

# Wie aktuell ist die Musterleistungsbeschreibung von Sachsen?

Claus Nitsche

## 1 Zielsetzung

Mit der Einführung des BBodSchG mit BBodSchV wurde eine Diskussion um die Vergleichbarkeit und Einsetzbarkeit der im Rahmen der Sickerwasserprognose verwendeten verschiedenen Elutionsverfahren entfacht. Vor dem Hintergrund beauftragte das Sächsische Landesamt für Umwelt, Landwirtschaft und Geologie 2003 die BGD Boden und Grundwasserlabor mit der Bearbeitung der „Leistungsbeschreibung Planung, Durchführung und Auswertung von laborativen Untersuchungen zur Gewinnung repräsentativer Mess-/Analysenwerte zur Sickerwasserprognose im Rahmen der Detailerkundung“. Diese Bearbeitung erfolgte unter wissenschaftlicher Begleitung der TU Dresden, Institut für Abfall und Altlasten und fachlicher Begleitung des LfULG (Frau Sohr, Frau Kuhn und Herrn Dr. Börke).

Die Zielstellung bestand in der Erarbeitung einer einheitlichen Methodik für Laborversuche, die eine Vergleichbarkeit der Ergebnisse sowie deren direkte Verwendung für eine Sickerwasserprognose sowohl für den Quell- als auch Transportterm ermöglicht (vor allem ParaAdsorption/ Desorption, Austauschraten, mikrobielle Transformationsraten). Im Ergebnis entstand das LfULG-Material zur Altlastenbearbeitung „Laborative Untersuchungen zur Sickerwasserprognose im Rahmen von Detailuntersuchungen“, das als Sächsische Methodik der Sickerwasserprognose bezeichnet wurde.

Die 2003 geltenden Normen, wie die DIN 38414 Teil 4 DEV S4 (S4-Test), der Bodensättigungsextrakt (BSE) und die DIN V 19736, wurden im Rahmen der damaligen Arbeiten diskutiert und in die Musterleistungsbeschreibung mit Musterleistungsverzeichnis „Laborative Untersuchungen zur Sickerwasserprognose im Rahmen der Detailuntersuchung eingeordnet. Die o.g. Normen wurden zum Teil durch die neuen Normen DIN 19528 (Säulenversuch), DIN 19529 (Schüttelversuch, anorganische Stoffe: W/F=2:1), DIN 19527 (Schüttelversuch, organische Stoffe: W/F=2:1) ersetzt, so dass nunmehr die generelle Frage nach der Aktualität der Sächsischen Methodik steht. Diese wird nachfolgend beantwortet und entsprechender Aktualisierungsbedarf abgeleitet.

## 2 Bearbeitungsstand der Sächsischen Methodik

Bei der Bearbeitung des LfULG-Materials zur Altlastenbearbeitung „Laborative Untersuchungen zur Sickerwasserprognose im Rahmen von Detailuntersuchungen“ wurde von folgenden Randbedingungen ausgegangen:

- Lange Kontakt- bzw. Reaktionszeiten zwischen den Phasen Boden, Bodenwasser und Bodenluft. Für die Verteilung und das Migrationsverhalten der Schadstoffe dominieren folglich Gleichgewichtsreaktionen, sowohl im Quellterm als auch im Transportterm.
- Durch den Wechsel zwischen Transport und Stagnation des infiltrierenden Regenwassers sind in Abhängigkeit von der hydraulischen Durchlässigkeit des zu betrachtenden Bodenbereiches wechselnde aerobe und anaerobe Milieubedingungen zu berücksichtigen. Bei den Untersuchungen zum biologischen Abbau ist zu beachten, dass bei gering durchlässigen Bodenbereichen nur unter anaeroben Bedingungen untersucht wird (s. Pseudogley). Grundsätzlich wird davon

ausgegangen, dass die versuchstechnisch gewählte Kombination von Quellterm- und Transporttermreaktor die realen Verhältnisse optimal widerspiegeln.

Dementsprechend wird die Sickerwasserprognose auf der Grundlage von Gleichgewichtskonzentrationen und mittleren Grundwasserneubildungsraten durchgeführt, die auch unter Feldbedingungen in das Grundwasser eingetragen werden.

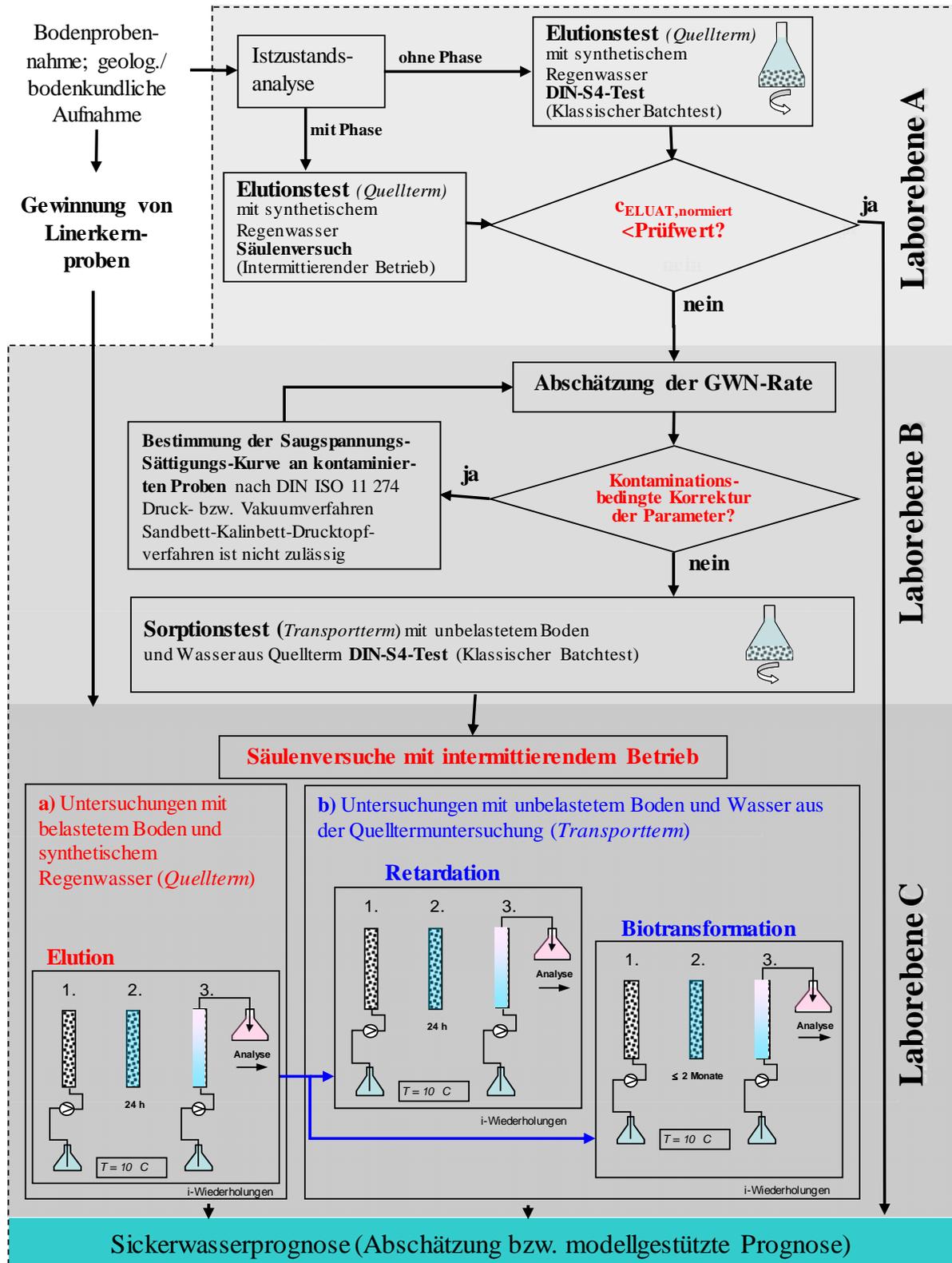
Grundlage für die Versuche zur Bestimmung der Parameter für den Quell- und Transportterm sind Batchversuche, zu denen der Bodensättigungsextrakt (BSE) und statische Batchtests gehören. Letztere wurden in der Sächsischen Methodik als intermittierend betriebene Säulenversuche (IBSV) bezeichnet, da in der BBodSchV der Begriff des Batchversuches nicht enthalten war. Während die bis zu einem hydraulischen Durchlässigkeitskoeffizienten ( $k_f$ -Wert) von  $> 1,0 \cdot 10^{-7}$  m/s IBSV durchgeführt werden, erfolgte ab einem  $k_f$ -Wert  $\leq 1,0 \cdot 10^{-7}$  m/s die Anwendung des BSE.

Der Inhalt der Sächsischen Methodik wurde in jeweils einen Ablaufplan für den Quell- und Transportterm zusammengefasst dargestellt, wobei die Ablaufpläne noch jeweils für den BSE- bzw. IBSV-Ansatz unterteilt wurden. In Abb. 1 und Abb. 2 wurden die Ablaufpläne für den Quell- und Transportterm dargestellt.

