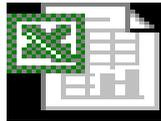


ALTEX-1D

Alytische Lösung der 1D-Transportgleichung mit MS-EXCEL



Microsoft
Excel-Arbeitsblatt

Benutzungsanleitung

Ver. 2.4



Anhang 3

Arbeitshilfe „Sickerwasserprognose bei Detailuntersuchungen“

Excel-Anwendung „ALTEX-1D“

Inhaltsverzeichnis:

A 3.1	Veranlassung und Zielsetzung	3
A 3.2	Installation der EXCEL-Anwendung	3
A 3.2.1	Excel 2003 unter Windows XP:	4
A 3.2.2	Excel 2007 unter Windows XP:	6
A 3.2.3	Excel 2007 unter WindowsVista:	7
A 3.3	Aufbau der Excel-Anwendung	7
A 3.3.1	Eingabe/Ausgabe	7
A 3.3.2	Ergebnisdarstellung	10
A 3.3.3	Hilfstabellenblätter	11
A 3.4	Anwendung des Arbeitsblatts	20
A 3.4.1	Fallkonstellation A	20
A 3.4.1.1	Dateneingabe Fall A	22
A 3.4.1.2	Berechnung der Ergebnis-Kenngrößen	30
A 3.4.2	Fallkonstellation B	33
A 3.4.2.1	Dateneingabe Fall B	34
A 3.4.2.2	Berechnung der Ergebnis-Kenngrößen	38
A 3.4.3	Verwendung äquivalenter Parameter	40
A 3.4.3.1	Leichtflüchtige Stoffe	40
A 3.4.3.2	Mehrschichtige Profile	45
A 3.5	Sensitivitätsbetrachtungen	49
A 3.5.1	Varianten zu Fallbeispiel 1	49
A 3.5.2	Varianten zu Fallbeispiel 2	52
A 3.5.3	Varianten zu Fallbeispiel 3	55
A 3.5.4	Varianten zu Fallbeispiel 4	58
A 3.5.5	Fazit der Variationsrechnungen	60
A 3.6	Validierung	60
A 3.6.1	mehrschichtige Profile	60
A 3.6.2	Berücksichtigung der Flüchtigkeit	61
A 3.6.3	Auswirkung linearisierter kd-Werte	61
A 3.7	Versionsgeschichte ALTEX-1D (Stand Februar 2010)	63

Hinweis: Die Benutzungsanleitung „ALTEX-1D“ war ursprünglich als Anhang 3 Bestandteil der Arbeitshilfe „Sickerwasserprognose bei Detailuntersuchungen“ (AH-DU). Aus Praktikabilitätsgründen wurde die Benutzungsanleitung in ein eigenständiges Dokument überführt. Die Gliederung, die verwendeten Kapitelhinweise und die Literaturangaben beziehen sich auf die Arbeitshilfe DU.

A 3.1 Veranlassung und Zielsetzung

Das in der Arbeitshilfe „Sickerwasserprognose bei Detailuntersuchungen“ (AH-DU) in Kap. 7.3 beschriebene Verfahren zur quantifizierenden Abschätzung der Sickerwasserkonzentrationen und -frachten für den Ort der Beurteilung beruht auf den analytischen Lösungen der Advektions-Dispersions-Transportgleichung für den eindimensionalen Fall (Kap. 7.3.2, Gl. 16). Mit den Lösungsgleichungen nach *van Genuchten* [4]/Anhang 2 kann unter den in Kap. 7.3.2 beschriebenen vereinfachenden Annahmen und Randbedingungen die Stoffkonzentration $c_s(z, t)$ im Sickerwasser in Abhängigkeit vom Ort (Tiefenkoordinate z) und der Zeit (Zeitkoordinate t) berechnet werden.

Um den Anwendern der Arbeitshilfe die Möglichkeit zu geben, das Verfahren an Hand ausgewählter Fallbeispiele selbständig nachzuvollziehen, wurde auf Veranlassung des ALA (Umlaufbeschluss vom 10.08.2005) ein Berechnungsinstrument auf der Grundlage einer EXCEL-Anwendung erstellt. Das EXCEL-Arbeitsblatt *ALTEX-1D* (Alytische Lösung der 1D-Transportgleichung mit MS-EXCEL) soll die in der Arbeitshilfe beschriebenen Zusammenhänge bei der Transportbetrachtung verständlicher und transparenter machen. Es soll dem Anwender außerdem an Hand von Fallbeispielen und beispielhaft durchgeführten Parameter-Variationen ein „Gefühl“ für die Auswirkungen unterschiedlicher Eingabeparameter und Randbedingungen auf das Ergebnis vermitteln.

Unter Beachtung der in Kap. 7.3.2 beschriebenen Vereinfachungen kann ALTEX-1D zudem im Vorfeld oder als Ergänzung zu komplexeren numerischen Instrumenten für quantifizierende Abschätzungen sowohl bei Detailuntersuchungen (DU) als auch bei Orientierenden Untersuchungen (OU) herangezogen werden. Die mit dem Arbeitsblatt berechneten Ergebnisse sollten bei sachgerechter Annahme der Eingabeparameter auf der sicheren Seite liegen, d. h. Konzentrationen und Frachten am Ort der Beurteilung werden eher überschätzt. Die EXCEL-Anwendung wurde durch Vergleich mit Ergebnissen aus der Literatur und Berechnungen mit numerischen Modellen validiert (s. Kap. A 3.6).

A 3.2 Installation der EXCEL-Anwendung

Voraussetzung für die Nutzung der EXCEL-Anwendung ist die Datei ALTEX-1D_verXX.xls. Die aktuelle Version ist auf der Internetseite des LBEG (www.lbeg.niedersachsen.de) unter dem Thema Boden & Grundwasser/Arbeitshilfen/Sickerwasserprognose verfügbar oder kann über einen Link von der Internetseite der LABO (www.labo-deutschland.de) herunter geladen werden. ALTEX-1D wird an den Stand der Erfahrungen aus der Anwendung angepasst. Die jeweiligen Änderungen können in der Versionsgeschichte ebenfalls auf der Internetseite des LBEG nachgelesen werden (s. Kap. A 3.7). Die aktuelle Versions-Nr. von ALTEX-1D ist auf den einzelnen Tabellenblättern angezeigt (s. Kap. A 3.3).

ALTEX-1D wurde bis zur Excel-Ausgabe 2007 (Vista) als lauffähig getestet. Die erforderlichen Voreinstellungen sind abhängig von der jeweiligen Excel-Ausgabe.

A 3.2.1 Excel 2003 unter Windows XP:

Die Datei darf **nicht** sofort mit **Doppelklick** geöffnet werden! Zunächst muss EXCEL unter *Windows/Programme* aufgerufen und für die Anwendung vorbereitet werden. Hierzu sind folgende Einstellungen vorzunehmen:

a) Unter Menü-Punkt *Extras/Add-Ins* die Felder *Analyse-Funktionen*, *Analyse-Funktionen-VBA* und *Solver* mit Haken versehen (Abb. 1):



Abb. 1: Auswahl Add-Ins

b) Unter Menü-Punkt *Extras/Makro/Sicherheit* die Stufe *Mittel* auswählen (Abb. 1a):

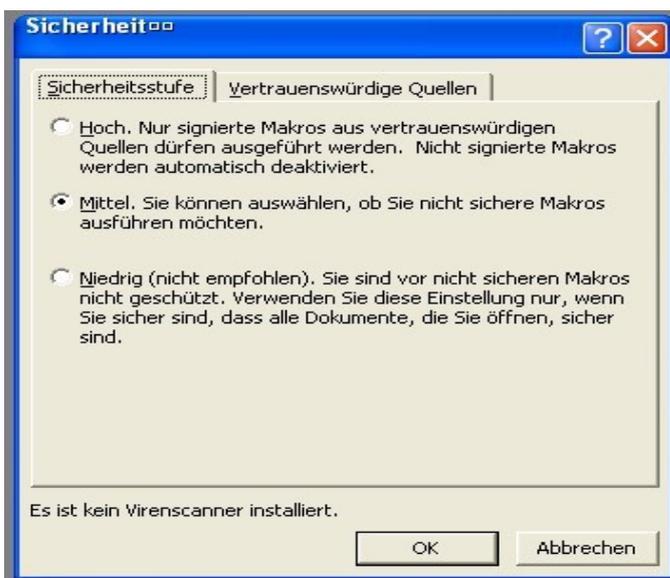


Abb. 1a: Auswahl Sicherheitsstufe

Erst nach diesen vorbereitenden Schritten kann die Datei ALTEX-1D_verXX.xls über den Menü-Punkt *Datei/Öffnen* geöffnet werden. Nach dem Öffnen erscheint das Fenster mit den Schaltflächen für die Aktivierung der Makros (Abb. 1b). Klicken Sie hier auf *Makros aktivieren*.



Abb. 1b: Hinweisfenster mit Schaltflächen für Makro-Aktivierung

Es ist darauf zu achten, dass die eingebundenen Funktionen in deutscher Bezeichnung vorliegen. Dies kann in EXCEL 2003 durch Anklicken des Menü-Punktes Einfügen/Funktion geprüft werden. Die Funktionen im eingblendeten Fenster sollten dann Abbildung 2 entsprechen.



Abb. 2: Fenster zur Überprüfung der Sprachversion der Funktionen

A 3.2.2 Excel 2007 unter Windows XP:

Die Datei kann direkt durch Doppelklick geöffnet werden. Die weiteren Schritte können der Abbildung 3 entnommen werden. Danach ist das Arbeitsblatt zur Berechnung bereit.

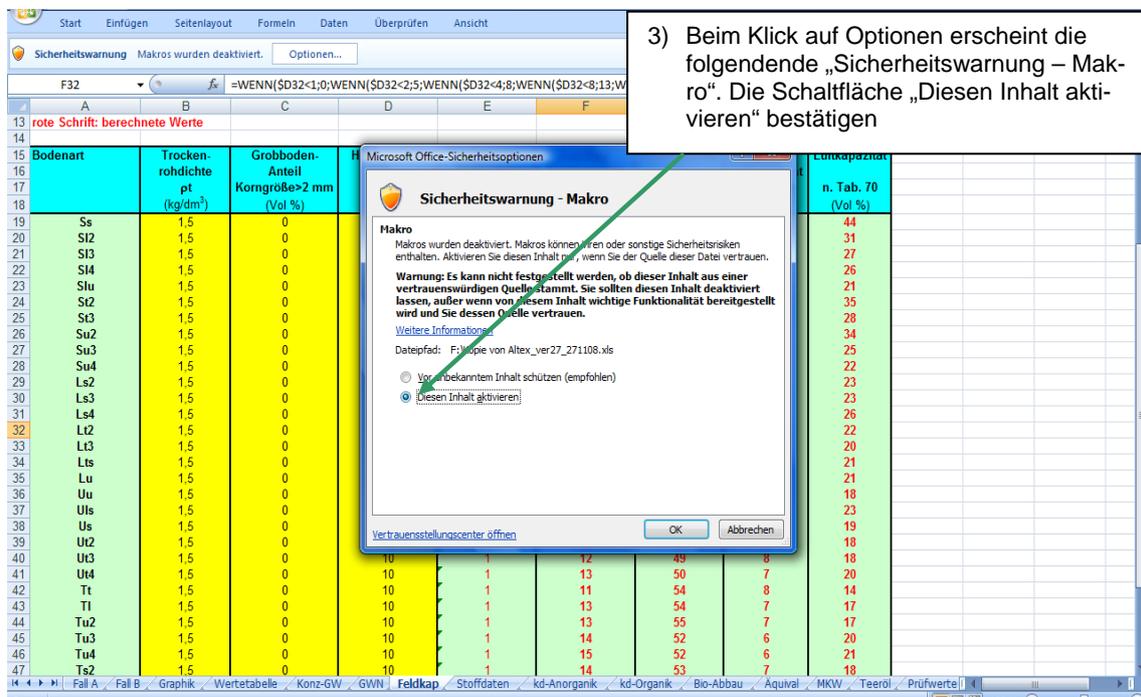
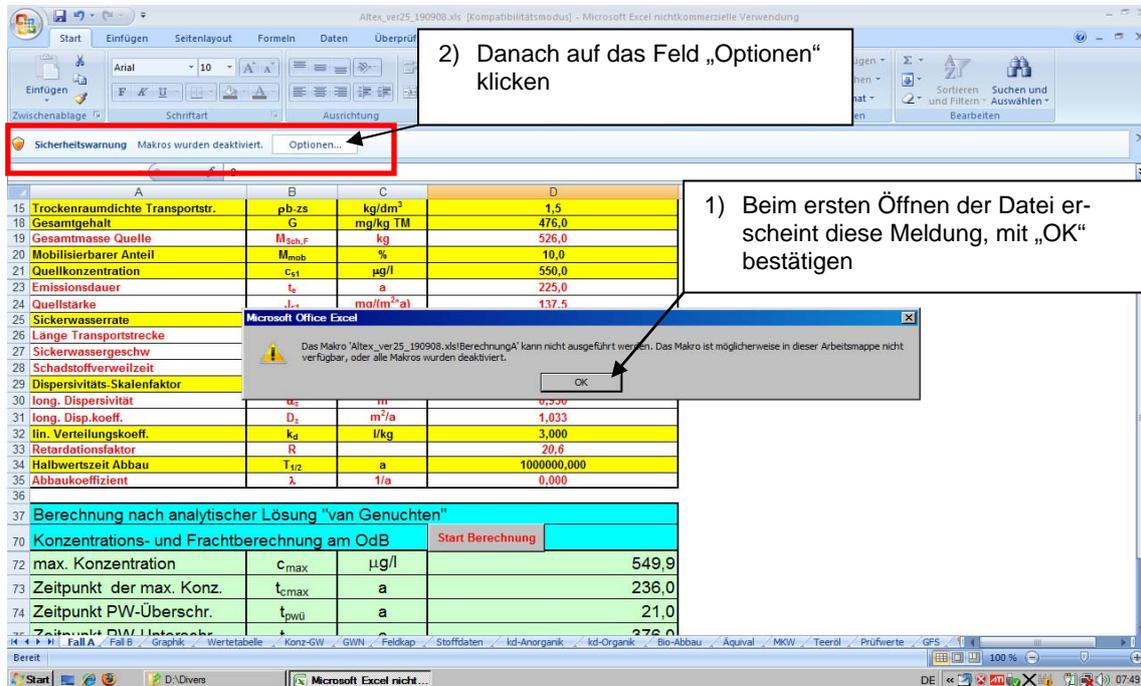


Abb. 3: Voreinstellung für EXCEL 2007 unter Windows XP

A 3.2.3 Excel 2007 unter WindowsVista:

Die Datei kann direkt durch Doppelklick geöffnet werden. Die weiteren Schritte sind aus Abbildung 4 ersichtlich.

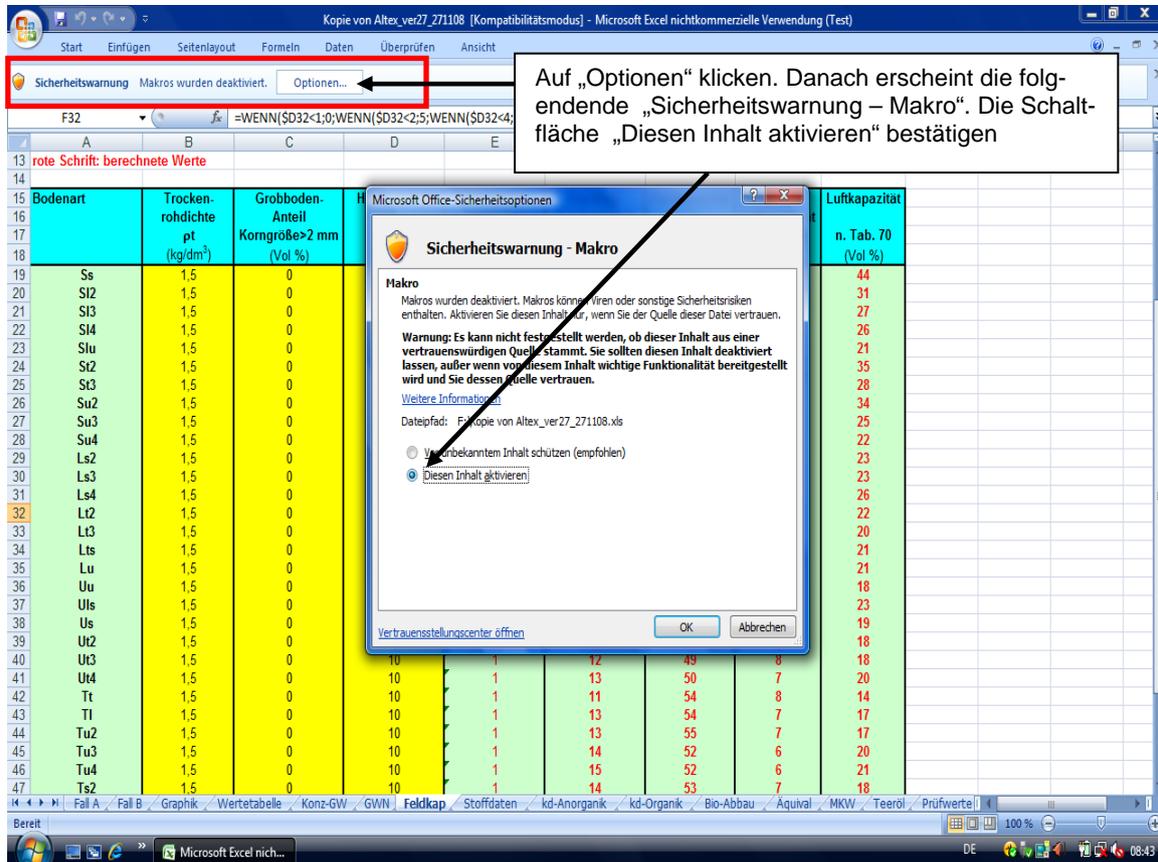


Abb. 4: Voreinstellung für EXCEL 2007 unter Windows Vista

A 3.3 Aufbau der Excel-Anwendung

Das Excel-Arbeitsblatt enthält 17 Tabellenblätter (Abb. 5 und Abb. 6) in der Reihenfolge:

Fall A, Fall B, Graphik, Wertetabelle, SWR_GWN, Feldkap, Äquival, Stoffdaten, kd-Anorganik, kd-Organik, Bio-Abbau, Konz-GW, MKW, Teeröl, Prüfwerte und GFS.

A 3.3.1 Eingabe/Ausgabe (Registerfarbe gelb)

Die Tabellenblätter **Fall A** (Abb. 5) und **Fall B** (Abb. 6) sind die Kernelemente der EXCEL-Anwendung ALTEX-1D (Registerfarbe gelb). Sie enthalten die Felder für die Eingabeparameter, die Ergebnis-Kenngrößen und die Schaltfläche zum Starten der Berechnung über ein Makro. Die aktuelle Versions-Nr. von ALTEX-1D wird im Kopf der Tabellenblätter angezeigt.

The screenshot displays the ALTEX-1D software interface. At the top, a yellow box labeled 'Versions-Nr' points to the version number '2.4' in the spreadsheet. The spreadsheet is divided into several sections: input parameters (yellow), calculation results (green), and a calculation status bar (blue). A graph on the right shows 'Konzentrationsentwicklung Quelle' with concentration C_0 on the y-axis and time t (a) on the x-axis. The graph includes the equations $C_{s1}(t) = C_0 (t < t_e)$ and $C_0 = C_{s1}(0)$, and a point t_e labeled 'Emissionsdauer'. A yellow box labeled 'Prinzipiskizze Fallkonstellation A' points to this graph. Another yellow box labeled 'Eingabefelder (gelb)' points to the input parameter table. A yellow box labeled 'Schaltfläche Makro' points to the 'Start Berechnung' button. A yellow box labeled 'Ergebnisausgabe' points to the calculation results table. A yellow box labeled 'Register/Tabellenblätter' points to the sheet tabs at the bottom.

Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert
Schadstoff			Cadmium
Prüfwert BBodSchV oder GFS	PV oder GFS	$\mu\text{g/l}$	5,00
Kontaminierte Fläche	F	m^2	1700,0
Ort der Beurteilung (u.GOK)	OdB	m	3,5
Oberkante Quelle (u.GOK)	OKq	m	0,0
Unterkante Quelle (u.GOK)	UKq	m	0,5
Bodenart (KAS)			Su2
Feldkapazität	FK	%	23,0
Trockenraumdichte Quelle	$\rho_b\text{-Q}$	kg/dm^3	1,30
Trockenraumdichte Transportstr.	$\rho_b\text{-zs}$	kg/dm^3	1,50
Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	476,000
Gesamtmasse Quelle	$M_{s1,r}$	kg	525,980
Mobilisierbarer Anteil	M_{mob}	%	10,0
Quellkonzentration	c_0	$\mu\text{g/l}$	550,0
Vorbelastung Transportstrecke	c_1	$\mu\text{g/l}$	0,0
Emissionsdauer	t_e	a	225,0
Quellstärke	J_{s1}	$\text{mg/(m}^2\text{a)}$	137,5
Sickerwasserrate	SWR	mm/a	250,0
Länge Transportstrecke	z_e	m	3,0
Sickerwassergeschw.	v_{se}	m/a	1,087
Schadstoffverweilzeit	t_{ve}	a	56,8
Dispersivitäts-Skalenfaktor	f_d		0,100
long. Dispersivität	α_e	m	0,3
long. Disp.koeff.	D_e	m^2/a	0,3
lin. Verteilungskoeff.	k_d	kg	3,000
Retardationsfaktor	R		20,6
Halbwertszeit Abbau	$T_{1/2}$	a	100000,000
Abbaukoeffizient	λ	$1/\text{a}$	0,000

max. Konzentration	C_{max}	$\mu\text{g/l}$	549,9
Zeitpunkt der max. Konz.	t_{cmax}	a	236,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{puü}$	a	21,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{puu}	a	376,0
Dauer PW-Überschr.	t_{pu}	a	355,0
Schadstoffemission Quelle	E_{s1ges}	kg	52,598
Schadstoffemission GW	E_{s2ges}	kg	52,548
max. Fracht GW	E_{s2max}	g/a	233,707
mittl. Fracht GW	$E_{s2mittel}$	g/a	148,024
max. Emissionsstärke GW	J_{s2max}	$\text{mg/(m}^2\text{a)}$	137,5
mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2mittel}$	$\text{mg/(m}^2\text{a)}$	87,1
mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	52,598

Abb. 5: Aufbau des Tabellenblattes Fall A

Aufgrund des grundsätzlich unterschiedlichen Berechnungsganges für die Fallkonstellationen A (konstante Quellkonzentration) und B (exponentiell abnehmende Quellkonzentration) ist vom Anwender einzelfallspezifisch eine Annahme zu treffen, welche Fallkonstellation maßgebend ist, und dementsprechend das Blatt **Fall A** (Abb. 5) bzw. **Fall B** (Abb. 6) zu verwenden (s. Kap. A 3.4). Das unterschiedliche Emissionsverhalten der Quelle für die beiden Fallkonstellationen wird durch die in die Arbeitsblätter integrierten Prinzipiskizzen verdeutlicht (Abb. 5 und 6 oben rechts).

Microsoft Excel - Altex-1D_ver24.xls

File Edit View Insert Format Tools Data Window Help

6,124

Versions-Nr

Transportbetrachtung Fallkonstellation B
 exponentiell abnehmende Quellkonzentration
 gelbe Felder: Eingabefelder
 rote Schrift: berechnete Werte

Bearbeiter: ALA-IA
 Projekt: Fallbsp. 3/Bspfall AB
 Datum Bearbeit.: 12.2.14
 Version: 2.4

Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	ber. Wert
Schadstoff			Acenaphthen	
Prüfwert BbodSchw/GFS	PW/GFS	µg/l	0,20	
Kontaminierte Fläche	F	m ²	1100,0	
OdB (u GOK)	OdB	m	4,5	
Oberkante Quelle	OKq	m	0,5	
Unterkante Quelle	UKq	m	0,7	
Bodenart (KAS)		Stü	Stü	
Feldkapazität	FK	%	23,0	
Trockenraumdichte Quelle	pb-Q	kg/dm ³	1,30	
Trockenraumdichte Transportstr.	pb-zs	kg/dm ³	1,70	
Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	85,000	
Gesamtmasse Quelle	M _{ges,q}	kg	24,310	
Mobilisierbarer Anteil	M _{mob}	%	100,0	
flächenbez. mob. Masse		g/m ²	22,100	
Quellkonzentration initial	c _{s1} (0)	µg/l	750,0	
Vorbelastung Transportstrecke	c _s	µg/l	0,0	
asympt. Endkonzentration	c _a	µg/l	0,0	
Abklingkonstante	k _s	1/a	8,48E-03	
Emissionsdauer Quelle	t _e	a	570,0	
Quellstärke initial	J _{s1} (0)	mg/(m ² a)	107,5	
Sicherwasserrate	SWR	mm/a	250,0	
Länge Transportstrecke	z _L	m	3,8	
Sicherwassergeschw.	v _m	m/a	1,087	
Schadstoffverweilzeit	t _{an}	a	101,7	
Dispersivitäts-Skalenfaktor	f _s		0,100	
long. Dispersivität	α _L	m	0,300	
long. Disp.koeff.	D _L	m ² /a	0,413	
im. Verteilungskoeff.	k _d	l/kg	6,124	
Retardationsfaktor	R		45,3	
Halbwertszeit Abbau	T _{1/2}	a	6,692	
Abbaukoeff. λ	λ	1/a	1,171	

Konzentrationsentwicklung Quelle

$$c_{s1}(t) = c_a + c_0 \cdot \exp(-k_s t)$$

$c_{s1}(0) = \text{initiale Quellkonzentration} = c_a + c_0$

k_s : Abklingkonstante
 c_0 : Quelltermkonstante
 c_a : asymptotische Endkonzentration

PW
 t_e : Emissionsdauer

Zeit t (a)

Prinzipskizze Fallkonstellation B

Eingabefelder (gelb)

Schaltfläche Makro

Ergebnisausgabe

Berechnung nach analytischer Lösung "van Genuchten"			
Konzentrations- und Frachtberechnung am OdB			Start Berechnung
max. Konzentration	c _{m,ak}	µg/l	14,5
Zeitpunkt der max. Konz.	t _{cm,ak}	a	144,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	t _{pwÜ}	a	45,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t _{pwU}	a	603,0
Dauer PW-Überschr.	t _{pw}	a	638,0
Schadstoffemission Quelle	E _{st,ges}	kg	24,019
Schadstoffemission GW	E _{st,gw}	kg	0,812
max. Fracht GW	E _{z,max,gw}	g/a	3,996
mittl. Fracht GW	E _{z,mittel,gw}	g/a	1,272
max. Emissionsstärke GW	J _{z,max,gw}	mg/(m ² a)	3,6
mittl. Emissionsstärke GW	J _{z,mittel,gw}	mg/(m ² a)	1,2
mobilisierbare Masse	M _{mob}	kg	24,310
Abbruchkriterium			
Abbruchkriterium 1: keine Unterschreitung des PW im Berechnungszeitraum			
Abbruchkriterium 2: Schadstoffemission Quelle überschreitet mobilisierbare Masse			

Register/ Tabellenblätter

Fall A, Fall B, Graphik, Wertetabelle, SWR, GW, Fallkap, Aquicl, Stoffstrom, 1d-Aerorgank, 1d-Organik, 5d-Abbau, Konz-SW, Schadstoffmasse, PW, Term, Infrwerte, GFS

Abb. 6: Aufbau von Tabellenblatt Fall B

A 3.3.2 Ergebnisdarstellung (Registerfarbe rot)

Das Tabellenblatt **Graphik** (Abb. 7) enthält das Ergebnis der Transportbetrachtung in Form einer graphischen Darstellung des Konzentrationsverlaufes am Ort der Beurteilung (OdB) über die Zeit. Auf der x-Achse sind die Jahre nach Prognosebeginn aufgetragen, auf der y-Achse die Stoffkonzentration $c_{s2}(t)$ am Ort der Beurteilung (OdB) und der Prüfwert bzw. die GFS sofern vorhanden als Bezugsgröße in [$\mu\text{g/l}$].

