

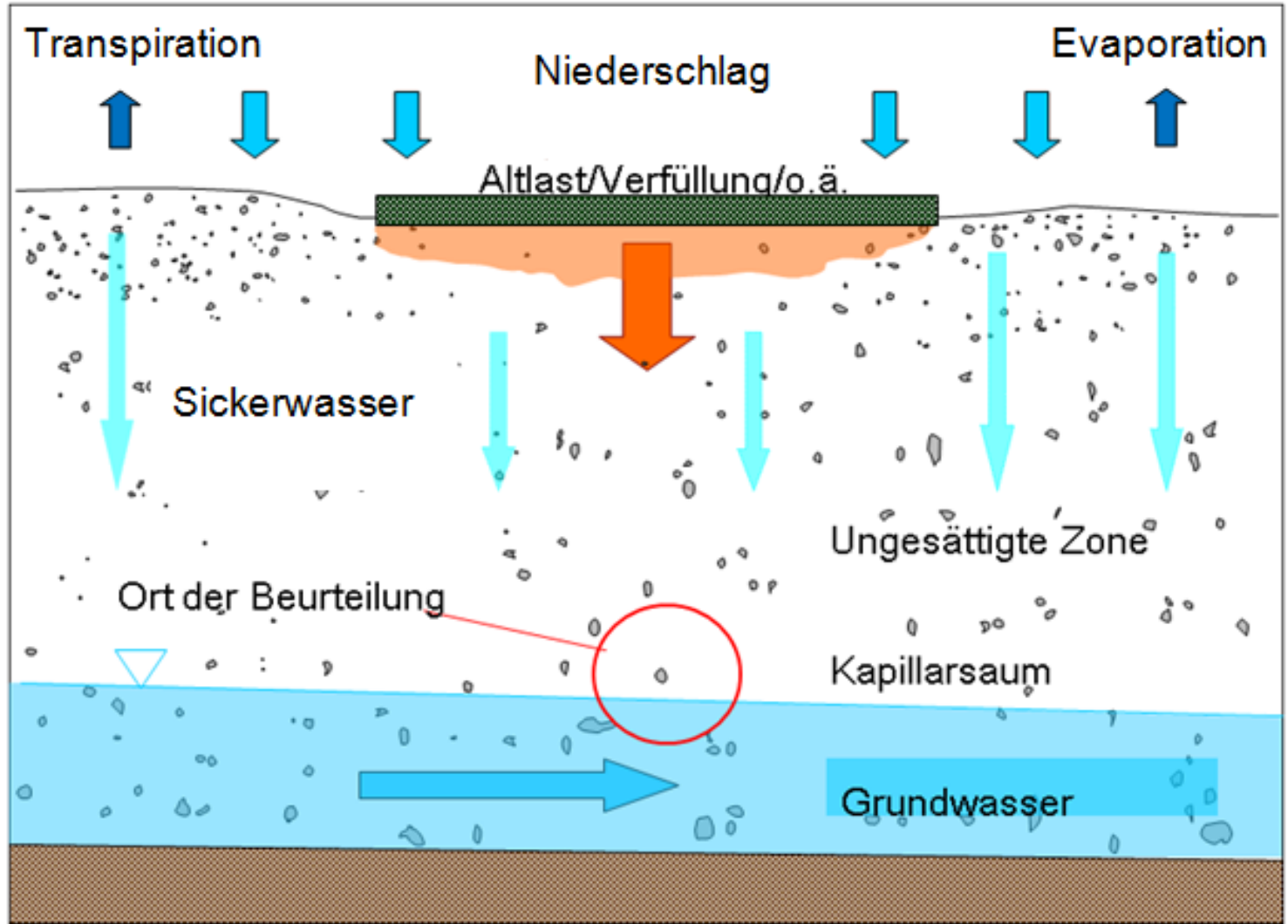
Workshop Sickerwasserprognose

Programm SiWaPro DSS
Dr.-Ing. Oliver Kemmesies
HPC AG, Harburg/Schwaben

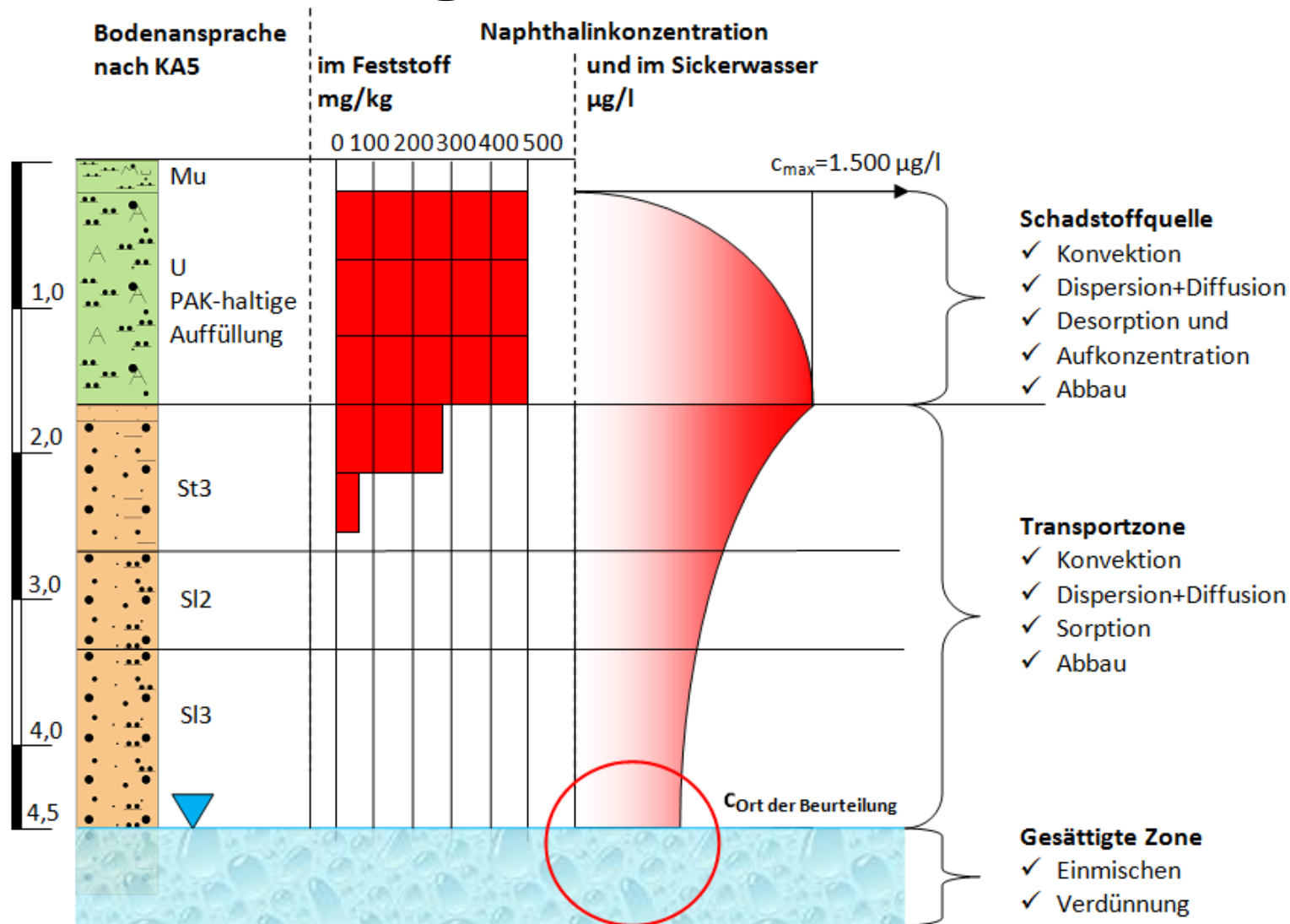
Gliederung

1. Aufgabenstellung
2. Programmvorstellung SiWaPro DSS
3. Eingangsparameter und deren Schwankungsbreiten
4. Sensitivitätsanalysen
5. Monte-Carlo-Simulation
6. Zusammenfassung

1. Aufgabenstellung

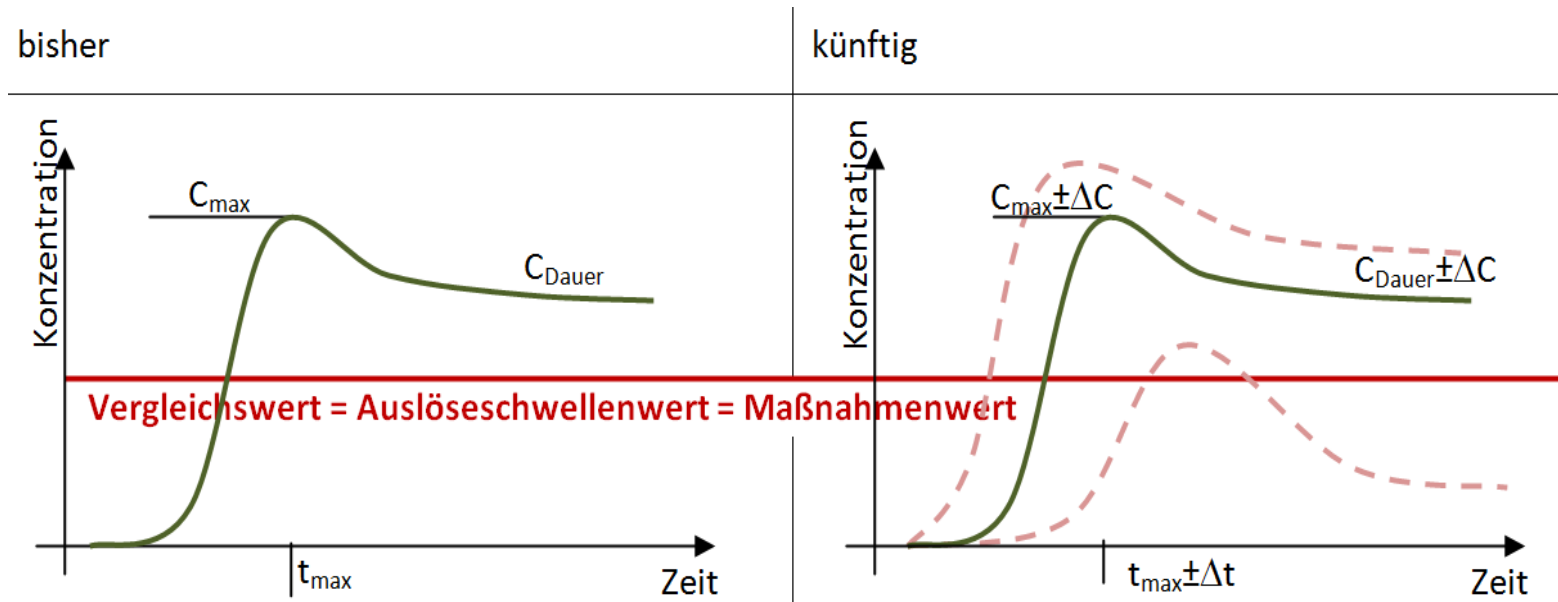


1. Aufgabenstellung: Prozesse



1. Aufgabenstellung

Entscheidungsfindung basiert nur auf EINER Zahl und berücksichtigt keine Schwankungsbreiten!



Ziel: Ausweisung des Einflusses von **Unsicherheiten** im Ergebnis

Weg: Sensitivitätsanalysen
Monte-Carlo-Simulation

2. Programmvorstellung SiWaPro DSS

Herausforderung

Entwicklung eines Programmes, das sowohl komplex ist als auch einfach zu handhaben ist!