Die 2003 geltenden und bereits oben genannten Normen wurden in dem LfULG-Material zur Altlastenbearbeitung „Laborative Untersuchungen zur Sickerwasserprognose im Rahmen von Detailuntersuchungen“ in dem Bereich der Laborebene A eingeordnet. In dieser wird entsprechend der damaligen Normen entschieden, ob die Eluatkonzentration unter oder über Prüfwert liegt, wobei die im S4-Eluat befindliche Stoffmenge auf das Porenvolumen der verwendeten Bodenprobe bezogen wird, um Minderbefunde zu vermeiden. Liegt der so bestimmte Eluatwert über dem Prüfwert, erfolgt eine Sickerwasserprognose im Sinne einer Einzelfallprüfung. Dabei werden Parameter für den Quell- und Transportterm bestimmt, mit denen eine modellgestützte Sickerwasserprognose ermöglicht wird.

Die Sächsische Methodik wurde erstmals im Rahmen des von BGD im Auftrag der DOW Olefinverbund GmbH, SOW Böhlen bearbeiteten Projektes „Lysimeteruntersuchungen zur Verifizierung der Sickerwasserprognose“ im Bereich ausgewählter kontaminierter Flächen des ökologischen Großprojektes „SOW Böhlen“ erfolgreich verifiziert.

Da bereits durch verschiedene S4-Eluatuntersuchungen eine Überschreitung des Prüfwertes festgestellt wurde, erfolgten die Untersuchungen gemäß Laborebene B und C mittels IBSV. Bereits die Ergebnisse der Laborebene B ergaben eine kontaminationsbedingte Korrektur der bei der Berechnung der Grundwasserneubildung erforderlichen Parameter. Dies hatte zur Folge, dass die Grundwasserneubildungsrate ca. 50% bis 60% geringer ausfiel als bis zu diesem Zeitpunkt angenommen. Damit reduzierten sich auch die Stofffrachten, die in das Grundwasser eingetragen werden, um denselben Betrag. In der Laborebene C erfolgte die Ermittlung der Parameter für eine modellgestützte Sickerwasserprognose. Die dabei erzielte Vergleichbarkeit zwischen den Ergebnissen aus den IBSV und den Lysimetern wurde in der Abb. 3 exemplarisch dargestellt.



© BGD: Nitsche/LfUG: Börke und Sohr; 2003

Abb. 1: Ablaufplan zur Musterleistungsbeschreibung mit Musterleistungsverzeichnis für Proben mit einem  $k_f$ -Wert  $> 1,0 \cdot 10^{-7}$  m/s unter Verwendung des IBSV-Versuchsansatzes in der Laborebene C

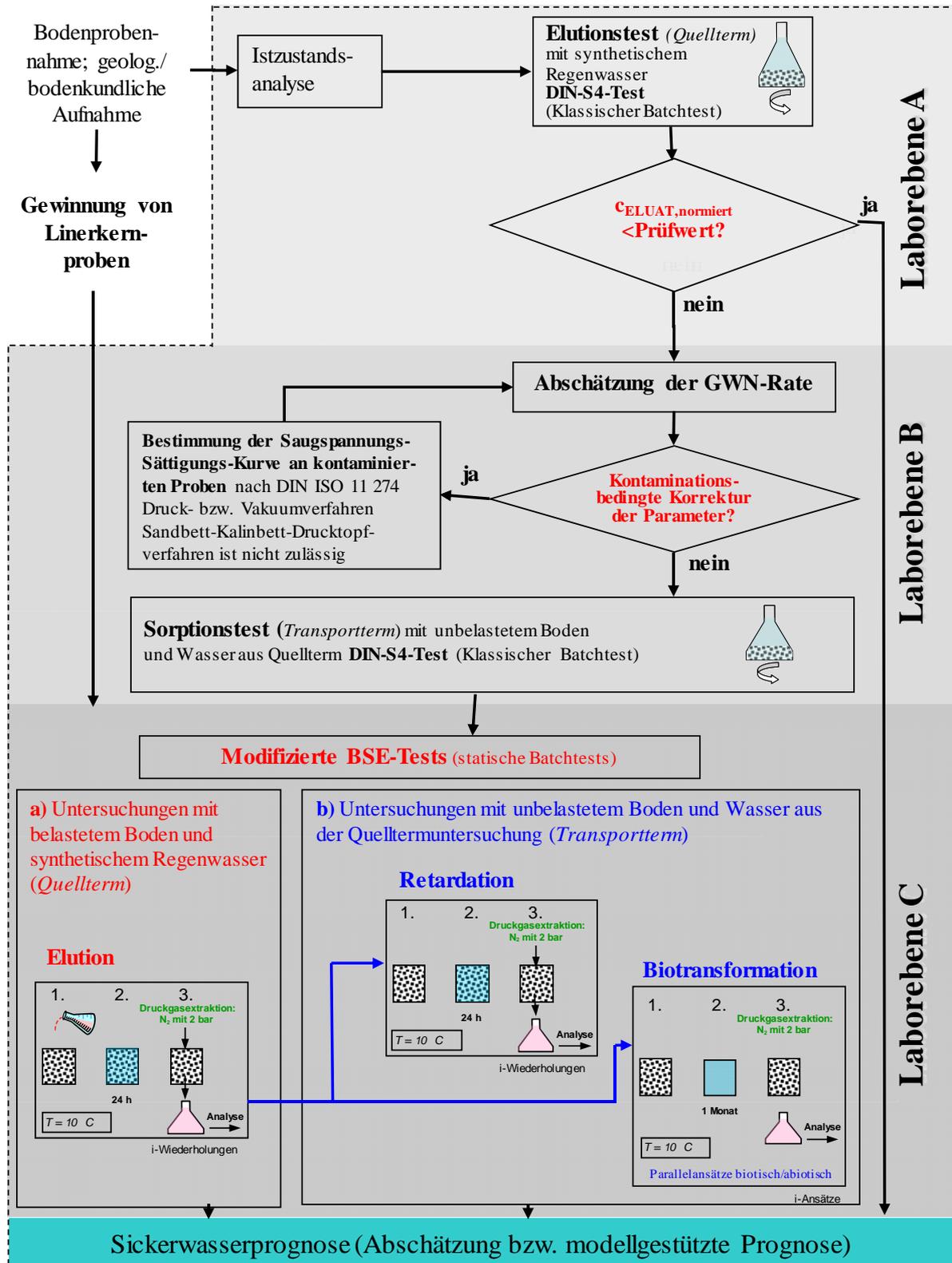


Abb. 2: Ablaufplan zur Musterleistungsbeschreibung mit Musterleistungsverzeichnis für Proben mit einem  $k_f$ -Wert  $\leq 1,0 \cdot 10^{-7}$  m/s unter Verwendung des BSE-Versuchsansatzes in der Laborebene C

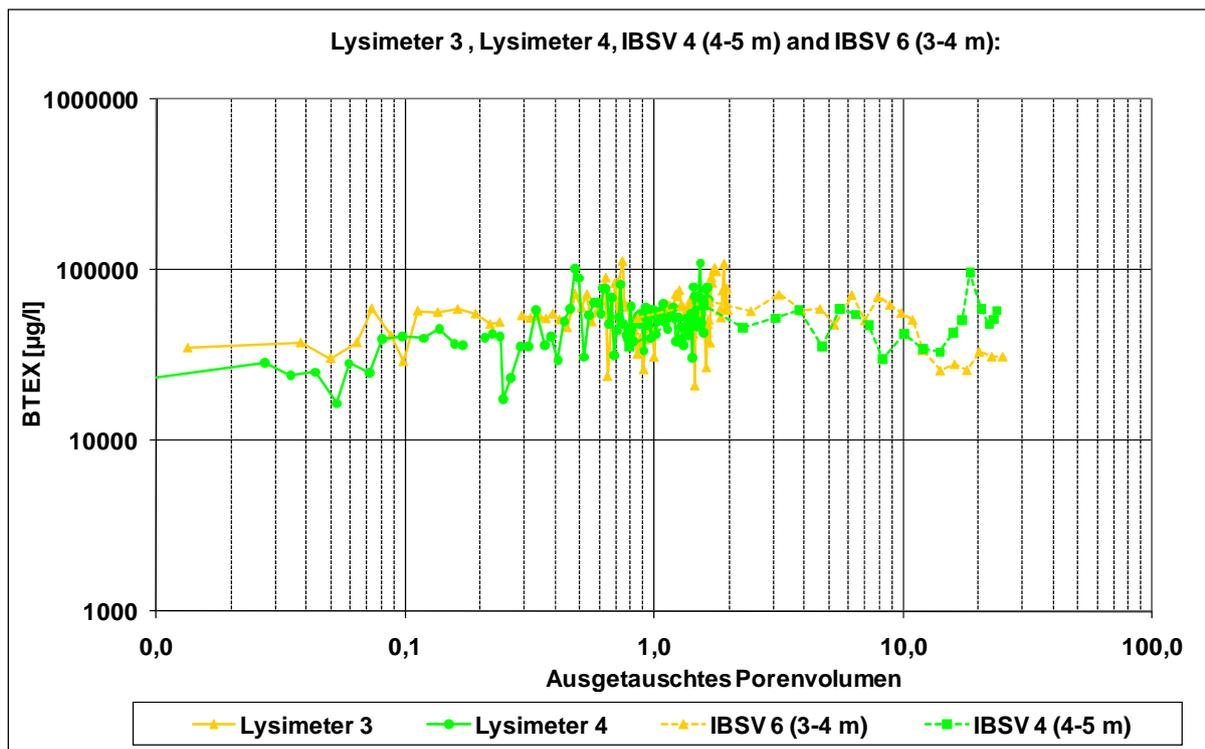


Abb. 3: Vergleich der Eluatkonzentrationen aus Lysimetern und IBSV bei vergleichbarem Stoffinventar

