

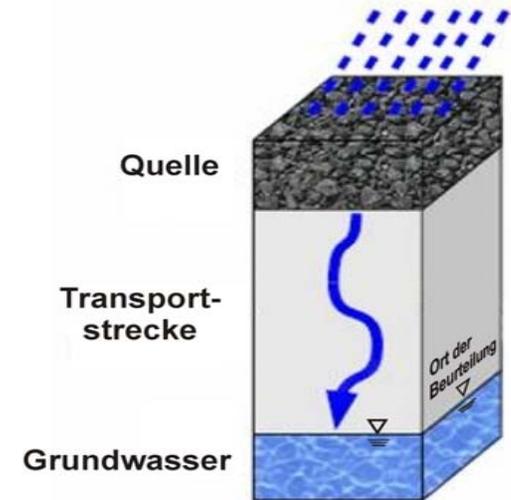
Sickerwasserprognose in der Altlastenbearbeitung

1

Teil 3b:

Vorstellung von ALTEX-1D (Teil 2)

- Berücksichtigung mehrschichtiger Bodenprofile
- Berücksichtigung der Flüchtigkeit
- Auswirkung von Parametervariationen
- Bewertung der Ergebnisse im Hinblick auf die Gefahr für das Grundwasser
- Ergebnisse der Validierung
- Fazit



Dipl.-Ing. B. Engeser (LBEG)

Stand Februar 2010

1D-Advektions-Dispersions-Transportgleichung

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

Analytische Lösung (ALTEX-1D) nur für **homogenen Aufbau** mit **einheitlichen Parametern** möglich

Lösung für mehrschichtigen Aufbau



Berücksichtigung der Parameter der Einzelschichten durch einen Ersatzwert mit Hilfe von **äquivalenten Parametern**

benötigt werden:

- äquivalente Trockenraumdichte: $\rho_b\text{-}\ddot{a}q$
- äquivalente Feldkapazität: $\theta_{FK}\text{-}\ddot{a}q$
- äquivalenter k_d -Wert: $kd\text{-}\ddot{a}q$

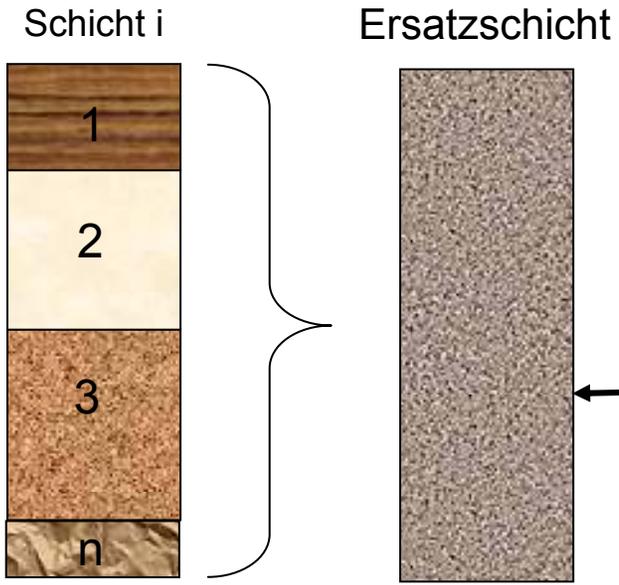
bei Berücksichtigung der Flüchtigkeit zusätzlich:

- äquivalenter Dispersivitätsskalenfaktor: $fd\text{-}\ddot{a}q$
- äquivalente Luftkapazität: $\theta_{LK}\text{-}\ddot{a}q$

Berechnung von
 $R\text{-}\ddot{a}q, D_z\text{-}\ddot{a}q, v_z\text{-}\ddot{a}q$

Analytische Lösung

Abbaukoeffizient λ wird für die Einzelschichten als gleich angenommen



Ableitung nach Schneider (2008)



Ermittlung der äquivalenten Parameter für mehrschichtige Profile

äquivalente Feldkapazität

äquivalente Trockenraumdichte

Schritt 1

$$\theta_{FK}^{\ddot{a}q} = \sum_{i=1}^n \frac{\theta_{FK}^i \cdot m_i}{z_s}$$

$$\rho_b^{\ddot{a}q} = \sum_{i=1}^n \frac{\rho_b^i \cdot m_i}{z_s}$$

Mächtigkeitsgewichteter Mittelwert der Einzelschichten

Verweilzeit in der Transportstrecke

Schritt 2:

$$t_{siwa} = \frac{\sum_{i=1}^n m_i \cdot \theta_{FK}^i}{SWR}$$

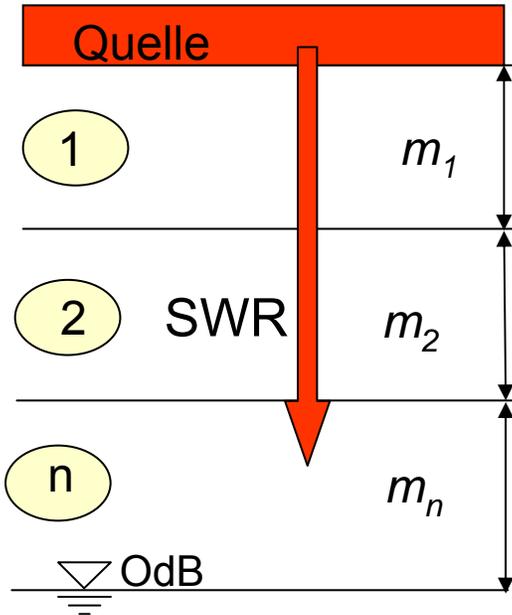
$$t_{stoff} = \frac{\sum_{i=1}^n (m_i \cdot \theta_{FK}^i \cdot R^i)}{SWR}$$

$\theta_{FK}^{\ddot{a}q}$: äquivalente Feldkapazität
 θ_{FK}^i : Feldkapazität Schicht i
 $\rho_b^{\ddot{a}q}$: äquivalente Trockenraumdichte
 ρ_b^i : Trockenraumdichte Schicht i
 m_i : Mächtigkeit Schicht i
 z_s : Länge Sickerstrecke

n : Anzahl der Schichten
 R^i : Retardationsfaktor Schicht i
 $R^{\ddot{a}q}$: äquivalenter Retardationsfaktor
 t_{stoff} : Verweildauer Sickerwasser in der Transportstrecke
 t_{siwa} : Verweildauer Schadstoff in der Transportstrecke
 SWR : Sickerwasserrate



Schritt 2: Verweilzeiten bei geschichtetem Aufbau



Verweilzeit des Sickerwassers

$$t_{siwa,1} = \frac{m_1 \cdot \theta_{FK,1}}{SWR}$$

$$t_{siwa,2} = \frac{m_2 \cdot \theta_{FK,2}}{SWR}$$

$$t_{siwa,n} = \frac{m_n \cdot \theta_{FK,n}}{SWR}$$

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

Verweilzeit des Schadstoffes

$$t_{stoff,1} = \frac{m_1 \cdot \theta_{FK,1} \cdot R_1}{SWR}$$

$$t_{stoff,2} = \frac{m_2 \cdot \theta_{FK,2} \cdot R_2}{SWR}$$

$$t_{stoff,n} = \frac{m_n \cdot \theta_{FK,n} \cdot R_n}{SWR}$$

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



Ermittlung der äquivalenten Parameter für mehrschichtige Profile

äquivalente Feldkapazität

äquivalente Trockenraumdichte

Schritt 1

$$\theta_{FK}^{\ddot{a}q} = \sum_{i=1}^n \frac{\theta_{FK}^i \cdot m_i}{z_s}$$

$$\rho_b^{\ddot{a}q} = \sum_{i=1}^n \frac{\rho_b^i \cdot m_i}{z_s}$$

Mächtigkeitsgewichteter Mittelwert der Einzelschichten

Verweilzeit in der Transportstrecke

Schritt 2:

$$t_{siwa} = \frac{\sum_{i=1}^n m_i \cdot \theta_{FK}^i}{SWR}$$

$$t_{stoff} = \frac{\sum_{i=1}^n (m_i \cdot \theta_{FK}^i \cdot R^i)}{SWR}$$

äquivalenter Retardationsfaktor

äquivalenter kd-Wert

Schritt 3:

$$R^{\ddot{a}q} = \frac{t_{stoff}}{t_{siwa}}$$

$$kd^{\ddot{a}q} = \frac{(R^{\ddot{a}q} - 1) \cdot \theta_{FK}^{\ddot{a}q}}{\rho_b^{\ddot{a}q}}$$

$\theta_{FK}^{\ddot{a}q}$: äquivalente Feldkapazität
 θ_{FK}^i : Feldkapazität Schicht i
 $\rho_b^{\ddot{a}q}$: äquivalente Trockenraumdichte
 ρ_b^i : Trockenraumdichte Schicht i
 m_i : Mächtigkeit Schicht i
 z_s : Länge Sickerstrecke

n : Anzahl der Schichten
 R^i : Retardationsfaktor Schicht i
 $R^{\ddot{a}q}$: äquivalenter Retardationsfaktor
 t_{stoff} : Verweildauer Sickerwasser in der Transportstrecke
 t_{siwa} : Verweildauer Schadstoff in der Transportstrecke
 SWR : Sickerwasserrate

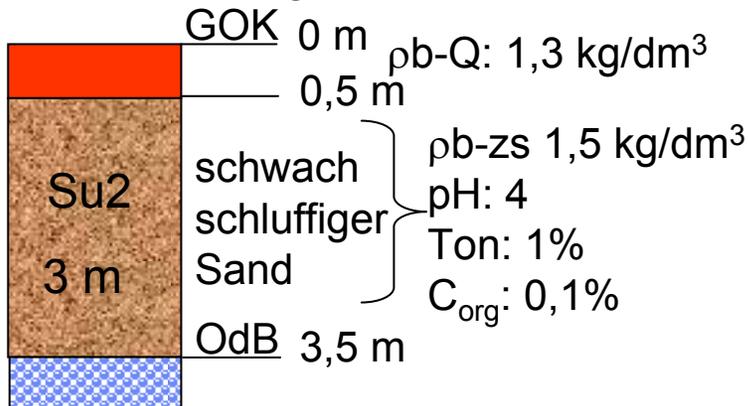


Fallbeispiel 1/1a (Anhang 3/A3.4.3.2 Arbeitshilfe DU): :

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. Cadmium liegt in Form von Cadmiumsulfid-Pigmentresten vor (**Fall A**)

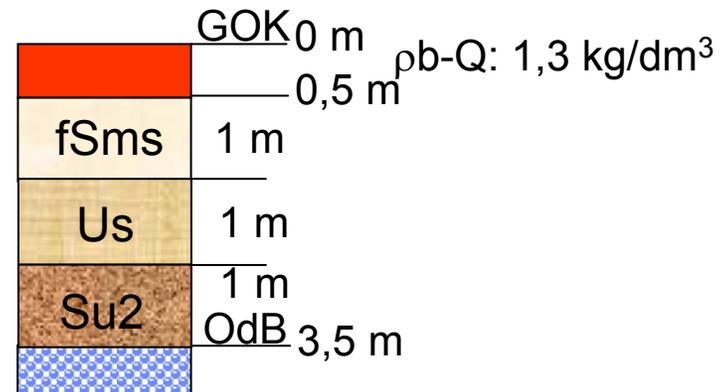
Fallbsp. 1

einschichtiger Aufbau



Fallbsp. 1a

mehrschichtiger Aufbau



Bodenparameter Fallbsp. 1a

Bodenart	Mächtigkeit	Trockenraum-dichte	Feldkapazität	pH	C _{org}	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



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

3schichtig

Äquivalente
Parameter aus
Tabellenblatt
Äquival



Dateneingabe im Tabellenblatt „Äquival“ bei mehrschichtiger Transportstrecke

	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 Mächtigkeitswert angegeben ist. Wenn ein Mächtigkeitswert 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			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/dm ³)	(l/ka)	
22	1							
23	2							
24	3							
25	4							
26	5							
27	6							
28	7							
29	8							
30	9							
31	10							
32	Summe/äquiv.							
33								
34	Äquivalente Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
35	Feldkapazität	FK-äq	(%)					
36	Luftkapazität	LK-äq	(%)					
37	Trockenraumdichte	ρb-zs-äq	(kg/dm ³)					
38	lin. Verteilungskoeff.	kd-äq	(l/kg)					
39	Retardationsfaktor	R-äq	(-)					
40	Tortuosität Bodenwasser	τw-äq	(-)					
41	Tortuosität Bodenluft	τg-äq	(-)					
42	Sickerwassergeschwindigkeit	vsm-äq	(m/a)					
43	longitudinale Dispersivität	αz	(m)					
44	mechanische Dispersion	Dmech	(m ² /a)					
45	molekulare Diffusion	Dmol	(m ² /a)					
46	Dispersion Verflüchtigung	Dvol	(m ² /a)					
47	Dispersionskoeffizient	Dz-äq	(m ² /a)					
48	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd-äq	(-)					