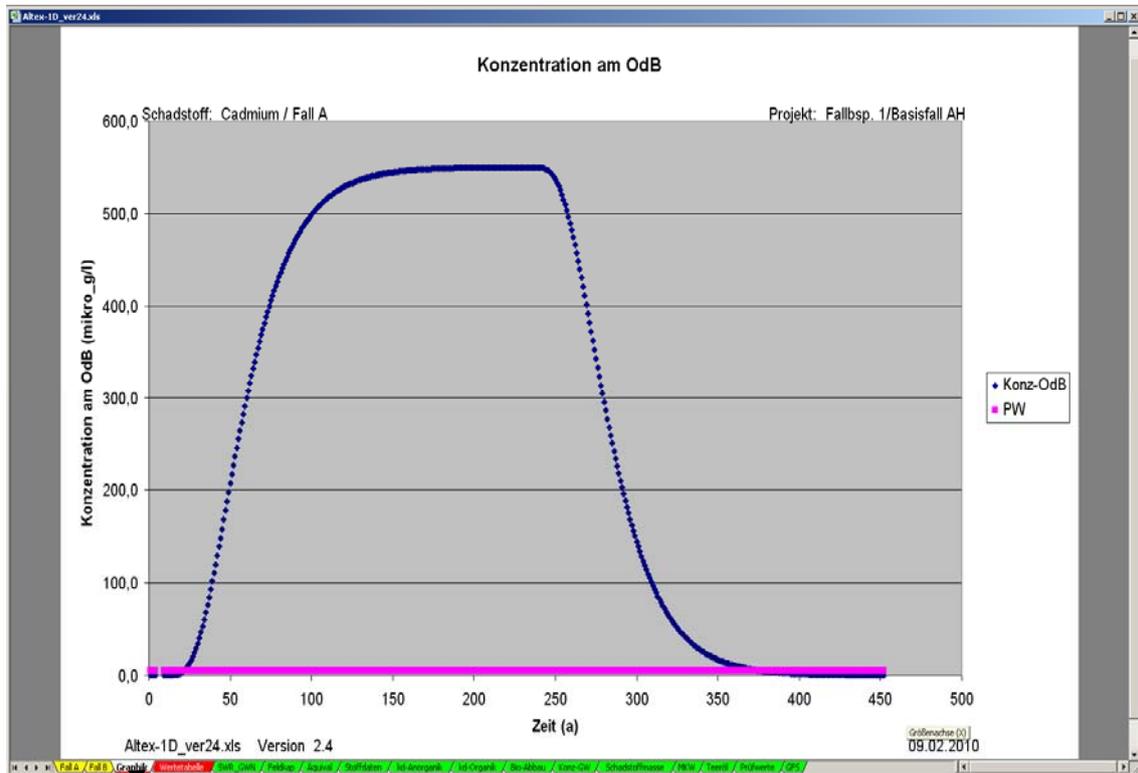


Abb. 7: Tabellenblatt Graphik mit Konzentrationsentwicklung am Ort der Beurteilung (OdB)

Das Tabellenblatt **Wertetabelle** (Abb. 8) beinhaltet die Zahlenwerte der Konzentrations- und Frachtentwicklung am Ort der Beurteilung über den gesamten Prognosezeitraum. Die Werte sind die Grundlage für die Erstellung der Graphik. Für den Fall B (abklingende Quellkonzentration) wird in der Spalte D zusätzlich die Entwicklung der Quellkonzentration angezeigt. Die Daten können zur weiteren Auswertung kopiert oder gespeichert werden.

	A	B	C	D	E	F
1	Konzentrations- und Frachtentwicklung im Prognosezeitraum					
2	Jahr	Konz. OdB	Fracht OdB	Konz. Quelle		
3	t	cs2(t)	Es2(t)	cs1(t)		
4		(mikro_g/l)	(g/a)	(mikro_g/l)		
5	1	0,0	0,000	743,7		
6	2	0,0	0,000	737,4		
7	3	0,0	0,000	731,2		
8	4	0,0	0,000	725,0		
9	5	0,0	0,000	718,9		
10	6	0,0	0,000	712,8		
11	7	0,0	0,000	706,8		
12	8	0,0	0,000	700,8		
13	9	0,0	0,000	694,9		
14	10	0,0	0,000	689,0		
15	11	0,0	0,000	683,2		
16	12	0,0	0,000	677,4		
17	13	0,0	0,000	671,7		
18	14	0,0	0,000	666,0		
19	15	0,0	0,000	660,4		
20	16	0,0	0,000	654,8		
21	17	0,0	0,000	649,3		
22	18	0,0	0,000	643,8		
23	19	0,0	0,000	638,3		
24	20	0,0	0,000	633,0		
25	21	0,0	0,000	627,6		
26	22	0,0	0,000	622,3		
27	23	0,0	0,000	617,0		
28	24	0,0	0,000	611,8		
29	25	0,0	0,000	606,7		
30	26	0,0	0,000	601,6		

Abb. 8: Aufbau des Tabellenblatts *Wertetabelle (Fall B)*

	A	B	E	F	H	J
1	Abschätzung der Sickerwasserrate/Grundwasserneubildung					
2	(nach Beims&Gutt)		Ver 2.3			
3	nur zur groben Abschätzung anzuwenden!					
4	wenn Daten vorhanden: Berechnung nach DIN 19687 bzw. TUB-BGR Verfahren					
5	(falls Hangneigung vorhanden, Niederschlagsmenge reduzieren)					
6	gelbe Felder: Eingabefelder					
7						
8	Tab.1: Werte nach Beims (2002)					
9	Bodentypen		Vegetationsart		Versiegelungsgrad	
10	Bezeichnung	Symbol	Bezeichnung	Symbol	Flächenanteil	
11						(%)
12	Sand	S	Ödland	Ö	0	
13	lehmiger Schluff	Uls	Gras	G	25	
14	sandiger Ton	Ts2	landw. Nutzfläche	N	50	
15	toniger Lehm	Lt3	Wald	W	75	
16						
17						
18	Niederschlag	Bodenart	Vegetationsart		Versiegelungsgrad	Grundwasser-
19					Flächenanteil	neubildung
20	(mm/a)	Symbol	Bezeichnung	Symbol	(%)	(mm/a)
21	650	S	Ödland	Ö	0	263
22						
23	nur Eingabe von Werten aus Tab. 1 erlaubt					
24	uW: unzulässiger Wert					

Abb. 9: Tabellenblatt *SWR_GWN* zur Abschätzung der Grundwasserneubildung nach Beims&Gutt

A 3.3.3 Hilfstabellenblätter (Registerfarbe grün)

Das Tabellenblatt *SWR_GWN* (Abb. 9) dient zur einfachen Abschätzung der Sickerwasserrate bzw. der Grundwasserneubildung, wenn für die Anwendung genauerer Verfahren (z. B. DIN 19687 bzw. TUB-BGR) keine ausreichenden Standortdaten vorliegen. Es beruht auf der in Kap. A 2.1 beschriebenen Methode nach Beims&Gutt [41].

Eingabedaten sind der Jahresniederschlag, der Bodentyp, die Nutzung sowie der Versiegelungsgrad (0 %, 25 %, 50 %, 75 %).

Mit dem Tabellenblatt **Feldkap** (Abb. 10) können die Parameter Feldkapazität und Luftkapazität für die in der KA5 [47] vorhandenen Bodenarten berechnet werden. Der Korrekturfaktor KF bei erhöhten Grobbodengehalten (Kornanteil > 2mm) wird nach der in der KA4 [11] angegebenen Formel berücksichtigt:

$$KF = (100 - \text{Vol\% Grobbodenanteil})/100.$$

Bei erhöhtem Humusgehalt werden die Zuschläge entsprechend Tab. 72 KA5 berücksichtigt.

	A	B	C	D	G	I	J	K	L
1	Feld/Luft-Kapazität nach KA 4/5								
2	Die Eingabe der Feldkapazität in den Blättern Fall A bzw. Fall B erfolgt als Volumenanteil in %.								
3	Sie entspricht der Wassermenge, die in Poren mit einem Äquivalentdurchmesser von 50 mm (entsprechend einer Saugspannung pF								
4	> 1,8, für Reinsande >2,5) gebunden ist.								
5	Die Feldkapazität ist neben der Bodenart von der Trockenrohdichte abhängig. Es ist die Klasseneinteilung nach Tab. 21/KA 5 zugrunde gelegt.								
6	Bei Böden mit Grobbodenanteil wird die Feldkapazität entspr. KA4/S. 295 mit dem Korrekturfaktor (100-Vol.% Grobbodenanteil)/100								
7	entsprechend dem Volumenanteil des Grobbodens reduziert.								
8	Bei Böden mit organischem Gehalt wird die Feldkapazität um einen Zuschlag entsprechend Tab. 72/KA 5 erhöht.								
9	Der Zuschlag ist abhängig vom Humusgehalt, es ist die Klasseneinteilung nach Tab. 15/KA 5 zugrunde gelegt.								
10									
11	gelbe Felder: Eingabefelder (mit Vorgabewerten)								
12	grüne Felder: Bodenarten nach KA 5								
13	rote Schrift: berechnete Werte								
14									
15	Bodenart	Trocken-	Grobboden-	Humusgehalt	Feldkapazität	Luftkapazität			
16		rohdichte	Anteil		n. Tab. 70	n. Tab. 70			
17		ρ_t	Korngröße>2 mm		(Vol %)	(Vol %)			
18		(kg/dm³)	(Vol %)	(Masse %)	(Vol %)	(Vol %)			
19	Ss	1,5	0	0	11	32			
20	Sl2	1,5	0	0	25	18			
21	Sl3	1,5	0	0	27	15			
22	Sl4	1,5	0	0	30	12			
23	Slu	1,5	0	0	33	10			
24	St2	1,5	0	0	22	20			
25	St3	1,5	0	0	30	14			
26	Su2	1,5	0	0	23	21			
27	Su3	1,5	0	0	29	14			
28	Su4	1,5	0	0	32	11			
29	Ls2	1,5	0	0	34	9			
30	Ls3	1,5	0	0	33	9			
31	Ls4	1,5	0	0	32	11			
32	Lt2	1,5	0	0	36	7			
33	Lt3	1,5	0	0	39	5			
34	Lts	1,5	0	0	37	6			
35	Lu	1,5	0	0	36	7			
36	Uu	1,5	0	0	38	7			
37	Uls	1,5	0	0	35	8			
38	Us	1,5	0	0	35	9			
39	Ut2	1,5	0	0	37	6			
40	Ut3	1,5	0	0	37	6			
41	Ut4	1,5	0	0	37	7			
42	Tt	1,5	0	0	43	3			
43	Tl	1,5	0	0	41	4			
44	Tu2	1,5	0	0	42	4			
45	Tu3	1,5	0	0	38	6			
46	Tu4	1,5	0	0	37	6			
47	Ts2	1,5	0	0	39	4			
48	Ts3	1,5	0	0	37	6			
49	Ts4	1,5	0	0	32	10			
50	Sande								
51	fS, fSms, fSgs	1,5	0	0	14	31			
52	mS, mSfs, mSgs	1,5	0	0	10	32			
53	gS	1,5	0	0	8	33			
54									
55									

Abb. 10: Tabellenblatt **Feldkap** zur Ermittlung der Feldkapazität und der Luftkapazität nach KA5

Mit dem Tabellenblatt **Äquival** (Abb. 11 und 12) können mehrschichtige Bodenprofile sowie die Flüchtigkeit bei leichtflüchtigen Stoffen berücksichtigt werden. Die Berechnung erfolgt nach dem Konzept der äquivalenten Parameter (Kap. A2.3 und A2.6). Es können bis zu 10 unterschiedliche Schichten eingegeben werden.

	A	B	C	D	F	H	J
1	Berechnung äquivalenter Parameter für Mehrschicht-Bodenprofil und flüchtige Stoffe						
2	Ver 2.3						
3	gelbe Felder: Eingabefelder						
4	Hinweis: eine Schicht wird berücksichtigt, wenn ein Mächtigkeitswert angegeben ist. Wenn ein Mächtigkeitswert für Schicht i angegeben ist, müssen auch die Parameter ausgefüllt werden. Soll die Schicht gelöscht werden, muss die entsprechende Zeile leer sein (Zelle mit rechter Maustaste einzeln auswählen und Inhalte löschen)						
5							
6							
7							
8							
9	Parameter	Symbol	Einheit	Wert			
10	Fall A oder B			B			
11	Stoff			Trichlorethen			
12	Sickerwasserrate	SWR	(mm/a)	300,000			
13	Henry-Konstante	H	(-)	2,303E-01			
14	Diffusionskoeff. Wasser	Dw	m ² /a	0,025			
15	Diffusionskoeff. Luft	Dg	m ² /a	215,011			
16	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd	(-)	0,100			
17							
18	Schicht-Nr	Bodenart	Mächtigkeit	Feldkapazität	Luftkapazität	Trockenraumdichte	lin. Verteilungs-koeffizient
19		KA5					
20	i		z(i)	Fk(i)	Lk(i)	ρb(i)	kd(i)
21			(m)	(Vol.-%)	(Vol.-%)	(kg/dm ³)	(l/kg)
22	1	Su2	4	27	21	1,6	2,033
23	2						
24	3						
25	4						
26	5						
27	6						
28	7						
29	8						
30	9						
31	10						
32	Summe/äquiv.		4	27,0	21,0	1,600	2,063

Abb. 11: Eingabeteil des Tabellenblattes **Äquival** zur Berücksichtigung von Mehrschichtprofilen und leichtflüchtigen Stoffen (Fallbsp. 4)

Äquivalente Parameter	Symbol	Einheit	Wert	
Feldkapazität	FK-äq	(%)	27,000	Die Werte der rot unterlegten Zellen sind in die Eingabeblätter Fall A bzw. Fall B zu übertragen
Luftkapazität	LK-äq	(%)	21,000	
Trockenraumdichte	ρb-zs-äq	(kg/dm ³)	1,600	
lin. Verteilungskoeff.	kd-äq	(l/kg)	2,063	
Retardationsfaktor	R-äq	(-)	13,227	
Tortuosität Bodenwasser	τw-äq	(-)	0,205	
Tortuosität Bodenluft	τg-äq	(-)	0,114	
Sickerwassergeschwindigkeit	vsm-äq	(m/a)	1,111	
longitudinale Dispersivität	αz	(m)	0,400	
mechanische Dispersion	Dmech	(m ² /a)	0,444	
molekulare Diffusion	Dmol	(m ² /a)	0,005	
Dispersion Verflüchtigung	Dvol	(m ² /a)	4,382	
Dispersionskoeffizient	Dz-äq	(m ² /a)	4,831	
Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd-äq	(-)	1,087	

Abb. 12: Ergebnis des Tabellenblattes **Äquival** zur Berücksichtigung von Mehrschichtprofilen und leichtflüchtigen Stoffen (Fallbsp. 4)

Das Tabellenblatt **Stoffdaten** (Abb. 13) enthält die zur Durchführung der Sickerwasserprognose erforderlichen chemisch-physikalischen Stoffdaten für organische Stoffe.

Es beinhaltet insgesamt 182 Einzelstoffe, darunter alle organischen Stoffe, für die ein Geringfügigkeitsschwellenwert GFS angegeben ist [38].

Die Stoffdaten stammen aus qualitätsgesicherten international frei zugänglichen Datenbanken (Epi-Suite/US-EPA [48], National Institute of Standards and Technology NIST [49], CalTox [50]). Das Datenblatt ermöglicht die Umrechnung der temperaturabhängigen Daten auf eine vom Nutzer wählbare Temperatur. Ein zusätzliches Feld gibt einen Hinweis auf die Flüchtigkeit des Stoffes. Die Flüchtigkeit wurde nach dem in der Literatur [61] beschriebenen Verfahren abhängig vom Wert der Henry-Konstante in die Klassen „gering“, „mittel“ und „hoch“ eingestuft. Für Stoffe mit geringer Flüchtigkeit ist eine Berücksichtigung bei der Sickerwasserprognose über äquivalente Parameter nicht erforderlich. Der Diffusionskoeffizient im freien Wasser wird nach Worch [59], der Diffusionskoeffizient in freier Luft nach der FSG-Methode [60] berechnet.

	A	B	C	D	E	F	G	J	K	O	P	T
1	Stoffdaten für organische Stoffe											
2	Einstufung der Flüchtigkeit (n. Handbook of Chemical Property Estimation Methods)											
3	grüne Felder: nach EPI-Suite	Datenbank der US-EPA	Henry-Konstante H									
4	gelbe Felder: Eingabefelder	H< 1,26e-5: gering										
5												
6												
7												
8												
9	Stoff	Temperatur	Summen-	Molgew.	CAS-Nr	Flüchtigkeit	Log (Koc)	Dampfdruck	Wasser-	Henry-	Diffusions-	Diffusions-
10	Gruppe/Name		Formel			Klasse		bei T Spalte B	Löslichkeit	Konstante	koeffizient	koeffizient
11		(°C)		(g/mol)			(l/kg)	(mm Hg)	(mg/l)	bei T Spalte B	bei T Spalte B	bei T Spalte B
12										(-)	(m ² /a)	(m ² /a)
45	Aromaten/Alkyl-Aromaten											
46	Benzol	25	C6H6	78,11	71-43-2	hoch	2,219	9,480E+01	1,790E+03	2,268E-01	294,699	0,034
47	Toluol	25	C7H8	92,14	108-98-3	hoch	2,428	2,840E+01	5,260E+02	2,714E-01	271,355	0,031
48	Ethylbenzol	25	C8H10	106,17	100-41-4	hoch	2,714	9,600E+00	1,690E+02	3,221E-01	253,076	0,029
49	Xylol (Mittelwert, o,m,p)	25	C8H10	106,17	1330-20-7	hoch	2,640	8,370E+00	1,430E+02	2,624E-01	253,076	0,029
50	1,2,4-Trimethylbenzol	25	C9H12	120,20	95-63-6	hoch	2,956	2,100E+00	5,700E+01	2,518E-01	238,251	0,027
51	Ethyltoluol	25	C9H12	120,20	620-24-4	hoch	2,924	3,040E+00	3,999E+01	3,815E-01	238,251	0,027
52	Propylbenzol	25	C9H12	120,20	103-65-1	hoch	2,980	3,420E+00	5,220E+01	4,292E-01	238,251	0,027
53	Styrol	25	C8H8	104,15	100-42-5	hoch	2,714	6,400E+00	3,100E+02	1,124E-01	255,466	0,029
54	Cumol	25	C9H12	120,20	98-82-8	hoch	2,912	4,500E+00	6,130E+01	4,700E-01	238,251	0,027
55	Indan	25	C9H10	118,18	496-11-7	mittel	2,998	1,470E+00	1,090E+02	8,216E-03	240,215	0,027
56												
57	MTBE											
58	MTBE	25	C5H12O	88,15	1634-04-4	mittel	0,721	2,500E+02	5,100E+04	2,399E-02	277,385	0,031
59												
60	LHKW											
61	halogenierte Alkene											
62	Tetrachlorethen (PER)	25	C2Cl4	166,83	127-18-4	hoch	2,029	1,850E+01	2,060E+02	7,235E-01	204,234	0,023
63	Trichlorethen (TRI)	25	C2HCl3	131,39	79-01-6	hoch	1,831	6,900E+01	1,260E+03	4,026E-01	228,239	0,025
64	cis-Dichlorethen	25	C2H2Cl2	96,94	156-59-2	hoch	1,641	2,010E+02	6,410E+03	1,688E-01	264,630	0,030
65	Vinylchlorid (VC)	25	C2H3Cl	62,50	75-01-4	hoch	1,376	2,980E+03	8,800E+03	1,136E+00	330,233	0,038
66												
67	halogenierte Alkane											
68	Tetrachlorkohlenstoff	25	CCl4	153,82	56-23-5	hoch	1,687	1,150E+02	7,930E+02	1,128E+00	211,682	0,023
69	Trichlormethan	25	CHCl3	119,38	67-66-3	hoch	1,545	1,970E+02	7,950E+03	1,500E-01	239,042	0,027
70	Dichlormethan	25	CH2Cl2	84,93	75-09-2	hoch	1,376	4,350E+02	1,300E+04	1,328E-01	282,578	0,032
71	Chlormethan	25	CH3Cl	50,49	74-87-3	hoch	1,155	4,300E+03	5,320E+03	3,605E-01	369,361	0,042
72	1,1,2,2-Tetrachlorethen	25	C2H2Cl4	167,85	79-34-5	mittel	2,029	1,330E+01	2,830E+03	1,500E-02	203,065	0,022
73	1,1,1,2-Tetrachlorethen	25	C2H2Cl4	167,85	630-20-6	hoch	1,985	1,200E+01	1,070E+03	9,891E-02	203,065	0,022
74	Trichlorethen (1,1,1)	25	C2H3Cl3	133,41	71-55-6	hoch	1,687	1,240E+02	1,290E+03	7,030E-01	226,571	0,025
75	Dichlorethen (1,2)	25	C2H4Cl2	98,96	107-06-2	hoch	1,641	7,890E+01	8,600E+03	4,823E-02	261,956	0,030
76	Chlorethan	25	C2H5Cl	64,52	75-00-3	hoch	1,376	1,010E+03	6,710E+03	4,537E-01	324,852	0,037

Abb. 13: Aufbau des Tabellenblattes **Stoffdaten**

Das Tabellenblatt **kd-Anorganik** (Abb. 14 und Abb. 15) dient der Berechnung des linearen Verteilungskoeffizienten (k_d -Wert) für anorganische Stoffe (Schwermetalle), der als Eingabewert in den Tabellenblättern **Fall A** und **Fall B** benötigt wird.

Grundlage der Berechnung sind die aus Pedotransferfunktionen abgeleiteten Freundlich-Parameter, mit denen ein linearisierter k_d -Wert ermittelt wird (Abb. 14).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	L	N	O	Q	S
1	kd-Werte Anorganik														
2															
3	gelbe Felder: Eingabefelder			wichtiger Hinweis: Die Werte sind als Orientierung gedacht, sofern keine standortspezifischen Werte aus Labor-/Felduntersuchungen vorliegen											
4	grüne Felder: Regressionskoeffizienten Bericht BGR/2005 [6]														
5	rote Schrift: berechnete Werte														
6	Freundlich-Modell : $c_s = K_{d,fr} \cdot c^n$														
7	Die k_d -Werte in den rot markierten Zellen sind in den Tabellenblättern Fall A bzw Fall B einzusetzen														
8	$\log K_{d,fr} = \log K^* + a \cdot pH + b \cdot \log Ton + c \cdot \log C_{org}$														
9	Verwendung substratübergreifender Sorptionsisothermen n. Bericht BGR/2005 [6]														
10															
11	Element	Sym	Tab. BGR	log K*	a (pH)	b (log Ton)	c (log Corg)	n-Freundlich	pH	C _{org}	Ton	K _d -Freundlich	c _s (=Quellk.)	k _d -linearisiert	
12										(%)	(%)	($\mu g^{1-n} \cdot P^n / kg$)	$\mu g/l$	(l/kg)	
13	Cadmium	Cd	Tab. 3.2.6	-0,827	0,521	0,419	0,376	0,836	4,0	0,10	1,0	7,6	500,0	3,0	
14	Chrom	Cr	Tab. 3.2.6	3,09				0,799	6,0	0,10	10,0	1230,3	500,0	391,4	
15	Kupfer	Cu	Tab. 3.2.6	0,764	0,332	0,41		0,758	6,0	0,10	10,0	1465,5	500,0	369,6	
16	Molybdän	Mo	Tab. 3.2.11	5,309	-0,663	0,732		0,628	6,0	0,10	10,0	115,6	500,0	14,0	
17	Nickel	Ni	Tab. 3.2.6	-0,122	0,365	0,473	0,226	0,761	6,0	0,10	10,0	206,5	500,0	53,0	
18	Blei	Pb	Tab. 3.2.11	1,231	0,432	0,465		0,61	6,0	0,10	10,0	19408,9	250,0	2783,5	
19	Antimon	Sb	Tab. 3.2.6	2,593	-0,333	0,776	-0,292	0,846	6,0	0,10	10,0	46,0	100,0	24,5	
20	Thallium	Tl	Tab. 3.2.11	0,718	0,216	0,729		0,857	6,0	0,10	10,0	553,4	10,0	427,1	
21	Zink	Zn	Tab. 3.2.6	0,248	0,456	0,381	0,27	0,575	6,0	0,10	10,0	1244,5	5000,0	42,1	
22															
	Vorgabewert: 10*PW														

Abb. 14: Tabellenblatt **kd-Anorganik**/Freundlich-Parameter

Ersatzweise kann insbesondere für diejenigen Schwermetalle, für die keine Freundlich-Parameter aus Pedotransferfunktionen vorliegen, das Verfahren nach van den Berg & Roels [13]/Anhang 2 zur Berechnung eines linearen k_d -Wertes herangezogen werden (Abb. 15).

25	Abschätzung linearer Verteilungskoeffizienten nach van den Berg & Roels (1991)														
26															
27															
28	Element	Sym	Regressionskoeffizienten				Bodenkenngrößen			kd-Wert					
29			C ₀	C ₁	C ₂	C ₃	C ₄	pH	C _{org}	Ton					
30									(%)	(%)				(l/kg)	
30	Arsen	As	349	942	9,42	1,79	-0,16	6,0	0,10	10,0	634,893				
31	Blei	Pb	0,0008	0,002	0	2,85	-0,17	6,0	0,10	10,0	1432,489				
32	Cadmium	Cd	2408	4309	129,26	0,57	0	4,0	0,10	1,0	7,006				
33	Chrom	Cr	15,18	61,14	0	2,51	-0,21	6,0	0,10	10,0	10100,631				
34	Kupfer	Cu	2168	8673	86,73	1,36	-0,12	6,0	0,10	10,0	314,996				
35	Nickel	Ni	42465	424650	0	0,4	0	6,0	0,10	10,0	320,002				
36	Quecksilber	Hg	0,00089	0,0024	0,0055	2,82	-0,163	6,0	0,10	10,0	1919,899				
37	Zink	Zn	130	598	2,99	0,89	-0,02	6,0	0,10	10,0	118,685				
38	Zinn	Sn	0	14367	431	1,03	-0,08	6,0	0,10	10,0	43,012				
39															

Abb. 15: Tabellenblatt **kd-Anorganik**/Verfahren nach van den Berg & Roels

Mit dem Tabellenblatt **kd-Organik** (Abb. 16) wird der lineare Verteilungskoeffizienten (k_d -Wert) für organische Stoffe aus dem $\log(K_{oc})$ -Wert des Tabellenblattes **Stoffdaten** und dem vom Anwender ggfs. schichtspezifisch einzugebenden Anteil an organischer Substanz (C_{org}) berechnet.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	kd-Werte Organik							
2								
3	gelbe Felder: Eingabefelder (Vorgabewert: 0,1% Corg)							
4	der k_{oc} -Wert wird aus dem Tabellenblatt "Stoffdaten" übernommen							
5								
6	lineares Sorptionsmodell: $c_s = k_d * c_w$		wichtiger Hinweis: Die Werte sind als Orientierung gedacht,					
7	$k_d = C_{org} * K_{oc}$		sofern keine standortspezifischen Werte aus					
8			Labor-/Felduntersuchungen vorliegen					
9								
10	Stoff		C_{org}	k_d				
11	Gruppe/Name		(%)	(l/kg)				
12								
45	Aromaten/Alkyl-Aromaten							
46	Benzol	0,1	0,166					
47	Toluol	0,1	0,268					
48	Ethylbenzol	0,1	0,518					
49	Xylol (Mittelwert, o,m,p)	0,1	0,437					
50	Trimethylbenzol	0,1	0,718					
51	Ethyltoluol	0,1	0,839					
52	Propylbenzol	0,1	0,955					
53	Styrol	0,1	0,518					
54	Cumol	0,1	0,817					
55	Indan	0,1	0,995					
56								
57	MTBE							
58	MTBE	0,1	0,005					
59								
60	LHKW							
61	halogenierte Alkene							
62	Tetrachlorethen (PER)	0,1	0,107					
63	Trichlorethen (TRI)	0,1	0,068					
64	cis-Dichlorethen	0,1	0,044					
65	Vinylchlorid (VC)	0,1	0,024					
66								

Abb. 16: Tabellenblatt *kd-Organik* zur Berechnung des k_d -Wertes für organische Stoffe

	A	D	E	G	I	K	M	O	P
1	Halbwertszeiten für organische Schadstoffe								
2	Abbau 1. Ordnung								
3	Ultimate Wert: kompletter Abbau bis CO2								
4	Datenquellen Primary Wert: nur erster Abbauschritt								
5	Epi-Suite-US-EPA								
6	CalTox		wichtiger Hinweis: Die Halbwertszeiten sind als Orientierung gedacht,						
7			sofern keine standortspezifischen Werte aus Labor-/Felduntersuchungen vorliegen						
8									
9	Stoff	Biowin 3	Biowin 4	CalTox	CalTox	CalTox	CalTox	CalTox	
10	Gruppe/Name	Ultimate	Primary	Oberboden	Wurzelzone	unges. Zone	Grundwasser	Sediment	
11		HWZ	HWZ	HWZ	HWZ	HWZ	HWZ	HWZ	
12		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	
45	Aromaten/Alkyl-Aromaten								
46	Benzol	0,175	0,028	0,521	0,521	0,666	0,666	0,611	
47	Toluol	0,067	0,017	0,078	0,078	0,299	0,048	0,293	
48	Ethylbenzol	0,071	0,018	0,018	0,018	0,321	0,321	0,318	
49	Xylol (Mittelwert, o,m,p)	0,085	0,020	0,041	0,041	0,512	0,512	0,504	
50	1,2,4 Trimethylbenzol	0,105	0,024	0,048	0,048	0,048	0,096	0,048	
51	Ethyltoluol	0,090	0,021	-	-	-	-	-	
52	Propylbenzol	0,075	0,018	-	-	-	-	-	
53	Styrol	0,061	0,015	0,123	0,123	0,326	0,326	0,173	
54	Cumol	0,075	0,018	0,022	0,014	0,014	0,027	0,034	
55	Indan	0,090	0,021	-	-	-	-	-	
56									
57	MTBE								
58	MTBE	0,091	0,020	0,063	0,285	0,285	0,570	0,194	
59									
60	LHKW								
61	halogenierte Alkene								
62	Tetrachlorethen (PER)	0,313	0,040	1,627	1,627	2,082	1,411	1,411	
63	Trichlorethen (TRI)	0,194	0,030	2,548	2,548	2,074	2,195	0,595	
64	cis-Dichlorethen	0,120	0,022	-	-	-	-	-	
65	Vinylchlorid (VC)	0,074	0,017	0,762	0,762	0,712	11,918	3,041	
66									
67	halogenierte Alkane								
68	Tetrachlorkohlenstoff	0,448	0,052	0,540	0,540	0,040	0,011	0,510	
69	Trichlormethan	0,184	0,029	0,167	0,167	3,507	3,589	0,256	
70	Dichlormethan	0,114	0,022	-	-	-	-	-	

Abb. 17: Tabellenblatt *Bio-Abbau*

Das Tabellenblatt **Bio-Abbau** (Abb. 17) enthält Halbwertszeiten für organische Schadstoffe zur Verwendung als Eingabewert in den Tabellenblättern **Fall A** und **Fall B**. Die Werte können zur Orientierung herangezogen werden, wenn keine standortspezifischen Daten vorliegen.

