


# Hinweise zur Erstellung und Beurteilung von Grundwassermodellen im Altlastenbereich

## LANUV-Arbeitsblatt 12





**Hinweise zur Erstellung und Beurteilung  
von Grundwassermodellen im Altlastenbereich  
LANUV-Arbeitsblatt 12**

Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen  
Recklinghausen 2010

## IMPRESSUM

Herausgeber	Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz Nordrhein-Westfalen (LANUV NRW) Leibnizstraße 10, 45659 Recklinghausen Telefon 02361 305-0 Telefax 02361 305-3215 E-Mail: poststelle@lanuv.nrw.de	
Autoren	Markus Himml Dr. Wolfgang Schäfer	GEOBIT Ingenieurgesellschaft mbH, Aachen Steinbeis-Transferzentrum Grundwassermodellierung, Wiesloch
Projektbegleitende Arbeitsgruppe	Wolf-Dietrich Bertges Dr. Rainer Baumann Dr. Lutz Decking Markus Himml Dorothee Levacher Michael Odensaß Rainer Röder Dr. Wolfgang Schäfer Gottfried Schellartz Stefan Schroers Birgit Wiele-Dixkens	LANUV NRW (Vorsitz) Emschergenossenschaft/Lippeverband Stadt Dortmund GEOBIT GmbH LANUV NRW LANUV NRW Kreis Viersen GWM Stadt Düsseldorf LANUV NRW Bezirksregierung Düsseldorf
Redaktion	Wolf-Dietrich Bertges, Dorothee Levacher, Stefan Schroers, Michael Odensaß	
Titelbild	Konzentrationen und Bahnlinien als ein Ergebnis der Grundwassermodellierung im Bereich eines Altstandortes (Ersteller: Dr. Schäfer mit Unterstützung der Firma GEOBIT Ingenieurgesellschaft mbH Aachen)	
ISSN	1864-8916 LANUV-Arbeitsblätter	

---

Informationsdienste: Informationen und Daten aus NRW zu Natur, Umwelt und Verbraucherschutz unter  
• [www.lanuv.nrw.de](http://www.lanuv.nrw.de)  
Aktuelle Luftqualitätswerte zusätzlich im  
• WDR-Videotext Tafeln 177 bis 179

Bereitschaftsdienst: Nachrichtenbereitschaftszentrale des LANUV NRW  
(24-Std.-Dienst): Telefon 0201 714488

Nachdruck – auch auszugsweise – ist nur unter Quellenangaben und Überlassung von Belegexemplaren nach vorheriger Zustimmung des Herausgebers gestattet.  
Die Verwendung für Werbezwecke ist grundsätzlich untersagt.

## Inhalt

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>9</b>
1.1	Aufbau der Arbeitshilfe	10
1.2	Stellung von Grundwassermodellen in der Altlastenbearbeitung	11
1.3	Auswahl möglicher Fragestellungen	12
1.4	Ablauf einer numerischen Modellierung	13
<b>2</b>	<b>Hydrogeologisches System (Hydrogeologisches Modell)</b>	<b>15</b>
2.1	Komponenten und Aspekte des hydrogeologischen Systems	16
2.1.1	Abgrenzung	16
2.1.2	Hydrogeologischer Aufbau	18
2.1.3	Bergsenkungsgebiete	19
2.1.4	Grundwasserhydraulische Kenngrößen	20
2.1.5	Natürliche Oberflächengewässer	21
2.1.6	Wasserschiffahrtsstraßen	23
2.1.7	Kanalisationsnetze	23
2.1.8	Grundwasserdynamik	24
2.1.9	Grundwasserbeschaffenheit, hydrogeochemisches Milieu	26
2.1.10	Grundwassernutzungen	26
2.1.11	Grundwasserneubildung	26
2.1.12	Wasserbilanz	28
2.2	Herkunft der Grundlagendaten für Grundwassermodelle	29
2.3	Grobentwurf des numerischen Modells	30
<b>3</b>	<b>Arbeitsschritte zur Strömungsmodellierung</b>	<b>32</b>
3.1	Definition der Aufgabenstellung	32
3.2	Dimensionalität	32
3.2.1	Räumliche Dimensionalität (2D, 3D)	32
3.2.2	Zeitliche Dimensionalität (stationär/instationär)	34
3.3	Räumliche und zeitliche Auflösung des Strömungsmodells	35
3.3.1	Räumliche Auflösung	35
3.3.2	Zeitliche Auflösung	36
3.4	Modellgeometrie (horizontaler/vertikaler Aufbau)	37
3.5	Randbedingungen der Grundwasserströmung	37
3.6	Quell- und Senkenterme, sonstige besondere Modellelemente	41
3.6.1	Brunnen	41
3.6.2	Grundwasserneubildung	41
3.6.3	Seen, Fließgewässer, Wasserschiffahrtsstraßen, Drainagen	41
3.7	Anfangsbedingungen	42
3.8	Modellparametrisierung	43
3.8.1	Durchlässigkeitsbeiwert, Transmissivität	43
3.8.2	Speicherwirksame Porosität, Speicherkoeffizient	43
3.8.3	Leakagefaktoren	44
3.9	Modellkalibrierung	44
3.10	Modellvalidierung	49
3.11	Wasserbilanz	49
3.12	Sensitivitätsanalyse	50
3.13	Prognose	51

<b>4</b>	<b>Arbeitsschritte zur Transportmodellierung</b>	<b>53</b>
4.1	Definition der Aufgabenstellung	53
4.2	Auswahl des numerischen Verfahrens	53
4.3	Festlegung der Rand- und Anfangsbedingungen	54
4.3.1	Simulation der Schadstoffquelle	54
4.3.2	Weitere Randbedingungen	55
4.3.3	Anfangsbedingungen	55
4.4	Transportparameter	56
4.4.1	Effektive Porosität	56
4.4.2	Dispersivitäten	58
4.4.3	Retardierungsfaktoren	59
4.4.4	Abbau- bzw. Reaktionsparameter	59
4.5	Kalibrierung des Transportmodells	61
4.5.1	Anpassung der Anfangsbedingungen	61
4.5.2	Anpassung der Transportparameter	62
4.5.3	Rückkopplung mit dem Strömungsmodell	62
4.5.4	Qualitätskriterien der Transportkalibrierung	63
4.5.5	Modellvalidierung	64
4.6	Anwendung des Transportmodells	64
4.6.1	Darstellung des Ist-Zustands	64
4.6.2	Prognoseberechnungen	65
<b>5</b>	<b>Grundwasserregionen in NRW</b>	<b>66</b>
<b>A1</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>69</b>
A1.1	Grundwasserströmung	69
A1.1.1	HUBBERT-Potenzial	69
A1.1.2	DARCY -Gesetz	70
A1.1.3	Kontinuitätsbedingung	74
A1.1.4	Bewegungsgleichung des Grundwassers	75
A1.1.5	Randbedingungen	77
A1.2	Stofftransport	78
A1.2.1	Advektion	78
A1.2.2	Diffusion	78
A1.2.3	Dispersion	79
A1.2.4	Einfache Reaktionsmodelle	82
A1.2.5	Biogeochemische Wechselwirkungen in Reaktionssystemen	87
<b>A2</b>	<b>Numerische Lösung der Strömungs- und Transportgleichung</b>	<b>90</b>
A2.1	Strömung	90
A2.1.1	Einführung	90
A2.1.2	Finite Differenzen Verfahren	93
A2.1.3	Finite Elemente Verfahren	94
A2.1.4	Lösung der Gleichungssysteme und zeitliche Diskretisierung	95
A2.1.5	Anfangsbedingungen	97
A2.1.6	Randbedingungen der Grundwasserströmung	97
A2.2	Transport	99
A2.2.1	Gitterverfahren (Euler-Verfahren)	100
A2.2.2	Numerische Kriterien für Gitterverfahren	101

A2.2.3	Charakteristiken-Verfahren (Lagrange-Verfahren)	103
A2.2.4	Random-Walk-Verfahren	105
A2.2.5	Vergleich der Diskretisierungsverfahren	106
A2.2.6	Kopplung zwischen Transport- und Reaktionsprozessen	108
A2.2.7	Anfangs- und Randbedingungen	109
<b>A3</b>	<b>Hinweise zur Ausschreibung und Vergabe von Grundwassermodellen</b>	<b>111</b>
<b>A4</b>	<b>Anwendungsbeispiele</b>	<b>113</b>
A4.1	Anwendungsbeispiel 1: Schwermetallbelasteter Abstrom einer Halde	113
A4.1.1	Situation	113
A4.1.2	Das Hydrogeologische Modell	114
A4.1.3	Numerisches Strömungs- und Transportmodell	115
A4.1.4	Detaillierergebnisse der numerischen Modellrechnungen	118
A4.2	Anwendungsbeispiel 2: PSM-Metabolit im Anstrom einer Wassergewinnungsanlage	124
A4.2.1	Situation	124
A4.2.2	Das Hydrogeologische Modell	125
A4.2.3	Numerisches Strömungs- und Transportmodell	126
A4.2.4	Bisherige Ergebnisse der numerischen Modellrechnungen	128
A4.3	Anwendungsbeispiel 3: Modellgestützte integrale Altlastenerkundung in Stuttgart-Feuerbach	131
A4.3.1	Situation	131
A4.3.2	Das Hydrogeologische Modell	131
A4.3.3	Numerisches Strömungs- und Transportmodell	134
A4.3.4	Ergebnisse der numerischen Modellrechnungen	137
<b>A5</b>	<b>Glossar</b>	<b>140</b>
<b>A6</b>	<b>Checkliste</b>	<b>150</b>
A6.1	Vorbemerkungen	150
A6.2	Generelle Überlegungen	150
A6.3	Hydrogeologisches System (Hydrogeologisches Modell)	150
A6.4	Strömungsmodell	151
A6.5	Transportmodell	153
A6.6	Modellpflege	155
<b>A7</b>	<b>Literatur</b>	<b>156</b>