Eingabe der Basiswerte aus dem Tabellenblatt A oder B (für nicht-flüchtige Stoffe Eingabewert Stoffdaten = 0)

Eingabe der Bodenparameter für die Einzelschichten (für nicht-flüchtige Stoffe Luftkapazität = 0 eingeben)

Die Werte der rot unterlegten Zellen sind in die Eingabeblätter Fall A bzw. Fall B zu übertragen



Ermittlung der Feldkapazität für die Einzelschichten des Beispiels 1a

	A	B	C	D	G	I
14						
15	Bodenart	Trocken- rohdichte	Grobboden- Anteil	Humusgehalt	Feldkapazität	Luftkapazität
16		pt	Korngröße>2 mm		n. Tab. 70	n. Tab. 70
17		(kg/dm³)	(Vol %)	(Masse %)	(Vol %)	(Vol %)
18						
19	Ss	1,5	0	0	11	32
20	SI2	1,5	0	0	25	18
21	SI3	1,5	0	0	27	15
22	SI4	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	1,6	0	0	32	4
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	20	0	6,4	33
54						

aus Standortbeschreibung

Schicht 3

Schicht 2

Schicht 1

übernehmen in Äquival



Dateneingabe im Tabellenblatt „Äquival“ bei mehrschichtiger Transportstrecke

	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 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)							
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				
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/dm ³)	(l/kg)	
22	1	fSms	1	14	0	1,5		
23	2	Us	1	32	0	1,6		
24	3	Su2	1	23	0	1,5		
25	4							
26	5							
27	6							
28	7							
29	8							
30	9							
31	10							
32	Summe/äquiv.							
34	Äquivalente Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
35	Feldkapazität	FK-äq	(%)					
36	Luftkapazität	LK-äq	(%)					
37	Trockenraumdichte	ρb-zs-äq	(kg/dm ³)					
38	lin. Verteilungskoeff.	kd-äq	(l/kg)					
39	Retardationsfaktor	R-äq	(-)					
40	Tortuosität Bodenwasser	τw-äq	(-)					
41	Tortuosität Bodenluft	τg-äq	(-)					
42	Sickerwassergeschwindigkeit	vsm-äq	(m/a)					
43	longitudinale Dispersivität	αz	(m)					
44	mechanische Dispersion	Dmech	(m ² /a)					
45	molekulare Diffusion	Dmol	(m ² /a)					
46	Dispersion Verflüchtigung	Dvol	(m ² /a)					
47	Dispersionskoeffizient	Dz-äq	(m ² /a)					
48	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd-äq	(-)					

Übernahme der Feldkapazitäts-Werte

Ermittlung der kd-Werte für die Einzelschichten mit dem Tabellenblatt Äquival

Die Werte der rot unterlegten Zellen sind in die Eingabeblätter Fall A bzw. Fall B zu übertragen



Ermittlung der kd-Werte für die Einzelschichten des Beispiels 1a

Schicht 1: fSms

9	A	B	C	G	H	I	J	L	N	O		
10	Freundlich-F BGR/2005)			Bodenkenngrößen				Linear. Freundlich-Isotr.				
11	Element	Sym	Tab. BGR	c (log Corg)	n-Freundlich	pH	C _{org} (%)	Ton (%)	K _d -Freundlich (µg ⁽¹⁻ⁿ⁾ ·l ⁿ /kg)	¹ c _{si} (=Quellk.) µg/l	k _d -linearisiert (l/kg)	
12												
13	Cadmium	Cd	pH	C _{org}	Ton-gehalt	0,836	4,0	0,10	0,5	5,7	500,0	2,2
14	Chrom(III)	Cr				0,799	6,0	0,10	10,0	1230,3	500,0	391,4
15	Kupfer	Cu				0,758	6,0	0,10	10,0	1465,5	500,0	369,6
16	Molybdän	Mo							115,6	500,0	14,0	
17	Nickel	Ni		(%)	(%)				206,5			
18	Blei	Pb							19408,9			
19	Antimon	Sb	4	0,1	0,5	0,846	6,0	0,10	10,0	46,0		
20	Thallium	Tl				0,857	6,0	0,10	10,0	553,4		
21	Zink	Zn	5	0,5	5	0,575	6,0	0,10	10,0	1244,5	5000,0	42,1
22												¹ Vorgabewert: 10*PW

kd-Wert in Äquival übernehmen

pH	C _{org}	Ton-gehalt
4	0,1	0,5
5	0,5	5
4	0,1	1

aus Schichtbeschreibung

Quellkonzentration einsetzen

Schicht 2: Us

9	A	B	C	G	H	I	J	L	N	O		
10	Freundlich-F BGR/2005)			Bodenkenngrößen				Linear. Freundlich-Isotr.				
11	Element	Sym	Tab. BGR	c (log Corg)	n-Freundlich	pH	C _{org} (%)	Ton (%)	K _d -Freundlich (µg ⁽¹⁻ⁿ⁾ ·l ⁿ /kg)	¹ c _{si} (=Quellk.) µg/l	k _d -linearisiert (l/kg)	
12												
13	Cadmium	Cd	Tab. 3.2.6	0,376	0,836	5,0	0,50	5,0	90,7	500,0	35,7	
14	Chrom(III)	Cr	Tab. 3.2.6		0,799	6,0	0,10	10,0	1230,3	500,0	391,4	
15	Kupfer	Cu	Tab. 3.2.6		0,758	6,0	0,10	10,0	1465,5	500,0	369,6	
16	Molybdän	Mo	Tab. 3.2.11						115,6	500,0	14,0	
17	Nickel	Ni	Tab. 3.2.6	0,226					206,5			
18	Blei	Pb	Tab. 3.2.11						19408,9			
19	Antimon	Sb	Tab. 3.2.6	-0,292	0,846	6,0	0,10	10,0	46,0			
20	Thallium	Tl	Tab. 3.2.11		0,857	6,0	0,10	10,0	553,4			
21	Zink	Zn	Tab. 3.2.6	0,27	0,575	6,0	0,10	10,0	1244,5	5000,0	42,1	
22												¹ Vorgabewert: 10*PW

kd-Wert in Äquival übernehmen

aus Schichtbeschreibung

Quellkonzentration einsetzen

Schicht 3: Su2

9	A	B	C	G	H	I	J	L	N	O		
10	Freundlich-F BGR/2005)			Bodenkenngrößen				Linear. Freundlich-Isotr.				
11	Element	Sym	Tab. BGR	c (log Corg)	n-Freundlich	pH	C _{org} (%)	Ton (%)	K _d -Freundlich (µg ⁽¹⁻ⁿ⁾ ·l ⁿ /kg)	¹ c _{si} (=Quellk.) µg/l	k _d -linearisiert (l/kg)	
12												
13	Cadmium	Cd	Tab. 3.2.6	0,376	0,836	4,0	0,10	1,0	7,6	500,0	3,0	
14	Chrom(III)	Cr	Tab. 3.2.6		0,799	6,0	0,10	10,0	1230,3	500,0	391,4	
15	Kupfer	Cu	Tab. 3.2.6		0,758	6,0	0,10	10,0	1465,5	500,0	369,6	
16	Molybdän	Mo	Tab. 3.2.11						115,6	500,0	14,0	
17	Nickel	Ni	Tab. 3.2.6	0,226					206,5			
18	Blei	Pb	Tab. 3.2.11						19408,9			
19	Antimon	Sb	Tab. 3.2.6	-0,292	0,846	6,0	0,10	10,0	46,0			
20	Thallium	Tl	Tab. 3.2.11		0,857	6,0	0,10	10,0	553,4			
21	Zink	Zn	Tab. 3.2.6	0,27	0,575	6,0	0,10	10,0	1244,5			
22												¹ Vorgabewert: 10*PW

kd-Wert in Äquival übernehmen

aus Schichtbeschreibung

Quellkonzentration einsetzen

achsen

Dateneingabe im Tabellenblatt „Äquival“ bei mehrschichtiger Transportstrecke

	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 Mächtigkeitswert angegeben ist. Wenn ein Mächtigkeitswert 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			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/dm ³)	(l/ka)	
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.							
33								
34	Äquivalente Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
35	Feldkapazität	FK-äq	(%)	23,000				
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				

Übernahme der kd-Werte der Einzelschichten

Die Werte der rot unterlegten Zellen sind in die Eingabeblätter Fall A bzw. Fall B zu übertragen

Werte in den rot unterlegten Zellen in Tabellenblatt A oder B übernehmen. (Dispersivitäts-Skalenfaktor ändert sich nur bei Berücksichtigung leichtflüchtiger Stoffe)

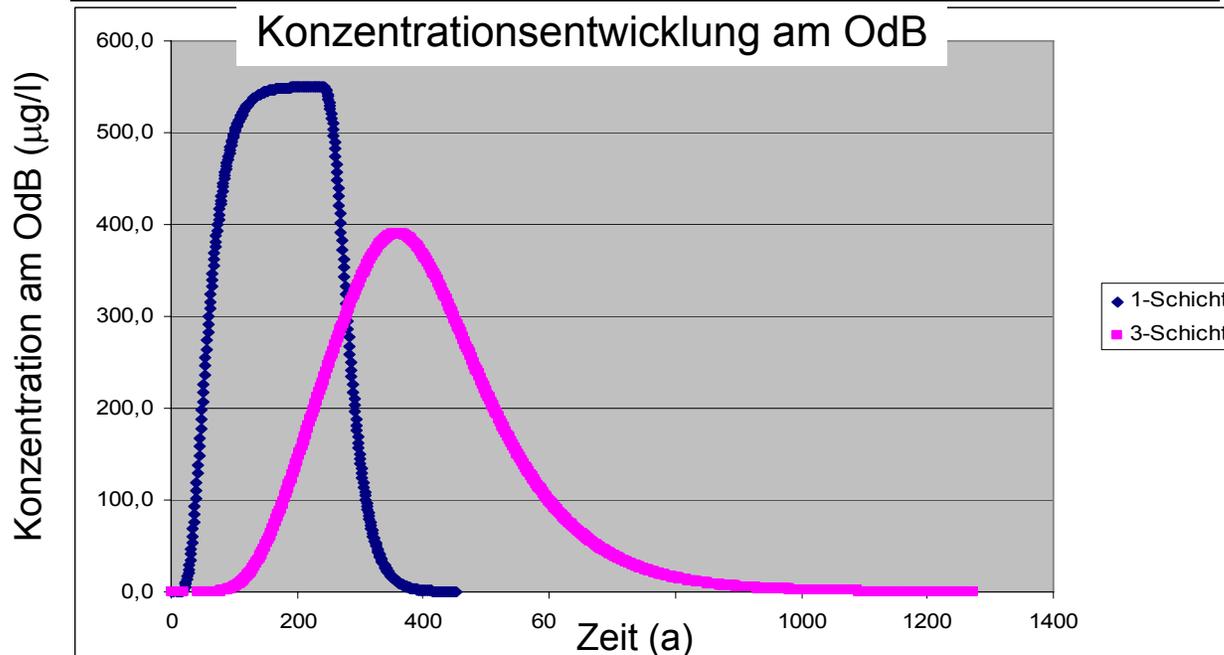


	A	B	C	D	E
3				Fallbsp. 1/AH	Fallbsp. 1/AH
4				einschichtig	dreischichtig
5	Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	Wert
6	Schadstoff			Cadmium	Cadmium
7	Prüfwert BBodSchV oder GFS	PW oder GFS	µg/l	5,00	5,00
8	Kontaminierte Fläche	F	m ²	1700,0	1700,0
9	Ort der Beurteilung (u.GOK)	OdB	m	3,5	3,5
10	Oberkante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