Das Tabellenblatt **Konz-GW** (Abb. 18) enthält ein einfaches Verfahren zur Abschätzung der Schadstoffkonzentration im Grundwasser, die aus der in das Grundwasser eintretenden Sickerwasserfracht (Ergebnis aus den Tabellenblättern Fall A bzw. Fall B) resultiert. Grundlage ist eine Massenbilanzbetrachtung unter Berücksichtigung der Sickerwasser- und Grundwasservolumenströme (Kap. 8.2). Voraussetzung ist die Kenntnis der Aquifereigenschaften (Durchlässigkeit, Mächtigkeit, Gefälle). Als Abstrombreite ist die Ausdehnung der Kontaminationsfläche senkrecht zur Grundwasserfließrichtung einzusetzen

	A	B	C	D	E
1	Schadstoffkonzentration im Grundwasser				
2	Ver 2.3				
3	Berechnung der aus der in das Grundwasser emittierten Sickerwasserfracht				
4	resultierenden Konzentrationen im Grundwasser				
5	Die resultierende Konzentration entspricht der über die gewählte				
6	Aquifermächtigkeit gemittelten Konzentration .				
7	kont. Aquifermächtigkeit: <= Aquifermächtigkeit				
8	Die Werte aus den Tabellenblättern Fall A und Fall B werden automatisch übernommen				
9	(abh. von der Eingabe (A oder B) im Feld D15				
10	gelbe Felder: Eingabefelder				
11	grüne Felder: aus Fall A oder Fall B übernommener Wert				
12					
13					
14	Parameter	Symbol	Einheit	Wert	
15	Fall (A oder B)			A	
16	kontaminierte Fläche	F	m²	1700,0	
17	Abstrombreite kont. Fläche	Ba	m	40,0	
18	Sickerwasserrate	SWR	mm/a	250,0	
19	max. Konz. am OdB	c_{max}	µg/l	549,9	
20	max. Fracht	E_{s2max}	g/a	233,7	
21	mittl. Fracht	E_{s2mittel}	g/a	148,0	
22	Sickerwasservolumenstrom	Q_{s2}	m³/a	425,0	
23	kont. Aquifermächtigkeit	h_{kont}	m	0,5	
24	Durchlässigkeit Aquifer	kf	m/s	1,0E-03	
25	hydr. Gefälle Grundwasser	l	m/m	1,0E-03	
26	Filtergeschwindigkeit	vf	m/a	31,5	
27	GW-Volumenstrom	Q_{gw}	m³/a	630,7	
28	max. Konzentration im GW	c_{gw-max}	µg/l	221,372	
29	mittl. Konzentration im GW	c_{gw-mittel}	µg/l	140,211	
30	Verdünnungsfaktor (c_{max})	VF	(-)	2,484	
31					

Abb. 18: Tabellenblatt **Konz-GW** zur Abschätzung der resultierenden Schadstoffkonzentration im Grundwasser

Das Tabellenblatt **Schadstoffmasse (Abb. 19)** dient zur Berechnung der vorhandenen Schadstoffmasse aus Bodenuntersuchungen nach Anhang A1.3 der AH-DU. Es können die Ergebnisse von bis zu 5 Sondierungen mit jeweils 5 Schichten berücksichtigt werden.

	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Ermittlung der Gesamtschadstoffmasse aus schichtbezogenen Sondierungsdaten							
2	Version 2.4							
3	(n. Arbeitshilfe Anhang 1/A1.3)							
4								
5	Größe der Untersuchungsfläche (m ²):			750				
6								
7	Sondierung	Schicht	Mächtigkeit	Lagerungsdichte	Schadstoffgehalt	schichtbez. flächenspez.	Flächenrepräsentanz	anteilige flächenspez.
8	Nr	Nr	(m)	(kg/dm³)	Feststoff	Schadstoffmasse	Sondierung	Schadstoffmasse
9					(mg/kg)	(g/m²)	(%)	(g/m²)
10	1	1	0,3	0,8	100,0	24		
11	1	2	1	1,4	250,0	350		
12	1	3	0,5	1,8	1000,0	900		
13	1	4	0,4	1,5	20,0	12		
14	1	5				0		
15	1			flächenspez. Schadstoffmasse Profil:		1286	100	1286
16	2	1				0		
17	2	2				0		
18	2	3				0		
19	2	4				0		
20	2	5				0		
21	2			flächenspez. Schadstoffmasse Profil:		0		0
22	3	1				0		
23	3	2				0		
24	3	3				0		
25	3	4				0		
26	3	5				0		
27	3			flächenspez. Schadstoffmasse Profil:		0		0
28	4	1				0		
29	4	2				0		
30	4	3				0		
31	4	4				0		
32	4	5				0		
33	4			flächenspez. Schadstoffmasse Profil:		0		0
34	5	1				0		
35	5	2				0		
36	5	3				0		
37	5	4				0		
38	5	5				0		
39	5			flächenspez. Schadstoffmasse Profil:		0		0
40	flächenspez. Schadstoffmasse gesamt (g/m ²):						1286	
41	Gesamtmasse Untersuchungsfläche (kg):						964,5	

Abb. 19: Tabellenblatt Schadstoffmasse zur Berechnung der Schadstoffgesamtmasse aus Bodenuntersuchungen

Das Tabellenblatt **MKW (Abb. 20)** dient zur Abschätzung der Quellkonzentration bei Bodenkontaminationen mit Phasen aus typischen Mineralölprodukten wie Superbenzin, Diesel, Heizöl und Kerosin, wenn keine Laboruntersuchungen (z. B. Säulenversuche) vorliegen. Grundlage der Abschätzung ist das Raoult'sche Gesetz. Die Sättigungskonzentrationen werden aus den Einzellöslichkeiten entsprechend dem einzugebenden Massenanteil in der Phase und dem mittleren Molekulargewicht berechnet. Als Vorgabedaten für die Kohlenwasserstoff-Anteile sind sofern verfügbar, Werte aus der Literatur eingegeben, die vom Anwender durch eigene Daten modifiziert werden können [36], [54-58].

	A	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	Sättigungskonzentrationen für Kohlenwasserstoffe in Mineralölprodukten berechnet nach Raoult										
2	Version 2.4		gelbe Felder: Eingabefelder (Werte aus Stoffdatenbank, bzw. DGMK, Grathwohl)								
3											
4	rote Schrift: berechnete Werte der Sättigungskonzentration (zur Verwendung als Anhaltspunkt für die Quellstärke bei Kontamination mit Phase)										
5	Mineralölprodukte										
6	Kohlenwasserstoffe	Normal		Super		Super Plus		Diesel		Kerosin	
7		KW-Anteil (Gew. %)	Ci,sat (µg/l)	KW-Anteil (Gew. %)	Ci,sat (µg/l)	KW-Anteil (Gew. %)	Ci,sat (µg/l)	KW-Anteil (Gew. %)	Ci,sat (µg/l)	KW-Anteil (Gew. %)	Ci,sat (µg/l)
8											
9	Alkane										
10	n-Butan	3,1	2,862E+03	3,3	3,126E+03	3,2	3,025E+03	-	-	-	-
11	i-Butan	1,6	1,145E+03	1,6	1,209E+03	1,6	1,206E+03	-	-	-	-
12	n-Pentan	4,8	2,234E+03	3,9	1,825E+03	3,0	1,428E+03	-	-	-	-
13	i-Pentan	10,5	6,139E+03	11,0	6,577E+03	11,3	6,742E+03	-	-	-	-
14	n-Hexan	2,8	2,736E+02	1,8	1,806E+02	1,1	1,089E+02	-	-	-	-
15	i-Hexan	13,3	1,902E+03	9,9	1,448E+03	7,8	1,141E+03	-	-	-	-
16	n-Heptan	3,4	1,015E+02	2,3	7,023E+01	3,3	1,005E+02	-	-	-	-
17	i-Heptan	3,4	7,584E+01	2,2	5,019E+01	3,3	7,511E+01	-	-	-	-
18	n-Octan	4,0	2,034E+01	4,0	2,080E+01	8,3	4,306E+01	-	-	-	-
19	i-Octan	3,9	7,331E+01	4,0	7,690E+01	8,3	1,592E+02	7,0	2,691E+02	-	-
20	n-Nonan	1,3	1,088E+00	1,3	1,113E+00	0,8	6,833E-01	2,0	3,424E+00	-	-
21	n-Decan	1,1	3,538E-01	1,1	3,618E-01	1,1	3,610E-01	7,0	4,605E+00	-	-
22	n-Dodekadekan	-	-	-	-	-	-	8,0	3,128E-01	-	-
23	n-Tetradekadekan	-	-	-	-	-	-	8,0	1,597E-01	-	-
24	n-Hexadecan	-	-	-	-	-	-	7,0	5,008E-02	-	-
25	n-Octadecan	-	-	-	-	-	-	7,0	4,633E-03	-	-
26	n-Eikosan	-	-	-	-	-	-	4,0	2,395E-04	-	-
27	Summe Alkane	53,2	1,483E+04	46,4	1,459E+04	53,1	1,403E+04	50,0	2,777E+02	0,0	0,000E+00
28	Cycloalkane										
29	Cyclopentan	1,0	1,859E+03	0,8	1,641E+03	0,6	1,278E+03	3,0	1,201E+04	-	-
30	Cyclohexan	1,5	8,396E+02	0,7	4,176E+02	0,4	2,406E+02	4,0	4,705E+03	-	-
31	Cycloheptan	-	-	-	-	-	-	3,0	1,650E+03	-	-
32	Cyclooctan	-	-	-	-	-	-	3,0	3,801E+02	-	-
33	Summe Cycloalkane	2,4	2,699E+03	1,5	2,059E+03	1,1	1,519E+03	13,0	1,875E+04	0,0	0,000E+00
34	Alkene										
35	Buten	1,1	3,900E+03	1,4	4,807E+03	0,9	3,304E+03	-	-	-	-
36	Penten	4,4	8,190E+03	3,4	6,458E+03	1,3	2,464E+03	-	-	-	-
37	Hexen	2,2	1,150E+03	1,9	1,016E+03	0,5	2,668E+02	2,0	2,139E+03	-	-
38	Hepten	1,3	1,643E+02	2,2	2,843E+02	1,1	1,418E+02	-	-	-	-
39	Octen	0,9	1,906E+01	2,0	4,331E+01	1,2	2,593E+01	-	-	-	-
40	Nonen	1,2	5,270E+00	1,0	4,491E+00	0,7	3,137E+00	-	-	-	-
41	Decen	1,2	7,533E-01	0,8	5,136E-01	0,4	2,562E-01	3,0	3,852E+00	-	-
42	Summe Alkene	12,3	1,343E+04	12,7	1,261E+04	6,1	6,206E+03	5,0	2,143E+03	0,0	0,000E+00
43	Aromaten										
44	Benzol	0,9	1,765E+04	0,9	1,764E+04	0,7	1,351E+04	-	-	-	-
45	Toluol	10,8	5,323E+04	12,0	6,017E+04	12,5	6,285E+04	-	-	-	-

Abb. 20: Tabellenblatt MKW zur Abschätzung der Sättigungskonzentration für einzelne Komponenten in Mineralölprodukten

Analog zum Tabellenblatt **MKW** dient das Blatt **Teeröl** (Abb. 21) zur Abschätzung der PAK-Quellkonzentration bei Bodenkontaminationen mit Teerölphase, wenn keine Laboruntersuchungen (Säulenversuche) vorliegen. Grundlage der Abschätzung ist das Raoult'sche Gesetz. Die Sättigungskonzentrationen werden aus den Einzellöslichkeiten (subcooled-Werte) entsprechend dem einzugebenden Massenanteil in der Phase und dem mittleren Molekulargewicht berechnet. Die Tabelle enthält die Zusammensetzung typischer Teerölprodukte aus der Literatur [36], [51].

Die Tabellenblätter **Prüfwerte** und **GFS** enthalten die Prüfwerte für den Wirkungspfad Boden-Grundwasser nach Anhang 2 Nr. 3.1 der BBodSchV und die Geringfügigkeitschwellenwerte nach LAWA [38].

	A	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	Sättigungskonzentrationen für die 16 EPA-PAK in Teerölprodukten berechnet nach Raoult										
2	Version 2.4		Daten aus Diana Loyek, 1998								
3	Hinweis: Zur Berechnung der Sättigungskonzentrationen werden die subcooled-Löslichkeitswerte verwendet										
4	rote Schrift: berechnete Werte der Sättigungskonzentration (zur Verwendung als Anhaltspunkt für die Quellstärke bei Kontamination mit Phase)										
5	Teerölprodukte										
6	16 EPA PAK	Pech		Steinkohlenteer		Rohteer		Kreosot		Antracen-Öl	
7		PAK-Anteil (Gew. %)	C _{i,sat} (µg/l)	PAK-Anteil (Gew. %)	C _{i,sat} (µg/l)	PAK-Anteil (Gew. %)	C _{i,sat} (µg/l)	PAK-Anteil (Gew. %)	C _{i,sat} (µg/l)	PAK-Anteil (Gew. %)	C _{i,sat} (µg/l)
8											
9	Naphthalin	0,00	0,00E+00	4,50	1,09E+04	12,30	2,64E+04	9,49	1,23E+04	0,37	6,00E+02
10	Acenaphthylen	0,00	0,00E+00	0,24	2,11E+02	1,88	1,46E+03	0,00	0,00E+00	0,00	0,00E+00
11	Acenaphthen	0,00	0,00E+00	0,07	2,15E+01	0,08	2,17E+01	6,07	9,96E+02	1,98	4,07E+02
12	Fluoren	0,00	0,00E+00	0,80	2,27E+02	1,46	3,66E+02	4,41	6,68E+02	5,18	9,82E+02
13	Phenanthren	0,35	6,11E+01	1,65	2,00E+02	4,44	4,76E+02	11,51	7,45E+02	17,01	1,38E+03
14	Anthracen	0,14	1,89E+01	0,58	5,41E+01	0,75	6,19E+01	0,81	4,04E+01	0,92	5,75E+01
15	Fluoranthren	0,78	3,04E+01	0,69	1,86E+01	2,08	4,97E+01	4,95	7,14E+01	7,52	1,36E+02
16	Pyren	0,59	2,95E+01	0,44	1,53E+01	1,28	3,93E+01	3,14	5,83E+01	4,31	1,00E+02
17	Benzo(a)anthracen	0,92	5,14E+00	0,47	1,82E+00	0,77	2,64E+00	2,06	4,26E+00	0,48	1,24E+00
18	Chrysen	0,98	7,24E+00	0,37	1,90E+00	0,75	3,40E+00	2,12	5,81E+00	0,31	1,06E+00
19	Benzo(b)fluoranthren	0,67	3,98E-01	0,35	1,44E-01	0,50	1,82E-01	1,68	3,70E-01	0,29	8,00E-02
20	Benzo(k)fluoranthren	0,68	2,02E-01	0,36	7,42E-02	0,50	9,12E-02	1,68	1,85E-01	0,29	4,00E-02
21	Benzo(a)pyren	0,47	1,05E+00	0,22	3,40E-01	0,37	5,06E-01	1,63	1,35E+00	0,18	1,86E-01
22	Indeno(123-cd)pyren	0,19	4,27E+00	0,17	2,65E+00	0,24	3,31E+00	1,29	1,08E+01	0,29	3,03E+00
23	Dibenzo(a,h)anthracen	0,46	8,06E-01	0,14	1,70E-01	0,19	2,04E-01	2,40	1,56E+00	0,26	2,11E-01
24	Benzo(ghi)perylen	0,34	1,38E-01	0,20	5,65E-02	0,22	5,49E-02	1,00	1,51E-01	0,19	3,59E-02
25	Summe 16 EPA PAK	6,57	1,59E+02	11,25	1,17E+04	27,81	2,88E+04	54,24	1,49E+04	39,58	3,67E+03
26	Rest	65,06		61,37		59,46		6,97		11,95	
27	nicht identifizierte Subst.	28,38		27,40		16,62		38,79		48,48	
28	Summe	100,01		100,02		103,89		100,00		100,01	
29	mittl. Molgewicht (g/mol)	375,00		260,00		230,00		139,00		174,00	

Abb. 21: Tabellenblatt *Teeröl* zur Abschätzung der Sättigungskonzentration für Teerölprodukte

A 3.4 Anwendung des Arbeitsblatts

Die Vorgehensweise bei der Anwendung von ALTEX-1D wird an Hand von Fallbeispielen demonstriert. Je nachdem, welches Freisetzungsverhalten für die Schadstoffquelle angenommen wird (vgl. Kap. 6.3.2 und A1.2.3), ist für die Fallkonstellation A (konstante Quellkonzentration) oder B (exponentiell abnehmende Quellkonzentration) jeweils das entsprechende Tabellenblatt **Fall A** oder **Fall B** zu verwenden. Zu beachten ist, dass eine Berechnung immer nur für einen Einzelstoff erfolgen kann. Im Falle von Stoffgemischen ist eine Einzelbetrachtung der relevanten Komponenten zu empfehlen.

A 3.4.1 Fallkonstellation A

Für die Beschreibung der Fallkonstellation A wurden folgende Beispiele ausgewählt:

Fallbeispiel 1:

Es handelt sich um ein Betriebsgelände, auf dem früher zink- und cadmiumhaltige Farbstoffe produziert wurden. In der oberflächennahen Bodenschicht wurden hohe Gehalte an Cadmium (durchschnittlich 476 mg/kg) und Zink festgestellt. Untersuchungen des Grundwassers unterhalb der kontaminierten Fläche ergaben deutlich erhöhte Konzentrationen von Cadmium und Zink. Die Transportbetrachtung wird für Cadmium durchgeführt.

Fallbeispiel 2:

Es handelt sich um ein ehemaliges Gaswerksgelände, auf dem in einer geringmächtigen Bodenschicht noch Reste von Steinkohlenteer in residualer Sättigung (19800 mg/kg) festgestellt wurden. Der Anteil von Naphthalin an der Teerphase beträgt aufgrund der Alterung nur noch 0,61 % (121 mg/kg). Untersuchungen des Grundwassers unterhalb der kontaminierten Fläche ergaben erhöhte Konzentrationen von Naphthalin und Phenanthren. Die Transportbetrachtung wird für Naphthalin durchgeführt.

Fallunterscheidung (Fallkonstellation A oder B)

Im ersten Schritt ist zunächst die Entscheidung zu treffen, welche Fallkonstellation vorliegt (s. o.). Im Fallbeispiel 1 liegen lösliche Cadmium- und Zinksalze vor. Daher wird ein lösungslimitiertes Freisetzungsverhalten mit konstanter Quellkonzentration (Fallkonstellation A) angenommen und das Tabellenblatt **Fall A** als Eingabeblatt durch Anklicken des entsprechenden Tabellenregisters (Registerfarbe wechselt beim Anklicken auf Weiß) ausgewählt (Abb. 22). Im Fallbeispiel 2 liegt die Kontamination als residuale Sättigung mit Teerphase vor. Auch hier wird lösungslimitiertes Freisetzungsverhalten mit konstanter Quellkonzentration angenommen (Tabellenblatt **Fall A**).

A		B		C		D		E		F		G		H		I		J		K		L		M	
Transportbetrachtung Fallkonstellation A konstante Quellkonzentration				Bearbeiter: ALA-UA Projekt: Fallbsp. HBasisfall AH		Datum Bearbeit.: 10.02.10 Version 2.4				<div style="text-align: center;"> Konzentrationsentwicklung Quelle </div>															
gelbe Felder: Eingabefelder				Datum Bearbeit.: 10.02.10																					
rote Schrift: berechnete Werte				Version 2.4																					
Kennwert/Parameter		Symbol		Einheit		Wert																			
Schadstoff						Cadmium																			
Prüfvert BBodSchV oder GFS		PV oder GFS		µg/l		5,00																			
Kontaminierte Fläche		F		m²		1700,0																			
Ort der Beurteilung (u.GOK)		OdB		m		3,5																			
Oberkante Quelle (u.GOK)		OKq		m		0,0																			
Unterkante Quelle (u.GOK)		UKq		m		0,5																			
Bodenart (KA5)						Su2																			
Feldkapazität		FK		%		23,0																			
Trockenraumdichte Quelle		pb-Q		kg/dm³		1,30																			
Trockenraumdichte Transportstr.		pb-zs		kg/dm³		1,50																			
Gesamtgehalt		G		mg/kg TM		476,000																			
Gesamtmasse Quelle		M _{tot,q}		kg		526,380																			
Mobilisierbarer Anteil		M _{mob}		%		10,0																			
Quellkonzentration		c _q		µg/l		550,0																			
Vorbelastung Transportstrecke		c _v		µg/l		0,0																			
Emissionsdauer		t _e		a		225,0																			
Quellstärke		J _q		mg/(m²·a)		137,5																			
Sickerwasserrate		SVR		mm/a		250,0																			
Länge Transportstrecke		z _u		m		3,0																			
Sickerwassergeschw		v _{sw}		m/a		1,087																			
Schadstoffverweilzeit		t _{res}		a		56,8																			
Dispersivitäts-Skalenfaktor		f _d				0,100																			
long. Dispersivität		α _z		m		0,3																			
long. Disp.koeff.		D _z		m²/a		0,3																			
lin. Verteilungskoeff.		k _d		l/kg		3,000																			
Retardationsfaktor		R				20,6																			
Halbwertszeit Abbau		T _{1/2z}		a		1000000,000																			
Abbaufkoeffizient		λ		1/a		0,000																			
Berechnung nach analytischer Lösung "van Genuchten"																									
Konzentrations- und Frachtberechnung am OdB						Start Berechnung																			
max. Konzentration		c _{max}		µg/l		549,9																			
Zeitpunkt der max. Konz.		t _{cmax}		a		236,0																			
Zeitpunkt PW-Überschr.		t _{pwü}		a		21,0																			
Zeitpunkt PW-Unterschr.		t _{pwu}		a		376,0																			
Dauer PW-Überschr.		t _{pw}		a		365,0																			
Schadstoffemission Quelle		E _{s1ges}		kg		52,598																			
Schadstoffemission GW		E _{s2ges}		kg		52,548																			
max. Fracht GW		E _{s2max}		g/a		233,707																			
mittl. Fracht GW		E _{s2mittel}		g/a		148,024																			
max. Emissionsstärke GW		J _{s2max}		mg/(m²·a)		137,5																			
mittl. Emissionsstärke GW		J _{s2mittel}		mg/(m²·a)		87,1																			
mobilisierbare Masse		M _{mob}		kg		52,598																			
Abbruchkriterium																									
Abbruchkriterium 1: keine Unterschreitung des PW im Berechnungszeitraum (max. 300000 a)																									
Fall A Fall B Graphik Wertetabelle SWR-GWI Feldkap Äquival Stoffdaten Id-Anorganik Id-Organik Bio-Abbau Konz-GW Schadstoffmasse MKW Teeröl Prüfwerte GFA																									

Abb. 22: Tabellenblatt **Fall A** für die Fallbeispiele 1 und 2

Tabellenblatt **Fall A** anklicken

A 3.4.1.1 Dateneingabe Fall A

In den Tabellenblättern sind für die Eingabe der Parameter ausschließlich die gelb markierten Felder vorgesehen. Die restlichen Felder der Blätter sind gesperrt. Felder mit roter Schrift enthalten berechnete Zwischenergebnisse, die im weiteren Berechnungsverlauf benötigt werden und zur Information des Anwenders dienen. Bei der Eingabe ist darauf zu achten, dass die Zahlenwerte jeweils den in Spalte C vorgegebenen Einheiten entsprechen! In den Zellen D1 und D2 können der Name des Bearbeiters und ein Projektname eingegeben werden. In Zelle D3 wird das aktuelle Bearbeitungsdatum, in Zelle C4 die Versionsnummer angezeigt.

Die Dateneingabe ist für die Fallbeispiele 1 und 2 in Tabelle 1 detailliert beschrieben.

Tab. 1: Dateneingabe für die Fallbeispiele 1 und 2

Zelle	Parameterbeschreibung und Textbezug zur Arbeitshilfe	Beispiel 1 Dateneingabe	Beispiel 2 Dateneingabe
D6	Zu betrachtender Schadstoff , s. Kap. 7.3.2. Es ist zu beachten, dass eine Berechnung immer nur für einen Einzelstoff erfolgen kann.	Cadmium	Naphthalin
D7	Prüfwert nach Anhang 2 Nr. 3.1 BBodSchV (falls kein Prüfwert oder GFS vorliegt, ist aus programmtechn. Gründen ein numerischer Ersatzwert einzugeben, z. B. 0,01).	5	2
D8	Als Kontaminierte Fläche ist die Größe der Emissionsfläche entsprechend Kap. 6.2, Gl. (3) einzusetzen.	1700	400
D9	Als Ort der Beurteilung (OdB) ist nach Kap. 5.2 für den Standort ein mittlerer Grundwasserhöchststand einzusetzen.	3,5	5
D10	Oberkante der Quelle (Kap. 6.2).	0	1,2
D11	Die Unterkante der Quelle bestimmt zusammen mit dem Ort der Beurteilung die Länge der Transportstrecke in D26 (s. a. Kap. 6.2).	0,5	1,8
D12	Bodenart (KA5) Hier ist die Bodenart mit den in Tab. 70 der KA5 aufgeführten Kurzzeichen einzugeben. Alternativ kann die Schichtbezeichnung nach EN ISO 14688/89 (DIN 4022) eingegeben werden. Bei mehrschichtigen Profilen können auch mehrere Kurzzeichen eingegeben werden. Das Feld ist nur informativ, es wird nicht als Bezug in den weiteren Berechnungen benötigt	Su2	Su3

Zelle	Parameterbeschreibung und Textbezug zur Arbeitshilfe	Beispiel 1 Dateneingabe	Beispiel 2 Dateneingabe
D13	Feldkapazität (Kap. 5.2). Das Modell geht von einem einschichtigen homogenen Aufbau der Transportstrecke aus. Es ist daher ein mittlerer Wert für die Bodenkennwerte der Transportstrecke einzugeben. Der Wert kann aus dem Tabellenblatt <i>Feldkap</i> entnommen werden (s. Abb. 23). Bei mehrschichtigen Profilen ist hier der entsprechende äquivalente Wert aus dem Tabellenblatt <i>Äquival</i> einzusetzen. (s. Kap. A3.4.3)	23	26
D14	Die Trockenraumdichte der Quelle wird für die Berechnung der Gesamtschadstoffmasse der Quelle (D19) benötigt und ist aus Untersuchungsergebnissen abzuleiten.	1,3	1,2
D15	Die Trockenraumdichte der Transportstrecke wird für die Berechnung des Retardationsfaktors (D33) benötigt und wird mit Laboruntersuchungen ermittelt oder aus der Bodenart geschätzt (KA5). Bei mehrschichtigen Profilen ist hier der entsprechende äquivalente Wert aus dem Tabellenblatt <i>Äquival</i> einzusetzen (Kap. A3.4.3)	1,5	1,6
D18	Schadstoffgesamtgehalt (Kap. 6.2). Im Beispiel 2 beträgt der Teerölgehalt 19800 mg/kg, und der Naphthalin-Anteil beträgt 121 mg/kg entsprechend 0,61 Gew.-%.	476	121
D20	Der mobilisierbare Anteil stellt den durch Niederschlagswasser freisetzbaren Anteil des Gesamtgehaltes dar und ist vorzugsweise aus Elutionsversuchen abzuschätzen (Kap. 6.3.2 und A 1.2.3). Der Wert für den mobilisierbaren Anteil bestimmt maßgeblich die Emissionsdauer in D23 und hat daher großen Einfluss auf das Ergebnis der Berechnung. Im Beispiel 1 beträgt der mobilisierbare Anteil nur 10%, da das meiste Cadmium in nicht wasserlöslicher, mineralischer Form gebunden ist. Im Fallbeispiel 2 wurde aufgrund der residualen Teerphase angenommen, dass 100% des Naphthalin-Gehaltes mobilisierbar sind.	10	100

Zelle	Parameterbeschreibung und Textbezug zur Arbeitshilfe	Beispiel 1 Dateneingabe	Beispiel 2 Dateneingabe
D21	Bei der Quellkonzentration ist die Schadstoffkonzentration im Sickerwasser der Quelle entsprechend Kap. 6.3.1 einzusetzen. Sie wird für die Fallkonstellation A als konstant über die Lebensdauer der Quelle angenommen (s. Prinzipskizze im Tabellenblatt). Im Falle residualer Phase kann hilfsweise (wenn keine Daten aus Elutionsversuchen zur Verfügung stehen) die Sättigungskonzentration der Einzelstoffe im jeweiligen Stoffgemisch als Quellkonzentration herangezogen werden. Zur Abschätzung der Sättigungskonzentrationen können die Tabellenblätter <i>MKW</i> und <i>Teeröl</i> verwendet werden. Im Fallbeispiel 2 kann aus dem Tabellenblatt <i>Teeröl</i> für Steinkohlenteer bei einem Anteil von 0,61 Gew% (Eingabe in Spalte F9) eine Sättigungskonzentration von 1480 µg/l entnommen werden.	550	1480
D22	Die Vorbelastung der Transportstrecke berücksichtigt eine zu Beginn in der Transportstrecke vorhandene Vorbelastung bspw. aufgrund geogen erhöhter Hintergrundwerte oder einer bereits vorhandenen Kontamination. Einzugeben ist der Wert der Sickerwasserkonzentration, der im Sorptionsgleichgewicht mit den entsprechenden Feststoffgehalten steht.	0	0
D25	Die nach Kap. 7.2.1 und A 2.1 ermittelte Sickerwasserrate (SWR) wird als konstant (entspricht einer mittleren jährlichen Rate) über die gesamte Zeitdauer der Prognose angenommen. Bei Fällen, in denen es z. B. durch Nutzungsänderungen zu einer Veränderung der SWR kommen kann, wird empfohlen, Berechnungen mit unterschiedlichen SWR durchzuführen. Hilfsweise kann für die Abschätzung der SWR auch das Tabellenblatt <i>SWR_GWN</i> herangezogen werden.	250	285

Zelle	Parameterbeschreibung und Textbezug zur Arbeitshilfe	Beispiel 1 Dateneingabe	Beispiel 2 Dateneingabe
D29	Der Dispersivitäts-Skalenfaktor dient zur Berechnung der longitudinalen Dispersivität (D30) und des longitudinalen Dispersivitätskoeffizienten (D31) entsprechend Kap. 7.3.3 und A 2.3. Insbesondere bei langen Transportstrecken (>10 m) ist ggf. eine Reduzierung des Faktors zu empfehlen. Beispiele, wie sich die Änderung des Dispersivitäts-Skalenfaktors auswirkt, sind in Kap. A 3.5 gegeben. Bei leichtflüchtigen Stoffen ist hier der entsprechende äquivalente Wert aus dem Tabellenblatt <i>Äquival</i> einzusetzen [42] (Kap. A2.3 und Kap. A 3.4.3.).	0,1	0,1
D32	Der lineare Verteilungskoeffizient k_d dient zur Berechnung des Retardationsfaktors in D33 (Kap. 7.3.3 und A 2.4) und hat großen Einfluss auf das Ergebnis der Berechnung. Liegen keine Ergebnisse aus Laboruntersuchungen vor, können die Tabellenblätter <i>kd-Anorganik</i> und <i>kd-Organik</i> als Orientierung zur Abschätzung des k_d -Wertes herangezogen werden (s. u.). Bei mehrschichtigen Profilen oder der Berücksichtigung der Flüchtigkeit ist hier der entsprechende äquivalente Wert aus dem Tabellenblatt <i>Äquival</i> einzusetzen (s. Kap. A 3.4.3.).	3,0	1,837
D34	Die Halbwertszeit Abbau (Kap. 7.3.3 und A2.5) wird zur Berechnung des Abbaukoeffizienten in D35 benötigt. Hierbei wird eine Abbaukinetik 1. Ordnung angenommen. Für nicht abbaubare Stoffe ist aus programmtechnischen Gründen ein Wert von 1.000.000 einzusetzen. Hieraus resultiert ein praktisch vernachlässigbarer Abbaukoeffizient. Liegen keine Ergebnisse aus Laboruntersuchungen vor, kann das Tabellenblatt <i>Bio-Abbau</i> als Orientierung zur Abschätzung der Halbwertszeit herangezogen werden (s. u.).	1.000.000	1,24

Ermittlung der Feldkapazität (Zelle D13)

Mit dem Tabellenblatt **Feldkap** (Abb. 23) können die Parameter Feldkapazität und Luftkapazität für die in der KA5 (dort Tab. 70) vorhandenen Bodenarten berechnet werden. Einzugeben sind die Trockenrohdichte, der Grobbodenanteil und der Humusgehalt. Die Zuschläge bei erhöhten Grobbodengehalten oder erhöhtem Humusgehalt werden berücksichtigt.