Lösung

Entwicklung eines Assistenten zur Sickerwasserprognose:

- ✓ Nutzung aller verfügbarer Informationen
 - Erkundungsdaten (Schichtenverzeichnisse)
 - Standortdaten
 - Stoffdaten
- ✓ Ankopplung von Boden- und Stoffdatenbanken zur Parameterabschätzung
- ✓ Klare Aussagen, Protokollausdruck



2. Programmvorstellung SiWaPro DSS

Laufende praktische Anwendung im Ingenieurbüro

➡ *Entwickelt von Ingenieuren für Ingenieure*

Innovativ

➡ *Stets werden neue unterstützende Module entwickelt*

Datenorganisation in Datenbanken

➡ *Qualitätsmanagement und Qualitätssicherung durch Reproduzierbarkeit*

Grafische Funktionsdarstellung bei der Eingabe sowie Ausgabe

➡ *Sofortige Fehlerkontrolle, übersichtlich*

Onlinehilfe

➡ *Jederzeit abrufbar, Zeitersparnis*

Individuelle Einstellungsmöglichkeiten

➡ *Wahl zwischen Anwender- und Expertenmodus*

2. Programmvorstellung SiWaPro DSS

Import- und Exportschnittstellen

➔ *Kompletter Modellaufbau aus GeODin*

➔ *Zeitreihen aus Excel*

Verfügbare Sprachen

➔ *Deutsch, Englisch, Russisch, Arabisch, Japanisch, Spanisch*

Integrierter Wettergenerator

➔ *Bereitstellung der klimatischen Daten*

Implementierung der Empfehlungen aus dem

- **BMBF-Vorhaben „Sickerwasserprognose“**

➔ *u.a. Quelltermfunktionen*

Assistent zur Sickerwasserprognose

➔ *Gezielte Benutzerführung*

The screenshot displays the 'Assistent Sickerwasserprognose' (Sickerwater Prognoses Assistant) software interface. It features a multi-step navigation bar at the top (1-5) and several configuration panels:

- Geometrie:** Shows the data bank path 'Z:\Projekte\2008\08025\SiWAPRO DSS Assistent\Seminar_GeODin.mdb' and a table of projects:

| Kennung | Projektbezeichnung |
|---------|--------------------|
| GNXYK2 | Übung 1 |
| HNXYK2 | Übung 2 |
- Aufschlüsse:** A table showing well data:

| Kürzel | Bezeichnung | GOK | Tiefe |
|--------|-------------|-----|-------|
| RKS1a | RKS1 | 0 | 3 |
- Aufschlüssen:** A vertical cross-section diagram showing layers Z1, B, dz, and Z2 with depths from 0.0 to -3.0 m. Parameters like U, I, S and S, u are indicated.
- Simulationsparameter:** Simulation time set to 200 years.
- Speicherort für Ausgabedatei:** C:\Users\barbara GUNZENHAUSEN\Doc...
- Parameter and Properties:**
 - Organische und anorganische Schadstoffe (Schw): $c = c_0 \cdot e^{-(k_s \cdot t)}$
 - Mächtigkeit: 2.0 m
 - langjährige GivN: 250 mm/a
 - Porosität ϕ : 0.39
 - mittl. Wassergehalt θ : 0.23
 - Funktionsparameter: 8997.675 µg/L
 - Trockendichte ρ : 1.50 g/cm³
 - Verteilungskoeffizient K_D : 3 L/kg
- Gleichungen:**

$$k_s = \frac{Q_0}{M^2 \cdot \rho_s^2} \cdot \kappa \quad \kappa = \frac{1}{K_D + \frac{B_w}{\rho_s}}$$
- Graph:** 'Organische und anorganische Schadstoffe (Schneider et al., 2006)'. The y-axis is 'Konzentration c [µg/L] (µg·L⁻¹)' from 0 to 10. The x-axis is 'Simulationszeit [a]' from 0 to 900. The graph shows a sharp initial drop in concentration followed by a long tail.

2. Programmvorstellung SiWaPro DSS

- 1

GEOMETRIE

 - Tiefe
 - Schichten
- 2

BODENPARAMETER

 - Van Genuchten-Parameter
 - Durchlässigkeitsbeiwert und Lagerungsdichte
- 3

STRÖMUNGSRANDBEDINGUNGEN

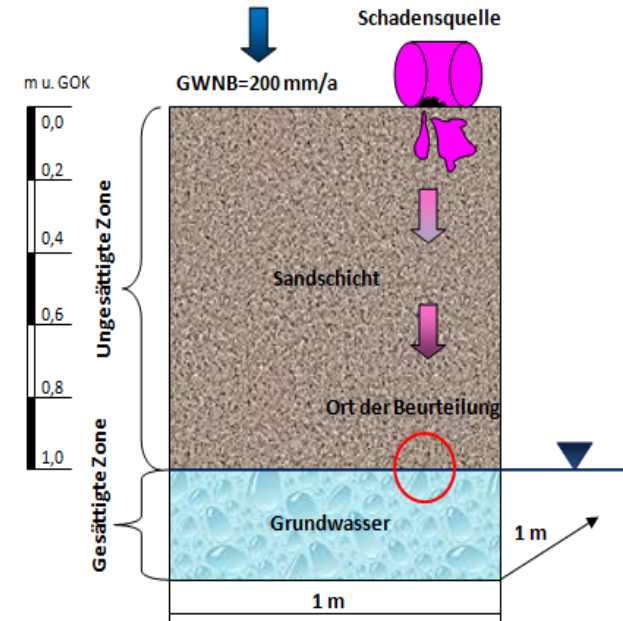
 - GWN-Wettergenerator (Zeitreihe, langjährige mittlere Werte)
 - Grundwasserspiegel: Lage und Schwankungsbereich
- 4

TRANSPORTPARAMETER

 - Dispersion und Diffusion
 - Sorption und Abbau
- 5

STOFFRANDBEDINGUNG

 - Konstante Quellkonzentration
 - Quelltermfunktionen



2. Programmvorstellung SiWaPro DSS

Assistent Sickerwasserprognose

1 2 3 4 5

Geometrie | Bodenparameter | Grundwasserneubildung | Transportparameter | Quelltermfunktion

GeODin - Datenbank
Z:\Projekte\2008\08025\SIWAPRO DSS Assistent\Seminar_GeODin.mdb

Daten der GeODin - Datenbank

| Projekte | | Aufschlüsse | | | |
|----------|--------------------|-------------|-------------|-----|-------|
| Kennung | Projektbezeichnung | Kürzel | Bezeichnung | GOK | Tiefe |
| 6NXYK2 | Übung 1 | RKS1a | RKS1 | 0 | 3 |
| HNXYK2 | Übung 2 | | | | |