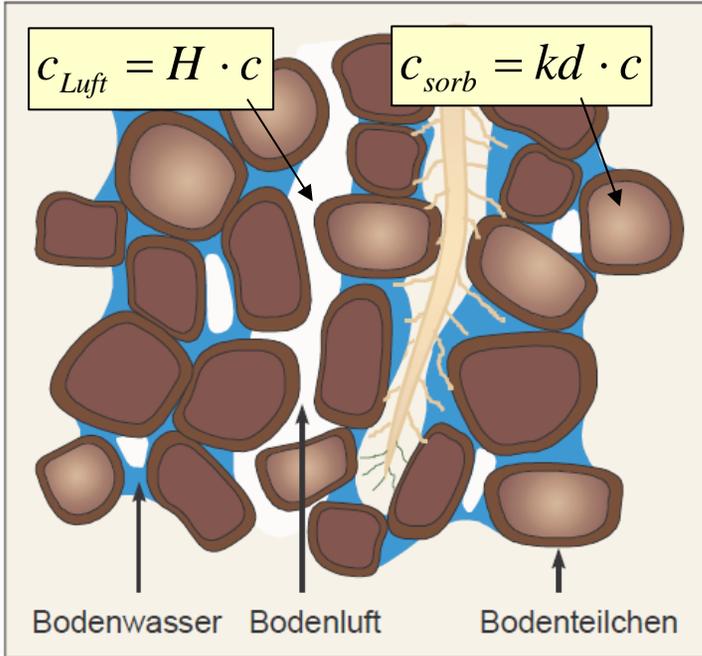
Äquivalente Parameter aus Tabellenblatt Äquival



			Fallbsp.1 einschichtig	Fallbsp.1a dreischichtig
max. Konzentration	c_{max}	$\mu\text{g/l}$	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}	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	137,5	97,6
mittl. Emissionsstärke GW	$J_{s2mittel}$	$\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{a})$	87,1	37,7
mobilisierbare Masse	M_{mob}	kg	52,598	52,598
Abbruchkriterium				



3-Phasensystem Boden



1D-Advektions-Dispersions-Transportgleichung

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

Schritt 1: Äquivalenter k_d -Wert

mit Verflüchtigung

ohne Verflüchtigung

$$R_{flucht} = \frac{\rho_b \cdot k_d}{\theta_{FK}} + 1 + \frac{\theta_{LK} \cdot H}{\theta_{FK}}$$

$$R = \frac{\rho_b \cdot k_d}{\theta_{FK}} + 1$$

$$t_{flucht} = \frac{z_s \cdot \theta_{FK} \cdot R_{flucht}}{SWR}$$

$$t_{siwa} = \frac{z_s \cdot \theta_{FK}}{SWR}$$

$$R_{\ddot{a}q} = \frac{t_{flucht}}{t_{siwa}}$$

$$k_d^{\ddot{a}q} = (R_{\ddot{a}q} - 1) \cdot \frac{\theta_{FK}}{\rho_b}$$

$$M_{Gesamt} = \underbrace{c \cdot \theta_w}_{\text{Sickerwasser}} + \underbrace{c_{Luft} \cdot \theta_{Luft}}_{\text{Bodenluft}} + \underbrace{c_{sorb} \cdot (1-n) \cdot \rho_s}_{\text{sorbiert}}$$

c : Konzentration Sickerwasser

c_{Luft} : Konzentration Bodenluft

c_{sorb} : sorbierte Konzentration

$\theta_w = \theta_{FK}$: Feldkapazität

$\theta_{Luft} = \theta_{LK}$: Luftkapazität

H: Henry-Konstante

k_d : linearer Sorptionskoeffizient

n : Gesamtporosität ($\theta_{FK} + \theta_{LK}$)

ρ_b : Trockenraumdichte

SWR: Sickerwasserrate

z_s : Länge Transportstrecke

R: Retardationsfaktor

t_{siwa} : Verweilzeit Sickerwasser Transportstrecke

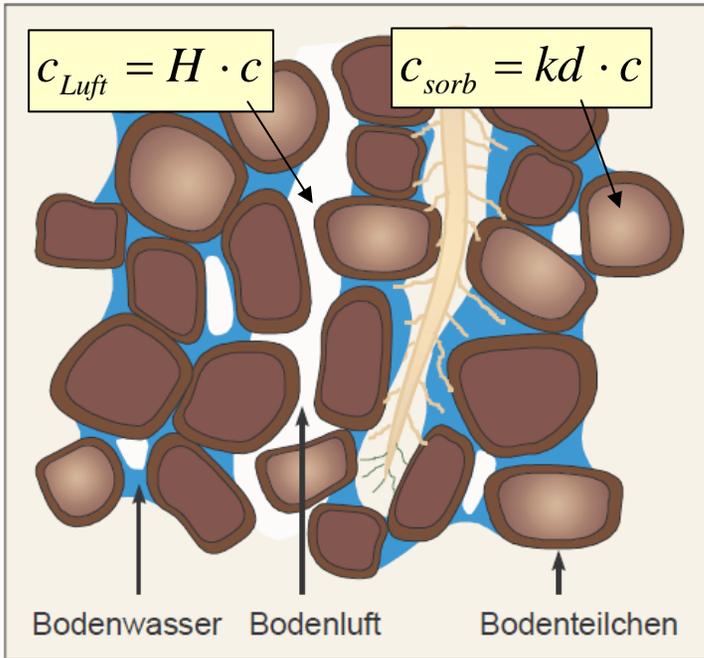
t_{flucht} : Verweilzeit Schadstoff Transportstrecke

D_z : longitudinaler Dispersionskoeffizient

Ableitung nach Schneider (2008)



3-Phasensystem Boden



1D-Advektions-Dispersions-Transportgleichung

$$R \cdot \frac{\delta c}{\delta t} = D_z \cdot \frac{\delta^2 c}{\delta z^2} - v_z \cdot \frac{\delta c}{\delta z} - \lambda \cdot c$$

Schritt 2: Äquivalenter Dispersionskoeffizient mit Verflüchtigung ohne Verflüchtigung

$$D_z^{äqui} = D_z^{siwa} + \frac{H}{\theta_{FK}} D_L^{eff} \cdot \theta_{LK}$$

$$D_z^{siwa} = \alpha_z \cdot v_z + D_W^{eff} \quad D_L^{eff} = D_{Luft} \cdot \tau_L$$

$$D_W^{eff} = D_W \cdot \tau_W$$

Tortuosität Wasser/Luft

$$\tau_W = \frac{\theta_{FK}^{7/3}}{(\theta_{FK} + \theta_{LK})^2}$$

$$\tau_L = \frac{\theta_{LK}^{7/3}}{(\theta_{FK} + \theta_{LK})^2}$$

$$f_d^{äq} = \frac{D_z^{äq}}{z_s \cdot v_z}$$

$$D_z = \alpha_z \cdot v_z$$

$$\alpha_z = f_d \cdot z_s$$

$$D_z = f_d \cdot z_s \cdot v_z$$

$$v_z = \frac{SWR}{\theta_{FK}}$$

$$M_{Gesamt} = \underbrace{c \cdot \theta_W}_{\text{Sickerwasser}} + \underbrace{c_{Luft} \cdot \theta_{Luft}}_{\text{Bodenluft}} + \underbrace{c_{sorb} \cdot (1-n) \cdot \rho_b}_{\text{sorbiert}}$$

- c: Konzentration Sickerwasser
- c_{Luft} : Konzentration Bodenluft
- c_{sorb} : sorbierte Konzentration
- $\theta_W = \theta_{FK}$: Feldkapazität
- $\theta_{Luft} = \theta_{LK}$: Luftkapazität
- H: Henry-Konstante
- k_d : linearer Sorptionskoeffizient
- SWR: Sickerwasserrate

- n: Gesamtporosität ($\theta_{FK} + \theta_{LK}$)
- ρ_b : Trockenraumdicke
- z_s : Länge Transportstrecke
- f_d : Skalenfaktor Dispersivität
- α_z : long. Dispersivität
- R: Retardationsfaktor

- D_z : longitudinaler Dispersionskoeffizient
- τ_W : Tortuosität Wasser
- τ_L : Tortuosität Luft
- D_{Luft} : Diffusionskoeffizient Luft
- D_{Wasser} : Diffusionskoeffizient Wasser

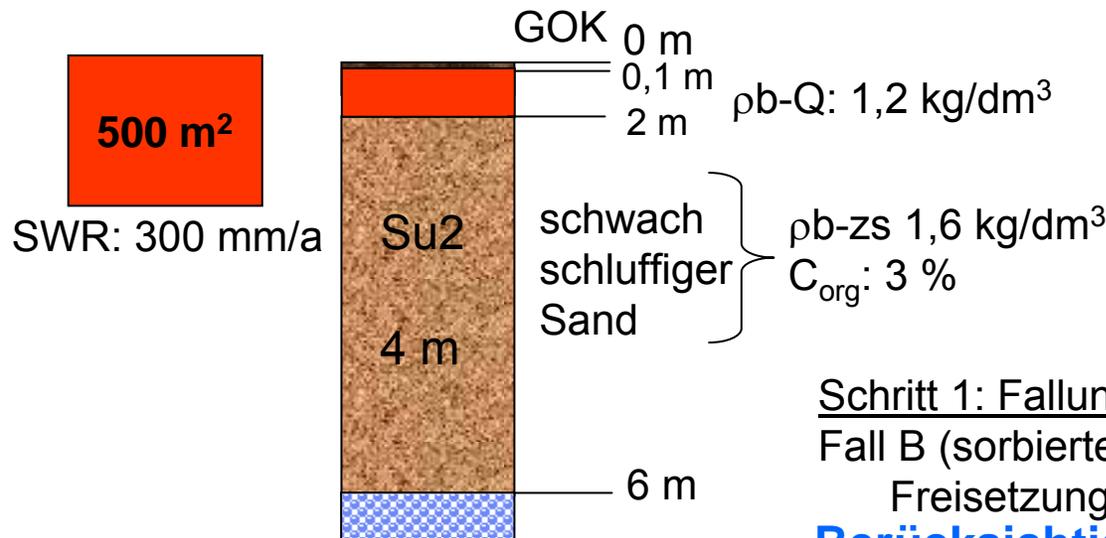


Fallbeispiel 4

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 (Corg: 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 $300 \text{ } \mu\text{g/l}$.

Standortbeschreibung**Beschreibung der Quelle**

Trichlorethen sorptiv gebunden in schluffig-humoser Schicht

Gesamtgehalt: 55 mg/kg

Mobilisierbarer Anteil: 100%

Quellkonzentration: $3260 \text{ } \mu\text{g/l}$
(Gleichgewichtskonzentration Bodenluft)

Schritt 1: Fallunterscheidung

Fall B (sorbierter Schadstoff/desorptionslimitierte Freisetzung)

Berücksichtigung der Flüchtigkeit

ALTEX-1D – Dateneingabe/Fallbeispiel 4 mit Berücksichtigung der Flüchtigkeit ¹⁸

	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	m²	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	
14	Trockenraumdichte Quelle	ρ_{b-Q}	kg/dm³	1,20	1,20
15	Trockenraumdichte Transports	ρ_{b-zs}	kg/dm³	1,60	
17	Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	55,000	55,000
18	Gesamtmasse Quelle	M_{Su,1}	kg	62,700	62,700
19	Mobilisierbarer Anteil	M₁	%	100,0	100,0
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	
32	long. Dispersivität	α_l	m	0,400	4,348
33	long. Disp.koeff.	D_l	m²/a	0,444	4,831
35	lin. Verteilungskoeff.	k_d	l/kg	2,033	
36	Retardationsfaktor	R		13,0	13,2
37	Halbwertszeit Abbau	T_{1/2}	a	2,550	2,550
38	Abbaukoeff. λ	λ	1/a	0,272	0,272

Hinweis:

bei Berücksichtigung der Flüchtigkeit in ALTEX-1D wird nur die Auswirkung durch die Verteilung des Schadstoffs auf die 3 Phasen Bodenfeststoff/Sickerwasser/Bodenluft berücksichtigt, **jedoch nicht die Verluste durch Ausgasung aus der Bodenluft zur Oberfläche** (konservativer Ansatz)!