	A	B	C	D	G	I	J	K	L
1	Feld/Luft-Kapazität nach KA 4/5								
2	Version 2.4								
3	Die Eingabe der Feldkapazität in den Blättern Fall A bzw. Fall B erfolgt als Volumenanteil in %.								
4	Sie entspricht der Wassermenge, die in Poren mit einem Äquivalentdurchmesser von 50 mm (entsprechend einer Saugspannung pF								
5	> 1,8, für Reinsande >2,5) gebunden ist.								
6	Die Feldkapazität ist neben der Bodenart von der Trockenrohdichte abhängig. Es ist die Klasseneinteilung nach Tab. 21/KA 5 zugrunde gelegt.								
7	Bei Böden mit Grobbodenanteil wird die Feldkapazität entspr. KA4/S. 295 mit dem Korrekturfaktor (100-Vol.% Grobbodenanteil)/100								
8	entsprechend dem Volumenanteil des Grobbodens reduziert.								
9	Bei Böden mit organischem Gehalt wird die Feldkapazität um einen Zuschlag entsprechend Tab. 72/KA 5 erhöht.								
10	Der Zuschlag ist abhängig vom Humusgehalt, es ist die Klasseneinteilung nach Tab. 15/KA 5 zugrunde gelegt.								
11									
12	gelbe Felder: Eingabefelder (mit Vorgabewerten)								
13	grüne Felder: Bodenarten nach KA 5								
14	rote Schrift: berechnete Werte								
15									
16	Bodenart	Trocken-	Grobboden-	Humusgehalt	Feldkapazität	Luftkapazität			
17		roh-	Anteil		n. Tab. 70	n. Tab. 70			
18		dicke	Korngröße>2		(Vol %)	(Vol %)			
19		pt	mm		(Masse %)				
20		(kg/dm³)	(Vol %)						
21	Ss	1,5	0	0	11	32			
22	Sl2	1,5	0	0	25	18			
23	Sl3	1,5	0	0	27	15			
24	Sl4	1,5	0	0	30	12			
25	Slu	1,5	0	0	33	10			
26	Slu	1,5	0	0	33	10			
27	Su2	1,5	0	0	23	21			
28	Su3	1,5	0	0	29	14			
29	Su4	1,5	0	0	32	11			
30	Lu2	1,5	0	0	34	9			
31	Lu3	1,5	0	0	33	9			
32	Lu4	1,5	0	0	32	11			
33	Lt2	1,5	0	0	36	7			
34	Lt3	1,5	0	0	39	5			
35	Lts	1,5	0	0	37	6			
36	Lu	1,5	0	0	36	7			
37	Uu	1,5	0	0	38	7			
38	Uls	1,5	0	0	35	8			
39	Us	1,5	0	0	35	9			
40	Ut2	1,5	0	0	37	6			
41	Ut3	1,5	0	0	37	6			
42	Ut4	1,5	0	0	37	7			
43	Tt	1,5	0	0	43	3			
44	Tl	1,5	0	0	41	4			
45	Tu2	1,5	0	0	42	4			
46	Tu3	1,5	0	0	38	6			
47	Tu4	1,5	0	0	37	6			
48	Ts2	1,5	0	0	39	4			
49	Ts3	1,5	0	0	37	6			
50	Ts4	1,5	0	0	32	10			
51	Sande								
52	fS, fSms, fSgs	1,5	0	0	14	31			
53	mS, mSfs, mSgs	1,5	0	0	10	32			
54	gS	1,5	0	0	8	33			
55									
56									

Werte für Fallbeispiel 1

Tabellenblatt **Feldkap** anklicken

Abb. 23: Ermittlung der Feldkapazität in Fallbeispiel 1 mit Hilfe des Tabellenblatts **Feldkap**

Ermittlung des linearen Verteilungskoeffizienten k_d (Zelle D32)

a) Anorganische Stoffe (Fallbeispiel 1)

Liegen keine standortspezifischen Ergebnisse aus Laboruntersuchungen (Sorptionisothermen) vor, kann das Tabellenblatt **kd-Anorganik** für eine orientierende Abschätzung herangezogen werden (Abb. 24).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	L	N	O	Q	S
1	kd-Werte Anorganik														
2															
3	gelbe Felder: Eingabefelder														
4	grüne Felder: Regressionskoeffizienten Bericht BGR/2005 [6]														
5	rote Schrift: berechnete Werte														
6	Freundlich-Modell : $c_s = K_{d,fr} \cdot c^n$														
7	$\log K_{d,fr} = \log K^* + a \cdot pH + b \cdot \log \text{Ton} + c \cdot \log C_{org}$														
8	Verwendung substratübergreifender Sorptionsisothermen n. Bericht BGR/2005 [6]														
9															
10															
11	Element	Sym	Tab. BGR	log K*	a (pH)	b (log Ton)	c (log Corg)	n-Freundlich	pH	C _{org}	Ton	K _d -Freundlich	c _s (=Quellk.)	k _d -linearisiert	
12												$\log^{(1-n)}(\mu\text{g/kg})$	$\mu\text{g/l}$	(l/kg)	
13	Cadmium	Cd	Tab. 3.2.6	-0,827	0,521	0,419	0,376	0,836	4,0	0,10	1,0	7,6	500,0	3,0	
14	Chrom	Cr	Tab. 3.2.6	3,09				0,799	6,0	0,10	10,0	1230,3	500,0	391,4	
15	Kupfer	Cu	Tab. 3.2.6	0,764	0,332	0,41		0,758	6,0	0,10	10,0	1465,5	500,0	369,6	
16	Molybdän	Mo	Tab. 3.2.11	5,309	-0,663	0,732		0,628	6,0	0,10	10,0	115,6	500,0	14,0	
17	Nickel	Ni	Tab. 3.2.6	-0,122	0,365	0,473	0,226	0,761	6,0	0,10	10,0	206,5	500,0	53,0	
18	Blei	Pb	Tab. 3.2.11	1,231	0,432	0,465		0,61	6,0	0,10	10,0	19408,9	250,0	2783,5	
19	Antimon	Sb	Tab. 3.2.6	2,593	-0,333	0,776	-0,292	0,846	6,0	0,10	10,0	46,0	100,0	24,5	
20	Thallium	Tl	Tab. 3.2.11	0,718	0,216	0,729		0,857	6,0	0,10	10,0	553,4	10,0	427,1	
21	Zink	Zn	Tab. 3.2.6	0,248	0,456	0,381	0,27	0,575	6,0	0,10	10,0	1244,5	5000,0	42,1	
22															

Die kd-Werte in den rot markierten Zellen sind in den Tabellenblättern Fall A bzw Fall B einzusetzen

Eingabewerte für Fallbeispiel 1

lin. kd-Wert

¹Vorgabewert: 10⁶PW

Abb. 24: Ermittlung des k_d -Wertes in Fallbeispiel 1 mit Hilfe des Tabellenblatts **kd-Anorganik** auf der Grundlage von Pedotransferfunktionen

Eingaben sind ausschließlich in den gelb markierten Feldern möglich. Die restlichen Felder sind gesperrt. Das Tabellenblatt berechnet nach Eingabe der Bodenkenngrößen **pH-Wert**, **C_{org}-Gehalt** und **Tongehalt** (gelb markierte Felder in den Spalten I bis L) den Freundlich-Koeffizienten $K_{d\text{-Freundlich}}$ (Spalte N). Die Bodenkenngrößen müssen aus der Beschreibung der Transportstrecke (Kap. 5.2) abgeleitet werden. Für das Fallbeispiel 1 wurde ein pH-Wert von 4, ein C_{org}-Gehalt von 0,1 % und ein Tongehalt von 1 % eingesetzt (Abb. 24). Grundlage der Berechnung des Freundlich-Koeffizienten sind die in der Tabelle hinterlegten Regressionskoeffizienten, die aus substratübergreifenden Sorptionsisothermen im Rahmen des BMBF-Förderschwerpunkts „Sickerwasserprognose“ abgeleitet wurden [6]/Anhang 2.

Für eine weitere Verwendung in den Tabellenblättern **Fall A** und **Fall B** ist zunächst die Linearisierung des Freundlich-Koeffizienten nach Kap. A 2.4, Gleichung (A15) der AH-DU erforderlich. Hierfür sind die Spalten O - Q vorgesehen. Für die Linearisierung muss ein Konzentrationsbereich ausgewählt werden. Als Obergrenze (Spalte O, gelbe Markierung) ist i. d. R. die Quellkonzentration heranzuziehen. Da die Sorptionsisothermen nur für einen begrenzten Konzentrationsbereich Gültigkeit haben, ist im Tabellen-

blatt als Vorgabewert der jeweils 10fache Prüfwert eingetragen. Im Beispiel 1 liegt die Quellkonzentration etwa um den Faktor 100 über dem Prüfwert. **Je höher die Obergrenze für die Linearisierung gewählt wird, desto geringer ist der resultierende lineare k_d -Wert.** Bei Annahme der Quellkonzentration liegt man daher i. d. R. auf der sicheren Seite. Als Untergrenze der Linearisierung wird der halbe Prüfwert (Spalte P) verwendet. Der linearisierte k_d -Wert (Q13) für Beispiel 1 beträgt 3,0 l/kg und wird als Eingabewert für Zelle D32 im Tabellenblatt **Fall A** verwendet. Eine Überprüfung mit einem numerischen Modell bestätigte, dass die so praktizierte Linearisierung der Freundlich-Isotherme ein Ergebnis auf der sicheren Seite ergibt (s. Kap. A3.6.3).

Für diejenigen Elemente, für die keine Pedotransferfunktionen zur Berechnung der Freundlich-Parameter zur Verfügung stehen, kann ein linearer k_d -Wert nach dem Ansatz von van den Berg & Roels [13]/Anhang 2 abgeschätzt werden (Abb. 25).

25 Abschätzung linearer Verteilungskoeffizienten nach van den Berg & Roels (1991)		Eingabewerte für Fallbeispiel 1								
26		lin. k_d -Wert								
27		Bodenkenngrößen								
28 Element	29 Sym	Regressionskoeffizienten					pH	C_{org}	Ton	lin. k_d -Wert (l/kg)
		C_0	C_1	C_2	C_3	C_4		(%)	(%)	
30 Arsen	As	349	942	9,42	1,79	-0,16	6,0	0,10	10,0	634,893
31 Blei	Pb	0,0008	0,002	0	2,85	-0,17	6,0	0,10	10,0	1432,489
32 Cadmium	Cd	2408	4309	129,26	0,57	0	4,0	0,10	1,0	7,006
33 Chrom	Cr	15,18	61,14	0	2,51	-0,21	6,0	0,10	10,0	10100,631
34 Kupfer	Cu	2168	8673	86,73	1,36	-0,12	6,0	0,10	10,0	314,996
35 Nickel	Ni	42465	424650	0	0,4	0	6,0	0,00	10,0	320,002
36 Quecksilber	Hg	0,00089	0,0024	0,0055	2,82	-0,163	6,0	0,10	10,0	1919,899
37 Zink	Zn	130	598	2,99	0,89	-0,02	6,0	0,10	10,0	118,685
38 Zinn	Sn	0	14367	431	1,03	-0,08	6,0	0,10	10,0	43,012
39										
40										

Abb. 25: Ermittlung des k_d -Wertes in Fallbeispiel 1 mit Hilfe des Tabellenblatts **kd-Anorganik** nach dem Ansatz von van den Berg & Roels

Für die Bodenkennwerte des Fallbeispiels 1 würde sich nach dem Ansatz von van den Berg & Roels für Cadmium ein linearer k_d -Wert von 7 l/kg ergeben. Im Vergleich dazu liegt der über die Pedotransferfunktion ermittelte Wert von 3,0 l/kg deutlich niedriger. Um ein Ergebnis auf der sicheren Seite zu bekommen, ist der geringere Wert vorzuziehen.

b) Organische Stoffe (Fallbeispiel 2)

Für organische Stoffe kann der k_d -Wert i. d. R. mit ausreichender Genauigkeit über das Tabellenblatt **kd-Organik** (Abb. 26) abgeschätzt werden. Eingaben sind ausschließlich in den gelb markierten Feldern möglich. Das Tabellenblatt berechnet nach Eingabe der Bodenkenngröße **C_{org} -Gehalt** (gelb markiertes Feld, Spalte B) den k_d -Wert auf der Grundlage einer linearen Sorptionsisotherme (Kap. A2.4, Gleichung A16). Der stoffspezifische K_{oc} -Wert wird aus dem Tabellenblatt **Stoffdaten** übernommen und stammt aus der Datenbank EPI-Suite der US-EPA (PCKOCWIN V. 1.66) [48]. Der berechnete k_d -Wert in Spalte C (rot markiert) wird als Eingabewert für Zelle D32 im Eingabebblatt **Fall A** verwendet.

	A	B	C	D
1	kd-Werte Organik			
2				
3	gelbe Felder: Eingabefelder			
4	der k_{oc} -Wert wird aus dem Tabellenblatt "Stoffdaten" übernommen			
5				
6	lineares Sorptionsmodell: $c_s = k_d \cdot c_w$			
7	$k_d = C_{org} \cdot K_{oc}$			
8				
9				
10	Stoff	C_{org}	k_d	
11	Gruppe/Name	(%)	(l/kg)	
12				
82	PAK			
83	Inden	0,1	0,995	
84	Naphthalin	0,1	1,837	lin. k_d -Wert
85	Methylnaphthalin	0,1	3,041	
86	Dimethylnaphthalin	0,1	5,023	
87	Acenaphthylen	0,1	6,124	
88	Acenaphthen	0,1	6,124	
89	Fluoren	0,1	11,298	
90	Phenanthren	0,1	20,845	
91	Anthracen	0,1	20,417	
92	Fluoranthen	0,1	70,795	
93	Pyren	0,1	69,343	
94	Benzo(a)anthracen	0,1	231,206	
95	Chrysen	0,1	236,048	
96	Benzo(a)pyren	0,1	787,046	
97	Benzo(b)fluoranthen	0,1	803,526	
98	Benzo(k)fluoranthen	0,1	787,046	
99	Benzo(ghi)perylen	0,1	2679,168	
100	Dibenzo(a,h)anthracen	0,1	2624,219	
101	Indeno(123-cd)pyren	0,1	2679,168	
102				

Abb. 26: Ermittlung des k_d -Wertes in Fallbeispiel 2 mit Hilfe des Tabellenblatts *kd-Organik*

Ermittlung der Halbwertszeit (Zelle D34)

Liegen keine standortspezifischen Ergebnisse aus Laboruntersuchungen vor, kann das Tabellenblatt *Bio-Abbau* (Abb. 27) als Orientierung zur Abschätzung der Halbwertszeit herangezogen werden. Aufgrund der erheblichen Schwankungsbreite der international veröffentlichten Daten zu Halbwertszeiten sind neben den BOWIN-Daten (aus der Datenbank EPI-Suite der US-EPA [48]) noch Daten aus dem Kompartiment-Modell „CalTox“ [50] (ein 7-Kompartiment-Modell auf Excel-Basis zur Simulation der Schadstoffausbreitung in unterschiedlichen Kompartimenten) angegeben, um eine möglichst große Spannweite abzudecken. Die BOWIN-Halbwertszeiten wurden über eine Regression [52] aus den BOWIN3- und BOWIN4-Werten errechnet. Die BOWIN3-Halbwertszeit (Ultimate) berücksichtigt die Zeit für den kompletten Abbau bis zum CO₂ während die BOWIN4-Halbwertszeit (Primary) nur die Zeit für den ersten Abbauschritt angibt. „CalTox“ enthält Halbwertszeiten, die für unterschiedliche Kompartimente repräsentativ sind. Allerdings liegen nicht für alle relevanten organischen Stoffe Werte vor. **Wegen des erheblichen Einflusses auf das Ergebnis ist eine kritische Anwendung der Literaturwerte wichtig!** Um in Zweifelsfällen auf der sicheren Seite zu liegen, sollte eher ein höherer Wert angenommen oder ein Abbau gar nicht berücksich-

tigt werden (programmtechnisch erforderliche Angabe in diesem Fall: Halbwertszeit 1.000.000 Jahre). Für Naphthalin ergibt sich eine Spannweite der Datenbank-Werte zwischen 0,032 und 1,244 Jahren. Als Eingabewert wird der konservative Wert von 1,244 Jahren verwendet.

	A	D	E	G	I	K	M	O	P
1	Halbwertszeiten für organische Schadstoffe								
2	Abbau 1. Ordnung								
3	Ultimate Wert: kompletter Abbau bis CO2								
4	Datenquellen								
5	Epi-Suite/US-EPA								
6	CalTox								
7	wichtiger Hinweis: Die Halbwertszeiten sind als Orientierung gedacht, sofern keine standortspezifischen Werte aus Labor-/Felduntersuchungen vorliegen								
8									
9	Stoff	Biowin 3	Biowin 4	CalTox	CalTox	CalTox	CalTox	CalTox	
10	Gruppe/Name	Ultimate	Primary	Oberboden	Wurzelzone	unges. Zone	Grundwasser	Sediment	
11		HWZ	HWZ	HWZ	HWZ	HWZ	HWZ	HWZ	
12		(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	(a)	
80	Dichlorbrommethan	0,151	0,025	-	-	-	-	-	
81									
82	PAK								
83	Inden	0,077	0,018	-	-	-	-	-	
84	Naphthalin	0,217	0,032	1,244	1,244	0,356	0,356	0,353	
85	1-Methylnaphthalin	0,086	0,020	-	-	-	-	-	
86	1,4-Dimethylnaphthalin	0,106	0,023	-	-	-	-	-	
87	Acenaphthylen	0,078	0,018	-	-	-	-	-	
88	Acenaphthen	0,105	0,023	0,156	0,156	0,591	0,591	0,591	
89	Fluoren	0,095	0,021	0,122	0,122	0,414	0,414	0,414	
90	Phenanthren	0,269	0,037	-	-	-	-	-	
91	Anthracen	0,269	0,037	1,556	1,556	2,658	1,397	2,589	
92	Fluoranthren	0,450	0,079	2,334	2,334	2,795	1,589	2,603	
93	Pyren	0,450	0,079	2,767	2,767	10,986	5,781	10,712	
94	Benzo(a)anthracen	0,503	0,085	2,405	2,405	4,000	2,142	3,863	
95	Chrysen	0,503	0,085	1,159	1,159	6,521	3,753	6,000	
96	Benzo(a)pyren	0,557	0,091	0,627	0,627	2,411	2,411	3,205	

Halbwertszeit für Naphthalin, Beispiel 2

Abb. 27: Ermittlung der Halbwertszeit in Fallbeispiel 2 mit Hilfe des Tabellenblatts **Bio-Abbau**

A 3.4.1.2 Berechnung der Ergebnis-Kenngrößen

Das Makro zur Berechnung wird durch Anklicken der Schaltfläche „Start Berechnung“ in der Zelle D70 (Abb. 28) gestartet. Damit werden die Konzentrations- und Frachtentwicklung am Ort der Beurteilung in Jahresschritten berechnet und die Werte im Tabellenblatt **Wertetabelle** (Abb. 8) abgelegt. Mit den Werten wird automatisiert eine graphische Darstellung des Konzentrationsverlaufs erzeugt und im Tabellenblatt **Graphik** angezeigt (für Fallbeispiel 1 s. Abb. 7). Die Berechnung kehrt am Ende zur Anzeige der in Kap. 8.2 der AH-DU beschriebenen Ergebnis-Kenngrößen in das Tabellenblatt **Fall A** zurück. Bei langen Transportstrecken und Emissionszeiträumen kann die Berechnung einige Minuten in Anspruch nehmen. Die Berechnung läuft, solange das Sanduhr-Symbol auf dem Bildschirm sichtbar ist. Zur Betrachtung der Graphik und der Wertetabelle müssen die entsprechenden Tabellenblätter angeklickt werden.

37	Berechnung nach analytischer Lösung "van Genuchten"				
70	Konzentrations- und Frachtberechnung am OdB			Start Berechnung	
72	max. Konzentration	c_{\max}	$\mu\text{g/l}$	549,9	Schaltfläche anklicken
73	Zeitpunkt der max. Konz.	$t_{c\max}$	a	236,0	
74	Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pwü}$	a	21,0	
75	Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	376,0	
76	Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	355,0	
77	Schadstoffemission Quelle	$E_{s1\text{ges}}$	kg	52,598	
78	Schadstoffemission GW	$E_{s2\text{ges}}$	kg	52,548	
79	max. Fracht GW	$E_{s2\max}$	g/a	233,707	
80	mittl. Fracht GW	$E_{s2\text{mittel}}$	g/a	148,024	
81	max. Emissionsstärke GW	$J_{s2\max}$	$\text{mg}/(\text{m}^2\cdot\text{a})$	137,5	
82	mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2\text{mittel}}$	$\text{mg}/(\text{m}^2\cdot\text{a})$	87,1	
83	mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	52,598	
84	Abbruchkriterium				
85					
86					
87	Abbruchkriterium 1: keine Unterschreitung des PW im Berechnungszeitraum (max. 300000 a)				

Abb. 28: Start der Berechnung und berechnete Kenngrößen für Fallbeispiel 1

Die Berechnung des gesamten Schadstoffeintrags in das Grundwasser erfolgt durch Integration der jährlichen Frachten für die Zeitdauer der Prüfwertüberschreitung. Die berechnete mittlere jährliche Fracht ist der Quotient aus dem gesamten Schadstoffeintrag und der Zeitdauer der Prüfwertüberschreitung.

Falls im Prognosezeitraum keine Überschreitung des Prüfwertes erfolgt, wird dies in den entsprechenden Feldern durch eine Textinformation (Abb. 29) angezeigt. Eine Berechnung von Frachten wird in diesem Falle nicht durchgeführt.

37	Berechnung nach analytischer Lösung "van Genuchten"				
70	Konzentrations- und Frachtberechnung am OdB			Start Berechnung	
72	max. Konzentration	c_{\max}	$\mu\text{g/l}$	2,3	
73	Zeitpunkt der max. Konz.	$t_{c\max}$	a	54,0	
74	Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pwü}$	a	-	keine PW-Ü.
75	Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	-	keine PW-Ü.
76	Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	0,0	
77	Schadstoffemission Quelle	$E_{s1\text{ges}}$	kg	0,055	
78	Schadstoffemission GW	$E_{s2\text{ges}}$	kg	-	keine Berech.
79	max. Fracht GW	$E_{s2\max}$	g/a	-	keine Berech.
80	mittl. Fracht GW	$E_{s2\text{mittel}}$	g/a	-	keine Berech.
81	max. Emissionsstärke GW	$J_{s2\max}$	$\text{mg}/(\text{m}^2\cdot\text{a})$	-	keine Berech.
82	mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2\text{mittel}}$	$\text{mg}/(\text{m}^2\cdot\text{a})$	-	keine Berech.
83	mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	0,055	
84	Abbruchkriterium				

Abb. 29: Ergebnis-Darstellung für den Fall, dass keine Überschreitung des Prüfwertes auftritt

In manchen Fällen kann sich rechnerisch eine extrem lange Dauer (> 10000 Jahre) des Berechnungszeitraumes ergeben. Im Fallbeispiel 1 (Abb. 30) tritt dies ein, wenn man den mobilisierbaren Anteil auf 100 % setzt und für die Quellkonzentration 10 µg/l eingibt (rechnerische Emissionsdauer: 123760 Jahre). In diesen Fällen bricht das Programm vor dem Erreichen der Prüfwertunterschreitung ab. Als Zeitpunkt der Prüfwertunterschreitung wird in diesem Falle der Abbruchzeitpunkt angegeben. Als Zeitdauer der Prüfwertüberschreitung wird der Zeitraum zwischen Prüfwertüberschreitung und Abbruch angegeben. Der gesamte Schadstoffeintrag und die mittlere Fracht werden für diesen Zeitraum angegeben. Als Hinweis auf den Grund des Abbruchs wird das Abbruchkriterium 1 (keine Unterschreitung des Prüfwertes im Berechnungszeitraum) ausgegeben.

37	Berechnung nach analytischer Lösung "van Genuchten"				
70	Konzentrations- und Frachtberechnung am OdB			Start Berechnung	
72	max. Konzentration	c_{\max}	µg/l	10,0	
73	Zeitpunkt der max. Konz.	$t_{c\max}$	a	431,0	
74	Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pw\ddot{u}}$	a	56,0	
75	Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	16846,0	Abbruch
76	Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	16790,0	PW-Ü bis Abbruch
77	Schadstoffemission Quelle	$E_{s1\text{ges}}$	kg	71,596	bis Abbruch
78	Schadstoffemission GW	$E_{s2\text{ges}}$	kg	71,316	bis Abbruch
79	max. Fracht GW	$E_{s2\max}$	g/a	4,250	
80	mittl. Fracht GW	$E_{s2\text{mittel}}$	g/a	4,248	PW-Ü bis Abbruch
81	max. Emissionsstärke GW	$J_{s2\max}$	mg/(m ² *a)	2,5	
82	mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2\text{mittel}}$	mg/(m ² *a)	2,5	PW-Ü bis Abbruch
83	mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	525,980	
84	Abbruchkriterium				1
85					
86					
87	Abbruchkriterium 1: keine Unterschreitung des PW im Berechnungszeitraum				

Abb. 30: Ergebnis-Darstellung für den Fall, dass ein vorzeitiger Abbruch der Berechnung aufgrund einer extrem langen Emissionsdauer auftritt

Die berechneten Kenngrößen für die Fallbeispiele 1 und 2 sind in Tabelle 2 zusammenfassend dargestellt.

Tab. 2: Ergebnis-Kenngrößen für die Fallbeispiele 1 und 2

Kenngröße	Symbol	Einheit	Fallbeispiel 1 Ergebnis	Fallbeispiel 2 Ergebnis
max. Konzentration	c_{\max}	$\mu\text{g/l}$	549,9	310,6
Zeitpunkt der max. Konz.	$t_{c\max}$	a	236,0	209
Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pwü}$	a	21,0	11
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	376	277
Zeitdauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	355	266
Schadstoffemission Quelle	$E_{s1\text{ges}}$	kg	52,6	34,8
Schadstoffemission GW	$E_{s2\text{ges}}$	kg	52,5	7,3
max. Fracht GW	$E_{s2\max}$	g/a	233,7	35,40
mittl. Fracht GW	$E_{s2\text{mittel}}$	g/a	148,0	27,5
max. Emissionsstärke GW	$J_{s2\max}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	137,5	88,5
mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2\text{mittel}}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	87,1	68,7
mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	52,6	34,8

In Kapitel A 3.5 wird dargestellt, wie sich Variationen von Eingabeparametern auf die berechneten Ergebnis-Kenngrößen auswirken.

