}_{\text{Boden}}/\text{m}^3_{\text{Boden}}$]
θ_W	Wassergehalt [$\text{m}^3_{\text{Wasser}}/\text{m}^3_{\text{Boden}}$]
θ_{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_{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_{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 [mg/kg]
- c_{Luft} Stoffkonzentration in der Bodenluft [$\text{mg}/\text{m}^3_{\text{Luft}}$]
- K_d linearer Verteilungskoeffizient [m^3/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

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

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

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

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

mit

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

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:

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

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

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

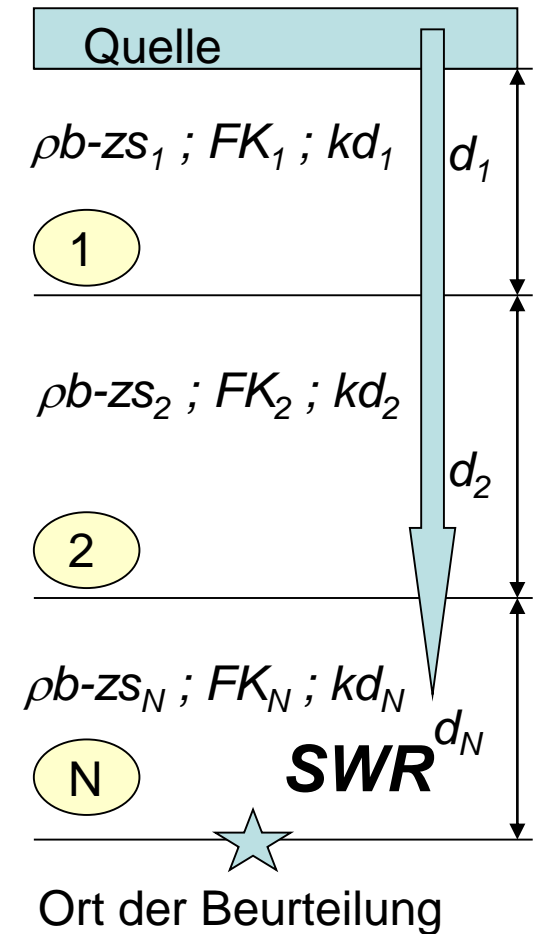
2) Erweiterung

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"> • Wassergehalt • Luftgehalt • Tortuosität Bodenwasser • Tortuosität Bodenluft 	Mächtigkeits-gemittelte Werte
Parameter in Speicherterm	<ul style="list-style-type: none"> • Retardationskoeffizient 	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]

θ_w^i Transportwirksamer Wassergehalt bei Feldkapazität der Schicht i [-]

d Länge der Transportstrecke [m]

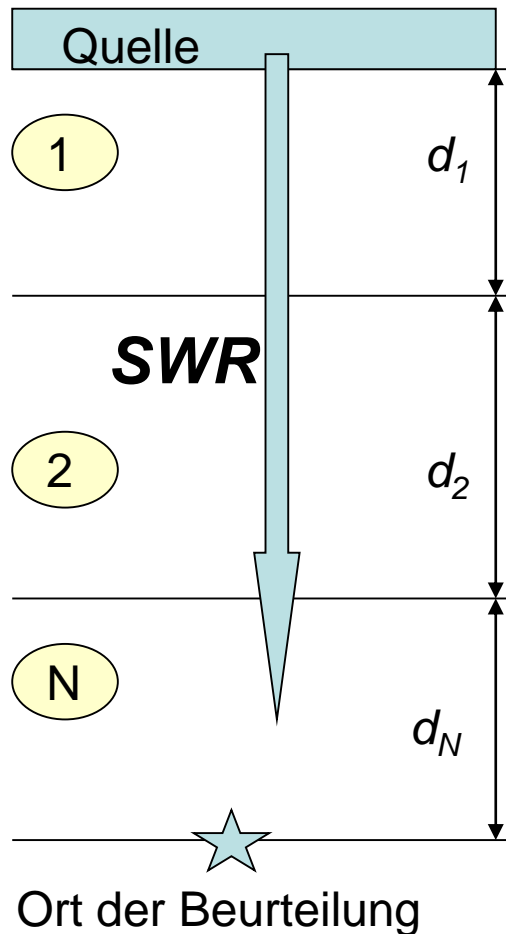
Art der Mittelung für den schichtspezifischen Parameter Retardationskoeffizient im **Speicherterm**