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Ablaufschema einer Grundwassermodellierung	14
Abbildung 2: Schematische Darstellung für die räumliche Abgrenzung der Begriffe Bilanzraum, Modellraum und Aussageraum (LUCKNER et al., 2008)	17
Abbildung 3: Prinzipskizze zur Grundwasser- / Vorflutinteraktion	22
Abbildung 4: Anordnung von Randbedingungen in einem Modellgebiet (ergänzt nach KINZELBACH, W. und RAUSCH, R. 1995)	40
Abbildung 5: Gegenüberstellung gemessener und berechneter Grundwasserstände in Ganglinienform	45
Abbildung 6: Gegenüberstellung gemessener und berechneter Grundwasserstände in Form von Grundwasserhöhengleichungen	46
Abbildung 7: Streudiagramme mit Gegenüberstellung von gemessenen und berechneten Piezometerhöhen	47
Abbildung 8: Beispiel eines Streudiagramms zur Dokumentation einer instationären Modellkalibrierung durch Gegenüberstellung von gemessenen und berechneten Piezometerhöhen	47
Abbildung 9: Hydrogeologische Raumgliederung in NRW (LINDER, B.; ELFERS, H.; SCHLIMM, W.; SCHUSTER, H.; 2007)	66
Abbildung 10: Prinzipskizze zum DARCY-Experiment (aus LANGGUTH, H.R. & VOIGT, R., 2003)	71
Abbildung 11: Durchlässigkeitsbeiwerte und Korngrößenklassen nach BREDDIN (aus STORK, W., 1980)	71
Abbildung 12: Gesamtporenraum und nutzbare Porosität (aus LANGGUTH, H.R. & VOIGT, R., 2004)	73
Abbildung 13: Zu- und Abflüsse an einem Kontrollvolumen (nach WANG, H.F. & ANDERSON, M. P. 1982)	75
Abbildung 14: Ursachen für die korngerüstbedingte Dispersion	80
Abbildung 15: Größerskalige Geschwindigkeitsvariabilitäten infolge einer heterogenen Durchlässigkeitsverteilung.	81
Abbildung 16: Zusammenhang zwischen longitudinaler Dispersivität und Größe des Untersuchungsgebiets (aus RAUSCH ET AL., 2002, nach GELHAR ET AL., 1985)	82
Abbildung 17: Auswirkungen verschiedener Adsorptionsisothermen auf den Stofftransport für eine hypothetische eindimensionale Situation.	86
Abbildung 18: Berechnete Konzentrationen für ausgewählte Modellspezies.	89
Abbildung 19: Diskretisierungsprinzipien: Modellgebiet (links), Finite Differenzen Gitter (mitte), Finite Elemente Gitter (rechts) (verändert nach WANG, H.F. & ANDERSON, M. P. 1982)	91
Abbildung 20: Komplexe 3D Modellgitter: Finite Differenzen (oben), Finite Elemente (unten)	92
Abbildung 21: Schematische Darstellung der Ursachen numerischer Dispersion.	101
Abbildung 22: Auswirkungen von numerischer Dispersion und Oszillationen auf den Schadstofftransport.	102



Abbildung 23: Bewegung von Partikeln beim MOC-Verfahren (aus ZHENG UND WANG, 1999).	104
Abbildung 24: Beispiel für eine mit dem Random-Walk-Verfahren berechnete Partikelverteilung	105
Abbildung 25: Umsetzung der Transmissions-Randbedingung an einem Ausstromrand des Transportmodells (aus RAUSCH et al., 2002)	110
Abbildung 26: Darstellung des hydrogeologischen Modells im Aussagegebiet im Grundriss (Grundwasserhöhengleichen und Fließrichtungen bei Hochwasser im Rhein) und Profilschnitt.	115
Abbildung 27: Schematische Darstellung des numerischen Modells	117
Abbildung 28: Ergebnis der Strömungskalibrierung	117
Abbildung 29: Simulierte Cadmium Konzentrationen (Startwerte) im Abstrom der Aufhaldung (oben), Grundwasserstände und Sickerwasserraten (unten)	120
Abbildung 30: Verteilungsmuster gelöster Schadstoffe im Abstrom des hydraulischen Fensters	120
Abbildung 31: Gemessene und berechnete Konzentrationen (oben), Grundwasserstände und Sickerwasserraten (unten)	121
Abbildung 32: Simulierte Konzentrationsverteilung des Metabolits nach 18 Jahren Anwendungsdauer	128
Abbildung 33: Quotient von gemessenen zu modellierten Konzentrationen in Abhängigkeit von der Entfernung zum Eintragsareal	129
Abbildung 34: Profilschnitt durch das zentrale Modellgebiet von NNW (links) nach SSE (rechts)	132
Abbildung 35: Isolinien der Basislage der Dunkelroten Mergel (grüne Linien) und Verlauf der Störungen im Modellgebiet (rote Linien). Das Modellgebiet ist rot umrandet, in grau umrandeten Bereichen sind die Dunkelroten Mergel aufgrund ihres Gipsgehaltes hydraulisch inaktiv	135
Abbildung 36: Basis der Dunkelroten Mergel im numerischen Modell. Gleiche Farben bedeuten Flächen gleicher Basislagen. Die Verteilung ist eine direkte Kopie der Basislagen aus dem Hydrogeologischen Modell (siehe Abbildung 35). Das Modellgebiet ist rot umrandet, graue Bereiche sind inaktiv.	135
Abbildung 37: Berechnete LCKW-Verteilung für den April 2007 in den quartären Sedimenten (oben) und in den Dunkelroten Mergeln (unten). Das Modellgebiet ist rot umrandet, graue Bereiche sind inaktiv.	138
Abbildung 38: Berechnete LCKW-Verteilung für den April 2012 in den Dunkelroten Mergeln. Für das obere Bild wurde angenommen, dass alle Brunnen unverändert weiterbetrieben werden, bei der Berechnung für das untere Bild wurden sämtliche Brunnen im Modellgebiet abgestellt.	139

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Mögliche äußere Begrenzungen eines hydrogeologischen Modells	17
Tabelle 2:	Wasserhaushaltsbilanzgrößen einer hydrogeologischen Systemanalyse	28
Tabelle 3:	Herkunft der Grundlagendaten für Grundwassermodelle (NRW)	29
Tabelle 4:	Kriterien zur Wahl der Modelldimensionalität	34
Tabelle 5:	Beispiele für mittlere Halbwertszeiten in Tagen für ausgewählte Grundwasserschadstoffe (aus SUAREZ und RIFAI, 1999)	83
Tabelle 6:	Beispiele für Retardierungsfaktoren ausgewählter organischer Grundwasserschadstoffe in einem hypothetischen Aquifer mit $n_f = 0,25$ , $n_{mat} = 0,7$ , $\rho_{mat} = 2,65 \text{ kg l}^{-1}$ und $f_{OC} = 0,1\%$ , ermittelt anhand der $k_d$ -Wert Methode.	85
Tabelle 7:	Beispiele für Reaktionssysteme und deren Nachbildung in Multispeziesmodellen. <sup>1</sup> Summarische Spezies.	88
Tabelle 8:	Herkunft der Grundlagendaten für das numerische Modell.	113
Tabelle 9:	Herkunft der Grundlagendaten für die numerischen Modelle.	125
Tabelle 10:	Wichtige hydrogeologische und hydrochemische Einflussgrößen und deren Herkunft für das Anwendungsbeispiel Feuerbach.	133

# 1 Einführung

Berechnungen der Grundwasserströmung und des Stofftransportes mit Hilfe analytischer Ansätze sind beschränkt auf stark vereinfachte Geometrien und weitere einschränkende Annahmen, so dass sich diese häufig nur für einfach gelagerte Fälle und/oder überschlägige Betrachtungen eignen.

In vielen Fällen sind die Standortverhältnisse bei Altlasten komplexer Natur, so dass sich zur Beantwortung bestimmter Fragestellungen die Anwendung numerischer Modelle anbietet. Mit *numerischen Grundwassermodellen* können mit wenigen Einschränkungen beliebige Geometrien, *Heterogenitäten* des Untergrundes und zahlreiche weitere Einflüsse auf das Grundwasser gleichzeitig berücksichtigt werden.

Unter dem zusammenfassenden Oberbegriff "*numerische Grundwassermodelle*" werden in dieser Arbeitshilfe *numerische Grundwasserströmungsmodelle* und Stofftransportmodelle ggf. einschließlich reaktiver Stofftransportmodelle zusammengefasst. Notwendige Voraussetzung für ein Stofftransportmodell ist ein *Grundwasserströmungsmodell*, dessen Aufbau mithin stets vor der *Stofftransportmodellierung* stattfindet.

Die zunehmende Anwendung *numerischer Grundwassermodelle* auch in der Altlastenbearbeitung ist angesichts der heute zur Verfügung stehenden Computertechnik eine logische Konsequenz. Der Ausgangspunkt der Entwicklung der mathematischen Grundlagen zur Beschreibung der Grundwasserströmung reicht bereits weit ins 19. Jahrhundert zurück. Die in der Praxis notwendige Beschränkung der Lösung der Differentialgleichungen der Grundwasserströmung und des Stofftransportes auf einfache *Randbedingungen* war lange Jahrzehnte lediglich Ausdruck des Mangels an geeigneten Lösungsmethoden, die erst mit dem Beginn des Computerzeitalters einen rasanten Aufschwung erfahren haben.

Mit der allgemeinen Spezialisierung in allen Natur- und Ingenieurwissenschaften zwangsläufig verbunden ist die Tatsache, dass fundierte Kenntnisse der Anwendung von Grundwassermodellen auch in Fachkreisen der Altlastenbearbeitung nicht weit verbreitet sein können, wohingegen klassische Berechnungsansätze weitgehend bekannt sind bzw. von jedem fachlich Interessierten relativ leicht nachvollzogen werden können.

Aus diesem Umstand resultiert auch in Fachkreisen der Altlastenbearbeitung oft eine gewisse Hemmnis, sich mit Grundwassermodellen auseinanderzusetzen. Ziel der vorliegenden Arbeitshilfe ist es, zum Abbau solcher Hemmnisse beizutragen. Die Arbeitshilfe soll den Nicht-Modellierer durch alle Phasen einer möglichen Modellbearbeitung begleiten. Diese führen von der Entwicklung einer Aufgabenstellung über die kritische Würdigung der Datengrundlage und die *hydrogeologische Systemanalyse* zum Aufbau des *hydrogeologischen Modells* und schließlich zur Erstellung des *numerischen Grundwassermodells* mit der nachfolgenden Prüfungsphase.

Die Arbeitshilfe erhebt nicht den Anspruch eines Lehrbuchs. Vielmehr steht der praktische Umgang mit *numerischen Grundwassermodellen* im größeren Kontext der Altlastenbearbeitung im Vordergrund der Arbeitshilfe. Auf die Darstellung mathematischer Zusammenhänge wurde so weit vertretbar verzichtet; sie beschränkt sich daher im Wesentlichen auf ein notwendiges Minimum im Zusammenhang mit den physikalischen Grundlagen der Strömung und des Transports. Hinweise auf vertiefende Literatur sollen dazu dienen, diese Beschränkung aufzufangen. Die Zusammenstellung praktischer Hinweise steht im Vordergrund der Arbeitshilfe.