Daraus wird ersichtlich, dass bei vergleichbarem Stoffinventar im IBSV und Lysimeter die Ergebnisse der IBSV den Mittelwert der Lysimeterergebnisse ergeben. Dadurch wurden die oben genannten Randbedingungen sowie die daraus abgeleitete Sächsische Methodik bestätigt. Aus den Ergebnissen der IBSV wurden im weiteren die  $K_D$ -Werte ermittelt und mit denen aus den Oktanol-Wasser-Verteilungskoeffizienten berechneten  $K_D$ -Werten verglichen. Mit beiden  $K_D$ -Werten erfolgte eine Sickerwasserprognose mit dem Programm HYDRUS für den Ort der Beurteilung. Die Bewertung erfolgte auf der Grundlage von Sickerwasserproben, die mittels eines von BGD speziell entwickelten sowie durch die Umwelt- und Gerätetechnik Müncheberg GmbH (UGT) gefertigten und im Untersuchungsgebiet (Feldbereich) installierten Sickerwasserprobennahmesystemen.

Tab. 1 Vergleich der mittels HYDRUS unter Verwendung der aus dem  $K_{OW}$ -Wert (Literatur) und den im Rahmen dieses Projektes im Labor (IBSV) ermittelten  $K_D$ -Werte berechneten Sickerwasserkonzentrationen mit den Mittelwerten der in Sickerwasserproben am Ort der Beurteilung analysierten BTEX-Konzentrationen

Kontaminant	Ergebnis-HYDRUS $K_D$ -Werten aus IBSV (Sickerwasseranalyse)	Ergebnis-HYDRUS $K_D$ -Werte aus $K_{OW}$ (Sickerwasseranalyse)	Faktor (Prognose $K_{OW}/K_D$ )
Benzol in µg/l	18.400 (21.780) (F: 0,85)	184.000 (21.780) (F: 8,5)	10
Toluol in µg/l	17.400 (26.430) (F: 0,66)	289.000 (26.430) (F: 10,9)	17
Ethylbenzol in µg/l	6.300 (13.860) (F: 0,55)	111.000 (13.860) (F: 8)	18
m,p-Xylol	4.200 (9.890) (F: 0,43)	112.000 (9.890) (F: 11,3)	27
o-Xylol	2.400 (5.530) (F: 0,43)	65.000 (5.530) (F: 11,8)	27
BTEX	48.700 (77.480) (F: 0,63)	761.000 (77.480) (F: 9,8)	16
Naphthalin	180 (450) (F: 0,4)	2.640 (450) (F: 5,9)	15

In dem oben genannten Beispielsprojekt wurden auch Versuche zur Ermittlung mikrobieller Transformationsraten gemäß Laborebene C durchgeführt. Im Ergebnis musste festgestellt werden, dass der mikrobielle Abbau der BTEX zu gering war, um einen signifikanten Beitrag zur Konzentrationsreduzierung leisten zu können. Dies wurde durch die Feldmessungen und die modellgestützte Prognose bestätigt. Der Ansatz wurde jedoch auch im Grundwasserbereich verwendet und erbrachte eine sehr gute Vergleichbarkeit mit den mittels Isotopenfraktionierung ermittelten Abbauraten (s. Tab. 2). Dabei ist zu beachten, dass bei der Isotopenfraktionierung die tatsächliche Länge des Strömungspfades kaum bekannt ist.

**Tab. 2: Vergleich der aus den Ergebnissen der IBSV ermittelten mit den im Feldbereich unter Verwendung der Isotopenfraktionierung bestimmten mikrobiellen Abbauraten 1. Ordnung**

Parameter	Benzol	Toluol	Ethylbenzol	m-,p-Xylol	o-Xylol
k [d <sup>-1</sup> ] Labor	0,008-0,01	0,035-0,06	0,03-0,067	0,033-0,05	0,02-0,043
k [d <sup>-1</sup> ] Feld (Isotopenfraktionierung)	keine Angabe	0,015-0,078	0,007-0,014	0,053-0,087	0,022-0,061

Nachfolgender Abb. 4 ist eine typische Versuchsanlage für die Durchführung von IBSV in Laborebene C zu entnehmen.



**Abb. 4: Realaufnahme einer IBSV-Anlage für Untersuchungen der Laborebene C**

Folgende Kennwerte bzw. Parameter werden in den Laborversuchen nach den Musterleistungsbeschreibungen ermittelt und stehen dann für anschließende Modellierungen zur Verfügung:

Untersuchungsziel	Verwendungszweck
<b>Laborebene A</b>	
<b>Istzustandsanalyse</b> der zu untersuchenden Substrate hinsichtlich der hydraulischen Eigenschaften (wie Korngrößenverteilung mit daraus ermittelten $k_f$ -Wert, Porosität, Lagerungsdichte, Partikeldichte) sowie der Beschaffenheitskennwerte bzw. -parameter (wie TOC, BTEX, PAK, MKW, Metalle)	<b>Entscheidungskriterium</b> , ob die Versuche mittels <b>IBSV oder BSE</b> durchgeführt werden müssen.  Planung und Auswertung der Versuche in den Laborebenen A, B und C
Eluatkonzentration (Bezogen auf das Porenvolumen der im Schüttelversuch verwendeten Probe)	<b>Entscheidungskriterium</b> , ob eine <b>Sickerwasserprognose</b> durchzuführen ist. Liegt die Eluatkonzentrationen unter dem Prüfwert, so sind keine weiteren Untersuchungen im Sinne einer Sickerwasserprognose erforderlich.
<b>Laborebene B</b>	
Bestimmung der Saugspannungs-Sättigungsverteilungs-Kurve unter Berücksichtigung der Kontamination für die Bestimmung der van Genuchten Parameter	Berechnung der Sicker- bzw. Grundwasserneubildung bzw. des Bodenwassertransportes ( <b>modellgestützte Sickerwasserprognose – Menge</b> ) notwendig sind.
Sorptionstest - Vorversuche	<b>Versuchsplanung für die in der Laborebene C durchzuführenden Retardationsuntersuchungen</b> hinsichtlich der Reaktorgröße. Dadurch wird erreicht, dass die Versuche zeitlich geplant werden können.
Abbautests - Vorversuche	<b>Versuchsplanung für die in der Laborebene C durchzuführenden Biotransformationsuntersuchungen</b> hinsichtlich der Zielstellung, ob überhaupt ein mikrobielles Abbaupotenzial vorhanden ist. Damit dienen diese Versuche auch zur Entscheidung über die Notwendigkeit der Durchführung der Biotransformationstests in der Laborebene C
<b>Laborebene C</b>	
Elutionstests für die Ermittlung von Elutionsraten für den <b>Quellbereich</b>	<b>modellgestützte Sickerwasserprognose-Beschaffenheit - Quellbereich</b> Identifikation von Kontaminanten in Phase (typisches Elutionsverhalten)
Retardationstests für die Ermittlung von Adsorptions-/ Desorptionsisothermen für den <b>Transportbereich</b>	Parameterermittlung der HENRY- ( $K_D$ -Wert), FREUNDLICH- bzw. LANGMUIR-Isotherme für die <b>modellgestützte Sickerwasserprognose-Beschaffenheit - Transportbereich</b>
Biotransformationstests für die Ermittlung von mikrobiellen Abbauraten bzw. Halbwertszeiten für den <b>Transportbereich</b>	<b>modellgestützte Sickerwasserprognose-Beschaffenheit - Transportbereich</b>

### 3 Aktualisierungsbedarf der Sächsischen Methodik

Ein Aktualisierungsbedarf ergibt sich aus den nunmehr verbindlichen Normen DIN 19528 (Säulenversuch), DIN 19529 (Schüttelversuch, anorganische Stoffe: W/F=2:1), E DIN 19527 (Schüttelversuch, organische Stoffe: W/F=2:1). Da diese, wie auch die vorher angewendeten Normen, für die Beantwortung der Frage zu verwenden sind, ob die Eluatkonzentration über oder unter dem Prüfwert liegt, werden die bisher in der Laborebene A durchgeführten S4-Tests sowie in der Laborebene B-Sorptionstests (Vorversuche) durch die neuen Normen DIN 19529 bzw. E DIN 19527 ersetzt. Alle anderen Untersuchungen in der Laborebene B und C bleiben davon unbeeinflusst.

Ein Aktualisierungsbedarf ergibt sich hinsichtlich der Vorversuche der Laborebene B, die bisher auf Sorptionsuntersuchungen begrenzt waren. Diese werden hinsichtlich mikrobieller Untersuchungen, die der Ermittlung mikrobiellen Abbaupotenzials und damit als Entscheidungsgrundlage über die Notwendigkeit der Durchführung der Bio-transformationstests in der Laborebene C dienen, erweitert.