ALTEX-1D ist standardmäßig für die Berechnung von Ergebnissen in Jahresschritten eingestellt. Hilfsweise kann auch eine Berechnung von Fällen mit Durchbruchzeiten unter einem Jahr in Tagesschritten (bspw. die Nachrechnung von Lysimeter- oder Säulenversuchen) erfolgen. Dafür muss die Sickerwasserrate in mm/d angegeben werden und bei den Ergebniskenngrößen die Einheit „Jahr“ durch „Tag“ ersetzt werden.

A 3.4.2 Fallkonstellation B

Für die Beschreibung der Fallkonstellation B wurde folgendes Beispiel ausgewählt:

Fallbeispiel 3:

Es handelt sich um das ehemalige Betriebsgelände eines Gummi- und Reifenwerkes. Auf dem Gelände wurden flächenhaft in rußhaltigen Auffüllungen PAK-Belastungen in der Größenordnung von 100 – 200 mg/kg festgestellt (Summe ohne Naphthalin, überwiegend Acenaphthen, Fluoren und Phenanthren). Untersuchungen des Grundwassers im Bereich der Auffüllungen zeigten Spuren von PAK. Die Transportbetrachtung wird für den Einzelstoff Acenaphthen durchgeführt.

Schritt 1: Fallunterscheidung (Fallkonstellation A oder B)

Im Fallbeispiel 3 liegen die PAK hauptsächlich sorptiv an die Rußpartikel gebunden vor. Es wird daher ein desorptionslimitiertes Freisetzungsverhalten angenommen. Aus Säulenversuchen wurde eine exponentiell abklingende Quellkonzentration abgeleitet

(s. Kap. 6.3.2). Für die Berechnung wird daher das Tabellenblatt **Fall B** (Abb. 31) ausgewählt.

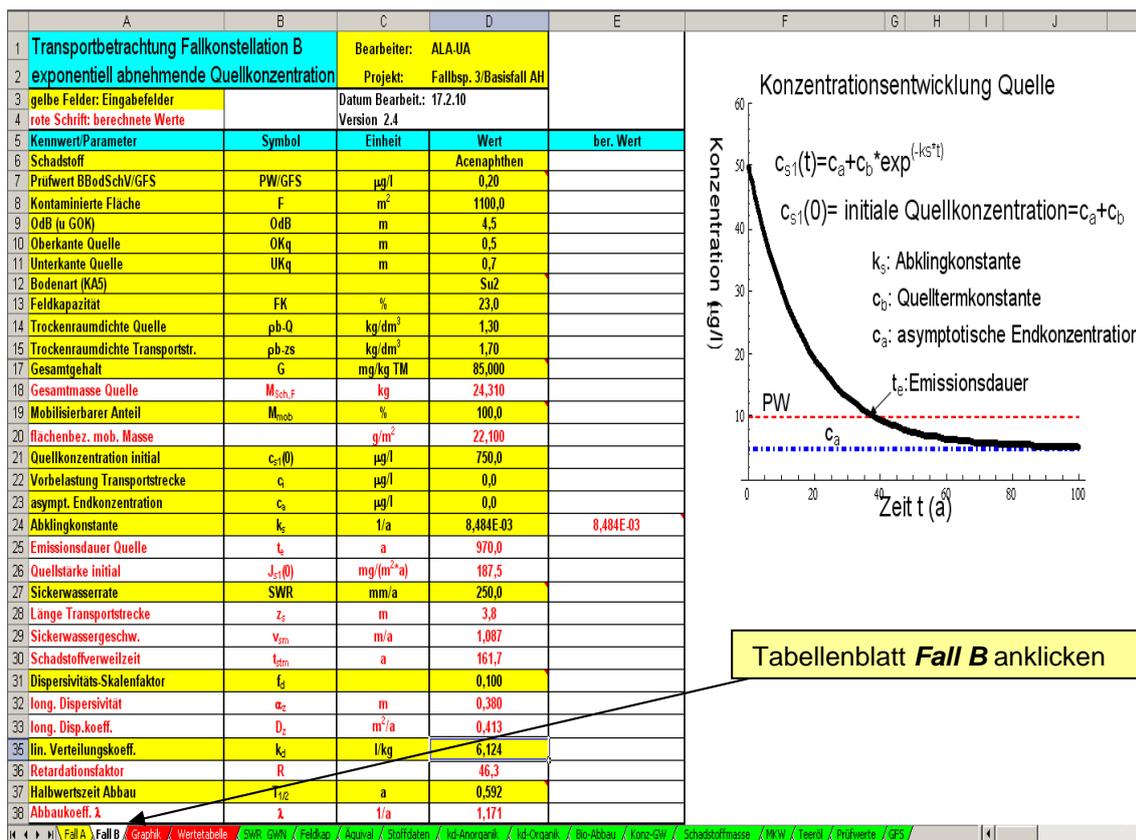


Abb. 31: Tabellenblatt für Fallbeispiel 3

A 3.4.2.1 Dateneingabe Fall B

Im Tabellenblatt Fall B sind für die Eingabe der Parameter ausschließlich die gelb markierten Felder in der Spalte D vorgesehen (Abb. 31). Die restlichen Felder des Blattes sind gesperrt. Felder mit roter Schrift enthalten berechnete Zwischenergebnisse, die im weiteren Berechnungsverlauf benötigt werden. **Bei der Eingabe ist darauf zu achten, dass die Zahlenwerte jeweils den in Spalte C vorgegebenen Einheiten entsprechen.** In den Zellen D1 und D2 können der Name des Bearbeiters und ein Projektname eingegeben werden. In Zelle D3 wird das aktuelle Bearbeitungsdatum, in Zelle C4 die Versionsnummer angezeigt.

Die Dateneingabe ist für das Fallbeispiel 3 in Tabelle 3 detailliert beschrieben.

Tab. 3: Dateneingabe für Beispiel 3

Zelle	Parameterbeschreibung und Textbezug zur Arbeitshilfe	Beispiel 3 Dateneingabe
D6	Zu betrachtender Schadstoff . Es ist zu beachten, dass eine Berechnung immer nur für einen Einzelstoff erfolgen kann.	Acenaphthen

Zelle	Parameterbeschreibung und Textbezug zur Arbeitshilfe	Beispiel 3 Dateneingabe
D7	Sickerwasserprüfwert nach BBodSchV (falls kein Prüfwert oder GFS vorliegt, ist ein numerischer Ersatzwert, z.B. 0,01 einzugeben).	0,2
D8	Als Kontaminierte Fläche ist die Größe der Emissionsfläche entsprechend Kap. 6.2, Gl. (3) der AH-DU einzusetzen.	1100
D9	Als Ort der Beurteilung (OdB) ist nach Kap. 5.2 für den Standort ein mittlerer Grundwasserhöchststand einzusetzen.	4,5
D10	Oberkante der Quelle (Kap. 6.2).	0,5
D11	Die Unterkante der Quelle bestimmt zusammen mit der Oberkante die Länge der Transportstrecke in D28 (s. a. Kap. 6.2).	0,7
D12	Bodenart (KA5) . Hier ist die Bodenart mit den in Tab. 70 der KA5 aufgeführten Kurzzeichen einzugeben. Alternativ kann die Schichtbezeichnung nach EN ISO 14688/89 (DIN 4022) eingegeben werden. Bei mehrschichtigen Profilen können auch mehrere Kurzzeichen eingegeben werden. Das Feld ist nur informativ, es wird nicht als Bezug in den weiteren Berechnungen benötigt.	Su2
D13	Feldkapazität (Kap. 5.2). Das Modell geht von einem einschichtigen homogenen Aufbau der Transportstrecke aus. Es ist daher ein mittlerer Wert für die Bodenkennwerte der Transportstrecke einzugeben. Der Wert kann aus dem Tabellenblatt <i>Feldkap</i> entnommen werden (s. Abb. 22). Bei mehrschichtigen Profilen ist hier der entsprechende äquivalente Wert aus dem Tabellenblatt <i>Äquival</i> einzusetzen (s. Kap. A 3.4.3).	23
D14	Die Trockenraumdichte der Quelle wird für die Berechnung der Gesamtschadstoffmasse der Quelle (D18) benötigt und ist aus Untersuchungsergebnissen abzuleiten.	1,3
D15	Die Trockenraumdichte der Transportstrecke wird für die Berechnung des Retardationsfaktors (D36) benötigt und mit Laboruntersuchungen ermittelt oder aus der Bodenart (KA5) geschätzt. Bei mehrschichtigen Profilen ist hier der entsprechende äquivalente Wert aus dem Tabellenblatt <i>Äquival</i> einzusetzen (s. Kap. A 3.4.3).	1,7
D17	Schadstoffgesamtgehalt (Kap. 6.2). Im Beispiel 3 beträgt der Gesamtgehalt an PAK (ohne Naphthalin) 150 mg/kg, der Acenaphthengehalt 85 mg/kg.	85

Zelle	Parameterbeschreibung und Textbezug zur Arbeitshilfe	Beispiel 3 Dateneingabe
D19	Der mobilisierbare Anteil stellt den durch Niederschlagswasser freisetzbaren Anteil des Gesamtgehaltes dar und ist vorzugsweise aus Elutionsversuchen (Kap. 6.3.2 und A1.2.3) abzuschätzen. Der Wert für den mobilisierbaren Anteil bestimmt maßgeblich die Emissionsdauer in D25 und den rechnerischen Abklingkoeffizienten und hat daher großen Einfluss auf das Ergebnis der Berechnung. Im Beispiel 3 wurde angenommen, dass der sorbierte Anteil zu 100 % mobilisierbar ist (vollständig reversibles Sorptionsgleichgewicht Boden/Sickerwasser).	100
D21	Bei der Quellkonzentration initial ist die anfängliche Schadstoffkonzentration im Sickerwasser der Quelle entsprechend Kap. 6.3.1 anzusetzen. Im Fallbeispiel 3 wurde die Anfangskonzentration aus Säulenversuchen bestimmt. Der Konzentrationsverlauf ergab Hinweise auf mit der Elutionsdauer abklingende Konzentrationen. Für die Berechnung wird eine exponentiell abklingende Konzentration entsprechend der Prinzipskizze im Tabellenblatt <i>Fall B</i> zugrunde gelegt.	750
D22	Die Vorbelastung der Transportstrecke berücksichtigt eine zu Beginn in der Transportstrecke vorhandene Vorbelastung bspw. aufgrund geogen erhöhter Hintergrundwerte oder einer bereits vorhandenen Kontamination. Einzugeben ist der Wert der Sickerwasserkonzentration, der im Sorptionsgleichgewicht mit den entsprechenden Feststoffgehalten steht.	0
D23	Besteht Grund zu der Annahme, dass die Quellkonzentration langfristig nicht auf Null zurückgeht, sondern auf einem konstanten Wert verharrt („Tailing“-Konzentration), kann dies durch Eingabe einer asymptotischen Endkonzentration berücksichtigt werden (s. Prinzipskizze Abb. 31).	0
D24	Der Abklingkoeffizient wird in Zelle E24 berechnet und kann entweder in der Zelle D 24 übernommen werden oder es kann alternativ ein vom Anwender frei gewählter Abklingkoeffizient (z. B. aus Säulenversuchen bestimmt) eingegeben werden. Bei leichtflüchtigen Stoffen mit möglicher Ausgasung zur Oberfläche kann der Abklingkoeffizient erhöht sein. Bei der Nachrechnung der Fallbeispiele ist darauf zu achten, dass der in Zelle E24 berechnete Wert korrekt in die Zelle D24 eingegeben wird.	8,484E-3

Zelle	Parameterbeschreibung und Textbezug zur Arbeitshilfe	Beispiel 3 Dateneingabe
D27	Die nach Kap. 7.2.1 und A 2.1 ermittelte Sickerwasserrate (SWR) wird als konstant über die gesamte Zeitdauer der Prognose angenommen. Bei Fällen, in denen es z.B. durch Nutzungsänderungen zu einer Veränderung der SWR kommen kann, wird empfohlen, Berechnungen mit unterschiedlichen SWR durchzuführen. Hilfsweise kann für die Abschätzung der SWR auch das Tabellenblatt SWR_GWN herangezogen werden.	250
D31	Der Dispersivitäts-Skalenfaktor dient zur Berechnung der longitudinalen Dispersivität (D32) und des longitudinalen Dispersivitätskoeffizienten (D33) entsprechend Kap. 7.3.3 und A 2.3. Insbesondere bei langen Transportstrecken (>10 m) ist ggf. eine Reduzierung des Faktors zu empfehlen (Beispiele s. Kap. A 3.5). Bei leichtflüchtigen Stoffen ist hier der entsprechende äquivalente Wert aus dem Tabellenblatt <i>Äquival</i> einzusetzen. (Kap. A2.3 und A 3.4.3).	0,1
D35	Der linearisierte Verteilungskoeffizient k_d dient zur Berechnung des Retardationsfaktors in D36 (Kap. 7.3.3 und A2.4) und hat großen Einfluss auf das Ergebnis der Berechnung. Liegen keine Ergebnisse aus Laboruntersuchungen vor, können die Tabellenblätter <i>kd-Anorganik</i> und <i>kd-Organik</i> als Orientierung zur Abschätzung des k_d -Wertes herangezogen werden. (s. Kap. A 3.4.1, Fallbeispiel 2 und Abb. 32). Bei mehrschichtigen Profilen oder der Berücksichtigung der Flüchtigkeit ist hier der entsprechende äquivalente Wert aus dem Tabellenblatt <i>Äquival</i> einzusetzen (s. Kap. A 3.4.3).	6,124
D37	Die Halbwertszeit Abbau (Kap. 7.3.3 und A2.5) wird zur Berechnung des Abbaukoeffizienten in D38 benötigt. Hierbei wird eine Abbaukinetik 1. Ordnung angenommen. Für nicht abbaubare Stoffe ist aus programmtechnischen Gründen ein Wert von 1.000.000 einzusetzen. Liegen keine Ergebnisse aus Laboruntersuchungen vor, kann das Tabellenblatt <i>Bio-Abbau</i> als Orientierung zur Abschätzung der Halbwertszeit herangezogen werden (s. Kap. A 3.4.1, Fallbeispiel 2). Für Acenaphthen ergibt sich eine Spannweite der Datenbankwerte zwischen 0,017 und 0,592 Jahren. Als Eingabewert wird der konservative Wert von 0,592 Jahren verwendet.	0,592

	A	B	C	D
1	kd-Werte Organik			
2				
3	gelbe Felder: Eingabefelder			
4	der k_{oc} -Wert wird aus dem Tabellenblatt "Stoffdaten" übernommen			
5				
6	lineares Sorptionsmodell: $c_s = k_d \cdot c_w$			
7	$k_d = C_{org} \cdot K_{oc}$			
8				
9				
10	Stoff	C_{org}	k_d	
11	Gruppe/Name	(%)	(l/kg)	
12				
79	Chlordibrommethan	0,1	0,035	
80	Dichlorbrommethan	0,1	0,035	
81				
82	PAK			
83	Inden	0,1	0,995	
84	Naphthalin	0,1	1,837	
85	Methylnaphthalin	0,1	3,041	
86	Dimethylnaphthalin	0,1	5,023	
87	Acenaphthylen	0,1	6,124	
88	Acenaphthen	0,1	6,124	
89	Fluoren	0,1	11,298	
90	Phenanthren	0,1	20,845	
91	Anthracen	0,1	20,417	
92	Fluoranthren	0,1	70,795	
93	Pyren	0,1	69,343	
94	Benzo(a)anthracen	0,1	231,206	
95	Chrysen	0,1	236,048	
96	Benzo(a)pyren	0,1	787,046	
97	Benzo(b)fluoranthren	0,1	803,526	
98	Benzo(k)fluoranthren	0,1	787,046	
99	Benzo(ghi)perylen	0,1	2679,168	
100	Dibenzo(a,h)anthracen	0,1	2624,219	
101	Indeno(123-cd)pyren	0,1	2679,168	
102				

Eingabe von C_{org} für Beispiel 3

Abb. 32: Ermittlung des k_d -Wertes für Fallbeispiel 3 mit Hilfe des Tabellenblatts *kd-Organik*

A 3.4.2.2 Berechnung der Ergebnis-Kenngrößen

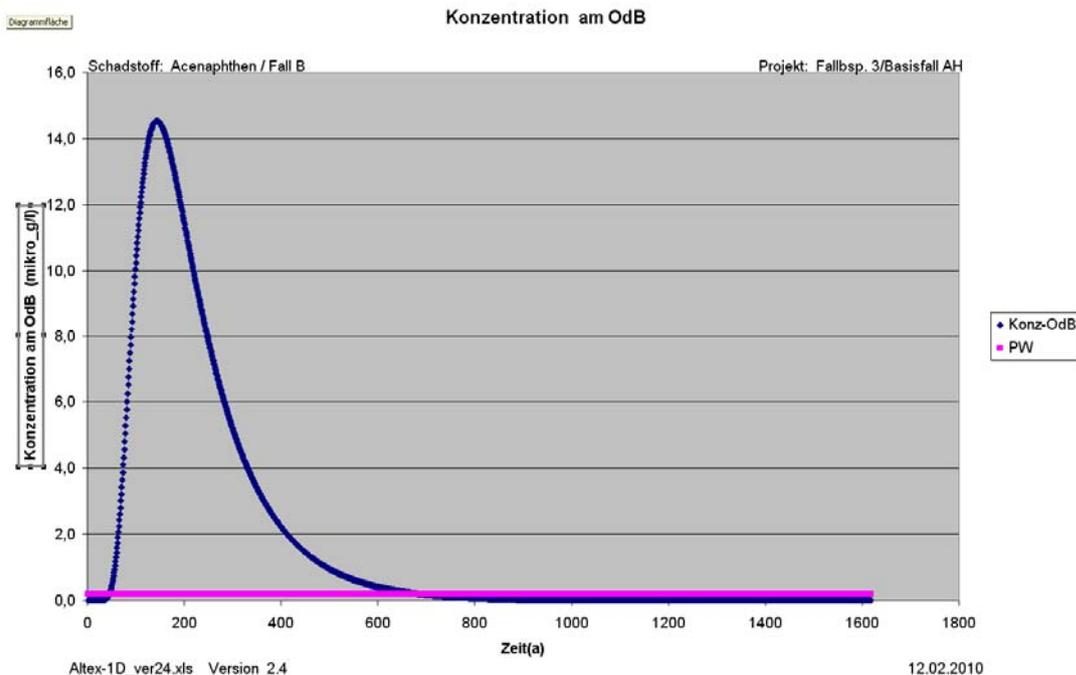
Das Makro zur Berechnung wird durch Anklicken der Schaltfläche „**Start Berechnung**“ in der Zelle D95 gestartet (Abb. 33). Mit dem Makro werden die Konzentrations- und Frachtentwicklung am Ort der Beurteilung in Jahresschritten berechnet und die Werte im Tabellenblatt *Wertetabelle* (Abb. 8) abgelegt. Neben der zeitlichen Entwicklung der Konzentration am OdB (Spalte B) wird in Spalte D der Wertetabelle auch noch die Entwicklung der Quellkonzentration in Jahresschritten angezeigt. Mit den Konzentrationswerten am OdB wird automatisiert eine graphische Darstellung des Konzentrationsverlaufs erzeugt und im Tabellenblatt *Graphik* angezeigt (Abb. 34).

41	Berechnung nach analytischer Lösung "van Genuchten"			
95	Konzentrations- und Frachtberechnung am OdB			Start Berechnung
97	max. Konzentration	c_{max}	$\mu\text{g/l}$	14,5
98	Zeitpunkt der max. Konz.	t_{cmax}	a	144,0
99	Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pwü}$	a	45,0
100	Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	683,0
101	Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	638,0
102	Schadstoffemission Quelle	E_{s1ges}	kg	24,019
103	Schadstoffemission GW	E_{s2ges}	kg	0,812
104	max. Fracht GW	E_{s2max}	g/a	3,996
105	mittl. Fracht GW	$E_{s2mittel}$	g/a	1,272
106	max. Emissionsstärke GW	J_{s2max}	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	3,6
107	mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2mittel}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	1,2
108	mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	24,310
109	Abbruchkriterium			

Schaltfläche anklicken

Abb. 33: Start der Berechnung und berechnete Kenngrößen für Fallbeispiel 3

Die Berechnung kehrt am Ende zur Anzeige der in Kap. 8.2 beschriebenen Ergebnis-Kenngrößen in das Tabellenblatt **Fall B** zurück. Bei langen Transportstrecken und Emissionszeiträumen kann die Berechnung einige Minuten in Anspruch nehmen. Die Berechnung läuft, solange das Sanduhr-Symbol auf dem Bildschirm sichtbar ist. Zur Betrachtung der Graphik und der Wertetabelle müssen die entsprechenden Tabellenblätter angeklickt werden.

Abb. 34: Tabellenblatt **Graphik** mit Konzentrationsentwicklung am OdB für Fallbeispiel 3

Bei Fällen in denen die Quellkonzentration nicht auf 0 zurückgeht sondern sehr lange Zeit auf einem erhöhten Wert verharrt (asymptotische Endkonzentration >0) kann es vorkommen, dass die Schadstoffemission die mobilisierbare Masse überschreitet. In diesem Fall wird die Berechnung abgebrochen und das Abbruchkriterium 2 ausgegeben (Abb. 35)

41	Berechnung nach analytischer Lösung "van Genuchten"				
95	Konzentrations- und Frachtberechnung am OdB			Start Berechnung	
97	max. Konzentration	c_{\max}	$\mu\text{g/l}$	71,7	
98	Zeitpunkt der max. Konz.	$t_{c\max}$	a	386,0	
99	Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pw\ddot{u}}$	a	71,0	
100	Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	2011,0	Abbruch
101	Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	1940,0	PW-Ü bis Abbruch
102	Schadstoffemission Quelle	$E_{s1\text{ges}}$	kg	13,585	bis Abbruch
103	Schadstoffemission GW	$E_{s2\text{ges}}$	kg	13,562	PW-Ü bis Abbruch
104	max. Fracht GW	$E_{s2\max}$	g/a	19,708	
105	mittl. Fracht GW	$E_{s2\text{mittel}}$	g/a	6,991	PW-Ü bis Abbruch
106	max. Emissionsstärke GW	$J_{s2\max}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	17,9	
107	mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2\text{mittel}}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	6,4	PW-Ü bis Abbruch
108	mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	13,585	
109	Abbruchkriterium				2
110					
111					
112	Abbruchkriterium 1: keine Unterschreitung des PW im Berechnungszeitraum				
113	Abbruchkriterium 2: Schadstoffemission Quelle überschreitet mobilisierbare Masse				

Abb. 35: Ergebnis-Darstellung für den Fall, dass ein Abbruch der Berechnung aufgrund des Abbruchkriteriums 2 (Schadstoffemission Quelle überschreitet mobilisierbare Masse) auftritt

A 3.4.3 Verwendung äquivalenter Parameter

A 3.4.3.1 Leichtflüchtige Stoffe

Durch Anpassung des Dispersionskoeffizienten kann bei leichtflüchtigen Stoffen auch ein Übergang von der gelösten Phase (Sickerwasser) in die Bodenluft und die diffusive Ausbreitung in der Bodenluft berücksichtigt werden. Ein Hinweis, ob die Flüchtigkeit berücksichtigt werden sollte, ergibt sich aus der Flüchtigkeitsklasse in Spalte F des Tabellenblattes **Stoffdaten**, die nach einem in der Literatur [61] beschriebenen Verfahren berechnet wurde. Grundlage der Klasseneinstufung ist der Wert der Henry-Konstante. Eine Berücksichtigung in der Sickerwasserprognose ist bei Stoffen mit mittlerer oder hoher Flüchtigkeit zu empfehlen. Um die Verflüchtigung zu berücksichtigen, muss ein äquivalenter Dispersionskoeffizient nach Gleichung A11 (Kap. A2.3) errechnet werden. Für die Demonstration der Auswirkungen durch die Berücksichtigung der Flüchtigkeit wurde folgendes Fallbeispiel ausgewählt:

Fallbeispiel 4

Es handelt sich um das ehemalige Betriebsgelände eines metallverarbeitenden Betriebes. Bei Bodenluftuntersuchungen wurden nach einer bereits erfolgten Sanierungsmaßnahme noch hohe Bodenluftkonzentrationen (750 mg/m^3) an Trichlorethen festgestellt. Laboruntersuchungen an Kernmaterial ergaben Trichlorethen-Gesamtgehalte von 55 mg/kg , die im Wesentlichen an eine bis 2 m Tiefe reichende schluffig-sandige Schicht mit deutlich erhöhtem humosem Anteil (C_{org} : 3%) gebunden sind. Es wird davon ausgegangen, dass die Trichlorethen-Kontamination sorptiv in der schluffig-humosen Schicht gebunden ist und eine desorptionslimitierte Freisetzung mit abklingender Quellkonzentration vorliegt. Untersuchungen des Grundwassers ergaben Trichlorethen-Konzentrationen im Bereich von 200 bis 300 µg/l .

Für die Berechnung wird das Tabellenblatt *Fall B* (abklingende Quellkonzentration) ausgewählt. Die Berechnung wird ohne und mit Berücksichtigung der Verflüchtigung durchgeführt (Abb. 36).

	A	B	C	D	E
3				Fallbsp. 4/AH	Fallbsp. 4/AH
4				ohne Flüchtigkeit	mit Flüchtigkeit
5	Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	Wert
6	Schadstoff			Trichlorethen	Trichlorethen
7	Prüfwert BBodSchV/GFS	PV/GFS	µg/l	10,00	10,00
8	Kontaminierte Fläche	F	m^2	500,0	500,0
9	OdB (u GOK)	OdB	m	6,0	6,0
10	Oberkante Quelle	OKq	m	0,1	0,1
11	Unterkante Quelle	UKq	m	2,0	2,0
12	Bodenart (KA5)			Su2	Su2
13	Feldkapazität	FK	%	27,0	27,0
14	Trockenraumdichte Quelle	$\rho_b\text{-Q}$	kg/dm^3	1,20	1,20
15	Trockenraumdichte Transport	$\rho_b\text{-zS}$	kg/dm^3	1,60	1,60
17	Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	55,000	55,000
18	Gesamtmasse Quelle	$M_{\text{Sst,r}}$	kg	62,700	62,700
19	Mobilisierbarer Anteil	M_{mob}	%	100,0	100,0
20	flächenbez. mob. Masse		g/m^2	125,400	125,400
21	Quellkonzentration initial	$c_{\text{q},1}(0)$	µg/l	3260,0	3260,0
22	Vorbelastung Transportstrecke	c_i	µg/l	0,0	0,0
23	asympt. Endkonzentration	c_e	µg/l	0,0	0,0
24	Abklingkonstante	k_e	$1/\text{a}$	7,799E-03	7,799E-03
25	Emissionsdauer Quelle	t_e	a	742,0	742,0
26	Quellstärke initial	$J_{\text{q},1}(0)$	$\text{mg/(m}^2\text{a)}$	978,0	978,0
27	Sickerwasserrate	SWR	mm/a	300,0	300,0
28	Länge Transportstrecke	z_e	m	4,0	4,0
29	Sickerwassergeschw.	v_{sw}	m/a	1,111	1,111
30	Schadstoffverweilzeit	t_{sw}	a	47,0	47,6
31	Dispersivitäts-Skalenfaktor	f_d		0,100	1,087
32	long. Dispersivität	α_e	m	0,400	4,348
33	long. Disp.koeff.	D_e	m^2/a	0,444	4,831
35	lin. Verteilungskoeff.	k_d	l/kg	2,033	2,063
36	Retardationsfaktor	R		13,0	13,2
37	Halbwertszeit Abbau	$T_{1/2}$	a	2,550	2,550
38	Abbaukoeff. λ	λ	$1/\text{a}$	0,272	0,272

blau umrahmt:
äquivalente
Parameter
(Übernahme
aus Tabellen-
blatt Äquival

Abb. 36: Eingabeparameter für Fallbeispiel 4 (ohne/mit Berücksichtigung der Verflüchtigung)

Als initiale Quellkonzentration ($C_{Siwa} = 3.260 \mu\text{g/l}$) wird die im Gleichgewicht mit der Bodenluftkonzentration ($C_{Bolu} = 750 \text{ mg/m}^3$) über die Henry-Konstante ($H=0,23$ bei 15°C) berechnete Sickerwasserkonzentration ($C_{Siwa} = C_{Bolu} / H$) angenommen. Als Halbwertszeit wurde der konservative Wert von 2,55 a aus dem Tabellenblatt **Bio-Abbau** übernommen.

Bei Berücksichtigung der Verflüchtigung sind für die Parameter Feldkapazität, Trockenraumdichte, Dispersivitäts-Skalenfaktor und linearer Verteilungskoeffizient k_d die äquivalenten Ersatzwerte einzugeben (blau umrahmte Felder der Abb. 36). Diese können mit dem Tabellenblatt **Äquival** (Abb. 37) berechnet werden.