Die Arbeitshilfe bezieht sich ausschließlich auf Anwendungen in der gesättigten Zone von Lockergesteinsaquiferen ohne Berücksichtigung von Dichteeffekten. Sie hat somit nicht die Anwendung von Modellen zu Strömungsvorgängen in der ungesättigten Zone und in Festgesteinsaquiferen zum Gegenstand.

Die Arbeitshilfe favorisiert weder eine bestimmte Lösungsmethode, noch ist sie orientiert an einer speziellen Software.

## 1.1 Aufbau der Arbeitshilfe

Die Arbeitshilfe beschreibt die grundsätzlich empfohlene Vorgehensweise beim Aufbau eines Grundwassermodells. Sie soll dazu beitragen, dem Nichtspezialisten die Beurteilung von Modellen und deren Ergebnisse zu erleichtern. Sie bietet Hilfestellung bei der Vergabe, Begleitung und Abnahme eines Auftrags zur Grundwassermodellierung. Zielgruppe der Arbeitshilfe sind insbesondere die mit diesen Fragen befassten Behördenvertreter.

Kapitel 2 beschreibt die erforderlichen grundlegenden Arbeiten für den Aufbau des *hydrogeologischen Modells*. Diese Arbeitsschritte können als Teil der allgemeinen Standorterkundung (Detailuntersuchung) aufgefasst werden, die nicht notwendigerweise nur dann durchzuführen sind, wenn eine Grundwassermodellierung erfolgen soll. Vielmehr ermöglichen diese Untersuchungsschritte erst den Erkenntnisprozess, an dessen Ende ggf. über das Erfordernis einer Grundwassermodellierung zu befinden ist und der stets mit einer konkreten Fragestellung für eine eventuelle Modellierung verbunden sein muss. Gleichzeitig liefern diese Arbeitsschritte die Grundlagendaten, die für eine Grundwassermodellierung immer erforderlich sind.

Kapitel 3 enthält konkrete Erläuterungen und Hinweise zum Aufbau und zur Prüfung von Grundwasserströmungsmodellen.

Kapitel 4 beschreibt die Arbeitsschritte zur *Stofftransportmodellierung* mit einem Ausblick auf die Möglichkeiten reaktiver *Multispeziesmodelle*, die im Rahmen von Untersuchungen zu Prozessen natürlicher Schadstoffminderung in Zukunft an Bedeutung gewinnen werden.

Kapitel 5 enthält ergänzend zu Kapitel 2 Hinweise zu den hydrogeologischen Verhältnissen in Nordrhein-Westfalen und speziellen Charakteristika der hier vorkommenden Grundwasserlandschaften, die bei der *hydrogeologischen Systemanalyse* und der Grundwassermodellierung zu beachten sind.

Für das Verständnis der Herangehensweise numerischer Modelle ist es grundsätzlich empfehlenswert, sich die physikalischen Grundlagen der Strömung und des Transports zu verdeutlichen.

Der Anhang enthält daher im Kapitel A1 Erläuterungen zu den entsprechenden mathematischen Grundlagen, die auch für analytische Berechnungsansätze Gültigkeit besitzen.

Kapitel A2 beinhaltet in komprimierter Form die Grundlagen der numerischen Lösung der Strömungs- und *Transportgleichung*. Es werden die unterschiedlichen Verfahrensweisen der am weitesten verbreiteten Lösungsmethoden - *Finite Differenzen-* und *Finite Elemente Methode* - aufgezeigt. In diesem Kapitel wird auf eine breite Darstellung mathematischer Formeln und Zusammenhänge zugunsten einer besseren Lesbarkeit verzichtet.

Kapitel A3 des Anhangs liefert einige grundsätzliche Hinweise zur Vergabe von Leistungen im Zusammenhang mit Grundwassermodellen.

Kapitel A4 des Anhangs beinhaltet schließlich drei Anwendungsbeispiele zum Einsatz von Grundwassermodellen.

Ausgewählte Fachtermini sind im Text *kursiv* gekennzeichnet. Eine kurze Erläuterung zu diesen Begriffen findet sich im Anhang A5 "Glossar".

Begleitend zum Text enthält die Arbeitshilfe gesondert hervorgehobene Prüfhinweise für den Sachbearbeiter, die zumeist noch einmal im Anhang A6 als "Checkliste" aufgegriffen werden. Diese Prüfhinweise haben den Zweck, wesentliche Punkte einer Thematik noch einmal hervorzuheben, um auf diese Weise dem Sachbearbeiter die Konzeption eines Modells und die Prüfung einer Modelldokumentation zu erleichtern.

Die genannte Checkliste ist als Ergänzung der vorliegenden Arbeitshilfe gedacht. Sie kann als Unterstützung bei der Beurteilung eines vorhandenen Modells nach formalen Kriterien oder bei der Erstellung von Kriterien im Rahmen der Ausschreibung einer geplanten Modellrechnung eingesetzt werden.

Die Arbeitshilfe bezieht sich nicht auf die Anwendung von Modellen zu Strömungsvorgängen in der ungesättigten Zone und in Festgesteinsaquiferen. Dichteabhängige Strömungen werden ebenfalls nicht behandelt.

## 1.2 Stellung von Grundwassermodellen in der Altlastenbearbeitung

Einfache analytische Modellinstrumente dienen lediglich als *Screeningtools* für grundsätzliche Fragestellungen unter einfachen hydrogeologischen *Randbedingungen*. Damit wird das Augenmerk auf relevante Modellparameter im Hinblick auf die Erkundung gerichtet und man erhält erste Hinweise für die Sensitivität der Parameter. Weitergehende Aussagen sind daraus i.d.R. nicht ableitbar.

*Numerische Grundwassermodelle* bieten bei Grundwasserschadensfällen ein breites Anwendungsspektrum. Sind die Standortverhältnisse hinreichend erkundet, können Grundwassermodelle als tragfähige Prognoseinstrumente eingesetzt werden. Mit Hilfe von Grundwassermodellen können die Auswirkungen unterschiedlicher Handlungsvarianten gegenübergestellt und bewertet werden.

Die Aussagekraft und mögliche Detailgenauigkeit eines numerischen Modells wächst proportional mit der Güte und dem Umfang der im Rahmen der Standorterkundung gewonnenen Datengrundlage. Es darf aber nicht erwartet werden, dass mit einem *numerischen Grundwassermodell* die Wirklichkeit exakt abgebildet werden kann, da ein Modell stets auf einer Vereinfachung der tatsächlichen Verhältnisse beruht.

Die Aufgabe numerischer Modelle besteht in der Quantifizierung der charakteristischen Prozesse des einzelnen Standortes. Es ist daher erforderlich, zunächst diese Prozesse zu erkennen, um die Voraussetzungen für eine numerische Modellierung zu schaffen.

Die sorgfältige Analyse und Beschreibung des hydrogeologischen Systems ist daher eine Grundvoraussetzung für eine *numerische Grundwassermodellierung*. Das Ziel der Beschreibung des hydrogeologischen Systems ist der Entwurf eines räumlich, hydraulisch, geochemisch und bilanziell in sich geschlossenen Bildes des hydrogeologischen Umfeldes eines Standortes.

Das mögliche Anwendungsspektrum von Grundwassermodellen reicht in Abhängigkeit von der Zielsetzung sowie vom Umfang und der Güte der Datengrundlage vom "*numerischen*

*Prinzipmodell*" bis hin zum prognosefähigen detaillierten Modell, welches anhand konkreter Standortdaten "kalibriert" und "validiert" wurde.

*Numerische Prinzipmodelle* können bereits in der Frühphase einer Detailuntersuchung eingesetzt werden, selbst wenn die Standorterkundung noch nicht abgeschlossen ist, während kalibrierte und validierte Standortmodelle i.d.R. erst in einer relativ späten Phase der Erkundung bzw. im Rahmen einer Sanierungsuntersuchung zum Einsatz kommen.

*Numerische Prinzipmodelle* beruhen auf stark vereinfachten Standortdaten. In ihnen ist das "*konzeptionelle Standortmodell*" näherungsweise in ein numerisches Modell umgesetzt. Dieses enthält die bis dato bekannten und ggf. stark vereinfachten Wesensmerkmale des Standortes. Solche Prinzipmodelle bedürfen vom Grundsatz her keiner *Modelleichung*, sie sollen die Standortverhältnisse lediglich im Prinzip qualitativ abbilden. Sie stellen Instrumente zur Erhöhung des Prozessverständnisses dar, mit denen auch die weitere Erkundungsstrategie nicht zuletzt unter Kostenaspekten optimiert werden kann. In günstigen Fällen kann ein *numerisches Prinzipmodell* zur Beantwortung einer Reihe von möglichen Fragestellungen bereits ausreichend sein. Der Vorteil des *numerischen Prinzipmodells* liegt in dem im Vergleich zum detaillierten kalibrierten Grundwassermodell geringeren Aufwand beim Modellaufbau. Der Nachteil des *numerisches Prinzipmodells* liegt in den zwangsläufig quantitativ nur eingeschränkt belastbaren Aussagen.

Ein *numerisches Prinzipmodell* kann im Zuge der Erkundung "wachsen" und sich bis hin zum kalibrierten und validierten Grundwassermodell entwickeln. Andererseits werden einzelne Aspekte aufgrund mangelnder Kenntnisse zu standortspezifischen Detailvorgängen in der Praxis häufig nicht über das Stadium einer Prinzipmodellierung hinausgehen können.

In der Altlastenbearbeitung können kalibrierte Grundwassermodelle im Zuge der Sanierungsuntersuchung bzw. -planung bei der Gegenüberstellung von Handlungsalternativen bezüglich des Grundwassers eine wertvolle Hilfe darstellen.

### **1.3 Auswahl möglicher Fragestellungen**

Wird im Rahmen der Altlastenbearbeitung der Einsatz eines Grundwassermodells in Erwägung gezogen, muss darauf Wert gelegt werden, im ersten Schritt konkrete Fragestellungen und fest umrissene Ziele einer Modellierung zu formulieren. Es sollte immer klar beantwortet werden können, warum eine numerische Modellierung notwendig ist. Die Formulierung einer konkreten Aufgabenstellung ist auch deshalb unbedingt erforderlich, um stets definieren zu können, wann eine (Teil-) Aufgabe erfüllt ist.