Äquivalente Parameter aus Tabellenblatt Äquival



	A	B	C	D	F	H	J	R
1	Berechnung äquivalenter Parameter für Mehrschicht-Bodenprofil und flüchtige Stoffe							
2								
3	gelbe Felder: Eingabefelder							
4	Hinweis: eine Schicht wird berücksichtigt, wenn ein Mächtigkeitswert angegeben ist, müssen auch die Parameter ausgefüllt werden. Sonst entsprechende Zeile leer sein (Zelle mit rechter Maustaste einzeln auswählen)							
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	(-)					
14	Diffusionskoeff. Wasser	Dw	m ² /a					
15	Diffusionskoeff. Luft	Dg	m ² /a					
16	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd	(-)	0,100				
17								
18	Schicht-Nr	Bodenart	Mächtigkeit	Feldkapazität	Luftkapazität	Trockenraumdichte	lin. Verteilungskoeffizient	
19	i	KA5	z(i)	Fk(i)	Lk(i)	ρb(i)	kd(i)	
20			(m)	(Vol-%)	(Vol-%)	(kg/dm ³)	(l/kg)	
21								
22	1							
23	2							
24	3							
25	4							
26	5							
27	6							
28	7							
29	8							
30	9							
31	10							
32	Summe/äquiv.							
33								
34	Äquivalente Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
35	Feldkapazität	FK-äq	(%)					
36	Luftkapazität	LK-äq	(%)					
37	Trockenraumdichte	ρb-zs-äq	(kg/dm ³)					
38	lin. Verteilungskoeff.	kd-äq	(l/kg)					
39	Retardationsfaktor	R-äq	(-)					
40	Tortuosität Bodenwasser	τw-äq	(-)					
41	Tortuosität Bodenluft	τg-äq	(-)					
42	Sickerwassergeschwindigkeit	vsm-äq	(m/a)					
43	longitudinale Dispersivität	αz	(m)					
44	mechanische Dispersion	Dmech	(m ² /a)					
45	molekulare Diffusion	Dmol	(m ² /a)					
46	Dispersion Verflüchtigung	Dvol	(m ² /a)					
47	Dispersionskoeffizient	Dz-äq	(m ² /a)					
48	Dispersivitäts-Skalenfaktor	fd-äq	(-)					
49								

Übernahme der Basiswerte aus dem Tabellenblatt A oder B

Eingabe der Stoffdaten aus dem Tabellenblatt Stoffdaten

Die Werte der rot unterlegten Zellen sind in die Eingabeblätter Fall A bzw. Fall B zu übertragen



Stoffdaten für organische Stoffe											
Einstufung der Flüchtigkeit (n. Handbook of Chemical Property Estimation Methods)											
grüne Felder: nach EPI-Suite Datenbank der US-EPA			Henry-Konstante H								
gelbe Felder: Eingabefelder			H< 1,26e-5: gering								
			1,26e-5<H<4,087e-2: mittel								
			H>4,082e-2: hoch								
Stoff Gruppe/Name	Temperatur (°C)	Summen-Formel	Molgew. (g/mol)	CAS-Nr	Flüchtigkeit Klasse	Log (Koc) (l/kg)	Dampfdruck bei T Spalte B (mm Hg)	Wasser-Löslichkeit (25°C) (mg/l)	Henry-Konstante bei T Spalte B (-)	Diffusionskoeffizient Luft (n. FSG) bei T Spalte B (m²/a)	Diffusionskoeffizient Wasser (n. Worch) bei T Spalte B (m²/a)
Aromaten/Alkyl-Aromaten											
Benzol	25	C6H6	78,11	71-43-2	hoch	2,219	9,480E+01	1,790E+03	2,268E-01	294,699	0,034
Toluol	25	C7H8	92,14	108-88-3	hoch	2,428	2,840E+01	5,260E+02	2,714E-01	271,355	0,031
Ethylbenzol	25	C8H10	106,17	100-41-4	hoch	2,714	9,600E+00	1,690E+02	3,221E-01	253,076	0,029
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
1,2,4 Trimethylbenzol	25	C9H12	120,20	95-63-6	hoch	2,856	2,100E+00	5,700E+01	2,518E-01	238,251	0,027
Ethyltoluol	25	C9H12	120,20	620-24-4	hoch	2,924	3,040E+00	3,999E+01	3,815E-01	238,251	0,027
Propylbenzol	25	C9H12	120,20	103-65-1	hoch	2,980	3,420E+00	5,220E+01	4,292E-01	238,251	0,027
Styrol	25	C8H8	104,15	100-42-5	hoch	2,714	6,400E+00	3,100E+02	1,124E-01	255,466	0,029
Cumol	25	C9H12	120,20	98-82-8	hoch	2,912	4,500E+00	6,130E+01	4,700E-01	238,251	0,027
Indan	25	C9H10	118,18	496-11-7				1,090E+02	8,216E-03	240,215	0,027
MTBE											
MTBE		120						5,100E+04			
LHKW											
halogenierte Alkene											
Tetrachlorethen (PER)	25	C2Cl4	185,83	127-18-4	hoch	2,029	1,850E+01	2,060E+02	7,235E-01	204,234	0,023
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
cis-Dichlorethen	25	C2H2Cl2	96,94	156-59-2	hoch	1,641	2,010E+02	6,410E+03	1,668E-01	264,630	0,030
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

Stoffdatenblatt enthält relevante phys.-chem. Daten für 159 Stoffe (u.a. alle Stoffe mit GFS)

Eingabe der Bodentemperatur

Hinweis auf Flüchtigkeit

Koc-Wert (für kd-Wert in kd-Organik)

benötigte Stoffdaten für Tabellenblatt Äquival



Quelle für die Stoffdaten in ALTEX-1D

EPI Suite

File Edit Functions Batch Mode Show Structure Output Fugacity STP Help

EPI Suite - Welcome Screen

PhysProp Previous Get User Save User Search CAS Calculate Clear Input Fields

Output
 Full
 Summary

Input CAS #

Input Sm

Input Ch

Name

Henry LC: atm-m³/mole Water Solubility: mg/L

Melting Point: Pressure: mm Hg

Boiling Point: pw:

	River	Lake	
Water Depth:	<input type="text"/> 1	<input type="text"/> 1	meters
Wind Velocity:	<input type="text"/> 5	<input type="text"/> 0.5	meters/sec
Current Velocity:	<input type="text"/> 1	<input type="text"/> 0.05	meters/sec

BIOWIN-Daten für Berechnung der Halbwertszeit

Henry-Konstante

Koc-Wert für kd-Wert Berechnung

www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm

	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)							
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				
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	
34	Äquivalente Parameter	Symbol	Einheit	Wert				
35	Feldkapazität	FK-äq	(%)	27,000				
36	Luftkapazität	LK-äq	(%)	21,000				
37	Trockenraumdichte	ρb-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	τw-äq	(-)	0,205				
41	Tortuosität Bodenluft	τg-äq	(-)	0,114				
42	Sickerwassergeschwindigkeit	vsm-äq	(m/a)	1,111				
43	longitudinale Dispersivität	αz	(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				

Übernahme der Stoffdaten aus dem Tabellenblatt **Stoffdaten**

Eingabe der Bodenkennwerte für die Einzelschichten mit den Tabellenblättern **Feldkap** und **kd-Organik**

Die Werte der rot unterlegten Zellen sind in die Eingabeblätter **Fall A** bzw. **Fall B** zu übertragen

Werte in den rot unterlegten Zellen in Tabellenblatt **A** oder **B** übernehmen.



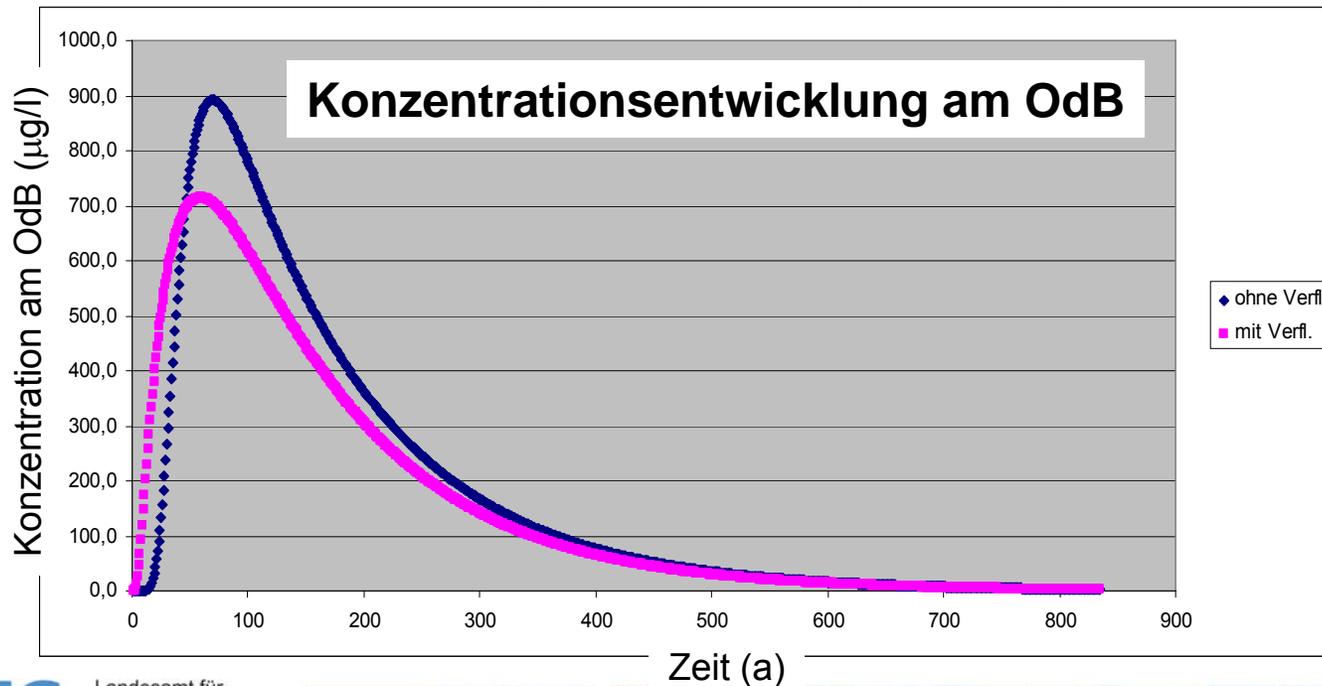
	A	B	C	D	E
3				Fallbsp. 4/AH	Fallbsp. 4/AH
4				ohne Flüchtigkeit	mit Flüchtigkeit
5	Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert	Wert
6	Schadstoff			Trichlorethen	Trichlorethen
7	Prüfwert BBodSchV/GFS	PV/GFS	µg/l	10,00	10,00
8	Kontaminierte Fläche	F	m²	500,0	500,0
9	OdB (u GOK)	OdB	m	6,0	6,0
10	Oberkante 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	ρb-Q	kg/dm³	1,20	1,20
15	Trockenraumdichte Transportst	ρb-zs	kg/dm³	1,60	1,60 ←
17	Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	55,000	
18	Gesamtmasse Quelle	M_{S...r}	kg	62,700	62,700
19	Mobilisierbarer Anteil	M_{...t}	%	100,0	100,0
20	flächenbez. mob. Masse		g/m²	125,400	125,400
21	Quellkonzentration initial	c_{s,t(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_s	1/a	7,799E-03	7,799E-03
25	Emissionsdauer Quelle	t_e	a	742,0	742,0
26	Quellstärke initial	J_{s,t(0)}	mg/(m²·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_{...s}	m/a	1,111	1,111
30	Schadstoffverweilzeit	t_{s...e}	a	47,0	47,6
31	Dispersivitäts-Skalenfaktor	f_s		0,100	1,087 ←
32	long. Dispersivität	α_s	m	0,400	4,348
33	long. Disp.koeff.	D_s	m²/a	0,444	4,831
35	lin. Verteilungskoeff.	k_s	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/a	0,272	0,272