	A	B	C	D	F	H	J	R
1	Berechnung äquivalenter Parameter für Mehrschicht-Bodenprofil und flüchtige Stoffe							
2	Ver 2.3							
3	gelbe Felder: Eingabefelder							
4	Hinweis: eine Schicht wird berücksichtigt, wenn ein Mächtigkeitwert angegeben ist. Wenn ein Mächtigkeitwert für							
5	Schicht i angegeben ist, müssen auch die Parameter ausgefüllt werden. Soll die Schicht gelöscht werden, muss die							
6	entsprechende Zeile leer sein (Zelle mit rechter Maustaste einzeln auswählen und Inhalte löschen)							
7								
8								
9	Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
10	Fall A oder B			B				
11	Stoff			Trichlorethen				
12	Sickerwasserrate	SWR	(mm/a)	300,000				
13	Henry-Konstante	H	(-)	2,303E-01				
14	Diffusionskoeff. Wasser	Dw	m^2/a	0,025				
15	Diffusionskoeff. Luft	Dg	m^2/a	215,011				
16	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd	(-)	0,100				
17								
18	Schicht-Nr	Bodenart	Mächtigkeit	Feldkapazität	Luftkapazität	Trockenraumdichte	lin. Verteilungs-	
19		KA5					koeffizient	
20	i		z(i)	Fk(i)	Lk(i)	pb(i)	kd(i)	
21			(m)	(Vol-%)	(Vol-%)	(kg/dm^3)	(l/kg)	
22	1	Su2	4	27	21	1,6	2,033	
23	2							
24	3							
25	4							
26	5							
27	6							
28	7							
29	8							
30	9							
31	10							
32	Summe/äquiv.		4	27,0	21,0	1,600	2,063	
33								
34	Äquivalente Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
35	Feldkapazität	FK-äq	(%)	27,000	Die Werte der rot unterlegten Zellen sind in die Eingabeblätter Fall A bzw. Fall B zu übertragen			
36	Luftkapazität	LK-äq	(%)	21,000				
37	Trockenraumdichte	pb-zs-äq	(kg/dm^3)	1,600				
38	lin. Verteilungskoeff.	kd-äq	(l/kg)	2,063				
39	Retardationsfaktor	R-äq	(-)	13,227				
40	Tortuosität Bodenwasser	τ_w -äq	(-)	0,205				
41	Tortuosität Bodenluft	τ_g -äq	(-)	0,114				
42	Sickerwassergeschwindigkeit	vsm-äq	(m/a)	1,111				
43	longitudinale Dispersivität	α_z	(m)	0,400				
44	mechanische Dispersion	Dmech	(m^2/a)	0,444				
45	molekulare Diffusion	Dmol	(m^2/a)	0,005				
46	Dispersion Verflüchtigung	Dvol	(m^2/a)	4,382				
47	Dispersionskoeffizient	Dz-äq	(m^2/a)	4,831				
48	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd-äq	(-)	1,087				

Abb. 37: Ermittlung der äquivalenten Parameter für Fallbeispiel 4 mit dem Tabellenblatt **Äquival**

Für die Berechnung der äquivalenten Parameter im Tabellenblatt **Äquival** sind die im oberen Teil des Blattes erforderlichen Stoffdaten (Henry-Konstante, Diffusionskoeffizient im freien Wasser, Diffusionskoeffizient in freier Luft) aus dem Tabellenblatt **Stoffdaten** (Abb. 38) zu übernehmen.

Für das Fallbeispiel 4 wurden die Werte für eine durchschnittliche Temperatur von 15°C ermittelt. Die restlichen Parameter Stoff, Sickerwasserrate und Dispersivitäts-Skalenfaktor im oberen Teil des Tabellenblattes **Äquival** (Abb. 37) sind entsprechend den Eingangsdaten aus den jeweiligen Tabellenblättern **Fall A** oder **Fall B** zu übernehmen.

	A	B	C	D	E	F	G	J	K	O	P	T
1	Stoffdaten für organische Stoffe											
2	Einstufung der Flüchtigkeit (n. Handbook of Chemical Property Estimation Methods)											
3	grüne Felder: nach EPI-Suite Datenbank der US-EPA			Henry-Konstante H								
4	gelbe Felder: Eingabefelder			H< 1,26e-5: gering								
5				1,26e-5<H<4,087e-2: mittel								
6				H>4,087e-2: hoch								
7												
8	Stoff	Temperatur	Summen-	Molgew.	CAS-Nr	Flüchtigkeit	Log (Koc)	Dampfdruck	Wasser-	Henry-	Diffusions-	Diffusions-
9	Gruppe/Name	(°C)	Formel	(g/mol)		Klasse	(l/kg)	bei T Spalte B	Löslichkeit	Konstante	koeffizient	koeffizient
10								(mm Hg)	(25°C)	bei T Spalte B	Luft (n. FSG)	Wasser (n. Worch)
11									(mg/l)	(-)	bei T Spalte B	bei T Spalte B
12											(m ² /a)	(m ² /a)
59												
60	LHKW											
61	halogenierte Alkene											
62	Tetrachlorethen (PER)	25	C2Cl4	186,83	127-18-4	hoch	2,029	1,850E+01	2,060E+02	7,235E-01	204,234	0,023
63	Trichlorethen (TRI)	15	C2HCl3	131,39	79-01-6	hoch	1,831	4,400E+01	1,280E+03	2,303E-01	215,011	0,025
64	cis-Dichlorethen	25	C2H2Cl2	96,94	186-69-2	hoch	1,641	2,010E+02	6,410E+03	1,668E-01	264,630	0,030
65	Vinylchlorid (VC)	25	C2H3Cl	62,50	75-01-4	hoch	1,376	2,980E+03	8,800E+03	1,136E+00	330,233	0,038
66												

Abb. 38: Eingabeparameter für Fallbeispiel 4 (ohne/mit Berücksichtigung der Verflüchtigung) im Tabellenblatt Stoffdaten

Um die Auswirkung der Flüchtigkeit zu erkennen, wurde für das Fallbeispiel 4 ein einschichtiges Profil mit der Bodenart Su2 ausgewählt. Als Mächtigkeit ist im Feld C22 des Tabellenblattes **Äquival** (Abb. 37) die Länge der Transportstrecke aus den Eingabebättern Fall A (D26) bzw. Fall B (D28) zu übernehmen. Die Parameter Feldkapazität (D23) und Luftkapazität (F23) können dem Tabellenblatt **Feldkap** (Abb. 39) entnommen werden. Als Trockenraumdichte der Transportstrecke (H23) ist der Wert aus dem jeweiligen Tabellenblatt **Fall A** bzw. **Fall B** (D15) zu übernehmen. Der lineare Verteilungskoeffizient k_d kann mit dem Tabellenblatt **kd-Organik** (Abb. 40) berechnet werden.

15					
16	Bodenart	Trocken-	Grobboden-	Humusgehalt	Feldkapazität
17		rohddichte	Anteil		Luftkapazität
18		ρ_t	Korngröße>2 mm		n. Tab. 70
19		(kg/dm³)	(Vol %)	(Masse %)	n. Tab. 70
20	Ss	1,5	0	0	11
21	Sl2	1,5	0	0	25
22	Sl3	1,5	0	0	27
23	Sl4	1,5	0	0	30
24	Slu	1,5	0	0	33
25	St2	1,5	0	0	22
26	St3	1,5	0	0	30
27	Su2	1,6	0	3	27
28	Su3	1,5	0	0	29
29	Su4	1,5	0	0	32
30	Ls2	1,5	0	0	34
31	Ls3	1,5	0	0	33
32	Ls4	1,5	0	0	32
33	Lt2	1,5	0	0	36
34	Lt3	1,5	0	0	39
35	Lts	1,5	0	0	37
36	Lu	1,5	0	0	36

Abb. 39: Ermittlung der Parameter Feldkapazität und Luftkapazität für Fallbeispiel 4 mit dem Tabellenblatt *Feldkap*

	A	B	C	D
1	kd-Werte Organik			
2				
3	gelbe Felder: Eingabefelder			
4	der k_{oc} -Wert wird aus dem Tabellenblatt "Stoffdaten" übernommen			
5				
6	lineares Sorptionsmodell: $c_s = k_d \cdot c_w$			
7	$k_d = C_{org} \cdot K_{oc}$			
8				
9				
10	Stoff	C_{org}	k_d	
11	Gruppe/Name	(%)	(l/kg)	
12				
53	Styrol	0,1	0,518	
54	Cumol	0,1	0,817	
55	Indan	0,1	0,995	
56				
57	MTBE			
58	MTBE	0,1	0,005	
59				
60	LHKW			
61	halogenierte Alkene			
62	Tetrachlorethen (PER)	0,1	0,107	
63	Trichlorethen (TRI)	3	2,033	
64	cis-Dichlorethen	0,1	0,044	
65	Vinylchlorid (VC)	0,1	0,024	
66				

Abb. 40: Ermittlung des k_d -Wertes für Fallbeispiel 4 mit dem Tabellenblatt *kd-Organik*

Die in das Tabellenblatt *Fall B* zu übertragenden äquivalenten Parameter sind in Abbildung 37 (rot unterlegt) gezeigt. Aufgrund der Einschichtigkeit ergibt sich für die Parameter Feldkapazität und Trockenraumdichte keine Änderung. Eine erhebliche Veränderung durch die Berücksichtigung der Flüchtigkeit ergibt sich für den Dispersivitäts-Skalenfaktor, der deutlich erhöht (1,087 anstelle des Standardwertes von 0,1) ist. Für

den linearen Verteilungskoeffizienten k_d ergibt sich eine leichte Erhöhung von 2,033 auf 2,063 l/kg.

Das Ergebnis der Berechnung für Fallbeispiel 4 ohne/mit Verflüchtigung ist in Abb. 41 gezeigt. Bei Berücksichtigung der Verflüchtigung ergibt sich durch die erhöhte Dispersivität eine deutlich geringere Maximalkonzentration. Allerdings tritt nicht in jedem Falle eine Verringerung der Maximalkonzentration bei Berücksichtigung der Verflüchtigung ein. Abhängig von der Halbwertszeit können sich auch höhere Maximalkonzentrationen ergeben (s. Kap. A 3.5).

			Fallbsp. 4/AH ohne Flüchtigkeit	Fallbsp. 4/AH mit Flüchtigkeit
max. Konzentration	c_{max}	$\mu\text{g/l}$	892,3	712,1
Zeitpunkt der max. Konz.	t_{cmax}	a	69,0	60,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pwü}$	a	16,0	3,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	660,0	640,0
Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	644,0	637,0
Schadstoffemission Quelle	E_{s1ges}	kg	62,174	62,083
Schadstoffemission GW	E_{s2ges}	kg	23,246	20,828
max. Fracht GW	E_{s2max}	g/a	133,844	106,822
mittl. Fracht GW	$E_{s2mittel}$	g/a	36,096	32,696
max. Emissionsstärke GW	J_{s2max}	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	267,7	213,6
mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2mittel}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	72,2	65,4
mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	62,700	62,700
Abbruchkriterium				

Abb. 41: Ergebnis der Sickerwasserprognose für Fallbeispiel 4 ohne bzw. mit Berücksichtigung der Verflüchtigung

A 3.4.3.2 Mehrschichtige Profile

Entsprechend der in Anhang 2.6 der AH-DU beschriebenen Methode können mit der analytischen Lösung auch mehrschichtige Profile berechnet werden. Hierzu müssen die Parameter Feldkapazität, Trockenraumdichte und der lineare Verteilungskoeffizient k_d (bei Berücksichtigung der Flüchtigkeit auch der Dispersivitäts-Skalenfaktor) durch sogenannte „äquivalente Parameter“ ersetzt werden [42]. Die Wirkung einer mehrschichtig aufgebauten Transportstrecke wird an Hand des Fallbeispiels 1 (s. Kap. A 3.4.1) gezeigt. Anstelle der einschichtig aufgebauten Transportstrecke (Fallbeispiel 1/A3.4.1) aus einem schwach schluffigen Sand (Su2) wird ein dreischichtiges Profil mit dem Aufbau entsprechend Abbildung 42 und den Bodenparametern entsprechend Tabelle 4 zugrunde gelegt.

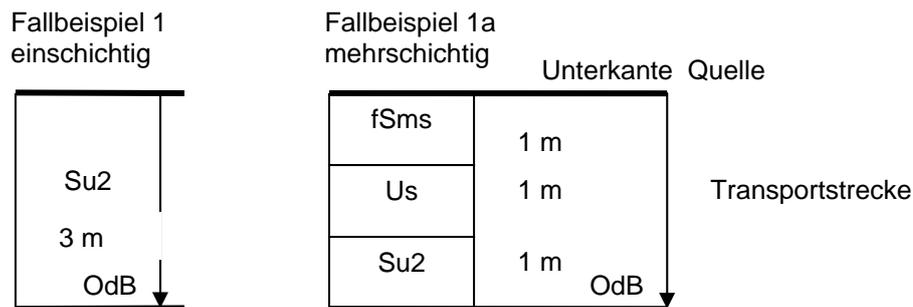


Abb. 42: Aufbau der Transportstrecke für Fallbeispiel 1

Tab. 4: Bodenparameter der Transportstrecke für Fallbeispiel 1a

Bodenart	Mächtigkeit	Trocken-Raum-dichte	Feldkapazität	pH	Corg	Tongehalt
	(m)	(kg/dm ³)	(%)		(%)	(%)
fSms	1	1,5	14	4	0,1	0,5
Us	1	1,6	32	5	0,5	5
Su2	1	1,5	23	4	0,1	1

Aus den Bodenparametern der Einzelschichten (Tab. 4) können mit Hilfe des Tabellenblattes **Äquival** (Abb. 43) die äquivalenten Parameter ermittelt werden. Falls die Flüchtigkeit nicht berücksichtigt werden soll (z. B. bei anorganischen Schadstoffen) können die Stoffdaten in den Feldern D13 –D15 des Tabellenblattes **Äquival** auf Null gesetzt werden. Die Bodenparameter der Einzelschichten sind in die gelb markierten Felder einzugeben. Für die Ermittlung der Parameter Feldkapazität und Luftkapazität kann das Tabellenblatt **Feldkap** herangezogen werden. Der lineare Verteilungskoeffizient ist mit dem Tabellenblatt **kd-Anorganik** oder **kd-Organik** zu ermitteln. Es können bis zu zehn Einzelschichten berücksichtigt werden. Eine Schicht wird berücksichtigt, falls eine Mächtigkeit in den Feldern der Spalte C eingegeben wird. Falls ein Mächtigkeitswert eingegeben wird, sind auch die restlichen Spalten mit Werten zu belegen. Soll eine Schicht gelöscht werden, muss die entsprechende Zeile leer sein (die einzelnen Felder mit rechter Maustaste **einzel**n auswählen und „Inhalte löschen“ auswählen). Die Werte der rot unterlegten Felder sind anschließend in das relevante Tabellenblatt (Fall A für Fallbeispiel 1) zu übertragen. Falls die Flüchtigkeit nicht berücksichtigt werden soll (Stoffdaten sind Null), kann die Luftkapazität (Spalte F) auf Null gesetzt werden. Der Dispersivitäts-Skalenfaktor ändert sich in diesem Falle nicht und entspricht dem im Tabellenblatt (Fall A oder B) vorgegebenen Standardwert (0,1).

	A	B	C	D	F	H	J	R
1	Berechnung äquivalenter Parameter für Mehrschicht-Bodenprofil und flüchtige Stoffe							
2	Ver 2.3							
3	gelbe Felder: Eingabefelder							
4	Hinweis: eine Schicht wird berücksichtigt, wenn ein Mächtigkeitwert angegeben ist. Wenn ein Mächtigkeitwert für Schicht i angegeben ist, müssen auch die Parameter ausgefüllt werden. Soll die Schicht gelöscht werden, muss die entsprechende Zeile leer sein (Zelle mit rechter Maustaste einzeln auswählen und Inhalte löschen)							
5								
6								
7								
8								
9	Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
10	Fall A oder B			A				
11	Stoff			Cadmium				
12	Sickerwasserrate	SWR	(mm/a)	250,000				
13	Henry-Konstante	H	(-)	0,000E+00				
14	Diffusionskoeff. Wasser	Dw	m ² /a	0				
15	Diffusionskoeff. Luft	Dg	m ² /a	0				
16	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd	(-)	0,100				
17								
18	Schicht-Nr	Bodenart	Mächtigkeit	Feldkapazität	Luftkapazität	Trockenraumdichte	lin. Verteilungs-	
19		KA5					koeffizient	
20	i		z(i)	Fk(i)	Lk(i)	ρb(i)	kd(i)	
21			(m)	(Vol-%)	(Vol-%)	(kg/dm³)	(l/kg)	
22	1	fSms	1	14	0	1,5	2,2	
23	2	Us	1	32	0	1,6	35,7	
24	3	Su2	1	23	0	1,5	3	
25	4							
26	5							
27	6							
28	7							
29	8							
30	9							
31	10							
32	Summe/äquiv.		3	23,0	0,0	1,533	14,113	
33								
34	Äquivalente Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
35	Feldkapazität	FK-äq	(%)	23,000	Die Werte der rot unterlegten Zellen sind in die Eingabeblätter Fall A bzw. Fall B zu übertragen			
36	Luftkapazität	LK-äq	(%)	0,000				
37	Trockenraumdichte	ρb-zs-äq	(kg/dm ³)	1,533				
38	lin. Verteilungskoeff.	kd-äq	(l/kg)	14,113				
39	Retardationsfaktor	R-äq	(-)	95,087				
40	Tortuosität Bodenwasser	τw-äq	(-)	0,605				
41	Tortuosität Bodenluft	τg-äq	(-)	0,000				
42	Sickerwassergeschwindigkeit	vsm-äq	(m/a)	1,087				
43	longitudinale Dispersivität	αz	(m)	0,300				
44	mechanische Dispersion	Dmech	(m ² /a)	0,326				
45	molekulare Diffusion	Dmol	(m ² /a)	0,000				
46	Dispersion Verflüchtigung	Dvol	(m ² /a)	0,000				
47	Dispersionskoeffizient	Dz-äq	(m ² /a)	0,326				
48	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd-äq	(-)	0,100				

Abb. 43: Ermittlung der äquivalenten Parameter für das Fallbeispiel 1a (dreischichtiger Aufbau der Transportstrecke)

Ein Vergleich der Tabellenblätter für das Fallbeispiel 1 (einschichtig) und Fallbeispiel 1a (dreischichtig) ist in Abbildung 44 gezeigt.

Das Ergebnis der Berechnung für Fallbeispiel 1 mit einschichtigem und dreischichtigem Profil ist in Abbildung 45 gezeigt. Aufgrund des sandigen Schluffes (mittlere Schicht) ist der äquivalente k_d -Wert stark erhöht. Dies führt zu einer deutlich längeren Schadstoffverweilzeit bei gleicher Emissionsdauer, was zu einer zusätzlichen Abminderung führt (Verhältnis V_{QT} nach Gl. 17/Kap. 7.3.3 wird geringer).

			Fallbsp. 1/AH einschichtig	Fallbsp. 1a/AH dreischichtig
Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	Wert
Schadstoff			Cadmium	Cadmium
Prüfwert BBodSchV oder GFS	PW oder GFS	µg/l	5,00	5,00
Kontaminierte Fläche	F	m ²	1700,0	1700,0
Ort der Beurteilung (u.GOK)	OdB	m	3,5	3,5
Oberkante Quelle (u.GOK)	OKq	m	0,0	0,0
Unterkante Quelle (u.GOK)	UKq	m	0,5	0,5
Bodenart (KA5)			Su2	fSms/Us/Su2
Feldkapazität	FK	%	23,0	23,0
Trockenraumdichte Quelle	ρ _{b-Q}	kg/dm ³	1,30	1,30
Trockenraumdichte Transportstr.	ρ _{b-zs}	kg/dm ³	1,50	1,53
Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	476,000	476,000
Gesamtmasse Quelle	M _{Sch,F}	kg	525,980	525,980
Mobilisierbarer Anteil	M _{mob}	%	10,0	10,0
Quellkonzentration	c ₀	µg/l	550,0	550,0
Vorbelastung Transportstrecke	c _i	µg/l	0,0	0,0
Emissionsdauer	t _e	a	225,0	225,0
Quellstärke	J _{s1}	mg/(m ² *a)	137,5	137,5
Sickerwasserrate	SWR	mm/a	250,0	250,0
Länge Transportstrecke	z _s	m	3,0	3,0
Sickerwassergeschw	v _{sm}	m/a	1,087	1,087
Schadstoffverweilzeit	t _{stm}	a	56,8	262,4
Dispersivitäts-Skalenfaktor	f _d		0,100	0,100
long. Dispersivität	α _z	m	0,3	0,3
long. Disp.koeff.	D _z	m ² /a	0,3	0,3
lin. Verteilungskoeff.	k _d	l/kg	3,000	14,113
Retardationsfaktor	R		20,6	95,1
Halbwertszeit Abbau	T _{1/2}	a	1000000,000	1000000,000
Abbaukoeffizient	λ	1/a	0,000	0,000

blau umrahmt:
äquivalente
Parameter

Abb. 44: Eingabe der äquivalenten Parameter für das Fallbeispiel 1/1a (dreischichtiger Aufbau der Transportstrecke)

			Fallbsp.1 einschichtig	Fallbsp.1a dreischichtig
max. Konzentration	c _{max}	µg/l	549,9	390,5
Zeitpunkt der max. Konz.	t _{cmax}	a	236,0	360,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	t _{pwü}	a	21,0	99,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t _{pwu}	a	376,0	915,0
Dauer PW-Überschr.	t _{pw}	a	355,0	816,0
Schadstoffemission Quelle	E _{s1ges}	kg	52,598	52,598
Schadstoffemission GW	E _{s2ges}	kg	52,548	52,365
max. Fracht GW	E _{s2max}	g/a	233,707	165,954
mittl. Fracht GW	E _{s2mittel}	g/a	148,024	64,173
max. Emissionsstärke GW	J _{s2max}	mg/(m ² *a)	137,5	97,6
mittl. Emissionsstärke GW	J _{s2mittel}	mg/(m ² *a)	87,1	37,7
mobilisierbare Masse	M _{mob}	kg	52,598	52,598
Abbruchkriterium				

Abb. 45: Ergebnis der Sickerwasserprognose für Fallbeispiel 1/1a mit einschichtigem und dreischichtigem Aufbau der Transportstrecke

A 3.5 Sensitivitätsbetrachtungen

Um den Einfluss verschiedener Eingabeparameter auf das Ergebnis zu verdeutlichen, wurden in den Fallbeispielen ausgewählte Eingabeparameter variiert.

A 3.5.1 Varianten zu Fallbeispiel 1

Ausgehend von den Parametern des Basisfalls (Abb. 22 bzw. Tab. 1) wurden für das Fallbeispiel 1 drei Varianten berechnet. Die Eingabeparameter sind in Abbildung 46 zusammenfassend dargestellt. Die gegenüber dem Basisfall veränderten Parameter sind blau umrahmt.

			Basisfall	Var. 1	Var. 2	Var. 3
Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	Wert	Wert	Wert
Schadstoff			Cadmium	Cadmium	Cadmium	Cadmium
Prüfwert BBodSchV oder GFS	PW oder GFS	µg/l	5,00	5,00	5,00	5,00
Kontaminierte Fläche	F	m ²	1700,0	1700,0	1700,0	1700,0
Ort der Beurteilung (u.GOK)	OdB	m	3,5	3,5	3,5	3,5
Oberkante Quelle (u.GOK)	OKq	m	0,0	0,0	0,0	0,0
Unterkante Quelle (u.GOK)	UKq	m	0,5	0,5	0,5	0,5
Bodenart (KA5)			Su2	Su2	Su2	Su2
Feldkapazität	FK	%	23,0	23,0	23,0	23,0
Trockenraumdichte Quelle	pb-Q	kg/dm ³	1,30	1,30	1,30	1,30
Trockenraumdichte Transportstr	pb-zs	kg/dm ³	1,50	1,50	1,50	1,50
Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	476,000	476,000	476,000	476,000
Gesamtmasse Quelle	M _{Sch,F}	kg	525,980	525,980	525,980	525,980
Mobilisierbarer Anteil	M _{mob}	%	10,0	10,0	1,0	10,0
Quellkonzentration	c ₀	µg/l	550,0	550,0	550,0	550,0
Vorbelastung Transportstrecke	c _i	µg/l	0,0	0,0	0,0	0,0
Emissionsdauer	t _e	a	225,0	225,0	22,5	225,0
Quellstärke	J _{s1}	mg/(m ² *a)	137,5	137,5	137,5	137,5
Sickerwasserrate	SWR	mm/a	250,0	250,0	250,0	250,0
Länge Transportstrecke	z _s	m	3,0	3,0	3,0	3,0
Sickerwassergeschw	v _{sm}	m/a	1,087	1,087	1,087	1,087
Schadstoffverweilzeit	t _{stm}	a	56,8	595,0	595,0	595,0
Dispersivitäts-Skalenfaktor	f _d		0,100	0,100	0,100	0,010
long. Dispersivität	α _z	m	0,3	0,3	0,3	0,0
long. Disp.koeff.	D _z	m ² /a	0,3	0,3	0,3	0,0
lin. Verteilungskoeff.	k _d	l/kg	3,000	32,900	32,900	32,900
Retardationsfaktor	R		20,6	215,6	215,6	215,6
Halbwertszeit Abbau	T _{1/2}	a	1000000,000	1000000,000	1000000,000	1000000,000
Abbaukoeffizient	λ	1/a	0,000	0,000	0,000	0,000

Abb. 46: Eingabeparameter für die Varianten in Fallbeispiel 1

Variante 1:

Diese Variante zeigt den Einfluss der Bodenkenngröße „pH-Wert“ auf die Berechnungen. Dieser Wert wurde im Tabellenblatt **kd-Anorganik** (Zelle H13) von 4 auf 6 erhöht (Abb. 47). Dadurch ergibt sich ein deutlich erhöhter linearer Verteilungskoeffizient von 32,9 l/kg als Eingabewert in Zelle D32.

		Freundlich-Regressionskoeffizienten (Bericht BGR/2005)						Bodenkenngrößen				Linear. Freundlich-Isoth.	
Element	Sym	Tab. BGR	log K*	a (pH)	b (log Ton)	c (log Corg)	n-Freundlich	pH	C _{org}	Ton	K _d -Freundlich	c _{s1} (=Quellk.)	k _d -linearisiert
									(%)	(%)	(µg ⁽¹⁻ⁿ⁾ ·l ⁿ /kg)	µg/l	(l/kg)
Cadmium	Cd	Tab. 3.2-6	-0,827	0,521	0,419	0,376	0,836	6,0	0,10	1,0	83,8	500,0	32,9

Abb. 47: Berechnung des k_d-Werts für Variante 1

Eingabewert für Zelle D32 im Tabellenblatt Fall A

Variante 2:

Neben dem erhöhten pH-Wert und dadurch höheren Verteilungskoeffizienten (Variante 1) wurde zusätzlich der mobilisierbare Anteil (D20) von 10% auf 1% verringert. Dies zeigt zusätzlich die Auswirkung einer kürzeren Emissionsdauer.

Variante 3:

Neben dem erhöhten pH-Wert und dadurch höheren Verteilungskoeffizienten (Variante 1) wurde der Dispersivitäts-Skalenfaktor (D29) von 0,1 auf 0,01 reduziert. Dies bewirkt eine Verringerung der longitudinalen Dispersivität (D30) von 0,30 m auf 0,030 m.

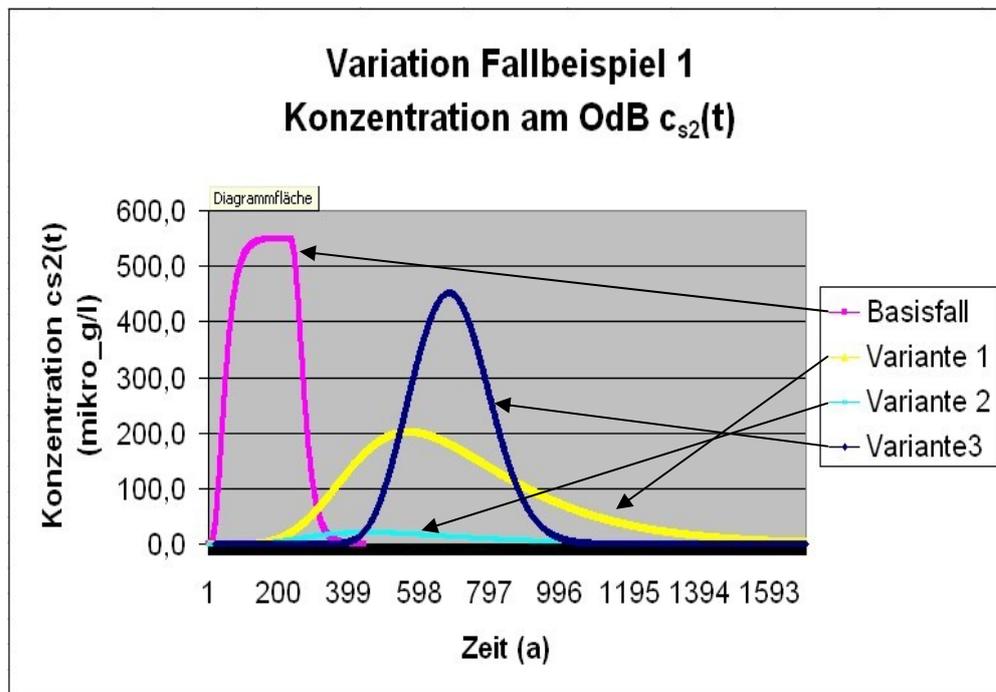


Abb. 48: Darstellung des Konzentrationsverlaufs am OdB für die Varianten des Beispiels 1

Die Auswirkungen der Parametervariationen für Beispiel 1 auf den Konzentrationsverlauf am Ort der Beurteilung sind in Abbildung 48 dargestellt. Die Auswirkungen auf die berechneten Ergebnis-Kenngrößen sind in Abbildung 49 zusammengefasst.