Aufschlusssdaten

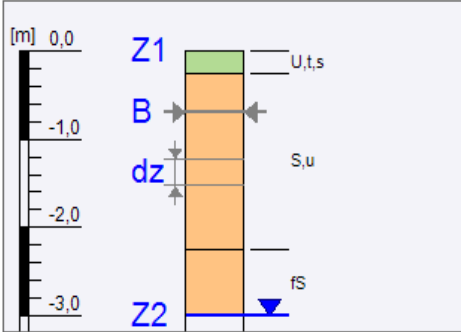
Oberkante (Z1) m 1. Schicht

Tiefe (Z2) m (Endteufe)

Simulationsparameter

Simulationszeitraum a

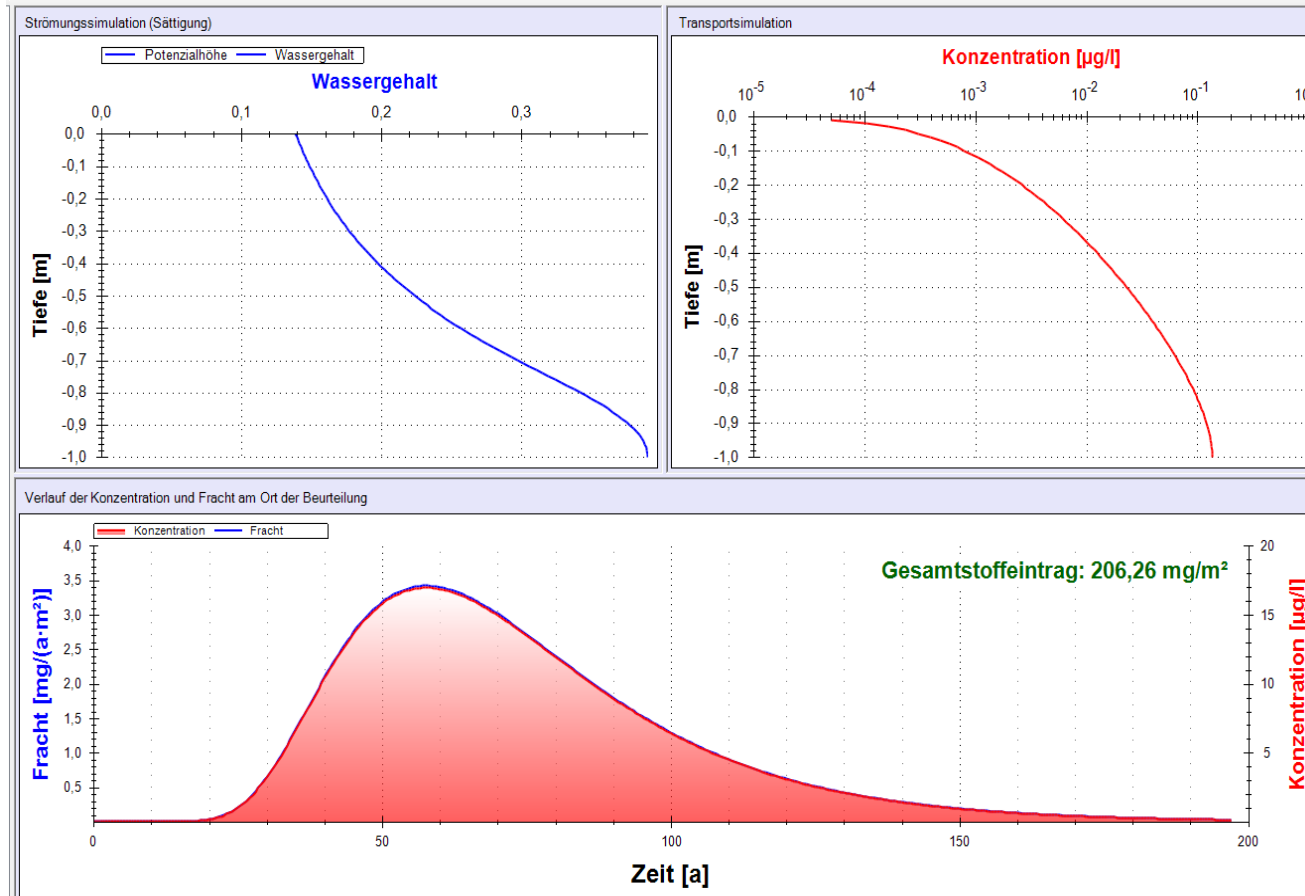
Speicherort für Ausgabedatei



Navigation: < > ✖

- ✓ 5 Schritte zur Sickerwasserprognose in Form eines Assistenten implementiert
- ✓ GeODin-Schnittstelle zum automatischen Modellaufbau vorhanden
- ✓ Datenbanken für Boden- und Schadstoffe implementiert
- ✓ Neueste Forschungsergebnisse des BMBF-Förderschwerpunkts eingearbeitet - Quelltermfunktionen

2. Programmvorstellung SiWaPro DSS



Online-Grafiken zur zeitlichen Entwicklung des Wassergehalts über die Tiefe, der Konzentration über die Tiefe und der Konzentration am Ort der Beurteilung

2. Programmvorstellung SiWaPro DSS

Ausgabeprotokoll mit

- ✓ Eingabedaten inklusive GeODin-Profil
- ✓ Konzentrations- und Frachtverlauf am Ort der Beurteilung über die Zeit
- ✓ Angabe des Zeitpunkts und Dauer der Prüfwertüberschreitung
- ✓ Gesamtstoffeintrag ins Grundwasser

Sickerwasserprognose gemäß §4 Abs. 3 BBodSchV

Programmname: SiWaPro DSS Version: 1.2.5 Kontakt: mail@bwabo.de

Vorhaben: **Übung 2**
 Variante: **Aufschluss: RKS1a**
 Az:

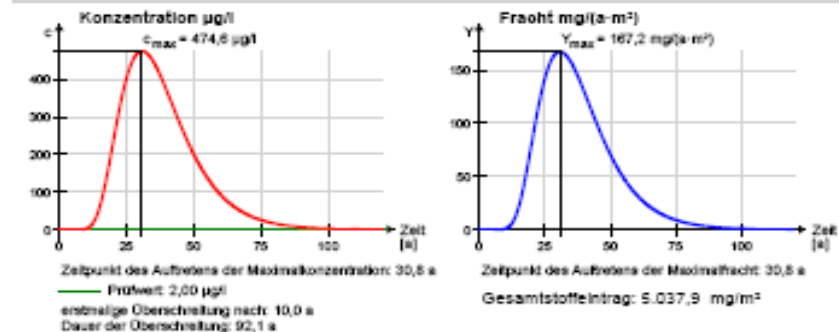
Eingabedaten: **Stoff/Stoffgruppe:**
 Geometrie und Prognosezeitraum **Naphthalin**

| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|
| | Oberkante: $z_o = 0 \text{ m}$ Ort der Beurteilung: $z_u = -3 \text{ m}$ |
| | Grundwasserneubildung: $V_{\text{GW}} = 335 \text{ mm/a}$ |
| Quellterm: Exponentialfunktion > Konzentration: $c_0 = 24.000,0 \text{ µg/l}$ > Abklingkonstante: $a = -0,3 \text{ 1/a}$ | Simulationszeitraum: $t_{\text{max}} = 120,0 \text{ a}$ |

| Lfd. Nr. | Schichtensprache | Bodenart | Mächtigkeit | | Bodenphysikalische Parameter | | | | | Stofftransportparameter | | | |
|----------|------------------|----------|-------------|------|------------------------------|----------------|----------|---------|-------|-------------------------|----------|-------|----------|
| | | | M | m | ψ | $\theta_{w,r}$ | α | n | k_f | β | δ | K_D | t_{90} |
| 1 | U1a | LU3 | 0,26 | 0,45 | 0,18 | 5,000 | 1,17 | 8,10E-7 | 1,80 | 0,30 | 30,27 | 1,00 | |
| 2 | S1a | St4 | 2,00 | 0,41 | 0,00 | 10,500 | 1,18 | 4,98E-8 | 1,80 | 0,30 | 3,03 | 1,00 | |
| 3 | R1 | R1 | 0,75 | 0,41 | 0,04 | 15,000 | 1,34 | 3,47E-5 | 1,80 | 0,30 | 0,30 | 1,00 | |

Legende:
 M - Mächtigkeit der Schicht ψ - Porosität β - Rohdichte
 $\theta_{w,r}$ - Restwassergehalt δ - Dispersivität
 α - Massstabfaktor K_D - Sorptionskoeffizient
 n - Anstiegsparameter
 k_f - Durchlässigkeitsbeiwert t_{90} - Halbwertszeit

Prognoseergebnis für den Ort der Beurteilung



3. Eingangsparmeter

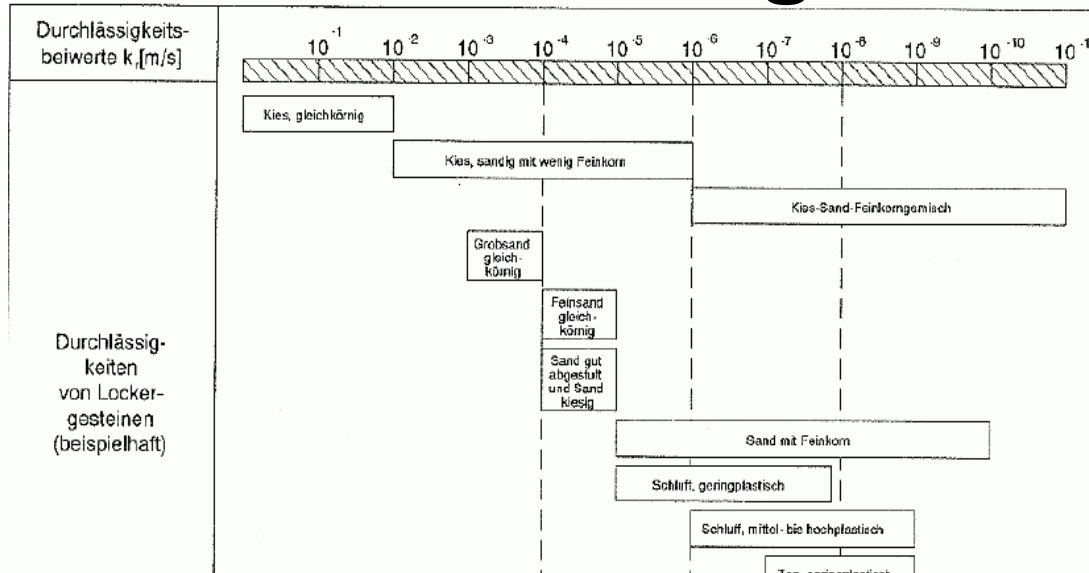
| Bodenparameter | Stofftransportparameter |
|-------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Durchlässigkeitsbeiwert k_f | Sorptionskoeffizienten nach Henry, Freundlich, Langmuir Zerfallskonstanten bzw. Halbwertszeiten |
| Porosität | |
| Maßstabsfaktor α | |
| Anstiegsparameter n | |
| Restwassergehalt | |
| Restluftgehalt | |
| Feldkapazität | |

+ Randbedingungen (Grundwasserspiegel etc.)