Auch wird keine Alternative zum BSE für zu untersuchende Substrate mit einem  $k_f$ -Wert  $\leq 1,0 \cdot 10^{-7}$  m/s gesehen.

#### Literatur

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung: Workshop/Anwendertreffen Elutionsverfahren im Boden- und Abfallbereich Praxiserfahrungen mit den neuen Verfahren für zukünftige gesetzliche Regelungen, Beiträge, Berlin 2010

LfULG (2004): Materialienband der Altlastenbearbeitung: "Laborative Untersuchungen zur Sickerwasserprognose im Rahmen der Detailerkundung"; auf der Grundlage einer im Auftrag des LfULG durch BGD GmbH bearbeiteten Leistungsbeschreibung

LfULG (1999): Materialienband der Altlastenbearbeitung: "Laborative Vorversuche im Rahmen der Sanierungsuntersuchung und Sanierung (Batch- und Säulentests)"; auf der Grundlage einer im Auftrag des LfULG durch BGD GmbH bearbeiteten Studie

#### Ansprechpartner

Dr. Claus Nitsche

BGD Boden- und Grundwasserlabor GmbH, Unternehmen der GICON-Gruppe; Tiergartenstraße 48, 01219 Dresden; [cnitsche@bgd-gmbh.de](mailto:cnitsche@bgd-gmbh.de)

Antje Sohr

SÄCHSISCHES LANDESAMT FÜR UMWELT, LANDWIRTSCHAFT UND GEOLOGIE, Referat 42 | Boden, Altlasten, Abteilung Wasser, Boden, Wertstoffe; Zur Wetterwarte 11, 01109 Dresden; [antje.sohr@smul.sachsen.de](mailto:antje.sohr@smul.sachsen.de)

# Programmgrundlagen

## ALTEX, EXPOSI und SIWAPRO

Dietrich Swaboda, GFI Grundwasserforschungsinstitut GmbH Dresden

### 1 Einleitung

Die Programme ALTEX, EXPOSI und SIWAPRO sind als Beratungssysteme für die Sickerwasserprognose konzipiert. Kernelement eines derartigen Beratungssystems stellt ein mathematisches Migrationsmodell dar, das den Transport von Stoffen (der auch als Migration bezeichnet wird) prozessbasiert beschreibt. Das mathematische Migrationsmodell kann in unterschiedlicher Form formuliert werden. Es bildet das Prozessmodell ab und gibt damit den grundlegenden Funktionsumfang des Programms vor. Um bewerten zu können, ob ein Programm für die modellgestützte Sickerwasserprognose geeignet ist, gilt es das mathematische Migrationsmodell mit zugehörigem Prozessmodell zu betrachten und zu analysieren.

Bei der Ableitung der grundlegenden Strömungs- und Transportgleichungen wird auf die notwendigen Vereinfachungen eingegangen, die zur Bildung praktikabler und handhabbarer Migrationsmodelle vorgenommen werden müssen. Es werden Spezialfälle der Transportgleichung dargelegt, für die analytische Lösungen möglich sind. Allgemeinere Formulierungen benötigen eine numerische Lösung. Hierzu werden die Grundzüge der numerischen Modellierung und die Schritte der praktischen Umsetzung kurz umrissen.

Beratungssysteme für die Sickerwasserprognose grenzen sich gegenüber reinen Stofftransportmodellen dahingehend ab, dass sie neben der Umsetzung eines mathematischen Migrationsmodells zusätzliche Programmfunktionen einbinden, wie z.B. die Bereitstellung von Schätzgrößen für Modellparameter, Assistenten für den Modellaufbau und Assistenten für eine automatisierte Berechnung bzw. Darstellung der Ergebnisse der Sickerwasserprognose. Derartige Programmfunktionen werden als weiteres (sekundäres) Kriterium für die Programmauswahl in die Betrachtung einbezogen.

Die Programme ALTEX, EXPOSI und SIWAPRO und deren Funktionsumfang werden kurz vorgestellt und die Grundlagen für eine Programmauswahl dargelegt. Es werden Empfehlungen zur Programmauswahl gegeben. Mit Hinweisen zur Programmanwendung und zur Bewertung von Modellierungsergebnissen schließt dieser Beitrag ab.

### 2 Bildung mathematischer Migrationsmodelle

#### Allgemeine Formulierung

Mathematische Migrationsmodelle werden aus einer Fluss- und Massenbilanzgleichung in Form einer Stoffstrombilanzgleichung entsprechend Gl. (2-1) gebildet. Diese beschreibt die Migration eines Migranten<sup>1</sup>  $i$  infolge der Transportprozesse Diffusion, Dispersion und Konvektion, als Folge von Speicheränderungen sowie Quellen- und Senkeneffekten. Derartige

---

<sup>1</sup> Ein Migrant kann eine Komponente der Mischphase, z.B. ein im Wasser gelösten Schadstoff, sein.

Migrationsgleichungen sind für jeden Migranten  $i$  und für jede der zu betrachtenden Mischphasen<sup>2</sup>  $j$  der Migration aufzustellen. Diese bilden Teilsysteme der Migration. Der summarische Migrationsprozess ergibt sich aus der Wirkung aller Teilsysteme. Verknüpft werden Migrationsgleichungen durch Quell- und Senkenterme, die wiederum Transferprozesse zwischen den Teilsystemen beschreiben. Für die Reaktionsprozesse gilt es geeignete Teilprozessmodelle bzw. Transferprozessmodelle zu bilden und in die Migrationsgleichung zu integrieren.

$$\operatorname{div} \left( \underbrace{-D_{M,i,j} \operatorname{grad} c_{i,j}}_{\text{Diffusion}} - \underbrace{\bar{D}_{D,i,j} \operatorname{grad} c_{i,j}}_{\text{Dispersion}} + \underbrace{\bar{v}_j c_{i,j}}_{\text{Konvektion}} \right) = \underbrace{-\partial (\theta_j c_{i,j}) / \partial t}_{\text{Speicheränderung}} + \underbrace{\sum S_{i,j}}_{\text{Quell- und Senkeneffekte}} \quad (2-1)$$

$D_{M,i,j}$  Molekulardiffusionskoeffizient des Stoffs  $i$  in der Mischphase  $j$   $m_j^3 / (m_R \cdot s)$

$\bar{D}_{D,i,j}$  hydrodynamischer Dispersionskoeffizient des Stoffs  $i$  in der Mischphase  $j$   $m_j^3 / (m_R \cdot s)$

$\bar{v}_j$  Volumenstromrate bzw. -dichte in  $m_j^3 / (m_R^2 \cdot s)$

$\theta_j$  volumetrischer Gehalt der Phase  $j$  in  $m_j^3 / m_R^3$

$c_{i,j}$  Konzentration des Stoffs  $i$  in der fluiden Mischphase  $j$

$\sum S_{i,j}$  Quellen- und Senkenterm, wie z.B.

Phasentransferreaktionen (Ionenaustausch, Sorption/Desorption, Lösung/Fällung, Verflüchtigung)

phaseninterne Reaktionen (Säure/Base- oder Oxidation/Reduktionsreaktionen)

Transferprozesse zwischen Teilsystemen werden durch Vor- und Rücktransfer der Migranten gebildet. Sind der Vor- und Rücktransfer gleich groß, spricht man davon, dass sich die zwei Teilsysteme im dynamischen Gleichgewicht befinden, sonst spricht man von Nichtgleichgewicht. Hierbei wird schneller (spontaner) und langsamer (kinetischer) Transfer unterschieden. Im Falle eines langsamen Transfers sind kinetische Formulierungen der Reaktionsgleichungen notwendig, dies gilt oftmals für biologisch unterstützte Abbaureaktionen aber auch für Sorptionsvorgänge. Gleichgewichtsformulierungen können als Einzelstoffformulierung (Einzelstoffgleichgewicht z. B. Sorptionsisotherme), als Zwei- oder Mehrstoffformulierungen (z.B. Ionenaustausch bzw. Multiple-Stoff-Gleichgewichtsformulierung) beschrieben werden.

Bleiben Transferreaktionen zwischen den Teilsystemen unberücksichtigt spricht man von einseitigen Reaktionen bzw. Quellen/Senken, die für jedes Teilsystem separat z.B. als Raten 0. oder 1. Ordnung formuliert werden.

Zur Bildung handhabbarer reaktiver Stofftransportmodelle ist eine sehr weitgehende Abstraktion auf die maßgebenden Prozesse erforderlich. Dies betrifft sowohl die Beschränkung auf möglichst wenige Modellphasen, zwischen welchen die Modellstoffe transferiert werden, als auch auf möglichst wenige Modellstoffe, deren Transfer von stöchiometrischen Gleichungen strukturiert wird.

<sup>2</sup> Als Phasen sind eine heterogene, räumlich fixierte Festphase sowie die fluiden homogenen Mischphasen Wasser und Luft im Mehrphasensystem Boden zu differenzieren.

## Migrationsprozessmodell der ungesättigten Bodenzone

Ein einfaches Migrationsmodell der ungesättigten Bodenzone bildet die Migration eines Migranten  $i$  in der Wasserphase und der Feststoffphase (unter Vernachlässigung des Transports in der Gasphase) in einer räumlichen Dimension ab. Es wird durch Reduktion des allgemeinen Migrationsmodells (Gl. (2-1)) gebildet. Es sind dabei Teilsysteme für die Wasserphase und für die Feststoffphase sowie geeignete Transferprozessmodelle zu betrachten. Der Transport in der Feststoffphase als Teilprozess kann vernachlässigt werden. Das Migrationsmodell kann wie folgt gekennzeichnet werden.