			Basisfall	Var. 1	Var. 2	Var. 3
max. Konzentration	c_{\max}	$\mu\text{g/l}$	549,9	202,3	21,1	451,7
Zeitpunkt der max. Konz.	$t_{c\max}$	a	236,0	621,0	507,0	706,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pw\ddot{u}}$	a	21,0	225,0	255,0	426,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	376,0	1709,0	1047,0	1054,0
Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	355,0	1484,0	792,0	628,0
Schadstoffemission Quelle	$E_{s1\text{ges}}$	kg	52,598	52,598	5,260	52,598
Schadstoffemission GW	$E_{s2\text{ges}}$	kg	52,548	52,064	4,664	52,474
max. Fracht GW	$E_{s2\max}$	g/a	233,707	85,961	8,982	191,953
mittl. Fracht GW	$E_{s2\text{mittel}}$	g/a	148,024	35,083	5,889	83,557
max. Emissionsstärke GW	$J_{s2\max}$	$\text{mg}/(\text{m}^2\cdot\text{a})$	137,5	50,6	5,3	112,9
mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2\text{mittel}}$	$\text{mg}/(\text{m}^2\cdot\text{a})$	87,1	20,6	3,5	49,2
mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	52,598	52,598	5,260	52,598
Abbruchkriterium						

Abb. 49: Ergebniskenngrößen für die Varianten des Beispiels 1

Im Basisfall ist das Verhältnis V_{QT} von Emissionsdauer (D23) zu Schadstoffverweilzeit (D28) mit > 4 ungünstig (s. a. Gl. (17)/Kap. 7.3.3). Dies führt zu einem „Durchbruch“ der Quellkonzentration am OdB (s. Fallkonstellation A1 in Kap. 7.3.3). Aus Variante 1 wird deutlich, dass die Erhöhung des Verteilungskoeffizienten nicht nur zu einer deutlichen Verzögerung des Transports führt, sondern bei unveränderter Emissionsdauer aufgrund der Wirkung der Dispersion auch zu einem zusätzlichen Verdünnungseffekt (geringere Konzentrationen und Frachten am Ort der Beurteilung, die aber über einen längeren Zeitraum anhalten). Die insgesamt in das Grundwasser eingetragene Schadstoffmasse bleibt nahezu unverändert. Der in Variante 2 zusätzlich reduzierte mobilisierbare Anteil verstärkt den dispersiven Verdünnungseffekt, da sich V_{QT} von > 4 (Basisfall) auf 0,037 reduziert (s. Fallkonstellation A2 in Kap. 7.3.3). Hieraus resultiert eine erhebliche Abminderung der Konzentration am OdB um den Faktor 26. Allerdings wird auch unter diesen günstigen Bedingungen der Prüfwert am OdB noch überschritten. Variante 3 macht den Einfluss der reduzierten Dispersivität gegenüber der Variante 1 deutlich. Die dispersive Verdünnungswirkung ist reduziert, was zu deutlich höheren Konzentrationen am OdB führt. Die insgesamt in das Grundwasser eingetragene Schadstoffmasse bleibt wegen der kürzeren Zeitdauer der Prüfwertüberschreitung allerdings fast gleich.

A 3.5.2 Varianten zu Fallbeispiel 2

Ausgehend von den Parametern des Basisfalls (Tab. 1) wurden für das Fallbeispiel 2 drei Varianten berechnet. Die Eingabeparameter sind in Abbildung 50 zusammenfassend dargestellt. Die gegenüber dem Basisfall veränderten Parameter sind blau umrahmt.

			Basisfall	Var. 1	Var. 2	Var. 3
Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	Wert	Wert	Wert
Schadstoff			Naphthalin	Naphthalin	Naphthalin	Naphthalin
Prüfwert BBodSchV oder GFS	PW oder GFS	µg/l	2,00	2,00	2,00	2,00
Kontaminierte Fläche	F	m ²	400,0	400,0	400,0	400,0
Ort der Beurteilung (u.GOK)	OdB	m	5,0	5,0	5,0	5,0
Oberkante Quelle (u.GOK)	OKq	m	1,2	1,2	1,2	1,2
Unterkante Quelle (u.GOK)	UKq	m	1,8	1,8	1,8	1,8
Bodenart (KA5)			Su3	Su3	Su3	Su3
Feldkapazität	FK	%	26,0	26,0	26,0	26,0
Trockenraumdichte Quelle	ρ _{b-Q}	kg/dm ³	1,20	1,20	1,20	1,20
Trockenraumdichte Transportstr.	ρ _{b-zs}	kg/dm ³	1,60	1,60	1,60	1,60
Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	121,000	121,000	121,000	121,000
Gesamtmasse Quelle	M _{Sch,F}	kg	34,848	34,848	34,848	34,848
Mobilisierbarer Anteil	M _{mob}	%	100,0	100,0	100,0	100,0
Quellkonzentration	c ₀	µg/l	1480,0	1480,0	1480,0	1480,0
Vorbelastung Transportstrecke	c _i	µg/l	0,0	0,0	0,0	0,0
Emissionsdauer	t _e	a	206,5	206,5	206,5	206,5
Quellstärke	J _{s1}	mg/(m ² *a)	421,8	421,8	421,8	421,8
Sickerwasserrate	SWR	mm/a	285,0	285,0	285,0	285,0
Länge Transportstrecke	z _s	m	3,2	3,2	3,2	3,2
Sickerwassergeschw.	v _{sm}	m/a	1,096	1,096	1,096	1,096
Schadstoffverweilzeit	t _{stm}	a	35,9	35,9	332,8	332,8
Dispersivitäts-Skalenfaktor	f _d		0,100	0,100	0,100	1,000
long. Dispersivität	α _z	m	0,3	0,3	0,3	3,2
long. Disp.koeff.	D _z	m ² /a	0,4	0,4	0,4	3,5
lin. Verteilungskoeff.	k _d	l/kg	1,837	1,837	18,365	18,365
Retardationsfaktor	R		12,3	12,3	114,0	114,0
Halbwertszeit Abbau	T _{1/2}	a	1,240	0,360	0,360	0,360
Abbaukoeffizient	λ	1/a	0,559	1,925	1,925	1,925

Abb. 50: Eingabeparameter für die Varianten in Beispiel 2

Variante 1:

Die Halbwertszeit Abbau (D34) wurde vom Wert des Basisfalls 1,24 Jahre (entspricht dem CalTox-Wert aus Tabellenblatt **Bio-Abbau** für das Kompartiment Oberboden) auf 0,36 Jahre (entspricht dem CalTox-Wert aus Tabellenblatt **Bio-Abbau** für das Kompartiment ungesättigte Zone) reduziert. Dies entspricht einer Erhöhung des Abbaukoeffizienten (D35) von 0,559 auf 1,925.

Variante 2:

Neben der Reduzierung der Halbwertszeit Abbau (D34) auf 0,36 Jahre (Variante 1) wurde zusätzlich der C_{org} -Gehalt in der Transportstrecke von 0,1 auf 1% erhöht. Der in D32 einzugebende lineare Verteilungskoeffizient k_d erhöht sich dadurch von 1,837 l/kg auf 18,365 l/kg.

Variante 3:

Neben der Reduzierung der Halbwertszeit Abbau (D34) auf 0,36 Jahre (Variante 1) und der Erhöhung des linearen Verteilungskoeffizienten k_d (D32) auf 18,365 l/kg (Variante 2) wurde zusätzlich der Dispersivitäts-Skalenfaktor von 0,1 um den Faktor 10 auf 1,0 erhöht.

Die Auswirkungen der Parametervariationen auf den Konzentrationsverlauf am OdB sind in Abbildung 51 dargestellt.

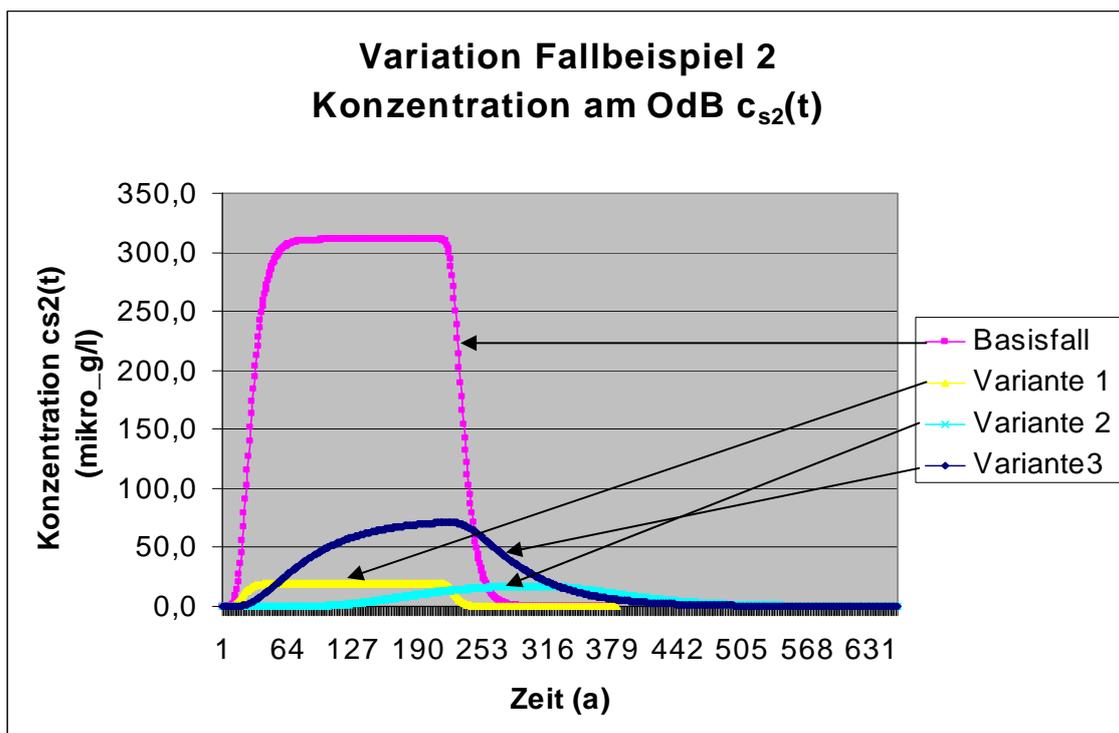


Abb. 51: Darstellung des Konzentrationsverlaufs am OdB für die Varianten des Beispiels 2

Die Auswirkungen auf die Ergebnis-Kenngrößen sind in Abbildung 52 zusammengefasst.

			Basisfall	Var. 1	Var. 2	Var. 3
max. Konzentration	c_{max}	$\mu\text{g/l}$	310,6	19,1	17,4	71,4
Zeitpunkt der max. Konz.	t_{cmax}	a	209,0	112,0	302,0	221,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pwü}$	a	11,0	13,0	125,0	25,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	277,0	236,0	487,0	438,0
Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	266,0	223,0	362,0	413,0
Schadstoffemission Quelle	E_{s1ges}	kg	34,848	34,848	34,848	34,848
Schadstoffemission GW	E_{s2ges}	kg	7,310	0,449	0,436	1,730
max. Fracht GW	E_{s2max}	g/a	35,403	2,180	1,989	8,136
mittl. Fracht GW	$E_{s2mittel}$	g/a	27,482	2,012	1,203	4,189
max. Emissionsstärke GW	J_{s2max}	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	88,5	5,5	5,0	20,3
mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2mittel}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	68,7	5,0	3,0	10,5
mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	34,848	34,848	34,848	34,848
Abbruchkriterium						

Abb. 52: Ergebniskenngrößen für die Varianten des Beispiels 2

Aufgrund der im Verhältnis zur Schadstoffverweilzeit deutlich längeren Emissionsdauer mit $V_{QT} > 4$ (s. Gl. (17)/Kap. 7.3.3) stellt sich für den Basisfall und die Variante 1 am OdB über einen längeren Zeitraum ein „quasistationärer“ Zustand mit konstanten Konzentrationen ein, deren Höhe durch die jeweilige Abbaurrate bestimmt ist. Die Variante 1 macht deutlich, dass die Abbaurrate einen überragenden Einfluss auf die Konzentrationsentwicklung am OdB hat.

Der erhöhte Verteilungskoeffizient in Variante 2 führt gegenüber Variante 1 zwar zu einem verzögerten Transport, die Maximalkonzentration am OdB ist in beiden Varianten jedoch annähernd gleich. Variante 3 unterscheidet sich gegenüber Variante 2 durch eine erhöhte Dispersivität. Die kombinierte Wirkung des biologischen Abbaus in Verbindung mit der höheren Dispersivität führt zu einer deutlichen Verringerung der Abminderung bei Variante 3. Die Ursache für die unerwartete Verringerung der Abminderung (bei Erhöhung der Dispersivität wäre eigentlich eine zusätzliche Abminderung zu erwarten) liegt darin, dass bei erhöhter Dispersivität die Schadstofffront früher den Ort der Beurteilung erreicht und damit für biologische Abbauprozesse weniger Zeit bleibt. Dieser Effekt ist daher vom Verhältnis der Transportzeit zur Abbaurrate (Damköhler-Zahl) abhängig.

A 3.5.3 Varianten zu Fallbeispiel 3

Ausgehend von den Parametern des Basisfalls (Abb. 31 bzw. Tab. 3) wurden für das Fallbeispiel 3 vier Varianten berechnet. Die Eingabeparameter sind in Abbildung 53 zusammenfassend dargestellt. Die gegenüber dem Basisfall veränderten Parameter sind blau umrahmt.

			Basisfall	Var. 1	Var. 2	Var. 3	Var. 4
Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	Wert	Wert	Wert	Wert
Schadstoff			Acenaphthen	Acenaphthen	Acenaphthen	Acenaphthen	Acenaphthen
Prüfwert BBodSchV/GFS	PW/GFS	$\mu\text{g/l}$	0,20	0,20	0,20	0,20	0,20
Kontaminierte Fläche	F	m^2	1100,0	1100,0	1100,0	1100,0	1100,0
ÖdB (u GOK)	ÖdB	m	4,5	4,5	4,5	4,5	4,5
Oberkante Quelle	OKq	m	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
Unterkante Quelle	UKq	m	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7
Bodenart (KA5)			Su2	Su2	Su2	Su2	Su2
Feldkapazität	FK	%	23,0	23,0	23,0	23,0	23,0
Trockenraumdichte Quelle	pb-Q	kg/dm^3	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30
Trockenraumdichte Transportstr.	pb-zs	kg/dm^3	1,70	1,70	1,70	1,70	1,70
Gesamtmasse Quelle	$M_{\text{sch,F}}$	kg	24,310	24,310	24,310	24,310	24,310
Mobilisierbarer Anteil	M_{mob}	%	100,0	100,0	100,0	100,0	50,0
flächenbez. mob. Masse		g/m^2	22,100	22,100	22,100	22,100	11,050
Quellkonzentration initial	$c_{s1}(0)$	$\mu\text{g/l}$	750,0	750,0	750,0	750,0	750,0
Vorbelastung Transportstrecke	c_i	$\mu\text{g/l}$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
asympt. Endkonzentration	c_a	$\mu\text{g/l}$	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Abklingkonstante	k_s	1/a	8,484E-03	8,484E-03	8,484E-03	8,484E-03	1,697E-02
Emissionsdauer Quelle	t_e	a	970,0	970,0	970,0	970,0	484,9
Quellstärke initial	$J_{s1}(0)$	$\text{mg/(m}^2\cdot\text{a)}$	187,5	187,5	187,5	187,5	187,5
Sickerwasserrate	SWR	mm/a	250,0	250,0	250,0	250,0	250,0
Länge Transportstrecke	z_s	m	3,8	3,8	3,8	3,8	3,8
Sickerwassergeschw.	v_{sm}	m/a	1,087	1,087	1,087	1,087	1,087
Schadstoffverweilzeit	t_{stm}	a	161,7	161,7	161,7	794,7	161,7
Dispersivitäts-Skalenfaktor	f_d		0,100	0,100	0,010	0,010	0,100
long. Dispersivität	α_z	m	0,380	0,380	0,038	0,038	0,380
long. Disp.koeff.	D_z	m^2/a	0,413	0,413	0,041	0,041	0,413
lin. Verteilungskoeff.	k_d	l/kg	6,124	6,124	6,124	30,618	6,124
Retardationsfaktor	R		46,3	46,3	46,3	227,3	46,3
Halbwertszeit Abbau	$T_{1/2}$	a	0,592	1,240	0,592	0,592	0,592
Abbaukoeff. λ	λ	1/a	1,171	0,559	1,171	1,171	1,171

Abb. 53: Eingabeparameter für die Varianten in Beispiel 3

Variante 1:

Die Halbwertszeit Abbau (D37) wurde vom Wert des Basisfalls 0,592 Jahre (entspricht dem CalTox-Wert für die unges. Zone) auf 1,24 Jahre (entspricht dem Wert für Naphthalin in Fallbeispiel 2) erhöht. Dies bewirkt eine Verringerung des Abbaukoeffizienten (D38) von 1,171 auf 0,559.

Variante 2:

Der Dispersivitäts-Skalenfaktor wurde von 0,1 auf 0,01 reduziert. Dies bewirkt eine Verringerung der longitudinalen Dispersivität (D_{32}) von 0,38 auf 0,038 m.

Variante 3:

Neben der Verringerung des Dispersivitäts-Skalenfaktors (Variante 2) wurde zusätzlich der C_{org} -Gehalt in der Transportstrecke von 0,1 auf 0,5 % erhöht. Der in D_{35} einzugebende k_d -Wert erhöht sich dadurch von 6,1 l/kg auf 30,6 l/kg.

Variante 4:

Der mobilisierbare Anteil wurde gegenüber dem Basisfall von 100 % auf 50 % halbiert. Dadurch erhöht sich der rechnerische Abklingkoeffizient von 0,008 auf 0,017 und die Emissionsdauer verkürzt sich von 970 auf 485 Jahre.

Die Auswirkungen der Parametervariationen für Beispiel 3 auf den Konzentrationsverlauf am OdB sind in Abbildung 54 dargestellt:

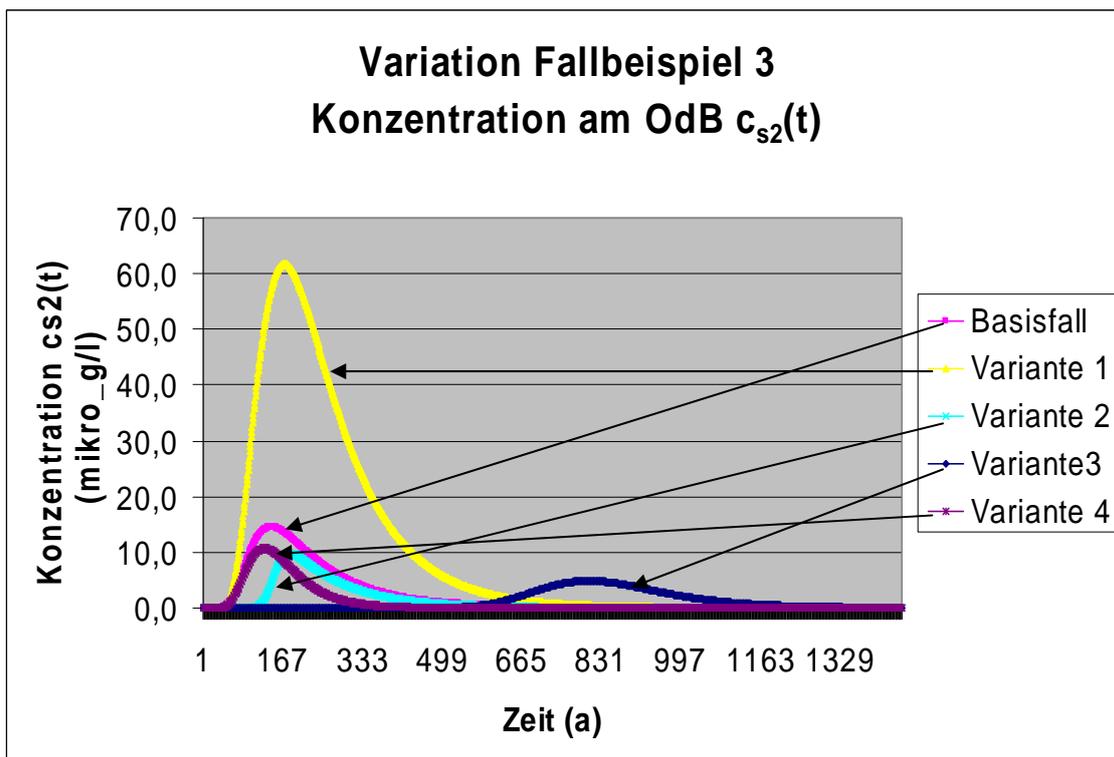


Abb. 54: Darstellung des Konzentrationsverlaufes am OdB für die Varianten des Beispiels 3

Die Auswirkungen auf die Ergebnis-Kenngrößen sind in Abb. 55 zusammengefasst.

			Basisfall	Var. 1	Var. 2	Var. 3	Var. 4
max. Konzentration	c_{\max}	$\mu\text{g/l}$	14,5	61,7	9,8	4,9	10,7
Zeitpunkt der max. Konz.	$t_{c\max}$	a	144,0	170,0	182,0	805,0	128,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pw\ddot{u}}$	a	45,0	42,0	111,0	552,0	45,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	683,0	898,0	654,0	1294,0	407,0
Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	638,0	856,0	543,0	742,0	362,0
Schadstoffemission Quelle	$E_{s1\text{ges}}$	kg	24,019	24,263	23,937	23,959	11,964
Schadstoffemission GW	$E_{s2\text{ges}}$	kg	0,812	3,898	0,449	0,449	0,406
max. Fracht GW	$E_{s2\text{max}}$	g/a	3,996	16,978	2,699	1,338	2,943
mittl. Fracht GW	$E_{s2\text{mittel}}$	g/a	1,272	4,554	0,827	0,605	1,121
max. Emissionsstärke GW	$J_{s2\text{max}}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	3,6	15,4	2,5	1,2	2,7
mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2\text{mittel}}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	1,2	4,1	0,8	0,6	1,0
mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	24,310	24,310	24,310	24,310	12,155
Abbruchkriterium							

Abb. 55: Ergebniskenngrößen für die Varianten des Beispiels 3

Im Vergleich zu Fallbeispiel 2 (konstante Quellkonzentration) wird deutlich, dass sich trotz der im Verhältnis zur Schadstoffverweilzeit deutlich längeren Emissionsdauer ($V_{QT} > 5$) für den Basisfall und die Varianten 1, 2 und 4 kein „quasistationärer“ Zustand mit konstanten Konzentrationen am OdB einstellt, sondern die Durchbruchkurven ausgeprägte Maxima zeigen. Dies ist auf die exponentiell abnehmende Quellkonzentration zurückzuführen.

Variante 1 zeigt, dass die Abbaurrate einen erheblichen Einfluss auf die Konzentrationsentwicklung am OdB hat. Je geringer die Abbaurrate ist, desto höher ist die Konzentration am OdB.

Die Verringerung der Dispersivität in Variante 2 führt zu einer Konzentrationsverringering gegenüber dem Basisfall. Die Ursache für die unerwartete zusätzliche Abminderung (bei Verringerung der Dispersivität wäre eigentlich eine geringere Abminderung zu erwarten) liegt darin, dass bei reduzierter Dispersivität die Schadstofffront später den OdB erreicht und damit für biologische Abbauprozesse mehr Zeit bleibt (vgl. Fallbeispiel 2, Variante 3). Dieser Effekt ist daher vom Verhältnis der Transportzeit zur Abbaurrate (Damköhler-Zahl) abhängig.

Der erhöhte Verteilungskoeffizient in Variante 3 führt gegenüber Variante 2 zu einem verzögerten Transport und durch die verlängerte Abbauwirkung zu einer zusätzlichen Abminderung der Konzentration am OdB. Die in Variante 4 vorgenommene Reduzierung des mobilisierbaren Anteils und der daraus resultierende höhere rechnerische

Abklingkoeffizient führt zu einer verringerten Emissionsdauer und einer im Vergleich zum Basisfall zusätzlichen Abminderung.

A 3.5.4 Varianten zu Fallbeispiel 4

Wie bereits im Kap. A 3.4.3.1 erläutert, ergibt sich bei Berücksichtigung der Verflüchtigung nicht in jedem Falle eine zusätzliche Abminderung durch den erhöhten Dispersionskoeffizienten, sondern die Auswirkung hängt von dem Zusammenspiel der Parameter Dispersionskoeffizient und Abbaurate ab. In der Variante 1 zum Fallbeispiel 4 wurde die Halbwertszeit des Basisfalls von 2,55 Jahren (entspricht CalTox-Wert für die Kompartimente Oberboden/Wurzelzone) auf 0,595 Jahre (entspricht CalTox-Wert für das Kompartiment Sediment) verringert und die Berechnung ohne und mit Berücksichtigung der Verflüchtigung durchgeführt. Die Eingabeparameter sind in Abbildung 56 zusammenfassend dargestellt. Die gegenüber dem Basisfall veränderten Parameter sind blau umrahmt.

			Basisfall ohne Verfl.	Basisfall mit Verfl.	Var. 1 ohne Verfl.	Var. 1 mit Verfl.
Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	Wert	Wert	Wert
Schadstoff			Trichlorethen	Trichlorethen	Trichlorethen	Trichlorethen
Prüfwert BBodSchV/GFS	PW/GFS	µg/l	10,00	10,00	10,00	10,00
Kontaminierte Fläche	F	m ²	500,0	500,0	500,0	500,0
OdB (u GOK)	OdB	m	6,0	6,0	6,0	6,0
Oberkante Quelle	OKq	m	0,1	0,1	0,1	0,1
Unterkante Quelle	UKq	m	2,0	2,0	2,0	2,0
Bodenart (KA5)			Su2	Su2	Su2	Su2
Feldkapazität	FK	%	27,0	27,0	27,0	27,0
Trockenraumdichte Quelle	ρb-Q	kg/dm ³	1,20	1,20	1,20	1,20
Trockenraumdichte Transportstr.	ρb-zs	kg/dm ³	1,60	1,60	1,60	1,60
Gesamtmasse Quelle	M _{Sch,F}	kg	62,700	62,700	62,700	62,700
Mobilisierbarer Anteil	M _{mob}	%	100,0	100,0	100,0	100,0
flächenbez. mob. Masse		g/m ²	125,400	125,400	125,400	125,400
Quellkonzentration initial	c _{s1(0)}	µg/l	3260,0	3260,0	3260,0	3260,0
Vorbelastung Transportstrecke	c _i	µg/l	0,0	0,0	0,0	0,0
asympt. Endkonzentration	c _a	µg/l	0,0	0,0	0,0	0,0
Abklingkonstante	k _s	1/a	7,799E-03	7,799E-03	7,799E-03	7,799E-03
Emissionsdauer Quelle	t _e	a	742,0	742,0	742,0	742,0
Quellstärke initial	J _{s1(0)}	mg/(m ² *a)	978,0	978,0	978,0	978,0
Sickerwasserrate	SWR	mm/a	300,0	300,0	300,0	300,0
Länge Transportstrecke	z _s	m	4,0	4,0	4,0	4,0
Sickerwassergeschw.	v _{sm}	m/a	1,111	1,111	1,111	1,111
Schadstoffverweilzeit	t _{sm}	a	47,0	47,6	47,0	47,6
Dispersivitäts-Skalenfaktor	f _d		0,100	1,087	0,100	1,087
long. Dispersivität	α _z	m	0,400	4,348	0,400	4,348
long. Disp.koeff.	D _z	m ² /a	0,444	4,831	0,444	4,831
lin. Verteilungskoeff.	k _d	l/kg	2,033	2,063	2,033	2,063
Retardationsfaktor	R		13,0	13,2	13,0	13,2
Halbwertszeit Abbau	T _{1/2}	a	2,550	2,550	0,595	0,595
Abbaukoeff. λ	λ	1/a	0,272	0,272	1,165	1,165

Abb. 56: Eingabeparameter für die Variante 1 zum Fallbeispiel 4 (ohne/mit Berücksichtigung der Verflüchtigung)

Die Auswirkungen der reduzierten Halbwertszeit für die Variante 1 ohne und mit Berücksichtigung der Verflüchtigung auf den Konzentrationsverlauf am OdB sind in Abbildung 57 dargestellt. Die Auswirkungen auf die Ergebnis-Kenngrößen sind in Abbildung 58 zusammengefasst. Im Gegensatz zum Basisfall führt die Berücksichtigung der Verflüchtigung bei der geringeren Halbwertszeit der Variante 1 nicht zu einer zusätzlichen Abminderung, sondern zu einer verringerten Abminderung mit einer deutlich erhöhten

Maximalkonzentration am OdB. Die Ursache für die unerwartete Verringerung der Abminderung (bei Erhöhung der Dispersivität wäre eigentlich eine zusätzliche Abminderung zu erwarten) liegt darin, dass bei erhöhter Dispersivität die Schadstofffront früher den Ort der Beurteilung erreicht und damit für biologische Abbauprozesse weniger Zeit bleibt. Dieser Effekt ist daher vom Verhältnis der Transportzeit zur Abbaurrate (Damköhler-Zahl) abhängig.

Die Vernachlässigung der Verflüchtigung führt daher nicht in jedem Fall zu einem Ergebnis auf der sicheren Seite!