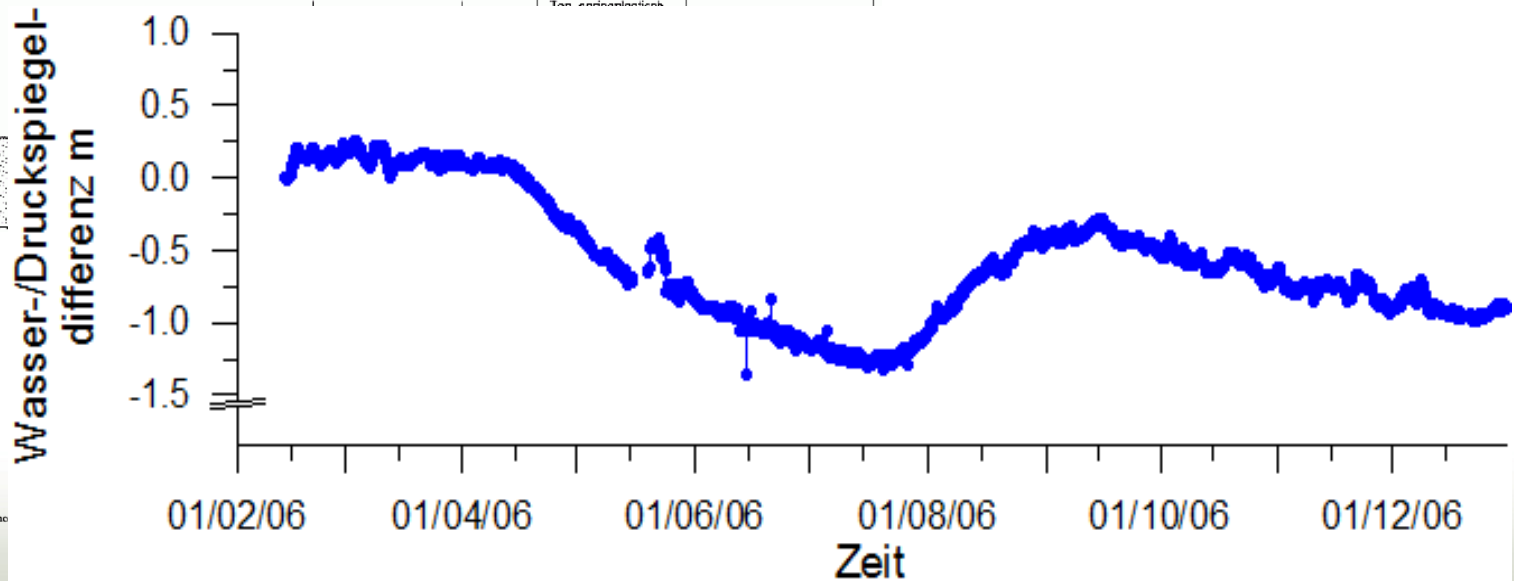
Alle Eingangsparmeter unterliegen **Schwankungen** auf Grund Ihrer:

- 1.natürlicher Heterogenität
- 2.Art der Bestimmung (Art der Messung, Abschätzung)

Natürliche Heterogenität



Schwankungen des k_f -wertes (Parameter) und des Grundwasserspiegels (Randbedingung)

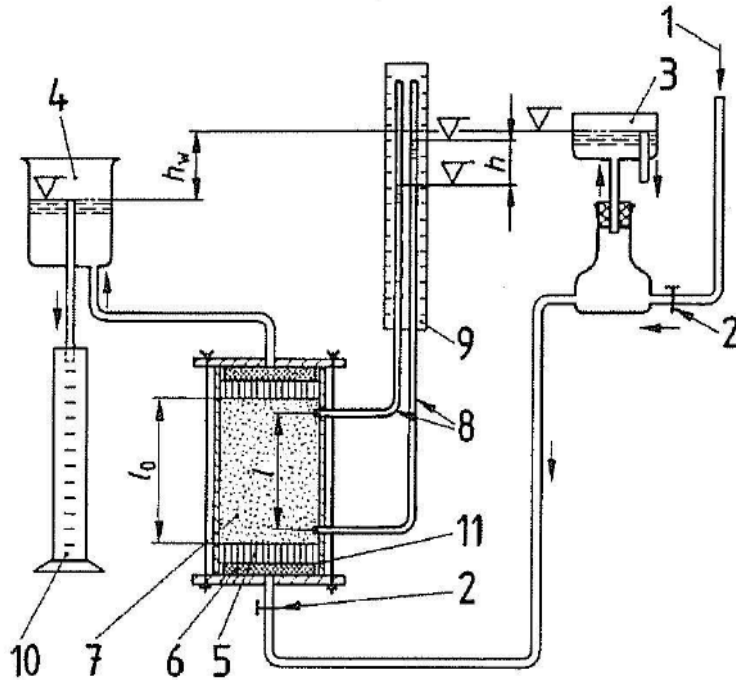


Durchlässigkeiten von Lockergesteinen (beispielhaft)

Bewertung der Durchlässigkeit nach DIN 18130

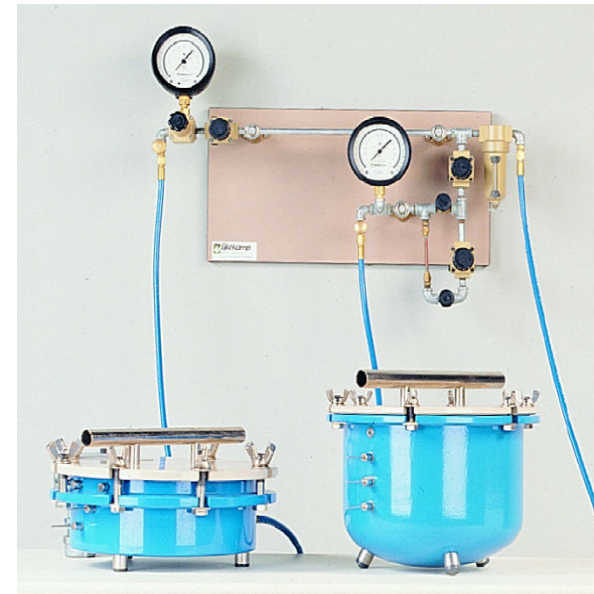
Quelle:
UBA,
2010

Messungenauigkeiten



k_f -Wert-Messung

Quelle: DIN 18130, Teil
1



Drucktopfmethode

Quelle: Umwelt-Geräte-
Technik GmbH,
Müncheberg (2004)

4. Sensitivitätsanalysen

- Nachweis, ob und wie stark die Konzentration (Fracht) in ihrem örtlichen und zeitlichen Verlauf sensitiv auf sinnvolle Parameteränderungen reagiert
- Quantifizierung über Sensitivitätskoeffizienten $SK(a_j)_i = \frac{\partial y_i}{\partial a_j} \cdot a_j$
- Bestimmung durch TAYLOR-Reihenentwicklung
- Skalierung der Parameter in begründeten Wertebereichen setzt die Einführung von einem oberen und einem unterem Grenzwert für jeden Eingangsparameter voraus
- Definition typischer Szenarien (alle oder ausgewählte Parameter)