Die Zielsetzung bestimmt die Detailtiefe der vorzunehmenden Standorterkundung. Es ist in diesem Zusammenhang darauf hinzuweisen, dass eine Grundwassermodellierung grundsätzlich mit Unsicherheiten behaftet ist, da eventuell erforderliche Daten ggf. nicht verfügbar sind. Generell gilt, dass eine Modellierung stets eine Bandbreite von möglichen Ergebnissen liefert.

Die folgende Auflistung enthält eine Auswahl möglicher Fragestellungen bzw. Ziele einer Modellierung im Rahmen der Altlastenbearbeitung.



Anwendung von Strömungsmodellen:

- Simulation der Grundwasserströmung unter komplexen Bedingungen
- Quantifizierung des Grundwasserflusses
- Positionierung / Optimierung von Brunnenstandorten, z.B. Sanierungsbrunnen
- Optimierung von Entnahmeraten
- Optimierung des *Grundwassermonitorings* (Lage, Ausbau von Messstellen, Untersuchungsparameter, Untersuchungsintervalle)

Anwendung von Strömungs- und Transportmodellen (ggf. einschließlich Reaktion):

- Abschätzung der ausbreitungsrelevanten Prozesse für die bisherige Schadstoffausbreitung der Fahne
- Prognose der künftigen Entwicklung der räumlichen Ausbreitung/Erstreckung einer Schadstofffahne
- Abgrenzung von Schadstofffahnen mit gleichem Schadstoffspektrum und unterschiedlichen Eintragsorten
- Prognose der Konzentrationen innerhalb der Schadstofffahne
- Emissionsabschätzung (*Schadstofffracht*)
- Prüfung, Gegenüberstellung, Optimierung von Sanierungsszenarien
- Prognose der Wirkung natürlicher Abbauprozesse (*MNA*)
- Prognose der Wirkung stimulierter Abbauprozesse (*ENA*)
- Optimierung des *Grundwassermonitorings* (Lage und Ausbau von Messstellen, Untersuchungsparameter, Untersuchungsintervalle)

## 1.4 Ablauf einer numerischen Modellierung

Am Anfang einer Modellierungsaufgabe steht die Formulierung der Aufgabenstellung (siehe Kap. 1.3). Da die Aufgabenstellung Umfang und Detailtiefe der nachfolgenden Arbeitsschritte bestimmt, hat sie eine herausgehobene Bedeutung.

Im Rahmen einer Modellierungsaufgabe hat die Analyse des *hydrogeologischen Systems* mit der anschließenden hydrogeologischen Modellbildung als eigenständiger Arbeitsschritt eine besondere Bedeutung. Die Inhalte der *hydrogeologischen Systemanalyse* werden in Kapitel 2 beschrieben.

Anhand der *hydrogeologischen Systemanalyse* wird ein Konzept für das *numerische Grundwassermodell* (siehe Kapitel 2.3) entwickelt und es werden Datendefizite erkannt. In dieser Arbeitsphase kann bereits eine Vorauswahl prinzipiell geeigneter Lösungsverfahren erfolgen.

Nach den Vorgaben des *hydrogeologischen Modells* wird im nächsten Arbeitsschritt zunächst das *numerische Grundwasserströmungsmodell* aufgebaut und parametrisiert (siehe Kapitel 3). Im Fall der *Stofftransportmodellierung* (siehe Kapitel 4) kann die Parametrisierung parallel erfolgen; allerdings benötigt das Stofftransportmodell als Voraussetzung stets ein Grundwasserströmungsmodell. Die *Stofftransportmodellierung* ist damit der Strömungsmodellierung immer nachgeschaltet.

Jedes Modell ist anhand eines gemessenen Datensatzes aus der Vergangenheit zu kalibrieren, d. h. es sind die mit dem Modell berechneten mit den gemessenen Daten zu vergleichen. Verläuft die *Modellkalibrierung* befriedigend, kann die eigentliche Anwendung des numerischen Modells durchgeführt werden. Zu einer Simulationsrechnung gehört immer eine Ergebnisinterpretation sowie eine Dokumentation des Modells mit den verwendeten

Eingangsdaten und den errechneten Ergebnissen. Ist die *Modellkalibrierung* nicht befriedigend verlaufen, bzw. ergibt sich ein nicht plausibles Ergebnis, müssen die Datengrundlage und die Modellannahmen überprüft und ggf. eine weitergehende Erkundung durchgeführt werden.

Abbildung 1 gibt den Ablauf einer Modellierung wieder.

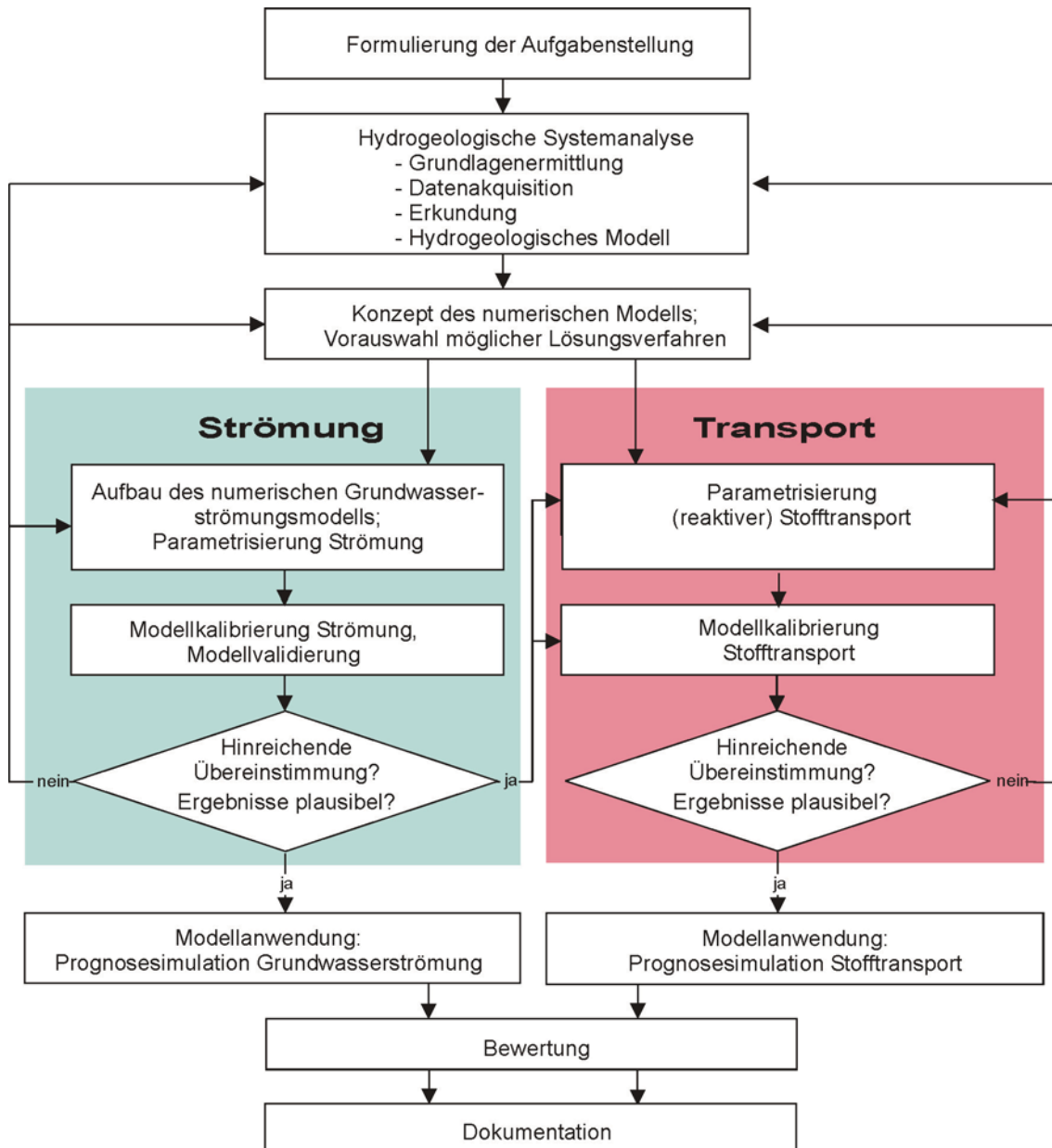


Abbildung 1: Ablaufschema einer Grundwassermodellierung



## 2 Hydrogeologisches System (Hydrogeologisches Modell)

Voraussetzung für die Anwendung von *numerischen Grundwassermodellen* ist die vorherige Entwicklung einer Modellvorstellung zu den kennzeichnenden Merkmalen des konkreten Altlastenstandortes. Die Erkundung führt zur Identifikation der für den Standort charakteristischen hydrogeologischen und hydraulischen *Randbedingungen*, Parameter und Prozesse. Unter einem *hydrogeologischen Systems* wird hier die Gesamtheit der individuellen Ausbildung aller hydrogeologischen Strukturen und Prozesse an einem Standort im 3-D-Raum verstanden.

Die Entwicklung einer umfassenden Modellvorstellung des *hydrogeologischen Systems* eines konkreten Altlastenstandortes kann in einzelne unabhängige Themenbereiche gegliedert werden, für die in jüngeren Veröffentlichungen (KORA, TV 7) z. T. sehr differenzierte Fachtermini entwickelt worden sind. Die wichtigsten dieser oft gebrauchten Begriffe werden nachfolgend kurz umrissen und eingeordnet.

Der Aufbau des *Geologischen Strukturmodells* (GSM) beinhaltet die Analyse und die Entwicklung eines räumlichen Modells der vorliegenden geologischen Strukturen des Standortes. Einzelne Komponenten dieses GSM werden dabei als *Modellstratigraphische Einheiten* (MSE) bezeichnet.

Das GSM bildet die Grundlage für das *Hydrogeologisch-geochemische Strukturmodell* (HGSM). Dieses besteht aus *hydrogeologisch-geochemischen Struktureinheiten* (HGSE). Eine HGSE besteht auf der Basis der MSE aus Struktureinheiten, denen ähnliche hydraulische und geochemische Parameter zugewiesen werden können. HGSE und MSE müssen räumlich nicht zwingend identisch sein.

Vereinfachend und zusammenfassend können die vorgenannten Detailbezeichnungen auch unter dem Begriff "*Hydrogeologisches Modell*" (FH-DGG, 1999) zusammengefasst werden. Ein weniger klar umrissener, aber dennoch häufig analog verwendeter Begriff ist das "*konzeptionelle Standortmodell*".