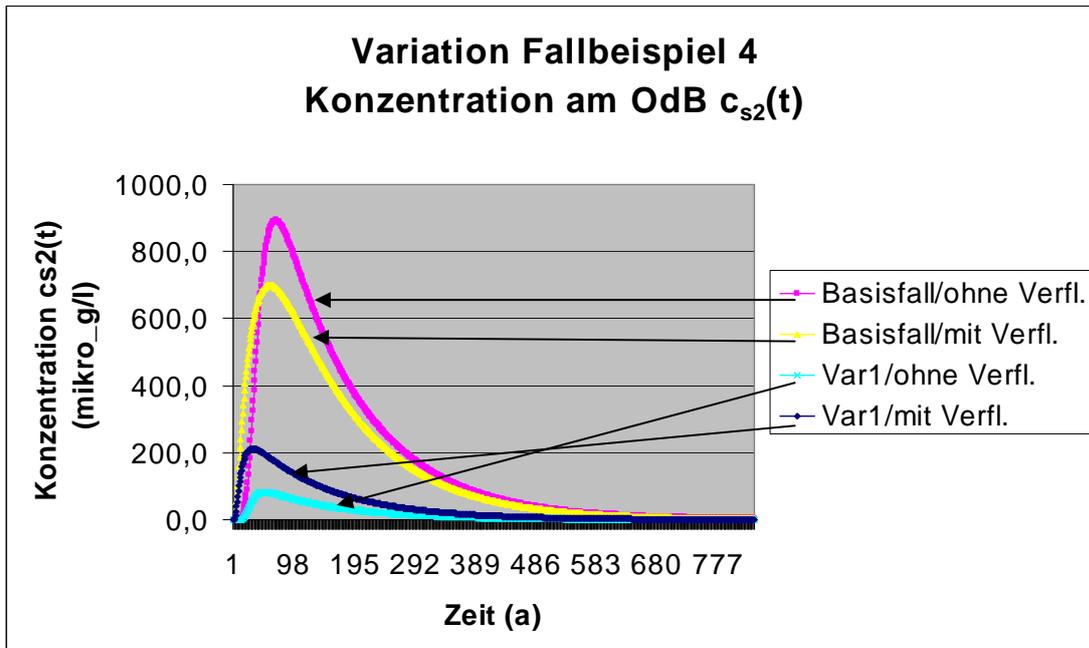


Abb. 57: Darstellung des Konzentrationsverlaufes am OdB für die Variante 1 des Fallbeispiels 4 (ohne/mit Berücksichtigung der Verflüchtigung)

			Basisfall ohne Verfl.	Basisfall mit Verfl.	Var. 1 ohne Verfl.	Var. 1 mit Verfl.
max. Konzentration	c_{max}	$\mu\text{g/l}$	892,3	712,1	82,8	206,0
Zeitpunkt der max. Konz.	t_{cmax}	a	69,0	60,0	51,0	33,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pwü}$	a	16,0	3,0	18,0	4,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	660,0	640,0	329,0	430,0
Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	644,0	637,0	311,0	426,0
Schadstoffemission Quelle	E_{s1ges}	kg	62,174	62,083	55,750	59,523
Schadstoffemission GW	E_{s2ges}	kg	23,246	20,828	1,780	4,712
max. Fracht GW	E_{s2max}	g/a	133,844	106,822	12,420	30,899
mittl. Fracht GW	$E_{s2mittel}$	g/a	36,096	32,696	5,723	11,061
max. Emissionsstärke GW	J_{s2max}	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	267,7	213,6	24,8	61,8
mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2mittel}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	72,2	65,4	11,4	22,1
mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	62,700	62,700	62,700	62,700
Abbruchkriterium						

Abb. 58: Ergebniskenngrößen für die Variante 1 des Fallbeispiels 4 (ohne/mit Berücksichtigung der Verflüchtigung)

A 3.5.5 Fazit der Variationsrechnungen

Die Beispielrechnungen machen die Auswirkungen von Parametervariationen auf das berechnete Ergebnis sichtbar. **Darüber hinaus wird deutlich, dass aufgrund der Kombinationswirkung der beim Transport wirkenden Prozesse eine einfache linear-kausale Prognose der Auswirkungen von Parameteränderungen nicht möglich ist. Dies gilt insbesondere, wenn leichtflüchtige Stoffe oder mehrschichtige Bodenprofile eine Rolle spielen.**

A 3.6 Validierung

Die Plausibilität der Ergebnisse von ALTEX-1D wurde durch Vergleich mit Literaturangaben geprüft [11]/Anhang 2.. Darüber hinaus wurden umfangreiche Vergleichsrechnungen mit einem numerischen Programm (Comsol 3.5) durchgeführt, um insbesondere die Plausibilität der Ergebnisse bei Verwendung „äquivalenter Parameter“ (mehrschichtige Profile, Berücksichtigung der Flüchtigkeit) zu überprüfen.

A 3.6.1 mehrschichtige Profile

Zur Überprüfung der ALTEX-1D-Ergebnisse bei mehrschichtigen Profilen mit Verwendung äquivalenter Parameter wurde das Fallbeispiel 1a (s. Kap. A 3.4.3.2) mit dem numerischen Programm Comsol 3.5 bei stationärer Sickerwasserrate (250 mm/a) nachgerechnet. Die Berechnungen mit Comsol wurden sowohl für ein 3-Schicht – Modell wie auch für ein 1-schichtiges Ersatzmodell mit Annahme äquivalenter Parameter für die Ersatzschicht durchgeführt und die Ergebnisse mit ALTEX-1D verglichen. Wie aus Abb. 59 deutlich wird, ergab der Vergleich eine exzellente Übereinstimmung zwischen ALTEX-1D und dem numerischen Modell.

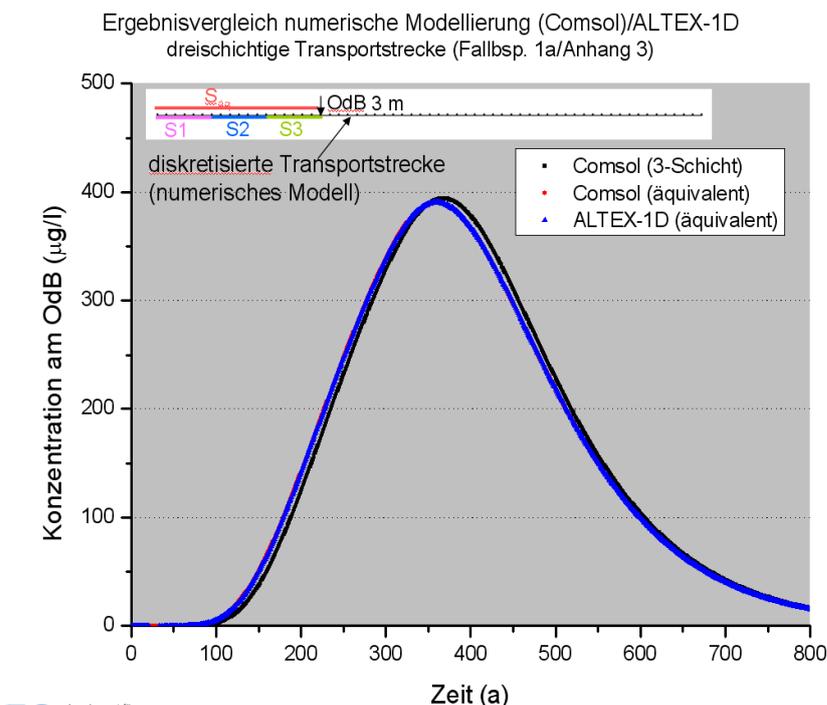


Abb. 59: Vergleich von Ergebnissen von ALTEX-1D und Comsol für das Fallbeispiel 1a (mehrschichtige Transportstrecke)

A 3.6.2 Berücksichtigung der Flüchtigkeit

Analog zur Vorgehensweise bei mehrschichtigen Profilen wurde das Fallbeispiel 4 (s. Kap. A3.4.3.1) mit Comsol bei stationärer Sickerwasserrate (300 mm/a) nachgerechnet. Dabei wurden 2 Modelle verwendet. Die reale Situation wurde durch Eingabe der Stoffdaten für Flüssigphase und Gasphase und originaler Dispersivität (0,4 m) gerechnet. Zusätzlich wurde noch eine Berechnung mit äquivalenten Parametern analog zu ALTEX-1D (ohne Berücksichtigung der Gasphase) durchgeführt. Wie aus Abb. 60 deutlich wird, ergab sich auch hier eine exzellente Übereinstimmung der Ergebnisse von Comsol und ALTEX-1D.

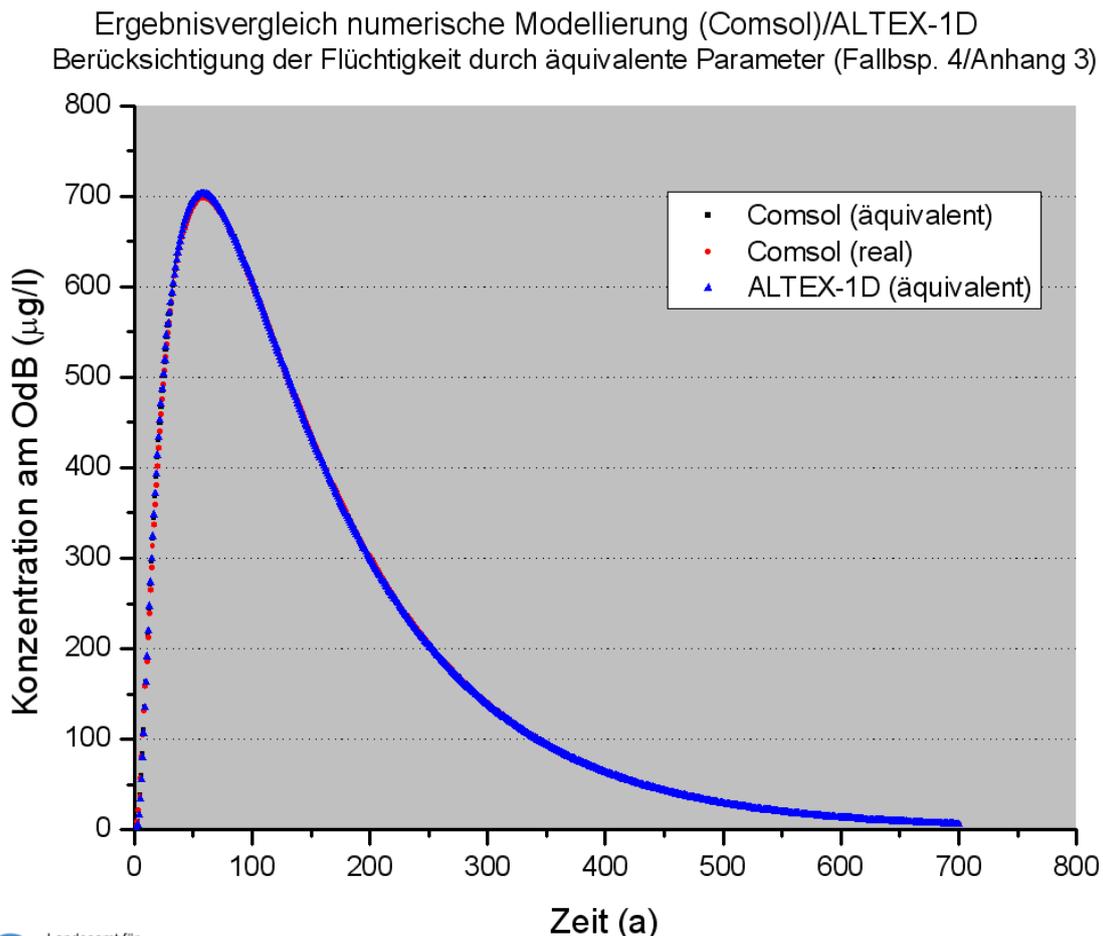


Abb. 60: Vergleich von Ergebnissen von ALTEX-1D und Comsol für das Fallbeispiel 4 (Berücksichtigung der Flüchtigkeit mittels äquivalenter Parameter)

A 3.6.3 Auswirkung linearisierter kd-Werte

Das Sorptionsverhalten von Schwermetallen kann i.d.R am besten durch eine nicht-lineare Freundlich-Isotherme (s. Kap. A 2.4) beschrieben werden. ALTEX-1D kann allerdings nur lineare Sorption berücksichtigen. Im Tabellenblatt kd-Anorganik wird daher aus den Freundlich-Parametern ein linearisierter kd-Wert berechnet. Um zu überprüfen, welche Abweichungen sich daraus ergeben, wurden für das Fallbeispiel 1 (s. Kap. A 3.4.1) Vergleichsrechnungen mit Comsol durchgeführt. Die Berechnungen

mit Comsol wurde sowohl mit den originalen Freundlich-Parametern wie auch mit dem linearisierten kd-Wert durchgeführt. Wie aus Abb. 61 deutlich wird, ergaben sich nur geringe Abweichungen bei Verwendung des linearisierten kd-Wertes anstelle der Freundlich-Parameter.

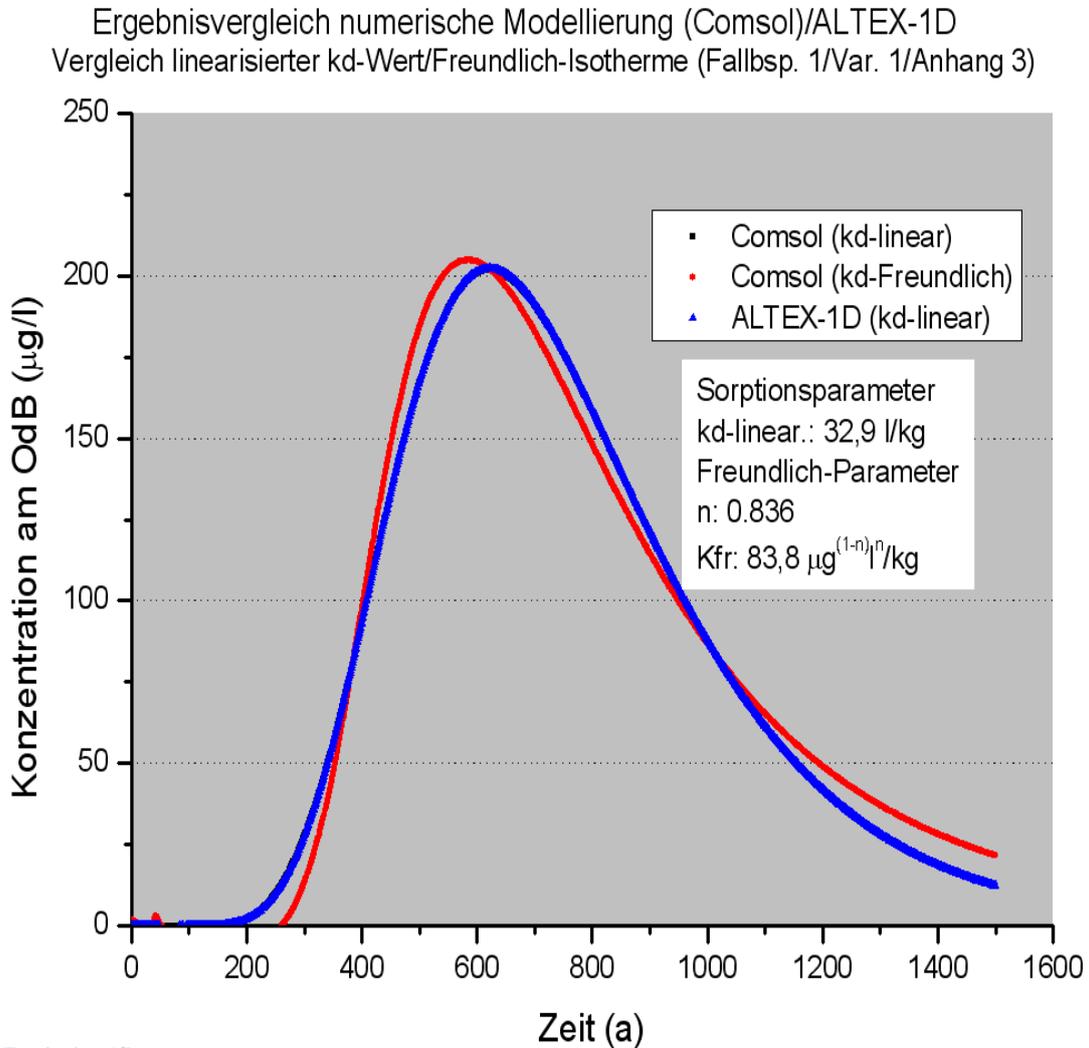


Abb. 61: Vergleich von Ergebnissen von ALTEX-1D und Comsol für das Fallbeispiel 1 (linearisierter kd-Wert im Vergleich mit Freundlich-Isotherme)

A 3.7 Versionsgeschichte ALTEX-1D (Stand Februar 2010)

Die Excel-Anwendung ALTEX-1D wurde als Ergänzung der LABO/ALA-Arbeitshilfe „Sickerwasserprognose bei Detailuntersuchungen“ entwickelt. ALTEX-1D ist eine eigenständige Excel-Datei mit der Bezeichnung ALTEX-1D_verXX.xls.

Version 1.0 (06/07)

Mit Umlaufbeschluss vom 10.8.2005 hat der ALA dem Unterausschuss „Sickerwasserprognose“ den Auftrag erteilt, ein Berechnungsinstrument zur Sickerwasserprognose auf der Grundlage einer Excel-Anwendung zu erstellen. Die erste Version von ALTEX-1D wurde gemeinsam mit der Arbeitshilfe „Sickerwasserprognose bei Detailuntersuchungen“ auf der 35. ALA-Sitzung am 16./17.1. 2007 in Berlin angenommen und an die LABO zur Veröffentlichung weitergeleitet. Die LABO hat auf der 31. Sitzung am 13./14.3.07 die Eignung der Arbeitshilfe für den Vollzug bestätigt und das ACK-Umlaufverfahren zur Veröffentlichung eingeleitet. Mit Umlaufbeschluss Nr. 12/2007 v. 14.5.07 hat die UMK der Veröffentlichung auf der LABO-Homepage zugestimmt und die Arbeitshilfe mit ALTEX-1D zur Anwendung in den Ländern empfohlen.

Version 2.0 (1.3.09)

Aufgrund der Ergebnisse eines in B-W durchgeführten Tests sowie einer Evaluierung verschiedener Programme zur Sickerwasserprognose im Rahmen des BMBF-Förderschwerpunktes „Sickerwasserprognose“ wurde die Eignung von ALTEX-1D für den Vollzug bestätigt. Aus dem Test ergaben sich aber auch konkrete Hinweise auf mögliche Verbesserungen. Mit Bezug darauf hat der ALA in der 36. Sitzung am 12./13.6.07 den Auftrag für die Überarbeitung der Version 1.0 erteilt. Die überarbeitete Fassung wurde vom ALA auf der 39. Sitzung am 20./21.1.09 angenommen und zur Veröffentlichung auf der LABO-Homepage empfohlen. Im März 2009 erfolgte die Veröffentlichung der Version 2.0 auf der LABO-Homepage und der Homepage des LBEG.

Arbeitshilfe: Ah_Du_1208_732_8fa.pdf

ALTEX-1D: Altex-1D_12_2008.xls

Die Veränderungen gegenüber Version 1.0 umfassen folgende Punkte:

- a) Der Fall B (exponentiell abklingende Quellkonzentration) wird jetzt für alle Parameterkombinationen korrekt berechnet. Der Abklingkoeffizient kann jetzt explizit eingegeben werden. Als Anhaltspunkt dient der bisher berechnete Wert. Damit ist es möglich, berechnete Abklingkoeffizienten bspw. aus Säulenversuchen direkt zu übernehmen. Der bisher im Tabellenblatt "Fall B" ausgeblendete Parameter "asymptotische Endkonzentration" wird jetzt angezeigt. Damit können die häufig auftretenden Fälle einer langfristig über dem PW liegenden „Tailing“-Konzentration berücksichtigt werden.
- b) die Probleme mit dem fehlerhaften Abbruch der Berechnung bei sehr langen Laufzeiten wurden behoben.
- c) ALTEX-1D enthält jetzt ein Tabellenblatt "Stoffdaten", das die erforderlichen physikalisch-chemischen Daten zu einer großen Anzahl (159) altlastrelevanter Stoffe (u.a. alle organischen Stoffe, für die ein GFS angegeben ist) enthält. Die Stoffdaten

stammen aus qualitätsgesicherten Datenbanken u.a. aus EPI-Suite/US-EPA, National Institute of Standards and Technology (NIST), CalTOX/US-EPA. Die enthaltenen Stoffdaten wurden erheblich erweitert und umfassen jetzt neben der Wasserlöslichkeit auch die erforderlichen Daten für die Berücksichtigung leichtflüchtiger Stoffe wie Diffusionskoeffizienten in Wasser und Luft, Henry-Konstante und Dampfdruck. Die Stoffdaten werden temperaturabhängig entsprechend einer vom Anwender vorgegebenen Temperatur berechnet. Ein Feld mit einer Klasseneinstufung der Flüchtigkeit gibt einen Hinweis, ob die Flüchtigkeit des Stoffes berücksichtigt werden sollte.

- d) Das bisherige Blatt "Abbau" wurde durch das Blatt "Bio-Abbau" ersetzt. Das Blatt "Bio-Abbau" enthält für alle im Tabellenblatt "Stoffdaten" aufgeführten Stoffe Halbwertszeiten, die mit einer Regressionsbeziehung nach Klein/Fraunhofer aus Biowin-Daten errechnet wurden. Darüber hinaus sind für viele Stoffe zusätzlich noch Halbwertszeiten für unterschiedliche Kompartimente (Wurzelzone, ungesättigte Zone, Grundwasser) angegeben, die dem Programmpaket CalTox entnommen wurden. Die Werte sind im Vergleich mit Biowin meist konservativer und stellen damit eine gute Ergänzung dar, um dem Anwender eine Vorstellung der Bandbreite zu geben, falls er keine eigenen Werte aus Labor- oder Felduntersuchungen zur Verfügung hat
- e) das Blatt "kd-Werte Anorganik" wurde um den Ansatz von "van den Berg und Roels" erweitert. Damit sind jetzt auch Abschätzungen der kd-Werte für die Schwermetalle möglich, für die keine Freundlich-Parameter aus den Pedotransferfaktoren nach BGR/Utermann vorliegen.
- f) ALTEX-1D enthält jetzt ein Tabellenblatt "Äquival" zur Berechnung äquivalenter Parameter, das in Zusammenarbeit mit Prof. Schneider/TU HH entwickelt wurde. Damit können Bodenprofile mit bis zu 10 Schichten und gleichzeitig die Flüchtigkeit von Stoffen berücksichtigt werden. Die Ergebnisse wurden durch Berechnungen mit numerischen Programmen (Hydrus 1D und Comsol Multiphysics) überprüft und bestätigt.
- g) Die überarbeitete Version von ALTEX-1D enthält jetzt ein Tabellenblatt "Feldkap" mit dem die benötigten Eingabeparameter Feldkapazität und Luftkapazität für die in der KA5 aufgeführten Bodenarten (Tab. 70 KA5) einschließlich der Korrekturen für erhöhten Grobbodenanteil oder Humusanteile automatisch berechnet werden.
- h) zur Abschätzung von Quellkonzentrationen bei vorhandenen Kontaminationen mit Phase wurden die Blätter "MKW" und "Teeröl" eingefügt. Sie ermöglichen eine einfache Abschätzung der Gleichgewichtskonzentration für Stoffgemische wie Mineralölprodukte (Benzin, Diesel) oder unterschiedliche Teeröle unter Berücksichtigung der Stoffgemischzusammensetzung nach Raoult, wenn Daten aus Laboruntersuchungen (Säulenversuche) nicht vorliegen.
- i) Als Anhaltspunkt zur einfachen Abschätzung der Sickerwasserrate/Grundwasserneubildung wurde das Blatt "GWN" eingefügt. Damit kann eine grobe Abschätzung der Grundwasserneubildung nach der Methode von Beims&Gutt (Sachsen) vorgenommen werden, wenn genauere Daten zur Anwendung von DIN 19687 bzw. des TUB-BGR- Verfahrens nicht vorliegen.

- j) Im Tabellenblatt "Wertetabelle" wird jetzt für den Fall B (abklingender Quellterm) auch die zeitliche Entwicklung der Quellkonzentration angegeben.
- k) ALTEX-1D enthält jetzt ein Berechnungsblatt "Konz-GW". Damit kann aus dem Ergebnis der Sickerwasserprognose eine Konzentration im Grundwasser (als tiefengemittelte Konzentration über eine vorzugebende Aquifermächtigkeit) abgeschätzt werden. Das Ergebnis kann herangezogen werden, um im Rahmen eines iterativen Prozesses einen Verdünnungsfaktor für eine Rückrechnung der Konzentration am OdB aus im Grundwasser gemessenen Konzentrationen abzuschätzen. Der Anwender bekommt darüber hinaus auch einen Anhaltspunkt, ob durch die in das Grundwasser eingetragene Sickerwasserfracht eine Überschreitung der Geringfügigkeitsschwellen im Grundwasser und damit ggfs. ein Grundwasserschaden droht.
- l) Es wurde ein Tabellenblatt "GFS" eingefügt, das die Geringfügigkeitsschwellenwerte der LAWA enthält.

Die Arbeitshilfe insbesondere der Anhang 3 (Anleitung zu ALTEX-1D) wurde entsprechend den Änderungen in ALTEX-1D angepasst und um zusätzliche Fallbeispiele erweitert.

Die folgenden Aktualisierungen wurden ausschließlich auf der Homepage des LBEG vorgenommen. Im pdf-Dokument der Arbeitshilfe ist die jeweilige Version aus dem auf Seite 2 unten links aufgeführten Datum ersichtlich.

Version 2.1 (17.4.2009)

- Im Tabellenblatt „Äquival“ wurde eine fehlerhafte Formel bei der Berücksichtigung leichtflüchtiger Stoffe korrigiert;
- Arbeitshilfe mit Anhang 3 an die Änderungen angepasst.

Version 2.2 (23.6.2009) nicht auf der LBEG-Homepage veröffentlicht

- Fehlerhafte Formel bei Berechnung des Diffusionskoeffizienten korrigiert;
- Fehlermeldungen im Tabellenblatt „GW-Konz“ abgefangen;
- Formatierung der Spalte C im Tabellenblatt „kd-Organik“ auf Exponentialformat umgestellt;
- Anpassung der Schrittweite bei der Berechnung des Konzentrationsverlaufes wegen Abbrüchen aufgrund Überschreitung der maximalen Zeilenzahl im Tabellenblatt „Wertetabelle“ bei langen Zeiträumen.

Version 2.3 (23.10.2009)

- Anzeige der Versions-Nr. in allen Tabellenblättern;
- Anzeige des PW in der Graphikausgabe und in der Wertetabelle;
- Beschriftung der Graphik-Ausgabe verbessert;
- Schrittweitensteuerung für Berechnung der Konzentrationsentwicklung verbessert;
- Fehlerhafte Formel bei der Berechnung des äquivalenten kd-Wertes im Tabellenblatt „Äquival“ korrigiert;
- Arbeitshilfe mit Anhang 3 an die Änderungen angepasst.

Version 2.4 (23.02.2010)

- fehlerhafte Formeln (bei Humusgehalten > 15% falsche Zuschlagswerte) in Spalte F des Tabellenblattes „Feldkap“ korrigiert;
- fehlerhafte Formeln in Zellen M15, M16 und M205 des Tabellenblattes „Stoffdaten“ korrigiert;
- Fehlermeldungen im Tabellenblatt „GW-Konz“ abgefangen;
- missverständliche Parametereingabe bei Fällen mit asymptotischer Endkonzentration im Tabellenblatt „Fall B“ korrigiert. Die initiale Quellkonzentration entspricht jetzt der Summe der asymptotischen Endkonzentration und dem exponentiell abfallenden Quellterm. Damit ist sichergestellt, dass sich die Quellkonzentration bei langen Zeiträumen asymptotisch dem Wert der asymptotischen Endkonzentration annähert (bisher Abfall auf 0). Die Prinzipskizze im Tabellenblatt wurde angepasst;
- Im Programmablauf für den Fall B wurde eine Überprüfung der Massenbilanz (Vergleich der emittierten Masse mit dem mobilisierbaren Vorrat) eingebaut. Die Berechnung wird jetzt abgebrochen, wenn die emittierte Masse den mobilisierbaren Vorrat überschreitet;
- Die Ergebnisausgabe in beiden Tabellenblättern „Fall A“ und „Fall B“ wurde um zusätzliche Parameter (Schadstoffemission Quelle, mobilisierbare Masse, mittl. Emissionsstärke GW) erweitert und neu strukturiert. Bei Abbruch der Berechnung wird jetzt die Abbruchursache in einem eigenen Ausgabefeld angegeben;
- In beiden Tabellenblättern „Fall A“ und „Fall B“ kann jetzt eine Vorbelastung der Transportstrecke durch Eingabe einer Anfangskonzentration berücksichtigt werden;
- Änderung der Einheiten für die Sättigungskonzentration $C_{i,sat}$ von mg/l auf $\mu\text{g/l}$ in den Tabellenblättern „Teeröl“ und „MKW“;
- Graphikausgabe ergänzt um Versions-Nr, Schadstoff/Fallkonstellation, Dateibezeichnung und Datum;
- Formatierungen in den Tabellenblättern angepasst;
- Registerblätter eingefärbt (gelb: Eingabeblätter, rot: Ausgabeblätter, grün: Hilfstabellenblätter);
- Kommentare in ausgewählten Zellen der Tabellenblätter „Fall A“ und „Fall B“ eingefügt;
- Tabellenblatt „Konz-GW“ an veränderte Ausgabestruktur „Fall A“ und „Fall B“ angepasst;
- „Sanduhr“-Anzeige während Laufzeit der Berechnung eingebaut;
- Stoffdatenblatt, sowie die Tabellenblätter „Bio-Abbau“ und „kd-Organik“ wurde um zusätzliche organische Stoffe erweitert;
- Neues Tabellenblatt „Schadstoffmasse“ zur Berechnung der Schadstoffmasse aus Ergebnissen von Bodenuntersuchungen nach Anhang A1.3 der AH-DU eingefügt;
- Tabellenblatt „GWN“ umbenannt in „SWR_GWN“
- Anhang 3 der Arbeitshilfe DU (Benutzungsanleitung ALTEX-1D) überarbeitet und in eigenständiges Dokument überführt
- Arbeitshilfe DU aktualisiert