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

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

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

θ_w^i	mittlerer Wassergehalt bei Feldkapazität der Schicht i [-]
$R^{\text{äqui}}$	Äquivalenter Retardationskoeffizient [-]
ρ_d^i	Trockenraumdichte der Schicht i [kg/m ³]
t_{Sick}	Aufenthaltszeit des Sickerwassers [Jahre]
t_{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

$$t_{Stoff,1} = \frac{d_1 \cdot \theta_{FK1} \cdot R_{äqui,flü1}}{SWR}$$

$$t_{Stoff,2} = \frac{d_2 \cdot \theta_{FK2} \cdot R_{äqui,flü2}}{SWR}$$

$$t_{Stoff,N} = \frac{d_N \cdot \theta_{FKN} \cdot R_{äqui,flüN}}{SWR}$$

$$t_{Stoff} = \frac{\sum_{i=1}^n (d_i \cdot \theta_{FK}^i \cdot R_{äqui,flü})}{SWR}$$

$$R_{\ddot{a}qui} \frac{\partial c}{\partial t} = D_{\ddot{a}qui} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v_{Sick}^{\ddot{a}qui} \frac{\partial c}{\partial z}$$

$$R_{\ddot{a}qui} = \frac{t_{Stoff}}{t_{Sick}}$$

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

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

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

$$D_{\ddot{a}qui} = \left(D_w^{\ddot{a}qui} + \frac{\theta_{Luft}^{\ddot{a}qui} D_{Luft}^{\ddot{a}qui} H}{\theta_w^{\ddot{a}qui}} \right)$$

$$v_{Sick}^{\ddot{a}qui} = \frac{d}{t_{Sick}}$$

$$D_w^{\ddot{a}qui} = f_d \cdot d \cdot v_{sick}^{\ddot{a}qui} + D_0 \cdot \tau_w^{\ddot{a}qui}$$

$$D_{Luft}^{\ddot{a}qui} = D_{Luft} \cdot \tau_G^{\ddot{a}qui}$$

$$\theta_{Luft}^{\ddot{a}qui} = \sum_{i=1}^n \frac{\theta_{Luft}^i \cdot d_i}{d}$$

$$\theta_w^{\ddot{a}qui} = \sum_{i=1}^n \frac{\theta_w^i \cdot d_i}{d}$$

$$\tau_w^{\ddot{a}qui} = \sum_{i=1}^n \frac{\tau_w^i \cdot d_i}{d}$$

$$\tau_G^{\ddot{a}qui} = \sum_{i=1}^n \frac{\tau_G^i \cdot d_i}{d}$$

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

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

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.

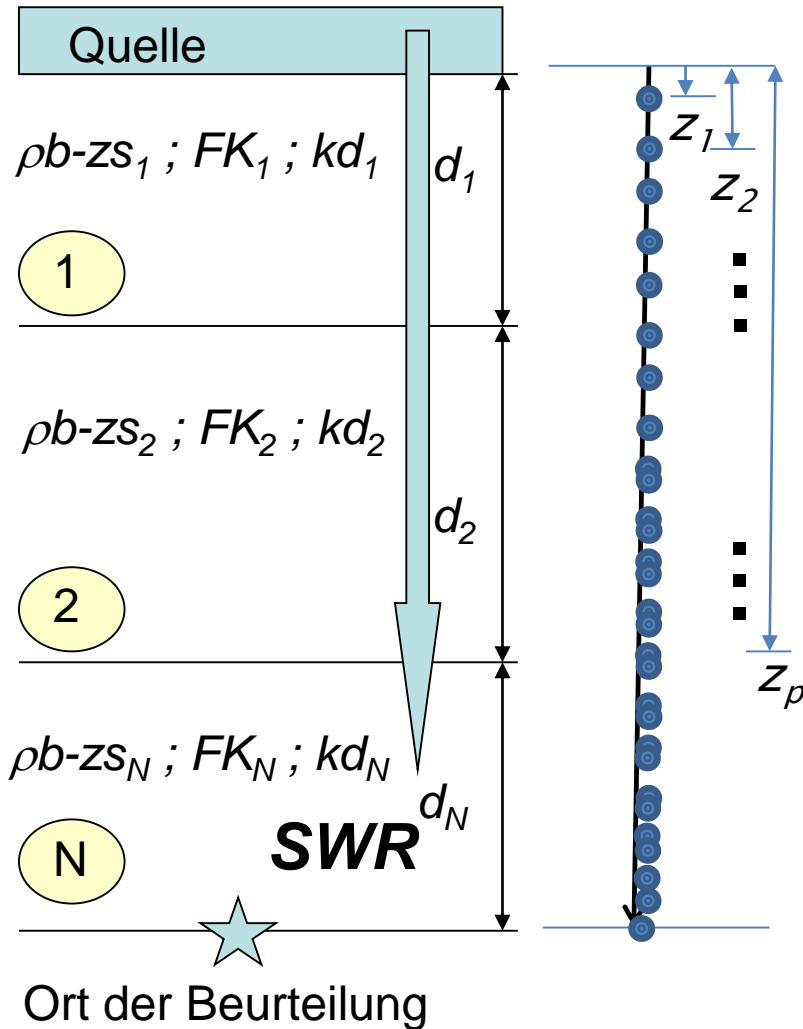
Durch **äquivalente Parameter** werden diese Einschränkungen umgangen. In den vG-Lösungsgleichungen werden insgesamt 3 Stofftransportparameter verwendet, die als äquivalente Parameter definiert werden müssen:

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.