Die Analyse des *hydrogeologischen Systems* führt zu einer integralen und abstrahierten Modellvorstellung des Standortes und beinhaltet neben räumlichen Informationen eine Beschreibung der für den Standort charakteristischen Prozesse bezüglich des Grundwassers. Bei diesen handelt es sich um Strömungs-, Transport- und Reaktionsprozesse, wobei die Reaktionsprozesse zunehmend an Bedeutung gewinnen.

Der Entwurf eines räumlich, hydraulisch, geochemisch und bilanziell in sich geschlossenen *Hydrogeologischen Modells* ist eine notwendige Voraussetzung für eine *numerische Grundwassermodellierung* und stellt einen unabhängigen eigenständigen Arbeitsschritt dar.

Die Fachsektion Hydrogeologie der Deutschen Geologischen Gesellschaft (FH-DGG) hat in der Vergangenheit zu diesem Thema geeignete Leitfäden (1999, 2002) veröffentlicht, auf die an dieser Stelle hingewiesen wird.

## 2.1 Komponenten und Aspekte des hydrogeologischen Systems

### 2.1.1 Abgrenzung

In einem ersten Schritt ist die Lage des Standortes in seinem geologischen Umfeld zu betrachten, wobei der Begriff des Umfeldes nicht zu eng gefasst verstanden werden sollte.

Es ist in der Regel nicht zielführend, die Analyse des hydrogeologischen Systems auf das engere Schadensgebiet zu begrenzen. Für das engere Schadensgebiet und dessen näheres Umfeld, für welches durch eine Modellierung Aussagen getroffen werden sollen, wird der Terminus Aussagegebiet bzw. Aussageraum verwendet.

Generell muss bei einer geplanten Grundwassermodellierung der Betrachtungsraum deutlich über den Aussageraum ausgedehnt werden (*Bilanzraum*). Die Abgrenzung dieses *Bilanzraumes* im Rahmen der *hydrogeologischen Analyse des Systems* soll eine Bilanzierung des Wasserhaushalts ermöglichen. Während bei der Standorterkundung einer Altlast die Untersuchungen in der Regel auf den *Aussageraum* begrenzt werden, muss für eine Grundwassermodellierung im Rahmen der Analyse des *hydrogeologischen Systems* zwingend auch das weitere Umfeld des Standortes berücksichtigt werden. Dies ist erforderlich, um die Grundwasserströmungsverhältnisse am Standort nachvollziehen zu können, um deren Einflussfaktoren zu erfassen und nicht zuletzt, um für ein späteres Grundwassermodell sinnvolle hydraulisch begründete Grenzen (*Randbedingungen*) definieren zu können. Auf diese Weise wird innerhalb des *Bilanzraums* ein definierter *Modellraum* geschaffen, der den eigentlichen *Aussageraum* in hinreichendem Abstand umschließt. Aussagen zu Punkten oder Flächen in der Nähe der Grenzen des *Modellraumes* sollten nur in gut begründeten Einzelfällen vorgesehen werden. Die Aufgabenstellung selbst muss ebenfalls in die Überlegungen zur notwendigen Größe des *Modellraumes* einfließen. Soll z.B. die Auswirkung einer Brunnenanlage auf das Grundwasser geprüft werden, muss der *Modellraum* so groß gewählt werden, dass seine Grenzen die Berechnungen nicht verfälschen.

Die Abbildung 2 enthält eine schematische Darstellung der räumlichen Zusammenhänge der Begriffe *Bilanzraum*, *Modellraum* und *Aussageraum*.

Für eine erste, eher grobe räumliche Abgrenzung des zu betrachtenden Systems kann neben dem geologisch/hydrogeologischen Kartenwerk des Geologischen Dienstes NRW auf die Aufgliederung der Landesfläche in Form von Grundwasserkörpern zurückgegriffen werden, die in Nordrhein-Westfalen im Zuge der Umsetzung der EU-Wasserrahmenrichtlinie ebenfalls vom Geologischen Dienst ([www.flussgebiete.nrw.de](http://www.flussgebiete.nrw.de)) vorgenommen wurde. Die Abgrenzung der Grundwasserkörper erfolgte unter Berücksichtigung geologischer, hydrogeologischer und hydrologischer Aspekte.

Für den einzelnen Standort ist die vorgenommene Abgrenzung räumlich aber oft zu weitreichend, so dass es erforderlich werden kann, den einzelnen Grundwasserkörper einer weiteren Feingliederung zu unterziehen.

Als Empfehlung kann festgehalten werden, dass es von grundlegendem Vorteil ist, die Grenzen des betrachteten *hydrogeologischen Systems* an natürlichen Grenzen zu orientieren, auch wenn das resultierende Gebiet auf den ersten Blick unverhältnismäßig groß erscheinen mag. Die Grenzen des späteren Grundwassermodells müssen nicht zwangsläufig mit denen des *hydrogeologischen Systems* zusammenfallen. Wird für das spätere Grundwassermodell ein kleineres Gebiet gewählt, so muss dennoch das Gesamtsystem verstanden sein, um diese Grenzen sinnvoll festlegen zu können.



4.	Besondere Querschnitte	Sind die Grundwasserflüsse quantifizierbar, kann in günstigen Fällen eine besondere geometrische Ausbildung der grundwasserführenden Schichten als Grenze herangezogen werden, Beispiel: Grundwasserzutritt über Talquerschnitt.
5.	Kleinere Oberflächengewässer	Nur dann geeignet, wenn eine prägende Grundwasserinteraktion besteht.
<b>In besonderen Fällen:</b>		
6.	Grundwasserstromlinie	Reagiert empfindlich auf Änderungen der Grundwassersituation.
7.	Grundwasserhöhengleiche	Reagiert empfindlich auf jegliche Änderung der Grundwassersituation. Der Grundwasserfluss über diese Grenze hinweg muss sehr genau bekannt sein.
<b>Nicht geeignet:</b>		
-	Verkehrswege, Verwaltungsgrenzen, Katastergrenzen	

In Ballungszentren mit einer hohen Dichte an Altstandorten/Altablagerungen kann es sinnvoll sein, eine Analyse des *hydrogeologischen Systems* unabhängig vom Einzelfall über einen größeren Raum - z.B. entsprechend einem der oben genannten Grundwasserkörper - vorzunehmen. Es kann sich dann anschließend ggf. auch anbieten, ein eher flächendeckendes Grundwassermodell aufzubauen, das dann für den konkreten Einzelfall lokal verdichtet wird.



#### Prüfhinweis

- ✓ *Wurden für das Gebiet der hydrogeologischen Systemanalyse hydraulisch sinnvolle natürliche Grenzen gewählt?*

## 2.1.2 Hydrogeologischer Aufbau

In einem zweiten Schritt ist zu ermitteln, welcher geologische Schichtaufbau ausgebildet ist und welche *Grundwasserstockwerke* im Bereich des Standortes und seines Umfeldes vorliegen. Bei einer Altlastenbearbeitung, die mit einem Grundwasserschaden verbunden ist, kann man in der Regel davon ausgehen, dass das obere *Grundwasserstockwerk* häufig vorrangig Gegenstand der Untersuchung des Sachverhaltes ist. Bei der Analyse des *hydrogeologischen Systems* sind aber zunächst grundsätzlich alle Stockwerke zu betrachten, um beurteilen zu können, welche Wechselwirkungen zwischen den Stockwerken bestehen und um eine Entscheidung darüber treffen zu können, welches Stockwerk bzw. welche Stockwerke trennende Einheit als untere Grenze des *hydrogeologischen Systems* herangezogen werden kann.

Neben den lokalen Standortdaten aus Bohrungen sind für die Analyse des *hydrogeologischen Systems* auch ggf. weitere vorhandene Daten unterschiedlicher Quellen zu berücksichtigen (siehe Kapitel 2.2). Hier ist in erster Linie auf das Kartenwerk bzw. die Informationssysteme des Geologischen Dienstes NRW hinzuweisen. Die Beschreibung des *hydrogeologischen Systems* bezüglich seines Aufbaus und seiner Umgrenzung wird erst vollständig durch eine geometrisch/räumliche Beschreibung der gewonnenen Daten. Sowohl

georeferenzierte GIS-taugliche kartographische Daten als auch geologische Daten in Form von vorliegenden Karten und Profilschnitten müssen aufbereitet, analysiert und interpretiert werden. Wichtige Grundlageninformationen sind hier: Verbreitung, Top, Basis und Mächtigkeit sowie mögliche Fazieswechsel der relevanten geologischen Einheiten. Um im Lauf der Untersuchungen Erkenntniszuwächse einarbeiten zu können, ist es ratsam, die gewonnenen Daten in Datenbanken zu führen und auch im räumlichen Modell stets zu aktualisieren.

Die Analyse des hydrogeologischen Aufbaus enthält neben der Identifizierung der vorliegenden *Grundwasserstockwerke* ergänzend eine möglichst detaillierte Dokumentation des geologischen Schichtaufbaus anhand von Typ-Profilen. Sie liefert insbesondere Erkenntnisse, inwieweit die zu betrachtenden Schichten *homogen* aufgebaut sind, oder ob *heterogene Grundwasserleiter* vorherrschen. In solchen Fällen muss entschieden werden, ob die *Heterogenitäten* in einer Weise erfasst werden können, dass sie in einem späteren Grundwassermodell explizit berücksichtigt werden können, wie z.B. örtlich auftretende Geringleiter, hydraulische Fenster zu tieferen Schichten etc. In den Materialien zur Altlastensanierung und zum Bodenschutz MALBO 25 (2006) des LANUV werden in anschaulicher Weise verallgemeinernd entsprechende Typen von *Grundwasserleitern* dargestellt.



#### Prüfhinweis

- ✓ Wurden die geologischen und hydrogeologischen Einheiten hinreichend genau beschrieben und dokumentiert?

Die Analyse des hydrogeologischen Aufbaus muss eine Entscheidung darüber ermöglichen, welche räumliche Dimensionalität (2D, 3D) das nachfolgende numerische Modell aufgrund der vorliegenden Untergrundverhältnisse besitzen muss.