Äquivalente Parameter aus Tabellenblatt Äquival übernehmen



ALTEX-1D – Ergebnis für Fallbeispiel 4/Berücksichtigung der Flüchtigkeit 24

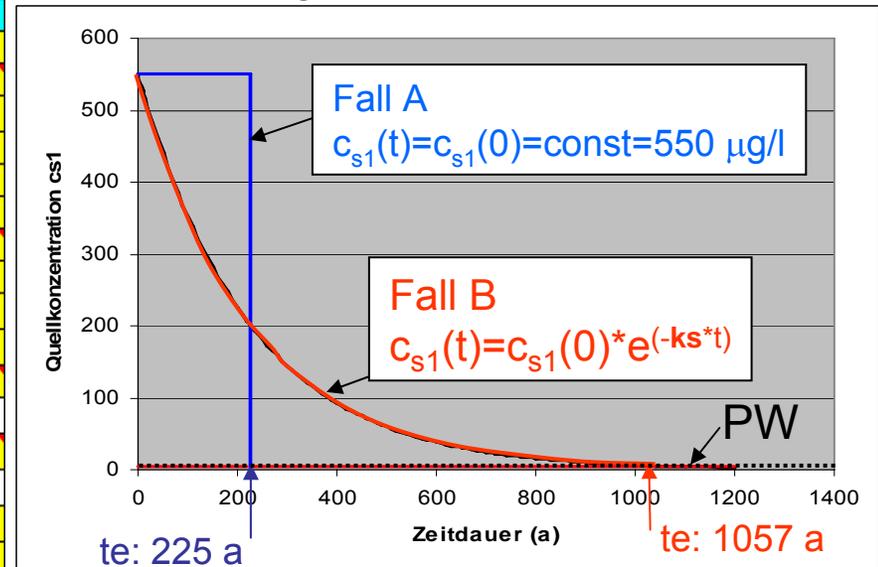
			Fallbsp. 4/AH ohne Flüchtigkeit	Fallbsp. 4/AH mit Flüchtigkeit
max. Konzentration	c_{max}	$\mu\text{g/l}$	892,3	712,1
Zeitpunkt der max. Konz.	t_{cmax}	a	69,0	60,0
Zeitpunkt PW-Überschr.	$t_{pwü}$	a	16,0	3,0
Zeitpunkt PW-Unterschr.	t_{pwu}	a	660,0	640,0
Dauer PW-Überschr.	t_{pw}	a	644,0	637,0
Schadstoffemission 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				



Eingabeblatt Fall B

Kennwert/Parameter	Symbol	Einheit	Wert
Schadstoff			Cadmium
Prüfwert BBodSchV/GFS	PW/GFS	µg/l	5,00
Kontaminierte Fläche	F	m ²	1700,0
OdB (u GOK)	OdB	m	3,5
Oberkante Quelle	OKq	m	0,0
Unterkante Quelle	UKq	m	0,5
Bodenart (KA5)			Su2
Feldkapazität	FK	%	23,0
Trockenraumdichte Quelle	ρb-Q	kg/dm ³	1,30
Trockenraumdichte Transportstr.	ρb-zs	kg/dm ³	1,50
Gesamtgehalt	G	mg/kg TM	476,000
Gesamtmasse Quelle	M _{Sch,F}	kg	525,980
Mobilisierbarer Anteil	M _{mob}	%	10,0
flächenbez. mob. Masse		g/m ²	30,940
Quellkonzentration initial	c _{s1} (0)	µg/l	550,0
Vorbelastung Transportstrecke	c _i	µg/l	0,0
asympt. Endkonzentration	c _a	µg/l	0,0
Abklingkonstante	k _s	1/a	4,444E-03
Emissionsdauer Quelle	t _e	a	1057,7
Quellstärke initial	J _{s1} (0)	mg/(m ² *a)	137,5
Sickerwasserrate	SWR	mm/a	250,0
Länge Transportstrecke	z _s	m	3,0
Sickerwassergeschw.	v _{sm}	m/a	1,087
Schadstoffverweilzeit	t _{stm}	a	56,8
Dispersivitäts-Skalenfaktor	f _d		0,100
long. Dispersivität	α _z	m	0,300
long. Disp.koeff.	D _z	m ² /a	0,326
lin. Verteilungskoeff.	k _d	l/kg	3,000
Retardationsfaktor	R		20,6
Halbwertszeit Abbau	T _{1/2}	a	1000000,000
Abbaukoeff. λ	λ	1/a	0,000

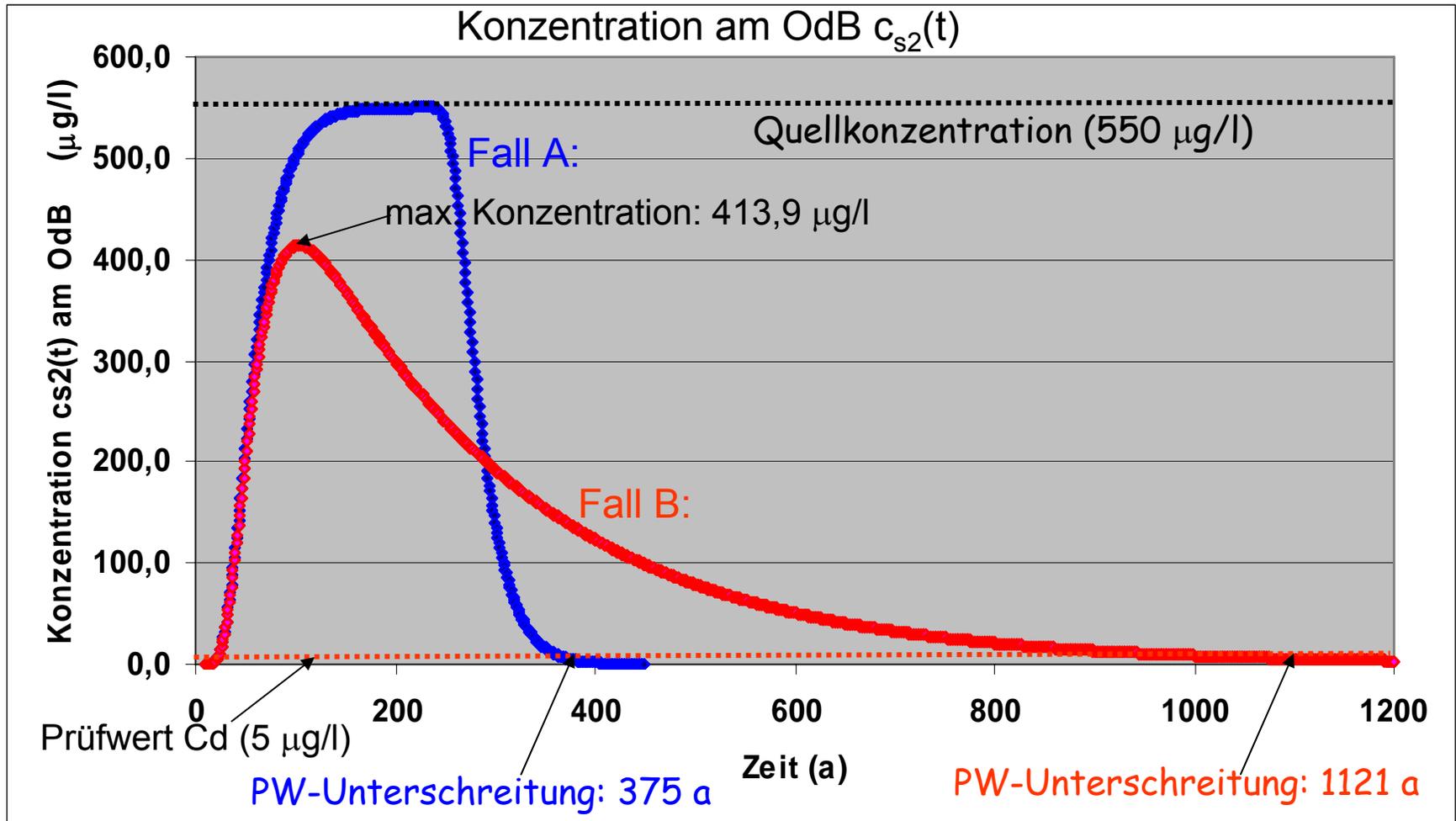
Entwicklung der Quellkonzentration



Die zur Beschreibung des Zeitverhaltens der Quelle erforderliche **Abklingkonstante ks** wird mit der Formel $ks = c_{s1}(0) * SWR / M_{mob}$ automatisch berechnet. Fall A/Fall B gleiche Quellkonzentration $c_{s1}(0) = c_{s1}(0) = 550 \mu\text{g/l}$

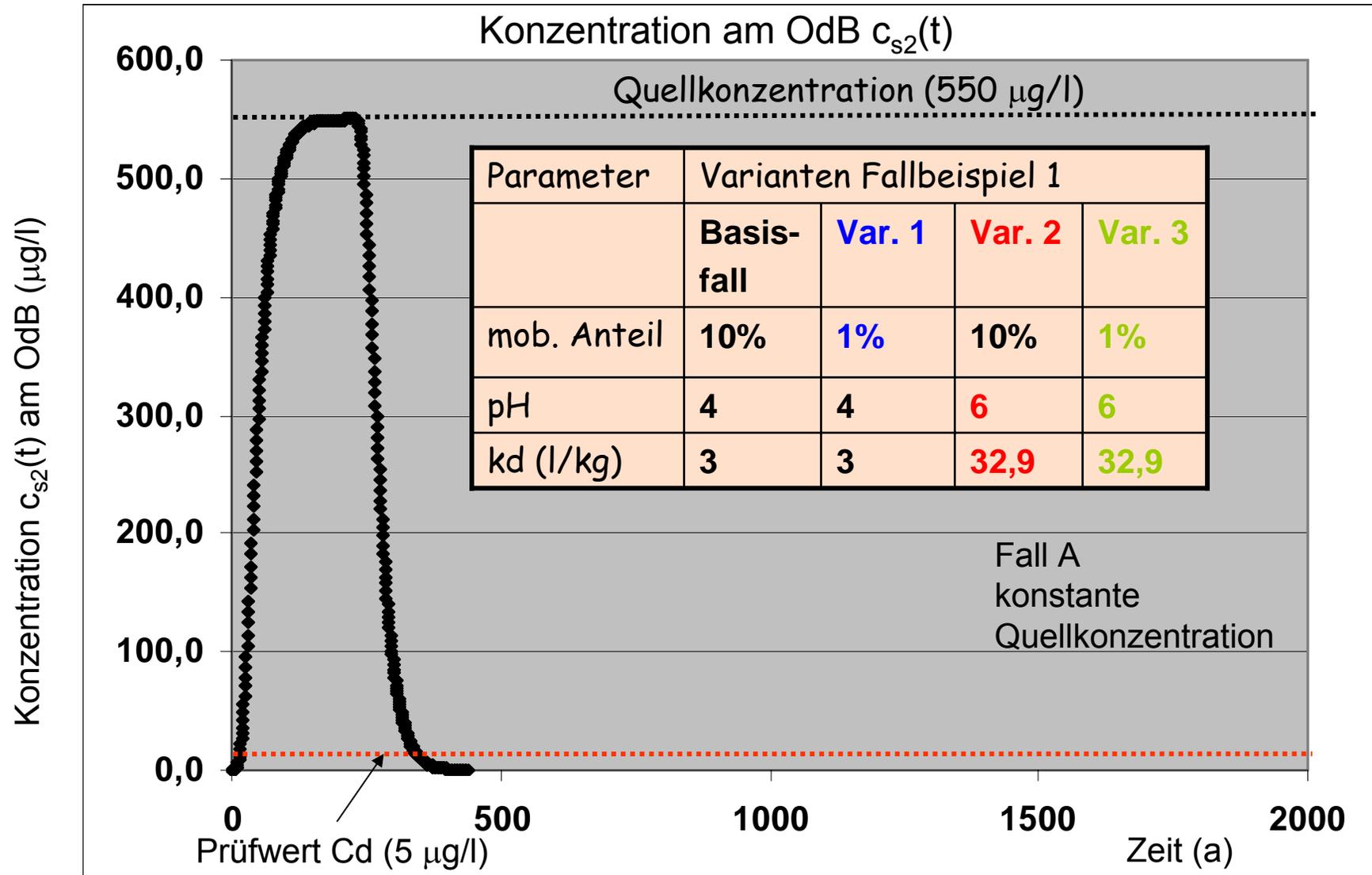
ALTEX-1D – Vergleich der Fallkonstellationen A und B