### Wasserdynamik:

- homogene, 1D-Strömung ohne interne Quellen/Senken
- stationär / instationär

### Stofftransport:

Als Teilprozesse und Transferprozesse zwischen den Teilsystemen werden folgende Prozesse betrachtet:

<u>Teilprozess</u>		<u>Teilprozessmodell</u>
Reaktion	Abbau als homogene Reaktion in der Wasserphase unter Vernachlässigung von Transferreaktionen	Reaktion 1. Ordnung als Einzelstoffformulierungen (einseitiger Senkenterm)
Speicherung	in den Phasen Wasser und Feststoff	Einzelstoffgleichgewichtsformulierung: Sorptionsmodell nach Henry / Freundlich Transferreaktion: Einzelstoffnichtgleichgewichtsformulierung

Die zugehörige Migrationsgleichung (Konvektions-Dispersions-Gleichung) nimmt dabei die Form:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \theta D_{L,i} \frac{\partial c_{L,i}}{\partial x} \right) - \frac{\partial q c_{L,i}}{\partial x} = \frac{\partial \theta c_{L,i}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_d c_{s,i}}{\partial t} + \mu_{L,i} \theta c_{L,i} \quad (2-2)$$

an, wobei  $x$  die Ortskoordinate,  $t$  die Zeit,  $\theta$  der vol. Wassergehalt,  $c_{L,i}$  die Konzentration des Migranten  $i$  in der Wasserphase,  $c_{s,i}$  die Beladung des Feststoffs durch den Migranten  $i$ ,  $\rho_d$  die Lagerungsdichte des Feststoffs,  $D_{L,i}$  der Dispersions-Diffusionskoeffizient des Migranten  $i$  in der Wasserphase,  $q$  der Fluss nach Darcy und  $\mu$  die Abbaurrate 1. Ordnung sind.

Als Teilprozessmodell, dass die Stoffspeicherung durch den Feststoff als Einzelstoffgleichgewichtsformulierung beschreibt, kann im einfachsten Fall ein lineares Isothermenmodell angewendet werden:

$$c_s = K_d \cdot c_L \quad (2-3)$$

Dieses Modell kann in guter Näherung die Speicherung organischer Stoffe durch den Feststoff beschreiben. Die Sorption von Schwermetallen ist konzentrationsabhängig, z.B. durch eine Freundlich-Isotherme, zu beschreiben.

$$c_s = K_f \cdot c_L^n \quad (2-4)$$

Nichtlineare Isothermen können vereinfacht abschnittsweise durch lineare Isothermenabschnitte approximiert werden. Hinweise hierzu werden in (Labo, 2006) gegeben.

### Analytische Lösung der Konvektions-Dispersions-Gleichung

Durch Einführung eines (konstanten) Retardationskoeffizienten  $R = 1 + K_d \cdot \rho_d / n_e$  auf der rechten Seite in Gl. (2-2) und Nutzung von Gl. (2-3), Ersetzen von  $q$  mit der Abstandsgeschwindigkeit ( $q = v_a \cdot n_e$ ) und Division von Gl. (2-2) durch  $\theta$  mit der Restriktion ( $\theta = n_e = \text{const.}$ ) erhält man die Konvektions-Dispersions-Gleichung der Form:

$$D_L \frac{\partial^2 c_L}{\partial x^2} - v_a \frac{\partial c_L}{\partial x} = \frac{\partial c_L}{\partial t} R + \mu \cdot c_L \quad (2-5)$$

Gl. (2-5) kann für bestimmte Anfangs- und Randwerte analytisch gelöst werden. Für die Anwendung der vereinfachten Konvektions-Dispersions-Gleichung ergeben sich folgende Restriktionen:

- Einzelstoffbetrachtung,
- einschichtiger Transportterm,
- vordefinierte Randbedingungen (Quelltermfunktion), z.B. konstant od. exponentiell abnehmend,
- lineare Sorption,
- stationärer Wasserfluss,
- orts- und zeitkonstanter (geschätzter) Wassergehalt.

### Numerische Lösung von Strömungsgleichung und Konvektions-Dispersions-Gleichung

Die numerische Lösung von Gl. (2-2) erfolgt sinnvollerweise durch Kopplung mit einem numerischen Strömungsmodell der Bodenzone, das die Strömungsgleichung zeit- und ortsabhängig löst. Strömungsgleichungen werden wiederum auf der Grundlage einer Bilanzgleichung und einer dynamischen Grundgleichung (Darcy-Gesetz) gebildet. In der Bilanzgleichung für Wasser gilt es den Wassergehalt als zeitabhängige Größe und in der Strömungsgleichung die Durchlässigkeit für Wasser als Funktion des Wassergehalts  $K(\theta)$  zu erfassen. Die Strömungsgleichung für teilgesättigte poröse Medien wird als RICHARDS-Gleichung bezeichnet. Diese beinhaltet neben  $K(\theta)$  die Funktion der kapillaren Speicherkapazität  $C(h)$ .

$$C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K(\theta) \cdot \frac{\partial h}{\partial z} \right) \quad (2-6)$$

Die Funktionen  $K(\theta)$  und  $C(h)$  bzw.  $\theta(h)$  in Gl. (2-6) sind durch geeignete Parametermodelle abzubilden. Gebräuchlich hierfür ist das Parametermodell nach (van Genuchten, 1980).

$$\theta(h) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[1 + |\alpha \cdot h|^n\right]^m} \quad (2-7)$$

Hierbei sind  $\theta_r$  der residuale Wassergehalt,  $\theta_s$  der Wassergehalt bei Sättigung sowie  $\alpha$  und  $n$  Formparameter der Funktion  $\theta(h)$ . Van Genuchten (1980) leitet für das Parametermodell nach Gl. (2-7) die Durchlässigkeitsfunktion nach Mualem (1976) mit der Restriktion  $m = 1-1/n$  wie folgt ab.

$$\frac{K(\theta)}{K_s} = S_e^\lambda \cdot \left[1 - \left(1 - S_e^{1/m}\right)^m\right]^2 \quad S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2-8)$$

Für viele praktische Anwendungen kann mit dem von Mualem (1976) für natürliche Böden abgeleiteten Wert des Tortuositätsfaktors  $\lambda = 0,5$  gearbeitet werden. Hinweise zu den Gültigkeitsgrenzen des Modells und zu physikalisch sinnvollen Parameterrelationen werden z. B. in (Nielsen u. Luckner, 1992) gegeben.

Für die Anwendung des Modells wird demnach neben der Angabe der gesättigten hydraulischen Leitfähigkeit  $K_s$  die Angabe der bodenspezifischen Parameter (van Genuchten-Parameter) erforderlich (vgl. Angaben in Tab. 3-1).

## Numerische Modellierung

Die numerische Lösung der Strömungs- und Transportgleichung erfolgt orts- und zeitdiskret unter Anwendung von Iterations- bzw. Näherungsverfahren. Es sind dafür Anfangs- und Randbedingungen des Problems und Iterationskriterien (Schrittweiten, Abbruchkriterien) vorzugeben. Bei den hier zu betrachtenden Finite Elemente Modellen (FEM) erfolgt eine Ortsdiskretisierung durch Unterteilung in Elemente. Die Lösungsfunktion wird am Knoten berechnet. Neben den Anfangs- und ggf. Randbedingungen sind am Knoten die Materialeigenschaften bzw. die Parameter, die diese reflektieren, vorzugeben. Die Materialeigenschaften werden Modellschichten zugeordnet.

Die zeitliche Diskretisierung wird variabel gehalten und programmintern gesteuert. Damit wird die Berechnung beschleunigt und ggf. die Konvergenz verbessert. Numerische Lösungen setzen eine Konvergenz des Suchverfahrens voraus. In ungünstigen Fällen, bei mangelhafter Konvergenz bzw. Stabilität, kann es zum Abbruch der Berechnung oder zu fehlerhaften Ergebnissen (Überschwingen, Oszillation) kommen. Mit der Auswahl spezifischer Wichtungsverfahren kann der Anwender derartigen Problemen entgegenwirken. Im Anschluss an die Berechnung muss der Bilanzfehler des Modells geprüft werden.

Die numerische Modellierung bedeutet die Umsetzung folgender Schritte:

- Aufbau eines Knotenmodells,
- Zuweisung von Randbedingungen, Initialbedingungen und Materialschicht am Knoten,
- Angabe Anzahl der Modellschichten,
- Angabe der Modellparameter je Modellschicht und Stoff,
- Vorgabe zeitvariabler Randbedingungen (Wasserfluss, Quellstärke) im Fall instationärer Modellierung,

- Angabe von Iterationskriterien, Auswahl von Wichtungsverfahren,
- Angaben zur Programmsteuerung z.B. Ausgabezeiten, -punkte
- Durchführung der Berechnung,
- Ergebnisprüfung, Kontrolle Massenbilanzfehler

Beratungssysteme für die Sickerwasserprognose automatisieren den Modellaufbau und unterstützen den Anwender durch Bereitstellung von Schätzwerten für Modellparameter und durch geeignete Voreinstellungen der Programmsteuerung. Der Modellaufbau wird damit nicht nur vereinfacht, auch die Gefahr einer Fehlbedienung des Programms wird dadurch wirksam verringert.