Bei der Dokumentation der hydrogeologischen Systemanalyse sollte darauf geachtet werden, dass für den späteren Aufbau eines *numerischen Grundwassermodells* sowohl die gewonnenen Punktdaten aus Bohrprofilen als auch die interpretierten räumlichen Daten in geeignetem Datenformat georeferenziert zur Verfügung gestellt werden können. Weitere Informationen dazu können den Handlungsempfehlungen des BMBF Förderschwerpunktes KORA ([www.natural-attenuation.de](http://www.natural-attenuation.de), LUCKNER, TH., 2008) und der Synopse des Themenverbundes 7 „Modellierung und Prognose“ ([www.natural-attenuation.de](http://www.natural-attenuation.de), LUCKNER, TH. ET AL., 2008) entnommen werden.

### 2.1.3 Bergsenkungsgebiete

Bergsenkungsgebiete stellen in NRW eine Besonderheit dar, die lokal einen erheblichen Einfluss auf die Grundwassersituation haben. Zu den betroffenen Gebieten gehören das nördliche Ruhrgebiet mit Emscher und Lippe bis hin in das südliche Münsterland sowie Teile des linken Niederrheins (siehe Kapitel 5).

Ob ein Standort zu einem aktiven Bergsenkungsgebiet gehört, muss im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* betrachtet werden. Aktive Bergsenkungen können die absoluten Höhenlagen hydrostratigraphischer Einheiten einschließlich der Geländeoberfläche zeitlich dynamisch beeinflussen und müssen in betroffenen Regionen bei einer Modellierung immer berücksichtigt werden.

Es ist zu beachten, dass in manchen Regionen Nordrhein-Westfalens Bergsenkungen zum Erfordernis dauerhafter Polderung geführt haben. In solchen Gebieten sind die natürlichen Grundwasser- und Vorflutverhältnisse oft stark verändert.



## 2.1.4 Grundwasserhydraulische Kenngrößen

Bei den System bestimmenden grundwasserhydraulischen Kenngrößen handelt es sich um den *Durchlässigkeitsbeiwert* ( $k_f$ -Wert) und den *Speicherkoefizienten* bzw. die *Speicherwirksame Porosität*. Während mit dem *Durchlässigkeitsbeiwert* die Wasserwegsamkeit eines *Grundwasserleiters* quantifiziert wird, gibt der *Speicherkoefizient* bzw. die *Speicherwirksame Porosität* Aufschluss über das Speichervermögen des *Grundwasserleiters*.

Pumpversuche liefern eine sehr gute Datengrundlage für die Ermittlung dieser Kennwerte, da sie integrale Werte aus der Umgebung des Versuchsbrunnens liefern. Bei ausreichender Versuchsdauer können Pumpversuche auch zur Interpretation hydraulisch wirksamer Ränder herangezogen werden. Zu beachten ist jedoch, dass analytische Auswerteverfahren für Pumpversuche auf einer Reihe von vereinfachenden Annahmen und Einschränkungen beruhen.

Es sollte stets versucht werden, Ergebnisse aus Pumpversuchen auch aus der weiteren Umgebung des Standortes in die hydrogeologische Systemanalyse einzubeziehen. Pumpversuche werden häufig von Wasserwerksbetreibern oder Industriebetrieben durchgeführt (siehe Kapitel 2.2).

Häufig werden im Rahmen der Erkundung auch Kurzpumpversuche durchgeführt. Kombiniert man solche Kurzpumpversuche mit Flowmetermessungen, können wertvolle Daten über die vertikale Verteilung der Durchlässigkeit und damit auch über vorhandene *Heterogenitäten* gewonnen werden.

Neben den genannten Messverfahren können *Durchlässigkeitsbeiwerte* auch anhand von Korngrößenanalysen über empirische Formelansätze ermittelt werden. Grundsätzlich liefern solche Daten jedoch nur Näherungswerte, da sie aus gestörten Proben abgeleitet wurden und insofern nicht unbedingt die realen Verhältnisse abbilden, und weil nicht immer ein strenger Zusammenhang zwischen Korngrößenverteilung und Durchlässigkeit gegeben ist.

In der Praxis wird häufig auch auf Erfahrungswerte aus der Literatur zurückgegriffen. Für die Grundwasserlandschaften in NRW liegen Anhaltswerte für die grundwasserhydraulischen Kenngrößen aller in der Regel für einen Modellaufbau relevanten geologischen Einheiten vor. Sie bilden meist eine ausreichend gute Grundlage für die Startwerte der Kalibrierung. Über lokale Detailkenntnisse verfügen oft die zuständigen kommunalen Behörden und Landesbehörden.



### Prüfhinweis

- ✓ *Wie wurden die relevanten hydraulischen Kennwerte ermittelt?*

Zu beachten ist bezüglich der *Durchlässigkeitsbeiwerte*, dass sich diese in vertikaler Richtung deutlich von denen in horizontaler Richtung unterscheiden können. Erstere sind in der Größenordnung von 2- bis 100-fach geringer als letztere. Der vertikale *Durchlässigkeitsbeiwert* ist meist nur durch Kalibrierung des numerischen Modells zu bestimmen.

Konkrete Daten zum *Speicherkoefizienten* bzw. zum *spezifischen Speicherkoefizienten* bei gespannten Grundwasserleitern liefern ausschließlich Pumpversuche. Gleiches gilt für die Ermittlung des *nutzbaren Porenvolumens*. Häufige Anwendung findet der empirische Ansatz nach MAROTZ (1968). Diese Daten sind i.d.R. aber wenig sensitiv und es reicht oft aus, einen Anhaltswert aus der Literatur im Modell als Startwert anzusetzen.

### 2.1.5 Natürliche Oberflächengewässer

Die Oberflächengewässer und das Grundwasser bilden prinzipiell ein zusammenhängendes System, das einer ganzheitlichen Betrachtung bedarf.

Bei normaler Abflusssituation dienen Oberflächengewässer der Entwässerung des *Grundwasserkörpers*. Ausnahmen können Gewässer sein, die aus einem Gebirge in das Flachland übertreten und im Übergangsbereich einen morphologisch erhöhten Schwemmfächer ausgebildet haben, oder Oberflächengewässer in künstlich angelegten Dammsystemen.

Das Entwässerungssystem erlaubt Rückschlüsse auf die hydrogeologischen Verhältnisse. Z.B. lässt ein engständiges System von Fließgewässern darauf schließen, dass der Grundwasserleiter aufgrund zu geringen Querschnitts oder mangelnder Durchlässigkeit nicht in der Lage ist, das anfallende versickerte Wasser unterirdisch abzuführen. Folglich steigt die Grundwasseroberfläche an und schneidet schließlich die Geländeoberfläche. Es kommt in morphologischen Senken zur Bildung von Vernässungen, Quellen und letztlich zur Bildung von Fließgewässern.

Da in offenen Gerinnen im Vergleich zum *Grundwasserleiter* vergleichsweise viel Wasser abgeführt werden kann und sich aus diesem Grund ein im Vergleich zum umgebenden Grundwasser geringerer Wasserstand im Fließgewässer einstellt, stellen Oberflächengewässer für das Grundwasser eine *Potenzialsenke* dar. Grundwasser fließt stets in Richtung des niedrigeren Potentials. Folglich fließt das Grundwasser daher generell in Richtung der Oberflächengewässer. Ausnahmen können sich ergeben bei großer grundwassererfüllter Mächtigkeit und nur relativ flach einschneidenden Fließgewässern. Die Abbildung 3 veranschaulicht diese Zusammenhänge.

Bei Hochwassersituationen im Oberflächengewässer in Folge länger anhaltender Niederschläge ändern sich die Strömungsverhältnisse temporär. In solchen Perioden herrscht im Oberflächengewässer im Vergleich zum Grundwasser ein höherer Wasserstand, d.h. ein höheres Potenzial, so dass Oberflächenwasser in das Grundwasser eindringt (*Influenz*). Das Grundwasser wird durch Infiltration aus dem Oberflächengewässer angereichert. Gleichzeitig wird der natürliche Grundwasserabfluss behindert; folglich kommt es zum Grundwasserrückstau, der zwangsläufig mit einem Anstieg des Grundwassers verbunden ist.

Fließgewässer fungieren also je nach hydrologischem Zustand als linienhafte *Potenzialsenken* oder *-quellen* für das Grundwasser. Bei der Analyse des *hydrogeologischen Systems* sind Oberflächengewässer sorgfältig in die Betrachtung einzubeziehen.

Bilden Oberflächengewässer natürliche Grenzen des betrachteten *hydrogeologischen Systems*, sind in erster Linie Aufzeichnungen des Wasserstands im Gewässer von Interesse. Liegen dagegen Oberflächengewässer innerhalb des Systems, d.h. sie bilden keine Grenze, sind auch die Gewässerabflüsse von Bedeutung. Sie können einen entscheidenden Einfluss auf die im System zirkulierenden Wasservolumina innehaben. Auch bei der späteren Kalibrierung des Grundwasserströmungsmodells sind solche Daten von großer Bedeutung, da sie die sachgerechte Kalibrierung erleichtern und das Ergebnis verlässlicher machen.

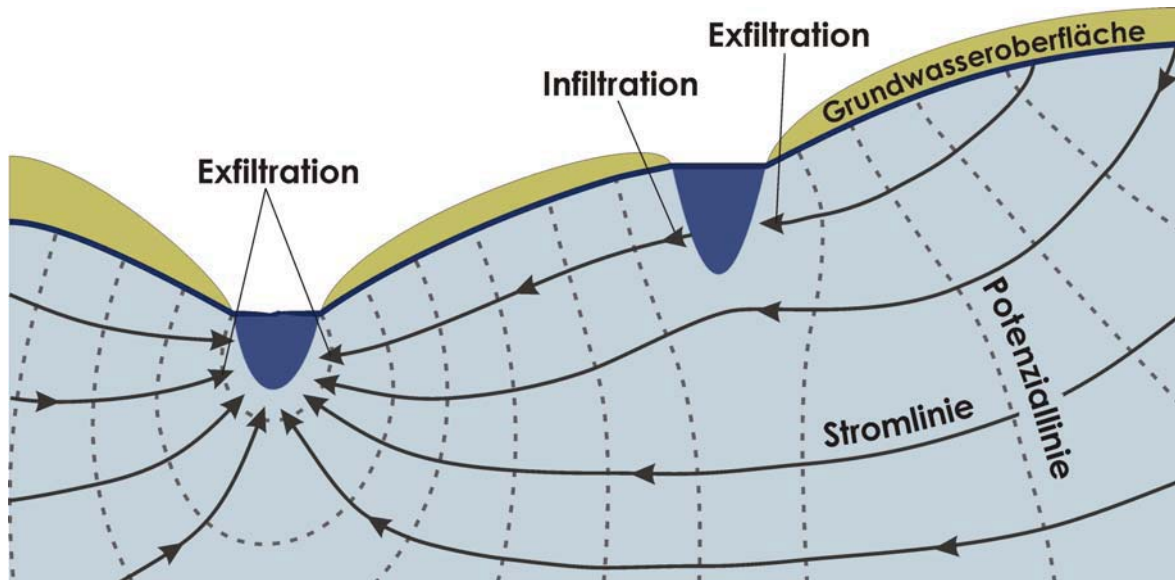


Abbildung 3: Prinzipskizze zur Grundwasser- / Vorflutinteraktion

Pegeldaten eines Oberflächengewässers liefern als Ganglinien Zeitreihen des Wasserstandes und in günstigen Fällen auch des Abflusses. Über diese Zeitreihen können Gewässerkenngrößen abgeleitet werden. Sind mehrere Pegel an einem Gewässer installiert, kann durch eine Interpolation der Pegelwasserstände (bezogen m NHN bzw. m NN) entlang der Gewässerstrecke der Wasserstand des Gewässers an jedem Punkt näherungsweise ermittelt werden. Voraussetzung für diese Abschätzung ist, dass sich zwischen den betrachteten Pegeln der Gewässerquerschnitt nicht ändert und zwischen den Zeitreihen der beiden Pegel lediglich eine zu vernachlässigende Phasenverschiebung festzustellen ist.