Graphische Darstellung des Ergebnisses

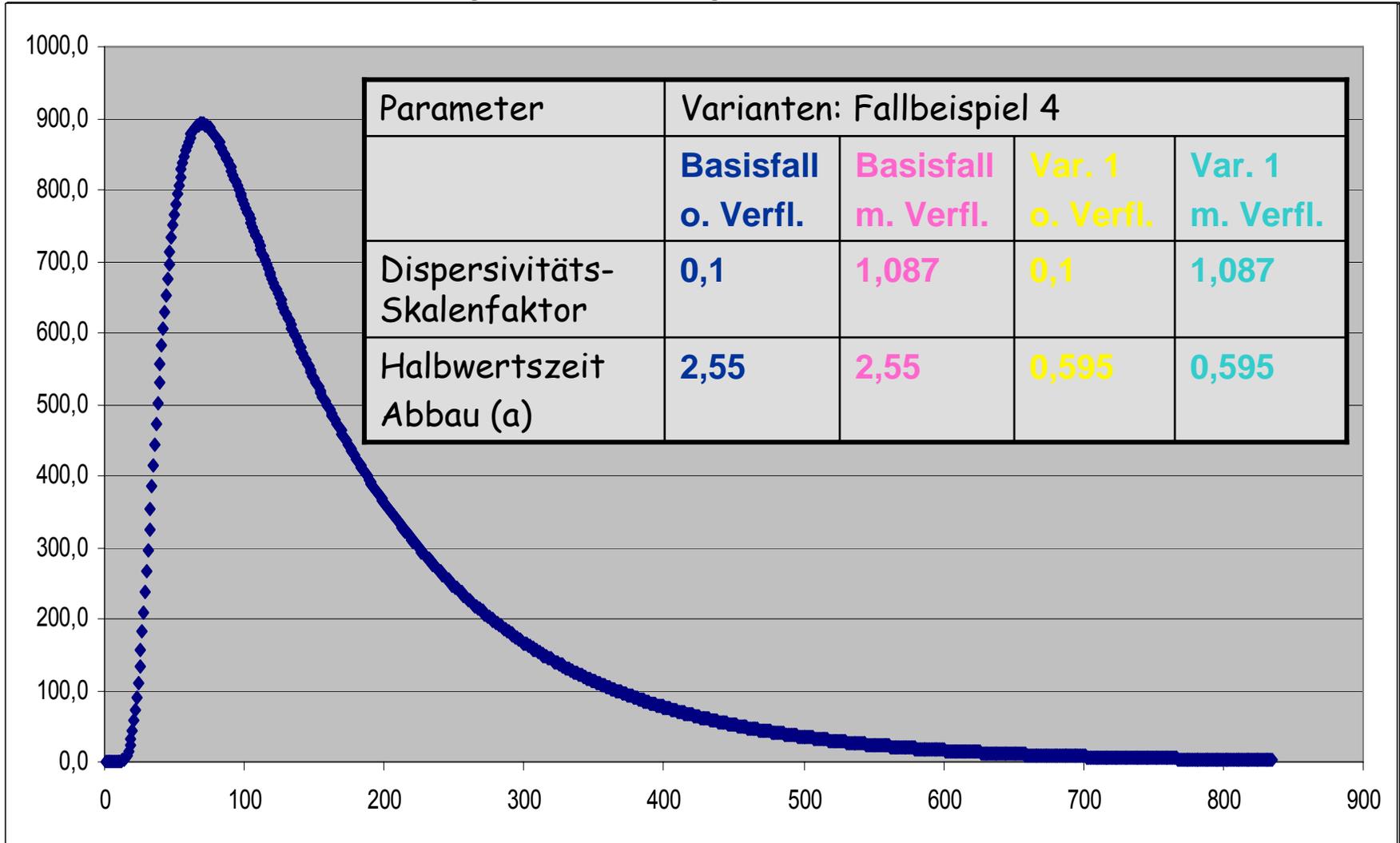


ALTEX-1D – Variation von Eingabeparametern

Auswirkung von mobilisierbarem Anteil und kd-Wert



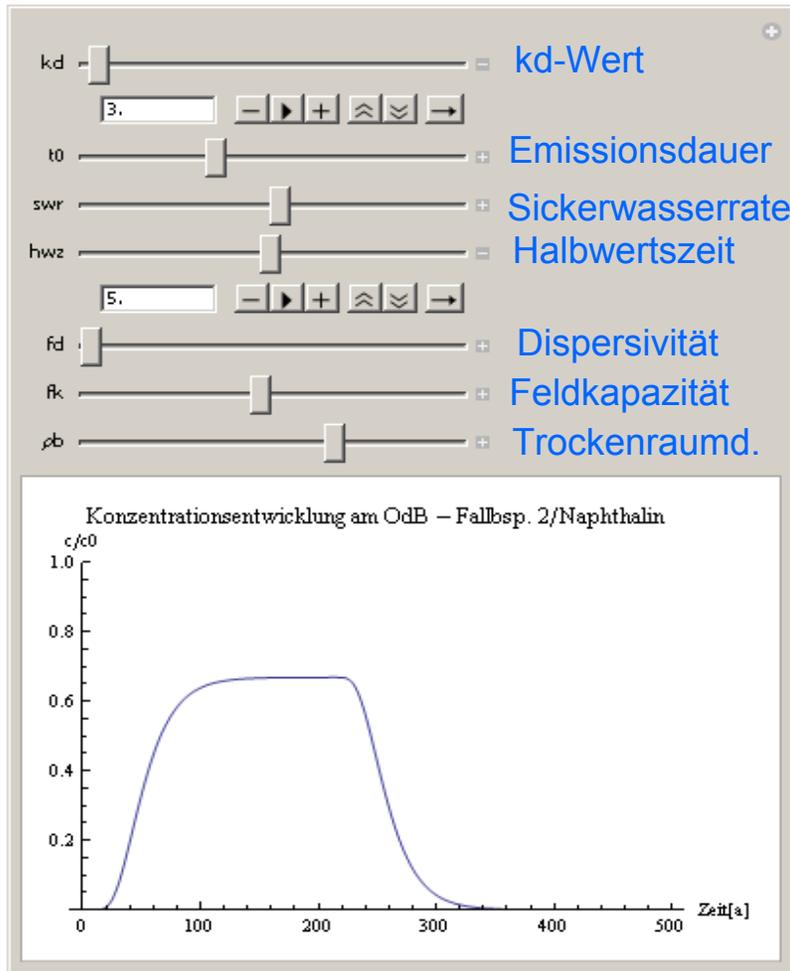
ALTEX-1D – Variation von Eingabeparametern Auswirkung von Flüchtigkeit und Abbauverhalten



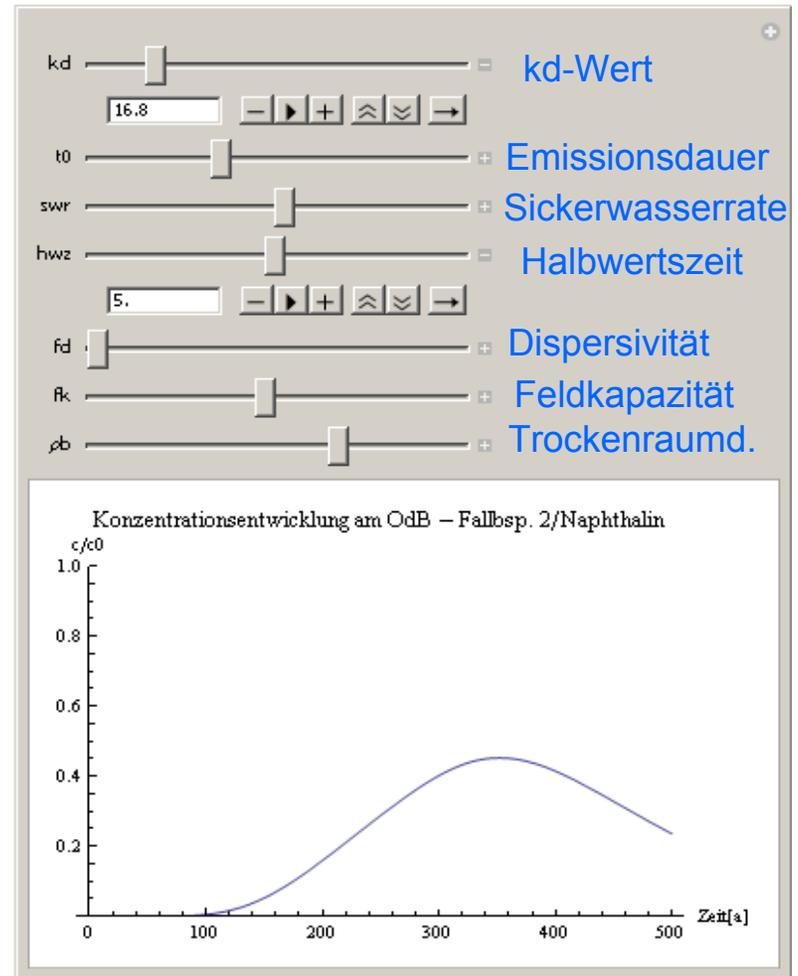
ALTEX-1D – Live-Demonstration der Sensitivität des Ergebnisses auf die Variation von Eingabeparametern

Fallbeispiel 2/Naphthalin

Parameter



Parameter



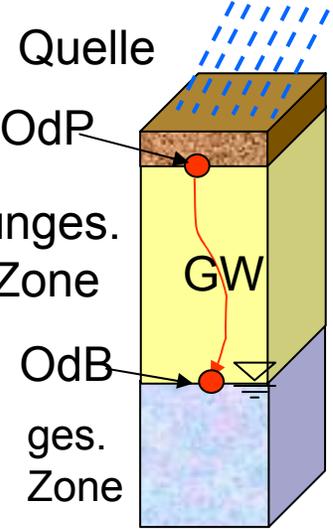
Fallgestaltungen bei der Gefahrenbeurteilung des Wirkungspfades Boden-Grundwasser³⁰

Fragestellung: Werden durch den Eintrag von Sickerwasser (Fracht) in das Grundwasser die Geringfügigkeitsschwellenwerte im Grundwasser überschritten?

wenn ja: Gefahr

Fall A

$$c_{si} < PW \text{ am OdP}$$



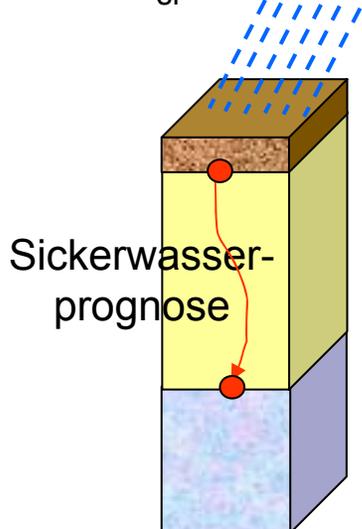
$$c_{gw} < GFS$$

Verdacht
ausgeräumt
keine Gefahr

Fall B

$$c_{si} > PW \text{ am OdP}$$

$$c_{si} < PW \text{ am OdB}$$



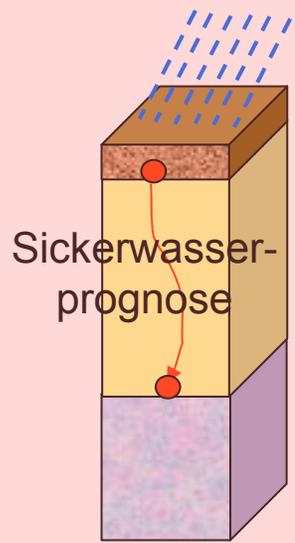
$$c_{gw} < GFS$$

Verdacht
ausgeräumt
keine Gefahr

Fall C

$$c_{si} > PW \text{ am OdP}$$

$$c_{si} > PW \text{ am OdB}$$



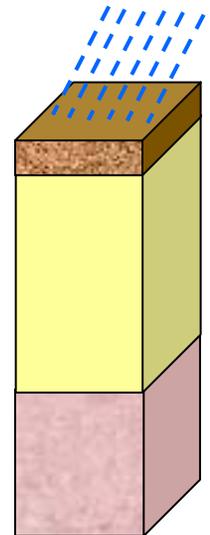
$$c_{gw} > GFS ?$$

Verdacht bestätigt
Gefahr?