### 3 Kurzvorstellung der Programme

Die nachstehende Charakterisierung der Programme ALTEX-1D, EXPOSI und SiWaPro DSS basiert auf einer Modellprüfung und -bewertung, die im Jahr 2008 für das Sächsische Landesamt für Umwelt und Geologie durchgeführt wurde.

Im Rahmen des Programmvergleichs wurden folgende Programmversionen getestet:

ALTEX-1D	(Stand: 12/07)	(LABO/ALA)
EXPOSI	V. 2.4	(IBB/DGC)
SiWaPro DSS	V. 1.0.5	(TUD/KP Ing.-Gesellschaft für Wasser und Boden)
HYDRUS 1D	V. 3.0	(U.S. Salinity Laboratory, Riverside, CA)

Das Programm HYDRUS 1D wurde im Vergleich als Referenzprogramm mitgeführt. HYDRUS 1D ist ein reines Simulationswerkzeug, kein Beratungssystem für die Sickerwasserprognose. Es eignet sich deshalb hier zur Gegenüberstellung und Abgrenzung Simulationswerkzeug – Beratungssystem.

#### ALTEX-1D

Das Programm ALTEX-1D ist als MS Excel-Anwendung zur analytischen Lösung der Konvektions-Dispersions-Gleichung konzipiert. Es werden die Transportprozesse Konvektion/Dispersion mit/in der Wasserphase, die Stoffspeicherung durch den Feststoff als lineare Sorption und Abbau / Zerfall 1. Ordnung in der Wasserphase unter stationärem Fluss (zeitlich und örtlich konstante durchströmte Porosität) berücksichtigt. Es stellt die Lösung der Transportgleichung als Funktion der Zeit  $c(x, t)$  und des Orts  $c(t, x)$  für zwei Randbedingungen Grundfall A: konstante Konzentration (Quellstärke) und Grundfall B: mit der Zeit exponentiell abnehmende Konzentration bereit (vgl. Abschnitt 2, analytische Lösung der Konvektions-Dispersions-Gleichung).

Modellparameter (durchströmte Porosität, Sorptionskoeffizient, Dispersivität, Trockenroh-dichte, Abbaurate), Modellgeometrie (Angaben zur Quelle, Länge der Transportzone) sowie Randbedingungen (Sickerwasserrate) werden in die Zellen des Tabellenkalkulationsblatts eingetragen. Aus den Angaben werden Bilanzgrößen: Lebensdauer /Abklingkonstante der Quelle, Retardationsfaktor und mittlere Verweilzeit in der Transportzone berechnet. Weiterhin ist die Angabe der Größe der kontaminierten Fläche für die Berechnung der dem Grundwasser zugehenden Stofffrachten vorgesehen. Anhand der Verknüpfungen der Zellen des Tabellenkalkulationsblattes kann die Berechnung der Zwischenergebnisse, die entsprechend den in Labo (2006) dokumentierten Grundlagen umgesetzt wurden, leicht nachvollzogen werden. Den Tabellenkalkulationsblättern sind Makros hinterlegt, die nach einer Prüfung der

Eingabedaten, die analytische Lösung der Transportgleichung nach van Genuchten (1982) zit. in (Labo, 2006) berechnen und das Ergebnis  $c(x, t)$  in Form einer Wertetabelle und eines Konzentrations-Zeit-Diagramms dokumentieren.

Aus dem Ergebnis der Lösungsfunktion werden bewertungsrelevante Größen, wie: die maximale Konzentration, der Zeitpunkt der maximalen Konzentration am OdB, die Zeitpunkte der Prüfwertüber- bzw. -unterschreitung, die Zeitdauer der Prüfwertüberschreitung, die maximale Fracht, die Gesamtschadstofffracht, mittlere Jahresfrachten und flächenspezifische Frachten berechnet und ausgewiesen.

Schätzwerte für Modellparameter werden in tabellarischer Form bereitgestellt. So sind in ALTEX-1D Tabellen zur Berechnung einer linearisierten Freundlich-Isotherme mit Parametern aus (Utermann u. a., 2005), Tabellen zur Berechnung von  $K_d(Koc)$ , Abbauraten, FK-Werte der KA 4 und eine Schätzung der Sickerwasserrate nach (Beims u. Gutt, 2002) integriert.

### Anwendungsgrenzen

- vordefinierte Quelltermfunktion,
- Transportterm auf eine Modellschicht beschränkt (Bildung von Äquivalentparametern möglich),
- nur stationäre Strömung, orts- und zeitkonstanter Wassergehalt,
- Berechnung des Wassergehalts in Abhängigkeit der Sickerwasserrate wird nicht unterstützt,
- nur lineare Sorption,
- Ableitung einer Quelltermfunktion wird nicht unterstützt

## **EXPOSI**

Das Programm EXPOSI ist ein Verfahren zur Bewertung von Bodenkontaminationen. Es beinhaltet ein numerisches Modell für die Prognose des Stofftransports in der ungesättigten Bodenzone (Aerationszonenmodellierung) sowie ökotoxikologische Modellansätze zur Bewertung der Exposition. Es ermöglicht die Abschätzung und Bewertung der

- Exposition beim Schutzgut Mensch, der
- Schadstoffkonzentration des Sickerwassers sowie der
- Schadstofffracht ins Grundwasser am Übergang von ungesättigter zur wassergesättigten Zone (Ort der Beurteilung)

für relevante Nutzungsszenarien, Altersgruppen und Berechnungszeiträume auf den Beweisebenen *Detailuntersuchung* und *Sanierungsuntersuchung* (EXPOSI, 2007).

Im Weiteren wird nur auf das Teilmodell der Aerationszonenmodellierung eingegangen.

EXPOSI nutzt für die *Aerationszonenmodellierung* (Berechnung der ungesättigten Bodenwasserströmung und Lösung der Transportgleichung) das Programm HYDRUS-1D. Bei der Erstellung des Strömungsmodells werden für Standardanwendungen der Sickerwasserprognose weitgehend sinnvolle Vereinfachungen getroffen. Es wird damit auch wenig erfahrenen Nutzern ein einfacher, effizienter und fehlerfreier Aufbau eines Strömungsmodells mit dem Prognosewerkzeug ermöglicht.

Es verfügt über folgende Leistungsmerkmale:

- Berechnung der ungesättigten, ein-dimensionalen Bodenwasserströmung,
- Berechnung des Wassergehalts bzw. der durchströmten Porosität unter stationären und instationären Randbedingungen,
- Berechnung des konvektiv-dispersiven Stofftransports für die Wasserphase,
- lineare Gleichgewichtssorption am Feststoff,
- Abbau in der Wasser- und Feststoffphase,
- Berücksichtigung von Initialkonzentrationen,
- geschichtete Bodenprofile.
- Einmischen in das Grundwasser.

Als obere Strömungsrandbedingung ist eine konstante bzw. eine zeitvariable Flussrandbedingung vorgesehen. Das Programm unterstützt den Nutzer durch eine

- einfache Schätzfunktion für die Sickerwasserrate aus dem Boden (Sickerwasserrate nach (Beims u. Gutt, 2002)) sowie durch eine
- vereinfachte (fiktive) Generierung synthetischer Datenreihen.

Mit einer vereinfachten (weitgehend fiktiven) Diskretisierung des Jahresniederschlags in Halbjahres- oder Monatsmittelwerte unterstützt das Programm die Prüfung von zeitabhängigen Prozessen (Abbauraten). Für realitätsnähere Szenarien können Messwerte der Sickerwasserrate als zeitvariable Randbedingung vorgegeben werden.

Durch Schätzwerte für hydraulische Parameter, für Abbauraten, Schätzfunktionen für Sorptionsparameter und für die Dispersivität wird dem Nutzer der Modellaufbau erleichtert. Die Ergebnisse der Prognose werden als Konzentrationsprofile und als Konzentrations-Zeit-Kurven angezeigt und in Textdateien ausgegeben.

#### Anwendungsgrenzen

- nur lineare Sorption,
- Anpassbarkeit auf Falldaten beschränkt, da
  - fixierte Dispersivität
  - begrenzter Simulationszeitraum  $t_{\max} < 70$  a
  - keine Ausgabe der berechneten Wassergehalte

#### **SiWaPro DSS**

Das Programm SiWaPro DSS ist ein komplexes, numerisches Simulationswerkzeug, das basierend auf SWMS 2D (Šimunek u. a. 1994) für die Lösung 2-dimensionaler Transportprobleme unter ungesättigten Strömungsbedingungen entwickelt wurde. Der Funktionsumfang des Programms ist auf insgesamt 12 Dialogfelder aufgeteilt und entspricht etwa dem von HYDRUS 2D. Für spezielle Modellanwendungen, wie die Sickerwasserprognose, stellt SiWaPro DSS Assistenten bereit, die einen standardisierten und automatisierten Modellaufbau ermöglichen.