Im seltenen, idealen Fall liegt z.B. eine kalibrierte numerische Modellierung der Gerinneströmung des Fließgewässers vor, aus denen die für die spätere numerische Modellierung der Grundwasserströmung benötigten Daten abgeleitet werden können.

Im typischen Fall ist es eher selten, dass sich ein Pegel im betreffenden Gewässer in nicht zu großer Entfernung befindet. Zur Ermittlung der Verteilung der Wasserstände innerhalb des Betrachtungsraumes ist es dann erforderlich, eine Reihe von Stichtagsnivellements zu unterschiedlichen Abflusssituationen durchzuführen, um auf diese Weise eine Übertragungsfunktion der Wasserstandsdaten des Pegels auf das *Aussagegebiet* bzw. den Aussageraum zu ermitteln. Wiederholte Abflussmessungen an geeigneten Querschnitten geben Aufschluss über die Dynamik der Austauschraten zwischen Oberflächengewässer und Grundwasser.



#### Prüfhinweise

- ✓ *Sind Oberflächengewässer zu berücksichtigen?*
- ✓ *Kann die Interaktion zwischen Oberflächengewässer und dem Grundwasser hinreichend genau beschrieben werden?*
- ✓ *Sind Austauschraten bestimmbar?*
- ✓ *Liegen Messdaten zu den räumlichen und hydraulischen Verhältnissen vor?*

Ist kein Gewässerpegel vorhanden, muss zunächst abgeschätzt werden, welche Bedeutung das Gewässer für die Grundwassersituation hat. Sodann ist ggf. im Rahmen eines Monitorings ein gezieltes Messprogramm durchzuführen, welches neben der Wasserstands-



erfassung auch Abflussmessungen enthalten sollte, wenn diese Daten für die quantitative Systemanalyse erforderlich sind.

Dem quantitativen Wasseraustausch zwischen Grund- und Oberflächenwasser muss im Rahmen der Analyse des *hydrogeologischen Systems* besonderes Augenmerk gewidmet werden, um für die Kalibrierung einer späteren Grundwassermodellierung Eingangsgrößen für Leakagefaktoren zu liefern.

Sind Oberflächengewässer im Betrachtungsraum des *hydrogeologischen Systems* enthalten, sind diese bei der Analyse gebührend zu würdigen, anderenfalls kann eine spätere Grundwassermodellierung im ungünstigen Fall mit erheblichen Unsicherheiten behaftet sein.

### **2.1.6 Wasserschiffahrtsstraßen**

Wasserschiffahrtsstraßen weisen gegenüber natürlichen Fließgewässern prägnante Unterschiede auf, die im Einzelfall zu verifizieren und im *hydrogeologischen Modell* entsprechend zu berücksichtigen sind.

Wasserschiffahrtsstraßen besitzen meist kein messbares Fließgefälle und i.d.R. eine sehr ausgeglichene Wasserspiegellage. Gegenüber dem Grundwasser besteht aufgrund von Einspundungen oft nur ein stark behinderter Kontakt. Vielfach sind Sohlabdichtungen vorhanden.

Ist unterhalb der Sohle des Kanals bzw. der Wasserschiffahrtsstraße eine signifikante Restmächtigkeit grundwasserführender Schichten vorhanden, ist die hydraulische Auswirkung auf das Grundwasser in vielen Fällen gering. Da eine hydraulische Entkopplung aber nicht grundsätzlich gegeben ist, muss im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* die Anbindung eines Kanals bzw. einer Wasserschiffahrtsstraße an das Grundwasser im Einzelfall geprüft werden.

### **2.1.7 Kanalisationsnetze**

Nicht nur in Ballungsgebieten können verrohrte unterirdische Gewässerstrecken ebenso wie Kanalisationsnetze für das *hydrogeologische System* von Bedeutung sein. Dies gilt insbesondere in Bergsenkungsgebieten. Kanalnetzstrecken stammen z. T. noch aus dem 19. Jahrhundert und sind oftmals defekt. In Abhängigkeit von ihrer Lage relativ zur Grundwasser Oberfläche können sie eine drainierende als auch eine anreichernde - ggf. alternierende - Wirkung auf das Grundwasser entfalten. Besteht der Verdacht auf eine Interaktion zwischen Kanalisationsnetz und Grundwasser, bilden die Sohlhöhen der Kanalschächte eine wichtige Datengrundlage, um anhand des Vergleichs mit Grundwasserständen zu prüfen, ob mit influenten oder effluenten Verhältnissen zu rechnen ist. Zu beachten ist, dass häufig schon alleine das Füllmaterial der Kanalbettung drainierende Eigenschaften für das Grundwasser aufweisen kann.

Ein Leitfaden zur *numerischen Grundwasserströmungsmodellierung* der Emschergenossenschaft (2005) enthält hilfreiche Hinweise zum Umgang mit dieser speziellen Thematik.

Es wird empfohlen, insbesondere in urbanen Gebieten Informationen zur Lage von Kanalnetzstrecken, zu Schachtsohlhöhen und Schadensklassen für die *hydrogeologische Systemanalyse* bereitzustellen und zu berücksichtigen.

## 2.1.8 Grundwasserdynamik

### 2.1.8.1 Datengrundlage

Im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* ist zunächst eine Zusammenstellung aller verfügbaren Grundwassermessstellen des Betrachtungsraumes mit ihren Stammdaten und Messzeiträumen vorzunehmen. Die Grundwassermessstellen sind auf ihre Verwendbarkeit hin zu überprüfen. Lage und Längen der Filterstrecken sowie auch die Art der Probennahme sind von besonderer Bedeutung für aussagekräftige Analyseergebnisse. Dabei sollten in einem ersten Schritt vor allem die Zuordnung zu den relevanten *Grundwasserleitern* und die Sichtung der vorliegenden Messreihen vorgenommen werden. Danach kann entschieden werden, ob

- alle relevanten Stockwerke hinreichend genau erfasst werden,
- die Messstellendichte zur Beschreibung des Grundwasserfließsituation ausreicht,
- die Messstellendichte zur Beschreibung der Grundwasserbeschaffenheit (siehe Kapitel 2.1.9) ausreicht und
- Zeitraum, Umfang und Messintervalle der Datenreihe ausreichen.

Aus der Bewertung ergibt sich die Beantwortung der Frage, ob der Betrachtungsraum für die Analyse des hydrogeologischen Systems bezüglich der Grundwasserfließsituation hinreichend genau beschrieben werden kann. Ist dies nicht der Fall, sollte geprüft werden, wo ggf. weitere Messstellen zu errichten sind. Dies betrifft ausdrücklich nicht nur den engeren Standortbereich, sondern den gesamten Bereich des *hydrogeologischen Systems*.

Im engeren Bereich des Standortes muss kritisch geprüft werden, ob eine ggf. bereits erkannte Schadstoffbelastung hinreichend genau erfasst wird. Dies gilt sowohl für die horizontale als auch vertikale Schadstoffverteilung im Bereich der Schadstofffahne.

### 2.1.8.2 Zeitreihen

Die Analyse von Zeitreihen von gemessenen Grundwasserständen ist ein wichtiger Bestandteil der Analyse des hydrogeologischen Systems. Je nach Qualität der Zeitreihe (Regelmäßigkeit der Messungen, angepasste Datendichte, Länge und Repräsentativität des Beobachtungszeitraums etc.) sind vielfältige Auswertungen möglich. Häufig können für eine Auswertung Zeitreihen von automatisch aufzeichnenden Messgeräten (Datenlogger) empfehlenswert sein. Zeitreihen können u.a. Aussagen ermöglichen zu folgenden Aspekten:

- Schwankungsbreite der Grundwasserstände
- Minimaler/maximaler Grundwasserstand
- Mittelwert (arithmetisch/Median)
- dauerhaft freie/gespannte Grundwasseroberfläche
- Vertikalgradienten zwischen *Grundwasserstockwerken* (ggf. Messstellenbündel erforderlich!)



#### Prüfhinweise

- ✓ *Wie ist die Grundwasserdynamik zu charakterisieren? Quasistationär, instationär?*
- ✓ *Herrschen deutliche Wechsel der Grundwasserfließrichtung vor?*
- ✓ *Wie ist die Qualität und Dichte des Messstellennetzes zu beurteilen?*
- ✓ *Liegen Messdaten (Zeitreihen) in ausreichender Dichte zur Beurteilung der Grundwassersituation vor?*

- Vertikalgradienten innerhalb eines *Grundwasserstockwerks* (Messstellenbündel erforderlich!)
- Jahreszeitliche Schwankungen
- Mehrjährige Zyklen passend zur mehrjährigen Niederschlagsverteilung
- Trends, mögliche Ursachen
- Einfluss von Oberflächengewässern
- Reaktionsgeschwindigkeit auf Neubildungsphasen
- Fließrichtungsänderungen, Ursachen
- Einfluss von Grundwasserentnahmen
- Einfluss von Einleitungen

Für den Aufbau eines Grundwassermodells bilden Zeitreihen des Grundwasserstands eine wichtige Datengrundlage. Soll die *Randbedingung* an einem Modellrand als feste Grundwasserstände vorgegeben werden, lassen sich die benötigten Werte aus Zeitreihen ermitteln. Bei einer *instationären* Simulation werden Zeitreihen als Grundlage für die *Modellkalibrierung* benötigt. Bei *stationären* Simulationen können anhand von Zeitreihen repräsentative Mittelwerte und/oder geeignete Zustände ermittelt werden.