Einführung von Parametergrenzwerten

a Parametergrenzwerte

Schicht: 1/7

Bodenparameter: U, s Schichtansprache (DIN 4022): U, s Bodenart (DIN4220): Ls3 Stoff: Naphthalin

| | Porosität | Restwassergehalt | Restluftgehalt | Dränage: Maßstabsfaktor alpha | Bewässerung: Maßstabsfaktor alpha | Anstiegsfaktor n | Le ko |
|------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------|-------------------------------------|-----------------------------------------|-------------------------------------|-------|
| Parameterwert | 0,4099 | 0,1513 | 0 | 2,864 | 2,864 | 1,49025 | 83, |
| Oberer Grenzwert | 0,45089 | 0,16643 | 0 | 3,1504 | 3,1504 | 1,639275 | 92, |
| Unterer Grenzwert | 0,36891 | 0,13617 | 0 | 2,5776 | 2,5776 | 1,341225 | 75, |
| Freier Parameter | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | <input checked="" type="checkbox"/> | |
| Temperaturabhängigkeit | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Datensätze hinzufügen/löschen

Szenarienauswahl: Szenario 1 Der Wertebereich aller Parameter wird auf $\pm 10\%$ ihres Wertes festgelegt

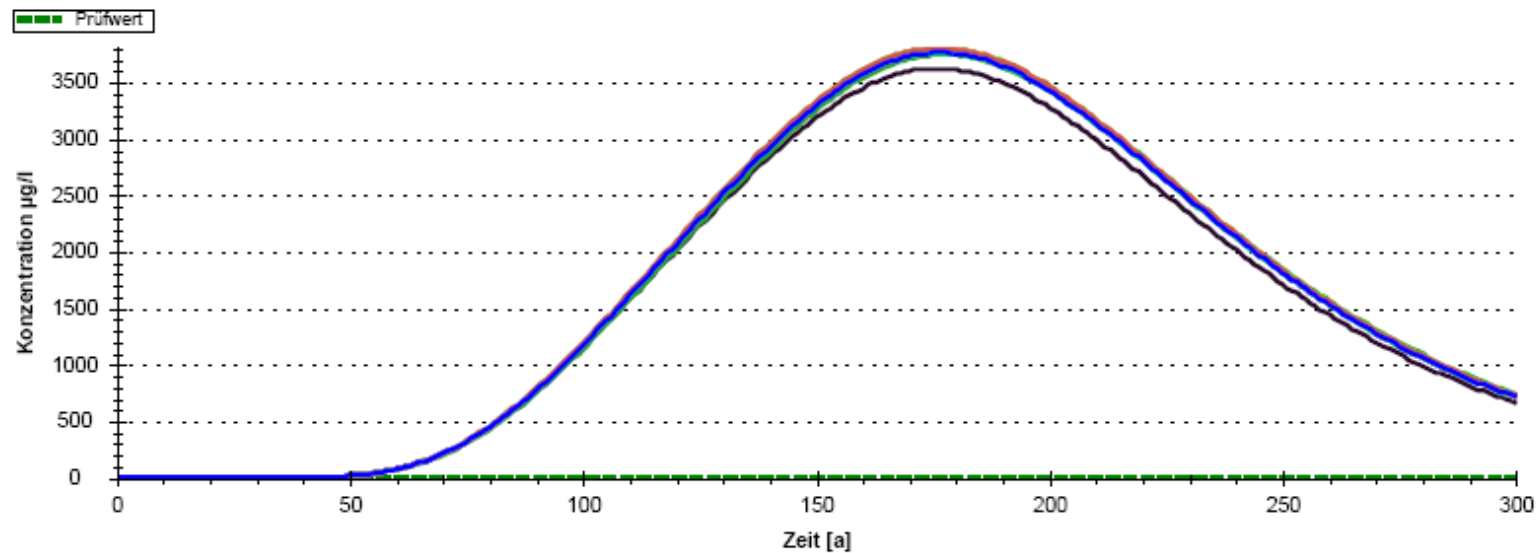
Buttons: ✓, ✗, ⏪, ⏩

4. Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse

Parameterranking (Anzeige der ersten 5 Parameter)

| max. Abweichung | MaterialNr: | Parametername |
|-----------------|-------------|-------------------------------------------------------------------------|
| 147,97 | 1: | CHPAR(6): Zerfallskoeffizient wässrige Phase 1. Ordnung [1/T] |
| 42,90 | 1: | PARAM(7): Leitfähigkeit bei So [L/T] |
| 42,42 | 1: | PARAM(1): Porosität [-] |
| 42,37 | 1: | CHPAR(5): HENRY-Sorptionskoeffizient [L ³ /M] |
| 14,48 | 1: | PARAM(8): Wassergehalt zum Zeitpunkt der Durchlässigkeitsbestimmung [-] |

Prognoseergebnis für den Ort der Beurteilung



5. Monte-Carlo-Simulation

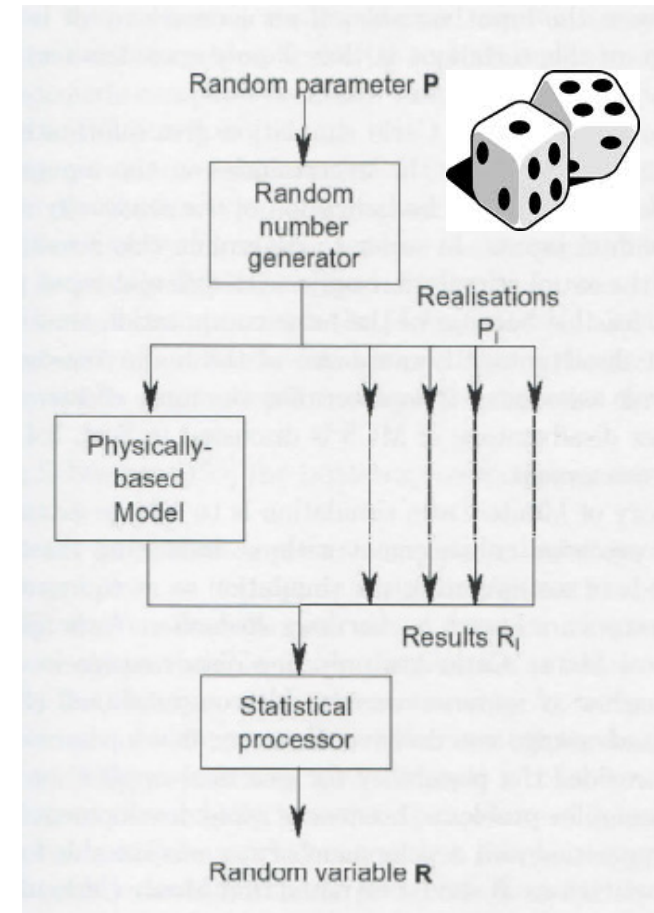
Ablauf:

1. Berechnungen (Schleife, $n = \dots$)

- Generierung von Zufallsvariablen (=Würfeln, jeder freie Parameter erhält einen neuen Wert innerhalb seines definierten Wertebereiches)
- Durchführung der Berechnung (realisations P_i)

2. Statistische Auswertung

- Mittelwert + Schwankungsbreite



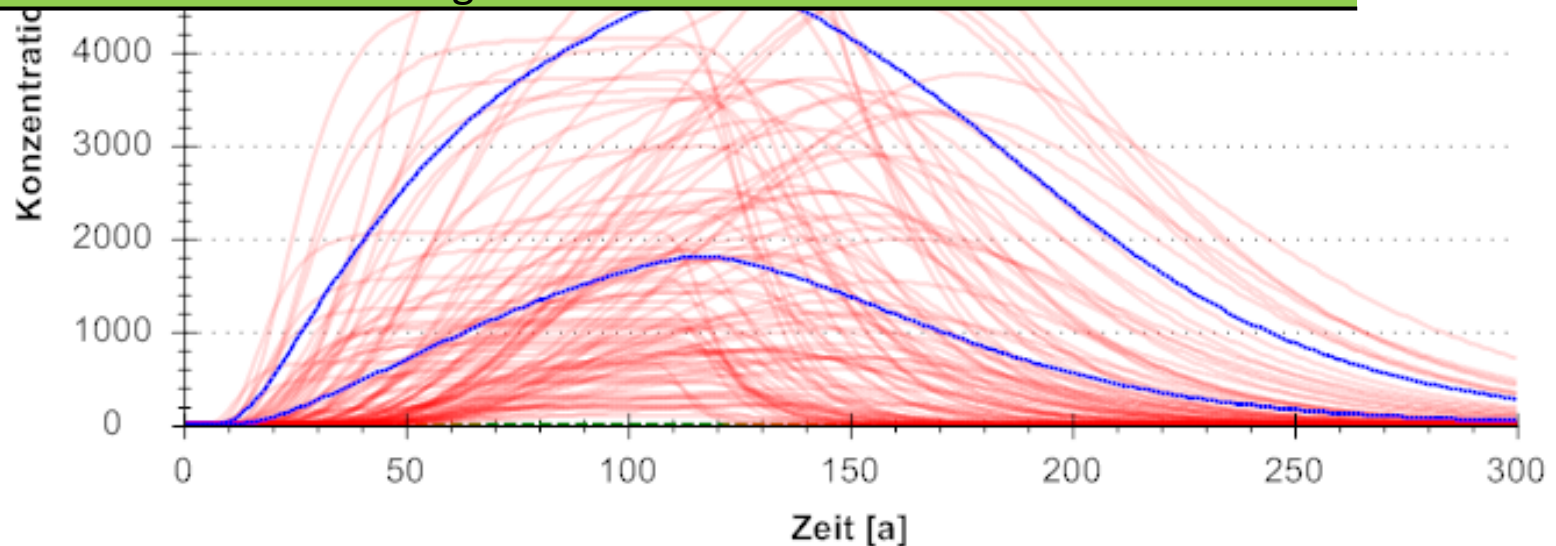
Quelle: Bárdossy et al., 2004

5. Monte-Carlo-Simulation

Prognoseergebnis für den Ort der Beurteilung

— Erwartungswert
 - - - obere Hüllkurve
 - - - untere Hüllkurve
 - - - Prüfwert

| Berechnungsgröße | Erwartungswert | Schwankungsbreit |
|-----------------------------------|----------------|------------------|
| Maximalkonzentration | 2.052 µg/l | ± 3.153 µg/l |
| Zeitpunkt des Auftretens | 128 a | ± 38 a |
| Erstmalige Prüfwertüberschreitung | 22 a | ± 19 a |
| Dauer der Prüfwertüberschreitung | 234 | ± 91 a |



6. Zusammenfassung

Das Ergebnis der Sickerwasserprognose ist in starken Maße von den Randbedingungen und Parametern abhängig.

- Randbedingungen

- (Zeitreihe der) Grundwasserneubildungsrate
- Lage des Grundwasserspiegels (=Länge der Transportstrecke)

- Parameter

- Abbaukoeffizienten
- Sorptionsparameter
- Hydraulische Leitfähigkeit ($k_f, \theta_0, \phi, \theta_{w,r}$)
- ...

6. Zusammenfassung

Empfehlungen

- Sachverhalte nicht aus dem Zusammenhang reißen
 - Standort nur in dem Maße idealisieren, wie unbedingt erforderlich
 - Quelle und Transportstrecke immer zusammen betrachten
 - Feststoffdaten einbeziehen
- Lokale Kalibrierung möglich

6. Zusammenfassung

- Sensitivität einzelner Parameter ist abprüfbar
- Ergebnis von Prognoseberechnungen immer anhand von Erwartungswert und Schwankungsbreite bewerten

Danksagungen

- ✓ für die freundliche Einladung
- ✓ an TASK für die Förderung der weiteren Qualifizierung des Programms
- ✓ an das BMBF für die Förderung der Entwicklung des Programms SiWaPro DSS im Rahmen des Förderschwerpunktes „Sickerwasserprognose“
- ✓ an unsere Projektpartner am Institut für Grundwasserwirtschaft (Herr Prof. Liedl) und am Institut für Abfallwirtschaft und Altlasten der TU Dresden (Herr Prof. Gräber, René Blankenburg u.a.)
- ✓ und natürlich an Sie, für Ihre Aufmerksamkeit und Geduld