Der Assistent zur Sickerwasserprognose sieht den Modellaufbau mit den fünf Schritten:

- Import der Modellgeometrie aus einer GeoDin-Datenbank,

- Auswahl der hydraulischen Parameter anhand der Bodenart,
- Ermittlung und Festlegung der Strömungsrandbedingungen,
- Ermittlung und Festlegung der Transportparameter,
- Auswahl und Vorgabe der Quelltermfunktion als konstante / zeitvariable Randbedingung

vor.

Die Ergebnisse der Modellprognose werden übersichtlich in Form eines Berichts dokumentiert. Nach der Erstellung des Modells können die Modellparameter über die Benutzeroberfläche des Programms bearbeitet werden.

## **HYDRUS 1D**

HYDRUS 1D berechnet die Bewegung von Wasser und Wärme sowie den Transport von Stoffen in variabel gesättigten porösen Medien. HYDRUS 1D löst die Strömungsgleichung ungesättigter poröser Medien (Richards-Gleichung) instationär nach dem FEM-Galerkin-Verfahren. Eine Vielzahl von Systemrandbedingungen (z. B. Atmosphäre, freie Drainage, seepage face) sind im Programm implementiert und anwendungsspezifisch aufbereitet, um die physikalischen Besonderheiten des Übertritts von Wasser in/aus teilgesättigte(n) poröse(n) Medien modelltechnisch umzusetzen. HYDRUS 1D berechnet konvektiv-dispersiven Stofftransport als Einzelstoffformulierung oder unter Berücksichtigung von Kettenreaktionen, nichtlineare Sorption als Gleichgewichtsformulierung oder als Nichtgleichgewichtsformulierung nach dem Modell von van Genuchten u. Wagenet (1989) (chemisches Nichtgleichgewicht). HYDRUS 1D berechnet Diffusion in der Wasser- und Gasphase sowie lineares Gleichgewicht zwischen den fluiden Phasen. Der Stoffaustausch zwischen mobilen und immobilen Phasen heterogener Fließfelder kann nach dem Modell nach (van Genuchten u. Wierenga, 1976) als physikalisches Nichtgleichgewicht beschrieben werden.

Das Programm HYDRUS 1D ist prinzipiell für Sickerwasserprognosen nutzbar, stellt aber nur Schätzwerte für Parameter der Bodenwasserdynamik bereit. Mehraufwand entsteht auch bei der Datenauswertung und Bewertung. Bislang fehlen Anleitungen zur Nutzung des Programms im Rahmen der Sickerwasserprognose. Das Programm ist frei (public domain) und jederzeit über das Internet verfügbar.

Tab. 3-1 gibt einen Überblick über Eingabegrößen und Modellparameter der Programme.

Tab. 3-1 Übersicht über Eingabegrößen und Parameter der Programme

Eingabewerte bzw. Parameter	Formel- zeichen	Einheit <sup>1)</sup>	ALTEX	EXPOSI	SIWAPRO DSS	HYDRUS- ID
<b>Abschätzung der Sickerwasserrate</b>						
jährl. Niederschlagshöhe	Nd <sub>jahr</sub>	mm/a	x	x	x	-
Niederschlagshöhe im Sommerhalbjahr	Nd <sub>som</sub>	mm	-	-	x	-
FAO-Grasreferenzverdunstung	ET0	mm/a	-	-	x	-
Nutzungsart		-	x	x	x	-
Versiegelungsgrad		%	x	x	x	-
Hangneigung		%	-	-	x	-
Lage des Grundwasserspiegels / OdB		m uGOK	x	x	x	x
<b>Profilangaben je Horizont</b>						
Teufe der Horizontunterkante	z	m uGOK	x	x	x	x
Bodenart		-	x	x	x	x
Skelettgehalt		Vol.-%	-	-	-	-
Trockenrohdichte	$\rho_d$	g/cm <sup>3</sup>	x	x	x	x
Humusgehaltklasse nach KA4 / C <sub>org</sub>		- / %	x	x	x	-
Tongehalt	T	%	x	x	x	-
pH-Wert	pH	-	x	x	x	-
Schadstoffgehalt oder Initialkonzentration	c <sub>0</sub>	µg/L	-	x	x	x
Initialbedingung Bodenwasserströmung (Druckhöhe, Wassergehalt)	$\theta$	-	-	x	x	x
<b>Angaben zur Quelle</b>						
Schadstoffgehalt		mg/kg	x	x	x	x
Initialkonzentration	c <sub>1</sub>	µg/L	x	x	x	x
kontaminierte Fläche	F	m <sup>2</sup>	x	x	-	-
<b>abzuleitende Größen / Parameter je Horizont</b>						
Sickerwasserrate			x	x	x	x
Feldkapazität	FK	Vol.-%	x	-	-	-
van Genuchten - Parameter			-	x	x	x
ges. Durchlässigkeit	Ks	m/s	-	x	x	x
longitudinale Dispersivität	$\delta_l$	m	x	x	x	x
transversale Dispersivität	$\delta_{tr}$	m	-	-	-	-
Sorptionskoeffizienten	Kd; Kf; n		x	x	x	x
Abbaukoeffizient	$\mu$	1/a	x	x	x	x

1) Einheiten sind programmspezifisch, verbindlich sind Angaben der Programmhersteller; x (fett) direkter Eingabewert; x Modellparameter abgeleitet; - Modell / Modellparameter nicht implementiert

#### 4 Programmauswahl

Für eine Modellierung des Stofftransports sind Teilprozessmodelle und Transfermodelle einzusetzen, die den Transport, die Speicherung und die Wandlung des zu betrachtenden Migranten korrekt abbilden. In wieweit Einzelstoffformulierungen nach Gl. (2-2) hierfür geeignet sind, bedarf einer sorgfältigen Prüfung (z.B. durch Vergleich der Prognoseergebnisse mit Labormessdaten/Feldmessdaten). Weitere Modellvereinfachungen, wie auch der Einsatz analytischer Lösungen, sind prinzipiell möglich. Modellvereinfachungen müssen jedoch begründet, z.B. im Rahmen einer Systemanalyse (Ermittlung relevanter Prozesse und

Abhängigkeiten durch Sensitivitätstests/Szenarienmodellierung), erfolgen. Die dafür notwendigen Informationen können z.B. durch prozessorientierte Laboruntersuchungen gewonnen werden. Für eine Systemanalyse sind numerische Modelle aufgrund ihres Funktionsumfangs prinzipiell geeignet. Einige Programme stellen für die Prüfung zeitabhängiger Prozesse (Abbau, kinetische Sorption) synthetische zeitvariable Randbedingungen bereit. In Tab. 4-1 sind für eine Programmauswahl relevante Modell- und Programmfunktionen zusammengestellt.

Tab. 4-1 Wesentliche Modell- und Programmfunktionen für eine Programmauswahl bezüglich funktionaler Kriterien

	HYDRUS	SIWAPRO DSS	EXPOSI	ALTEX-1D
Modellfunktionen		numerisch		analytisch
Modellierung Quellterm	x	x	x	-
Instationäre Strömung	x	x	x	-
Zeitvariable Konzentrationsrandbedingung	x	x	x	-
Mehrschichtige Transportzone	x	x	x	(x) <sup>1)</sup>
Nichtlineare Sorption	x	x	-	-
Programmfunktionen				
synthetische, instationäre Strömungsrandbedingung	-	x	x	-

1) unterschiedliche Materialeigenschaften können näherungsweise durch Äquivalentparameter berücksichtigt werden.

Neben funktionalen Kriterien ist für die Programmauswahl entscheidend, in welcher Form das Programm die Umsetzung/Anwendung des Modells unterstützt bzw. vereinfacht. Der Aufwand dafür ist bei komplexen Modellen höher als bei vereinfachten Modellen. In komplexen Werkzeugen sind separate Programmteile, so genannte Assistenten, dafür vorgesehen. Auch der Aufwand für die Dokumentation der Modellergebnisse (z. B. Wassergehalt bei instationärer Lösung) und für die Plausibilitätsprüfung nimmt zu. Bei dem Einsatz numerischer Lösungsverfahren ist deren Fehler zu prüfen. Tab. 4-2 gibt für eine anwendungsorientierte Programmauswahl eine Übersicht über wesentliche Programmmerkmale.