Fall D

$$c_{si} > PW \text{ am OdP}$$

$$c_{si} > PW \text{ am OdB}$$



$$c_{gw} > GFS$$

Gefahr realisiert/
GW-Verunreinigung



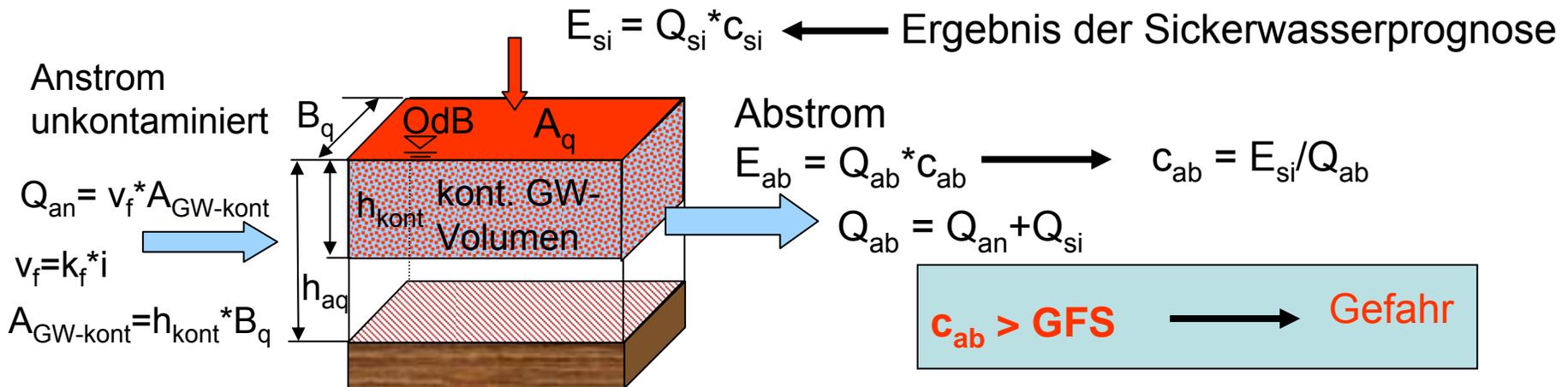
Gefahrenbeurteilung für das Grundwasser auf der Grundlage des Ergebnisse³¹ der Sickerwasserprognose

Voraussetzung für die Beantwortung der Frage: Berechnung der aus dem Sickerwassereintrag resultierenden Schadstoffkonzentration im Grundwasser

Grundlage der Berechnung: Massenbilanzbetrachtung für das kontaminierte Grundwasservolumen

Informationen aus dem Grundwasserraum zur Beurteilung erforderlich

Annahme: vollständige Durchmischung von Sickerwasser und Grundwasser im kont. GW-Volumen (idealer Reaktor)



- c_{si} : Konzentration Sickerwasser
- c_{ab} : Konzentration Grundwasserabstrom
- E_{si} : Fracht Sickerwasser
- E_{ab} : Fracht Grundwasserabstrom
- Q_{an} : Volumenstrom Grundwasseranstrom

- Q_{si} : Volumenstrom Sickerwasser
- Q_{ab} : Volumenstrom GW-Abstrom
- E_{si} : Fracht Sickerwasser
- E_{ab} : Fracht Grundwasserabstrom
- h_{aq} : Aquifermächtigkeit

- h_{kont} : Mächtigkeit des kont. GW
- B_q : Breite Quelle (quer zur Fließr.)
- A_q : Quellfläche
- $A_{GW-kont}$: kont. GW-Querschnittsfl.
- v_f : Filtergeschw. GW



ALTEX-1D - Berechnung der resultierenden Schadstoffkonzentration im Grundwasser²

Fallbeispiel 1

	A	B	C	D	E
1	Schadstoffkonzentration im Grundwasser				
2					
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	1,0	
24	Durchlässigkeit Aquifer	kf	m/s	5,0E-04	
25	hydr. Gefälle Grundwasser	l		5,0E-03	
26	Filtergeschwindigkeit	vf	m/a	78,8	
27	GW-Volumenstrom	Q_{gw}	m³/a	3153,6	
28	max. Konzentration im GW	c_{gw-max}	µg/l	65,307	
29	mittl. Konzentration im GW	c_{gw-mittel}	µg/l	41,364	
30	Verdünnungsfaktor (c_{max})	VF	(-)	8,420	
31					

Bei Eingabe A oder B werden die Werte (grüne Felder) aus den Tabellenblättern A oder B automatisch übernommen

- Eingabe der relevanten Aquiferparameter
- Abstrombreite quer zur GW-Fließrichtung
 - kont. Aquifermächtigkeit
 - Durchlässigkeit
 - hydr. Gefälle Grundwasser

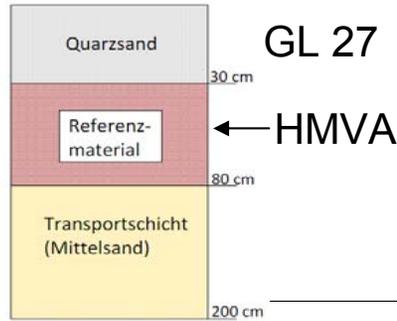
Fall A / Fall B / Graphik / Wertetabelle / **Konz-GW** / GWN / Feldkap / Stoffdaten



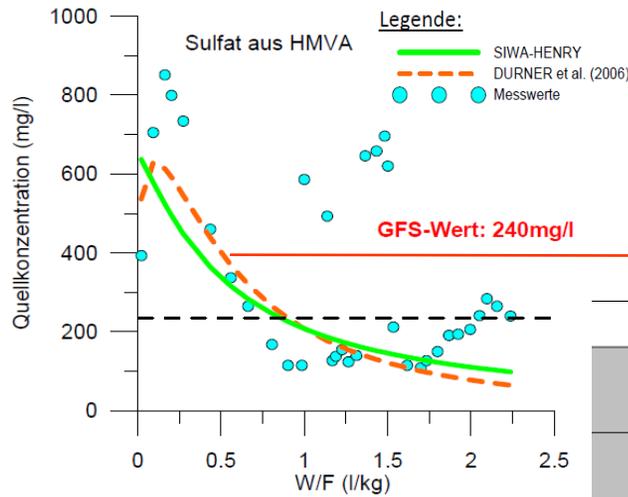
Validierung ALTEX-1D – Vergleich berechneter und gemessener Konzentrationen für³³Sulfat

Lysimeter- Durchbruchkurven

Aufbau der GSF Transport-Lysimeter



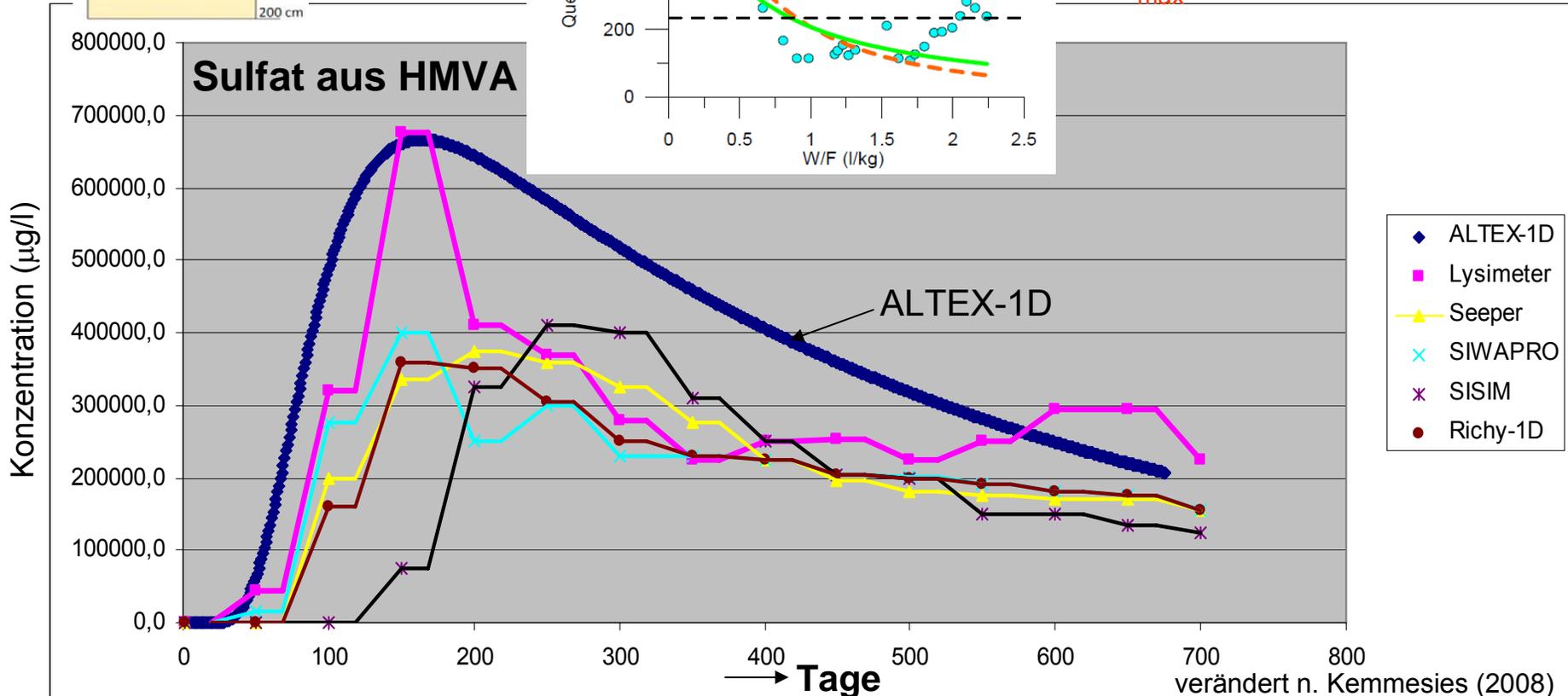
Quelltermfunktion



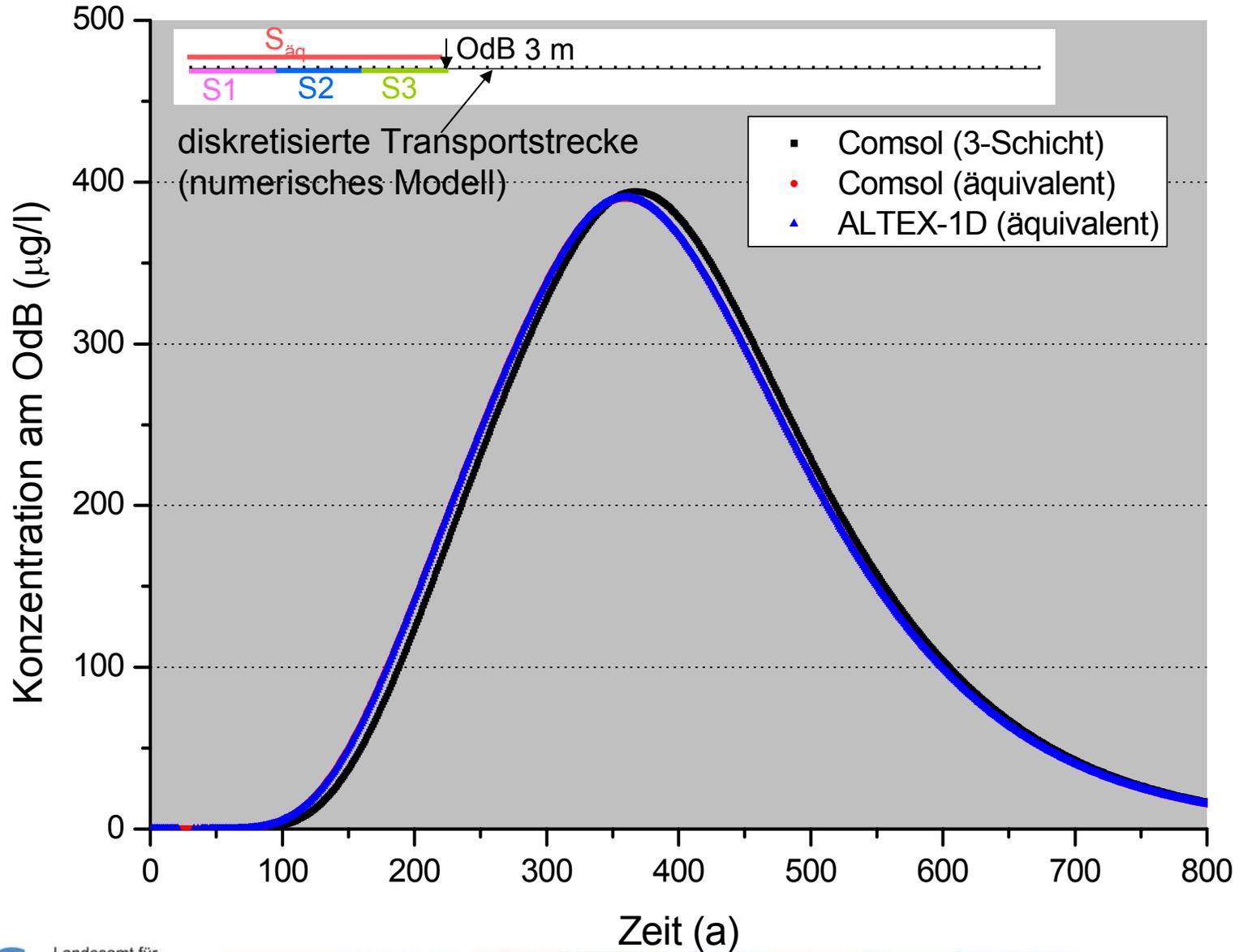
ALTEX-1D/Fall B

c_i : 850 mg/l (Messwert)
 Gesamtgehalt: 712,6 mg/kg
 mob. Masse: 100 %
 Abklingkonst.: 0,00245

M_{max} aus Quelltermf.n. Durner

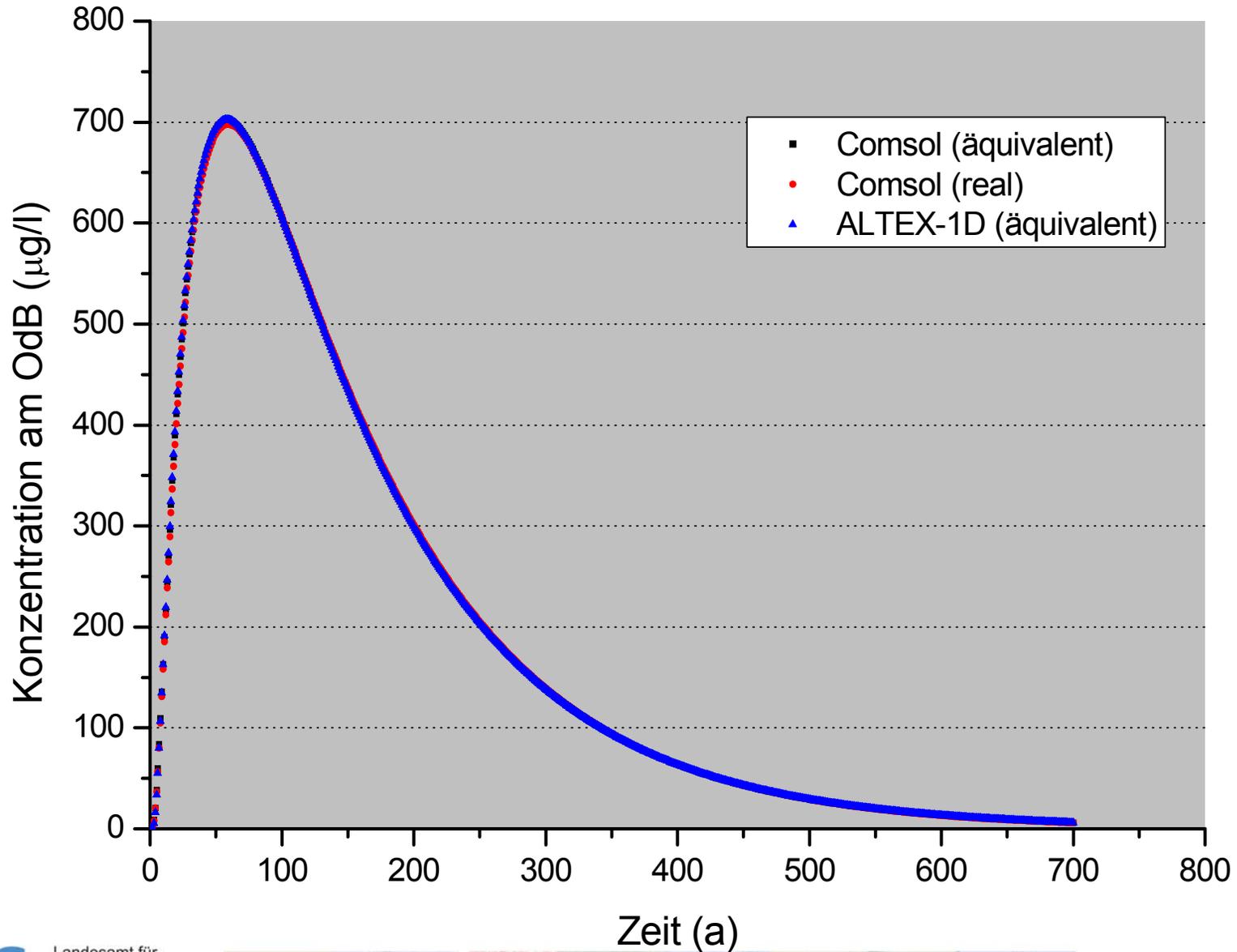


Ergebnisvergleich numerische Modellierung (Comsol)/ALTEX-1D dreischichtige Transportstrecke (Fallbsp. 1a/Anhang 3)

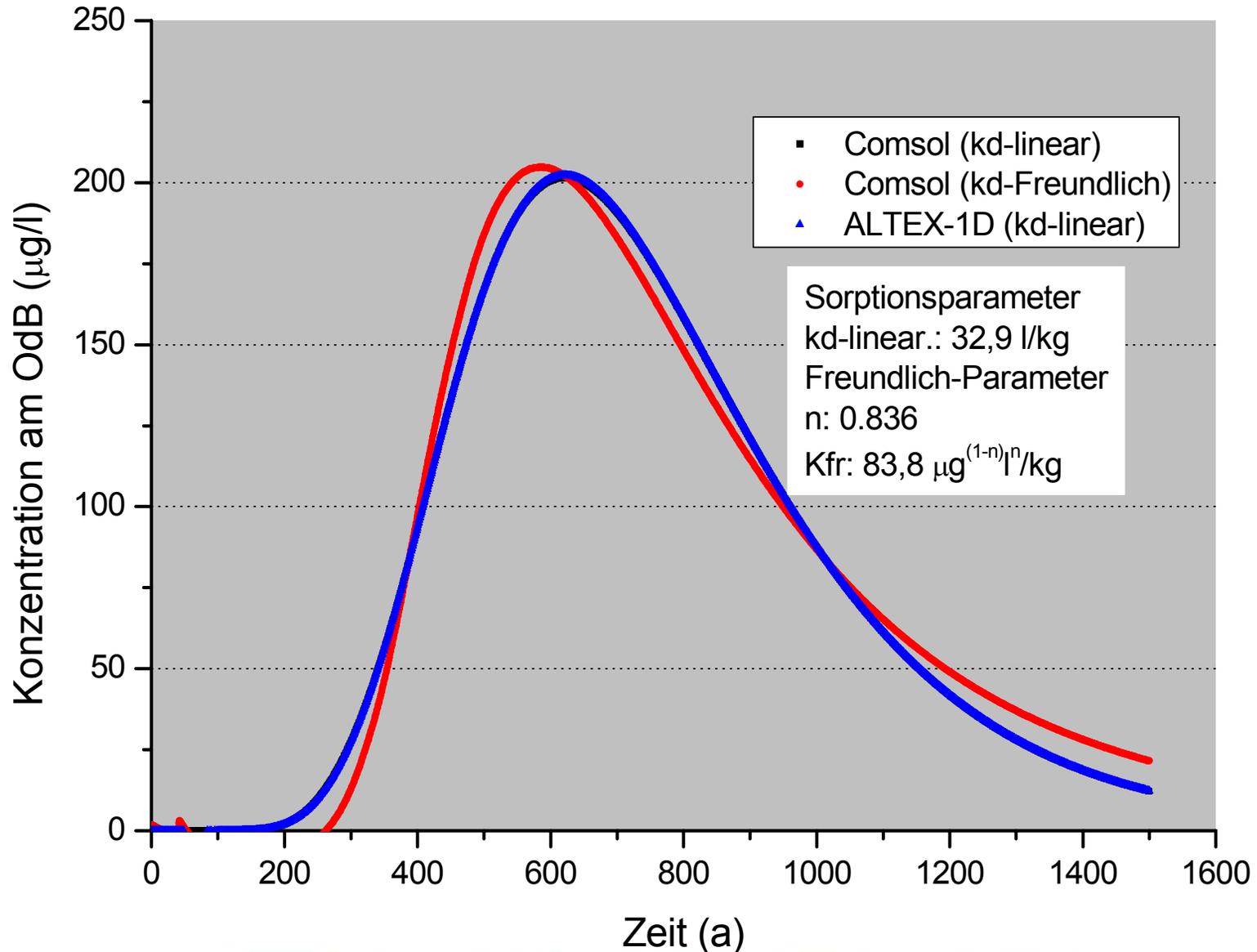


Ergebnisvergleich numerische Modellierung (Comsol)/ALTEX-1D

Berücksichtigung der Flüchtigkeit durch äquivalente Parameter (Fallbsp. 4/Anhang 3)



Ergebnisvergleich numerische Modellierung (Comsol)/ALTEX-1D
 Vergleich linearisierter kd-Wert/Freundlich-Isotherme (Fallbsp. 1/Var. 1/Anhang 3)



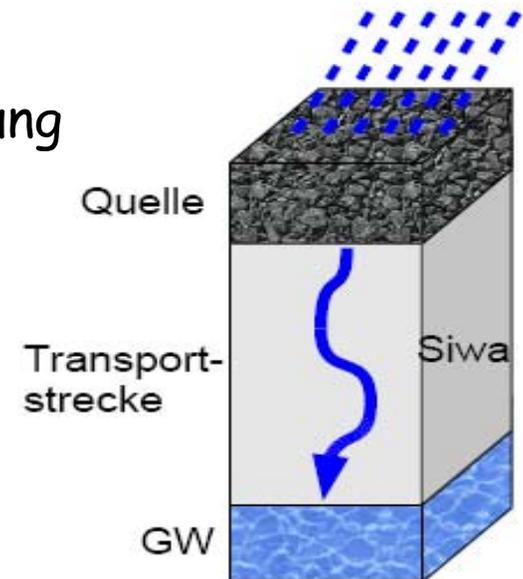
Vereinfachende Annahmen	Realität
eindimensionale Betrachtung	Dreidimensionaler Prozess
stationäre Sickerwasserbewegung mit einer mittl. Geschwindigkeit	instationäre Sickerwasserbewegung aufgrund saisonaler Infiltration
homogener einschichtiger Aufbau (äquivalente Parameter)	mehrschichtiger inhomogener Aufbau
vollkommenes und reversibles Gleichgewicht	Ungleichgewichtstransport durch
flüssiger Stofftransport	Stofftransport durch Austausch mit dem Wasser
nur eine gelöste Stoffkomponente	Mehrkomponentenlösung mit gegenseitiger Beeinflussung
lineare Sorptionsisotherme	nichtlineare Sorptionsisotherme
komplette und homogene laterale Durchmischung	Unvollständige Durchmischung (präferenzzieller Fluss)
Abbaukinetik 1. Ordnung	Monod-Kinetik

Vereinfachende Annahmen führen i.d.R. zu einem Ergebnis auf der sicheren Seite



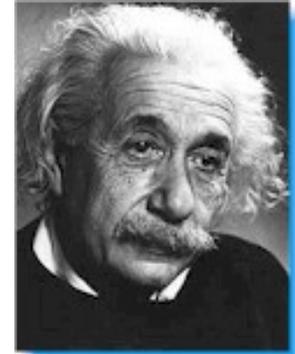
ALTEX-1D – Anwendungsrelevante Merkmale

- quantitative Abschätzung der Konzentrations-/Frachtentwicklung
- konservative Ergebnisse (auf der sicheren Seite)
- frei verfügbar
- einfach bedienbar
- integrierte Stoffdaten/Bodenkennwerte
- überschaubarer Aufwand für die Parametrisierung
- praxisgetestet
- validiert
- Anpassung an die Erfahrungen aus der Anwendung
- Anwendung in **OU** und **DU** möglich



Leitmotive bei der Entwicklung von ALTEX-1D

*Mache die Dinge so einfach wie möglich - aber nicht einfacher.
(Albert Einstein)*



*Wer gar zu viel bedenkt, wird wenig leisten.
(Friedrich Schiller/Wilhelm Tell)*