Tab. 4-2 Übersicht über wesentliche Programmeigenschaften für eine anwendungsorientierte Programmauswahl

	HYDRUS-1D	EXPOSI	SIWAPRO DSS	ALTEX-1D
<b>Assistenten</b>				
Modellaufbau	-	x	x	nicht erf.
Wahl / Vorgabe der RB-Art	-	x	x	nicht erf.
<b>Parameterschätzung</b>				
Sickerwasserrate	-	x	x	x
Wasserfluss	x	x	x	x
Sorption	-	x	x	x
Abbau	-	x	x	x
<b>Datenverwaltung</b>	Textdateien	-	MS Access	MS Excel
<b>Ergebnisdarstellung</b>				
Wassergehalt $\theta(z,t)$	x	-	(x) <sup>1)</sup>	nicht erf.
Wassergehalt $\theta(t,z)$	x	-	(x) <sup>1)</sup>	nicht erf.
Konzentration $c(z,t)$	x	x	x	x
Konzentration $c(t,z)$	x	x	(x) <sup>1)</sup>	x
Ergebnisbericht	-	-	x	-
<b>Programmlimitationen</b>				
Simulationszeitraum	unbegrenzt	< 270 a	unbegrenzt	< 7000 a ?
Zeitdiskretisierung des Ergebnisses	Zeitschrittweite / 1 Zeiteinheit	gestaffelt	1 Zeiteinheit	1 a
<b>Rechenstabilität</b>				
Wasserfluss	k. A.	k. A.	k. A.	-
Stofftransport	Überschwingen möglich <sup>2)</sup>	Überschwingen möglich <sup>2)</sup>	Überschwingen möglich <sup>2)</sup>	ohne Einschränkung
<b>Plausibilitätskontrolle</b>				
Kontrolle Wasserbilanz	x	x	x	nicht erf.
Kontrolle Stoffbilanz	x	x	x	nicht erf.
<b>Programmverfügbarkeit</b>	public domain	lizenziert	lizenziert	public domain
<b>Zeitaufwand</b>				
Installation	ca. 5 min	ca. 10 min	30...40 min	ca. 5 min
Einarbeitungsaufwand	hoch	hoch	hoch	gering

<sup>1)</sup> nutzerfreundliche Filterfunktionen in MS Access; <sup>2)</sup> fehlerhafte Ergebnisse bei unzureichender Stabilität des Lösungsverfahrens z.B. infolge Oszillation möglich

### Empfehlungen zur Programmauswahl und zum Programmeinsatz

Wie in Abschnitt 2 dargestellt wurde, ist es theoretisch möglich, mit komplexen Werkzeugen einfache Migrationsmodelle zu bilden. Dies ist, insbesondere für ungeübte Anwender nicht zu empfehlen, da die Gefahr einer Fehlbedienung bei komplexen Modellen groß ist. Es wird empfohlen, die Modellierung mit einem einfachen Programm (z. B. ALTEX-1D) zu beginnen und das Ergebnis später für die Plausibilitätsprüfung komplexer Programme zu nutzen. (Die Programme ergänzen sich sinnvoll). Plausibilitätsprüfungen (z. B. Prüfung des Retardationskoeffizienten) müssen Bestandteil jeder Modellierung sein.

Im Folgenden wird die Nutzbarkeit der Programme für die Sickerwasserprognose stichpunktartig, verbal bewertet. Diese subjektive Bewertung erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit.

## ALTEX-1D

positiv:

- Tabellenkalkulation unterstützt Berechnung der Retardationsfaktoren und der Massenbilanz von Hand
- **schnelle Berechnung einfacher Szenarien für Prozessstudien** (Wirkung v. Abbau, Sorption, Dispersion)
- frei verfügbare Software, schnell einsetzbar

negativ:

- nur lineare Sorption, konstanter Wassergehalt und konstante Initialkonzentration im Transportterm

## EXPOSI

positiv:

- schneller unkomplizierter Modellaufbau
- einfache, aber gut nutzbare Parameterschätzung
- **effizient für Standardaufgaben der Sickerwasserprognose, für wenig geübte Anwender nutzbar**
- sinnvolle Vorauswahl der Randbedingungen – Minimierung von Anwenderfehlern

negativ:

- Verwaltung der Eingabedaten mangelhaft – Modelle nicht rekonstruierbar
- Ausgabe ohne Information zum Wassergehalt
- nicht für grundwasserbeeinflusste Standorte anwendbar
- Anschluss an Office-Anwendungen mangelhaft
- geringe Flexibilität, da Randbedingungen/Parameter teilweise fest vorgegeben

## SiWaPro DSS

positiv:

- komfortable datenbankbasierte Datenverwaltung – guter Anschluss an Office-Anwendungen
- vereinfachter Modellaufbau durch Assistenten
- **flexibles Simulationswerkzeug für anspruchsvolle Aufgaben der Sickerwasserprognose**
- Ergebnisbericht mit wesentlichen Angaben der Sickerwasserprognose

negativ:

- Einarbeitungsaufwand hoch,
- Installationsaufwand für gelegentliche Nutzung relativ hoch

## HYDRUS 1D

positiv:

- validierte, flexible Software
- Modellaufbau auch ohne Assistenten relativ einfach
- **für geübte Anwender im Rahmen der Sickerwasserprognose gut nutzbar**
- Berücksichtigung von Nichtgleichgewichtsbedingungen möglich

negativ:

- Mehraufwand, da keine Schätzfunktionen für Sorptionskoeffizienten und Abbauraten, keine synthetischen Niederschlagsdaten
- Gefahr der Fehlbedienung relativ hoch
- Plausibilitätsprüfung erforderlich
- Empfehlungen / Handlungsanleitungen zum Einsatz für Sickerwasserprognosen fehlen

## 5 Bewertung und Validität von Modellergebnissen

Die Güte einer Modellvorhersage kann leicht an der Güte und Qualität der Eingangsdaten gemessen werden. So kann Modellierung eine verbal-argumentative Sickerwasserprognose auf der Basis geschätzter Parameter stützen und zum besseren Verständnis der Prozesse beitragen. Die Modellierung auf der Basis laborativ ermittelter Parameter kann qualifizierte Sickerwasserprognosen liefern. Besonderer Wert muss hierbei auf die prozessorientierte Ableitung der Parameter gelegt werden. Ein belastbares Ergebnis kann aus einem Modell nur nach einer Kalibrierung und Validierung am Realobjekt abgeleitet werden. Dies gilt letztendlich auch für die modellgestützte Sickerwasserprognose. Dementsprechend differenziert muss auch das Ergebnis der modellgestützten Sickerwasserprognose betrachtet und bewertet werden.

## 6 Quellen

### **Beims u. Gutt: 2002**

BEIMS, U. ; GUTT, B.: Entwicklung eines rationellen Verfahrens zur Bewertung von Bodenkontaminationen und deren Exposition (EXPOSI) / DGC - Dresdner Grundwasser Consulting GmbH. 2002. – Abschlussbericht zum Vorhaben: KU0055K01KBH9, unveröffentlicht

### **EXPOSI 2007**

IBB Ingenieurbüro Beger für Umweltanalyse und Forschung, DGC - Dresdner Grundwasser Consulting GmbH: EXPOSI 2.4 *Verfahren zur rationellen Bewertung von Bodenkontaminationen – Expositions- und Sickerwasserprognose* - April 2007

### **van Genuchten u. Wierenga 1976**

GENUCHTEN, M.T. van ; WIERENGA, P.J.: Mass transfer studies in sorbing porous media, I, Analytical solutions. In: *Soil Sci. Soc. Am. J.* 40 (1976), S. 473–481

### **van Genuchten u. Wagenet 1989**

GENUCHTEN, M.Th. van ; WAGENET, R.J.: Two-Site/Two-Region models for pesticide transport and degradation: Theoretical development and analytical solutions. In: *Soil Sci. Soc. Am. J.* 53 (1989), S. 1303–1310

### **van Genuchten 1980**

GENUCHTEN, M. T.: A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. In: *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44 (1980), S. 892–898

### **LABO 2006**

Arbeitshilfe Sickerwasserprognose bei Detailuntersuchungen / Bund-/Länderarbeitsgemeinschaft Bodenschutz (LABO) Unterausschuss Sickerwasserprognose. 2006. –Stand Oktober

### **Kemmesies u.a. 2007**

Kemmesies u.a. 2007: SIWAPRO DSS-Entwicklung eines computergestützten Beratungssystems zur Sickerwasserprognose. BMBF-Förderschwerpunkt "Sickerwasserprognose", Gemeinsamer Schlussbericht der KP Ingenieurgesellschaft für Wasser und Boden mbH und des Institutes für Abfallwirtschaft und Altlasten der TU Dresden, 2007, <http://www.ibwabo.de/pdf/BMBF.pdf> FKZ: 02WP 0192, 0242,0502, 0503

### **Mualem 1976**

Mualem, Y.: A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. In: *Water Resour. Res.* 12 (1976), Nr.3, S. 513-522

**Nielsen u. Luckner 1992**

Nielsen, D. R.; Luckner, L.: Theoretical aspects to estimate reasonable initial parameters and range limits in identification procedures for soil hydraulic properties. In: Genuchten, M. Th.; Leij, F. J.; Lund, L. J. (Hrsg.): *Proceedings of the International Workshop on Indirect Methods for Estimating the Hydraulic Properties of Unsaturated Soils*. Riverside, CA. 92521, USA, 11-13 October 1992, S. 147-160

**Šimùnek u. a. 1994**

ŠIMÙNEK, J. ; ŠEJNA, M. ; GENUCHTEN, M. T.: The SWMS 2D Code for simulating water flow and solute transport in two-dimensional variably saturated media. Ver. 1.21. 450 West Big Springs Road Riverside, CA 92507: U.S. Salinity Laboratory USDA, ARS, 1994

**Šimùnek u. a. 2005**

ŠIMÙNEK, J. ; ŠEJNA, M. ; GENUCHTEN, M. T.: The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional Movement of water, heat and multiple solutes in variably saturated media. Ver. 3. Riverside, California: Department of Environmental Sciences University of California Riverside, April 2005

**Ansprechpartner:**

Dr.-Ing. D. Swaboda  
GFI Grundwasserforschungsinstitut GmbH Dresden  
Meraner Str.10  
01217 Dresden  
EMail: dswaboda@gfi-dresden.de