### 2.1.8.3 Grundwasserhöhengleichungen

Für die Ermittlung der Grundwasserfließrichtungen ist im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* die Auswertung von Grundwasserhöhengleichungen erforderlich. Dabei sind alle relevanten Grundwasserleiter zu betrachten. Liegen für den Untersuchungsraum noch keine entsprechenden Kartendarstellungen vor, müssen sie auf der Grundlage der zur Verfügung stehenden Daten konstruiert werden. Dazu kann entweder auf historische Daten zurückgegriffen werden, oder es sind bei mangelnder Datenlage Stichtagsmessungen vorzunehmen. Die Aussagekraft eines Grundwasserhöhengleichensplans hängt dabei entscheidend von der vorliegenden Datendichte ab.

Grundwasserhöhengleichenspläne sollten idealerweise zu unterschiedlichen hydrologischen Zuständen konstruiert werden (z.B. mittlerer Grundwasserstand, Niedrigwasser, Hochwasser). Hinweise darauf, wie viele Zeitpunkte abgebildet werden sollten, ergeben sich aus der Fragestellung und aus der Analyse der Grundwasserstandszeitreihen. Generell gilt: Je unterschiedlicher die zeitliche Dynamik der Zeitreihen der Grundwasserstände einzelner Messstellen innerhalb eines Gebietes ausgebildet ist, umso größer ist die Anzahl der zu analysierenden Zustände.

Insbesondere in der Nähe von Oberflächengewässern mit großen Wasserstandsamplituden ist mit ausgeprägten Richtungswechseln der Grundwasserströmung zu rechnen. Folglich kann eine solche Situation mit einem einzigen Grundwasserhöhengleichensplan nicht hinreichend beschrieben werden.

Im engeren Standortbereich können automatische Wasserstandsaufzeichnungsgeräte genutzt werden, um maßgebende Wasserstandsschwankungen oder Fließrichtungswechsel im Detail aufzulösen.

### 2.1.9 Grundwasserbeschaffenheit, hydrogeochemisches Milieu

Gleichermaßen bedeutend wie die grundwasserhydraulische Situation ist bei der Analyse des hydrogeologischen Systems die Grundwasserbeschaffenheit. Anhand von Analysedaten des Grundwassers können Rückschlüsse auf das hydrogeochemische Milieu gezogen werden.

Neben der Darstellung der Konzentrationsverteilungen gelöster organischer Schadstoffe im Grundriss und Profilschnitt sind die Verteilungen der Konzentrationen anorganischer Grundwasserinhaltsstoffe von Interesse. Insbesondere sind die das Abbaumilieu charakterisierenden redoxsensitive Inhaltsstoffe hervorzuheben (Sauerstoff, Nitrat, Eisen, Sulfat, Methan). Wertvolle ergänzende Informationen können auch anhand der Schichtbeschreibungen von Bohrprofilen und anhand von mineralogischen Untersuchungen gewonnen werden.

Bezüglich der Beurteilung der zeitlichen Dynamik ist die Darstellung und Auswertung von Zeitreihen der Grundwasserbeschaffenheit von ähnlich hoher Bedeutung wie die grundwasserhydraulischer Daten.

### 2.1.10 Grundwassernutzungen

Entnahmen von Grundwasser sind unbedingt bei der Analyse des hydrogeologischen Systems zu berücksichtigen, da sie einen erheblichen Einfluss auf die Grundwassersituation und die Wasserbilanz aufweisen können.

Zunächst ist zu prüfen, aus welchem *Grundwasserstockwerk* die Entnahme erfolgt. Die Entnahmeraten und ihre zeitliche Dynamik sind so genau wie möglich zu ermitteln. Bei der Datenanalyse sollte die Betriebsweise von Brunnen berücksichtigt werden, um die Schwankungsbreite von Grundwasserstandsaufzeichnungen in Brunnennähe einschätzen zu können und um entscheiden zu können, welcher Zeitraum bei der Ermittlung einer mittleren Entnahme anzusetzen ist. Es ist immer zu empfehlen, konkrete Betriebsdaten abzufragen. Die Angaben zum Wasserrecht alleine erlauben allenfalls eine Einschätzung der Größenordnung der Entnahme. Oft wird das Wasserrecht nicht im erlaubten Maß genutzt.

Die Ausbildung von Absenkungstrichtern von Grundwasserentnahmen mit bekannter Entnahmerate ist für die spätere Kalibrierung des Grundwassermodells von herausragender Bedeutung.

In der Praxis stehen detaillierte Entnahmedaten oft nicht zur Verfügung. Bei den zuständigen Behörden in NRW sind Entnahmeraten häufig nur als Jahresentnahmemengen vorhanden. Die Datenreihen sind nicht immer vollständig und aktuell. Für manche Fragestellungen reicht aber auch eine eingeschränkte Datenlage zum Aufbau eines Grundwassermodells aus. Falls erforderlich, sind jedoch genaue Betriebsdaten von den Betreibern der Entnahmen einzuholen.

### 2.1.11 Grundwasserneubildung

Die Grundwasserneubildung ist eine der wichtigsten Bilanzgrößen *hydrogeologischer Systeme*, deren Einfluss mit zunehmender Größe des Betrachtungsraumes an Bedeutung gewinnt. Lediglich in stark versiegelten urbanen und industriellen Räumen besitzt sie lokal eine geringere Bedeutung.

Im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* erfolgt zunächst eine Bilanzierung über mehrere Jahre, so dass eine mittlere Neubildungsrate zu ermitteln ist. Diese Ermittlung sollte flächendifferenziert unter Berücksichtigung folgender Daten bzw. Attribute erfolgen:

- Klimadaten (Niederschlag, Temperatur, Luftfeuchte u.a.)
- Hangneigung / Reliefenergie
- Bodenart
- Bewuchs
- Versiegelungsgrad
- Flächennutzung

Bezüglich der Klimadaten kann auf die Daten des Deutschen Wetterdienstes zurückgegriffen werden, Informationen über Hangneigung/Reliefenergie, Bewuchs und Versiegelungsgrad sind topographischen Karten oder dem digitalen Geländemodell (DGM25; DGM5) des Landes NRW zu entnehmen. Informationen zur Bodenart finden sich in den geologischen Karten des Geologischen Dienstes des Landes NRW (siehe Kapitel 2.2).

Hinzuweisen ist im Zusammenhang mit einer flächendifferenzierten Betrachtungsweise auf das Verfahren nach DÖRHÖFER/JOSOPAIT (HAHN, J., DÖRHÖFER, G., JOSOPAIT, V., 1981). Eine Weiterentwicklung bietet das auf langjährigen Mittelwerten der relevanten Klimadaten beruhende Verfahren nach MEßER (1996), welches insbesondere eine stärkere Differenzierung der Grundwasserneubildung in urbanen Gebieten erlaubt.

Für NRW liegen beim LANUV Auswertungen zur mittleren Grundwasserneubildung des Forschungszentrums Jülich (siehe Kapitel 2.2) in einem Raster mit 100 m Auflösung vor.

Für stationäre Modellrechnungen einer mittleren Grundwassersituation reicht die mittlere *Grundwasserneubildung* als Modelleingangsdatensatz i.d.R. aus.

Zu beachten ist, dass für eine standortspezifische Betrachtung der Grundwasserneubildung Abschätzungen nach regionalen Erfahrungswerten lediglich für erste Bilanzbetrachtungen im Rahmen der Systemanalyse geeignet sind. Für eine *instationäre* Grundwassermodellierung reichen solche Abschätzungen in der Regel nicht aus. Für praktisch alle fundierten Berechnungsansätze müssen Wetter- bzw. Klimadaten herangezogen werden.

In diesem Zusammenhang ist insbesondere auf das DVWK Merkblatt 238 "Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen" (DVWK, 1996) hinzuweisen. Breite Anwendung findet das modifizierte HAUDE-Verfahren und das FAO-Verfahren nach der Penman-Monteith Formel. Auf Grundlage dieser Ansätze kann eine Bodenwasserbilanz aufgestellt und schließlich eine Sickerwasserrate ermittelt werden, die in vielen Fällen mit der Grundwasserneubildung gleichgesetzt werden kann.

Kleinräumig differenzierte Karten der mittleren Grundwasserneubildung und eine darauf aufbauende zeitliche Dynamik des Untersuchungszeitraums müssen in der Regel für einen Modellaufbau neu erarbeitet werden. Ausnahmen sind hier bereits bestehende Modellgebiete, für die solche Vorarbeiten bereits abgeschlossen sind.



#### Prüfhinweise

- ✓ *Wie wurde die Grundwasserneubildung ermittelt?*
- ✓ *Auf welchen Klimadaten beruht die Berechnung?*
- ✓ *Wurde eine Flächendifferenzierung vorgenommen?*
- ✓ *Wurde die Grundwasserneubildungsrate zeitlich aufgelöst?*

Künftig kann damit gerechnet werden, dass die künstliche Niederschlagversickerung in Siedlungsbereichen an Bedeutung gewinnen wird, die dann ggf. als ebenfalls witterungsbedingte Größe bei der *Grundwasserneubildung* zu berücksichtigen ist.

### A2.2.3 Wasserbilanz

Eine vollständige *hydrogeologische Systemanalyse* enthält eine Bilanzierung der für das Grundwasser relevanten Wasserhaushaltsgrößen. Positive Bilanzgrößen beinhalten Wasserflüsse (=Volumen pro Zeit), die das Grundwassersystem anreichern, negative solche, die dem System Wasser entziehen. Tabelle 2 zeigt eine Zusammenstellung der wesentlichen Größen.



#### Prüfhinweise

- ✓ *Ist die Wasserbilanz plausibel?*
- ✓ *Wie wurden die Bilanzgrößen ermittelt?*
- ✓ *Beruhren sie auf konkreten Messdaten?*
- ✓ *Welche Bilanzgrößen wurden geschätzt bzw. rechnerisch ermittelt?*

Tabelle 2: Wasserhaushaltsbilanzgrößen einer *hydrogeologischen Systemanalyse*

positive Bilanzgrößen (L <sup>3</sup> /T)	negative Bilanzgrößen (L <sup>3</sup> /T)
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Grundwasserneubildung</li> <li>• Infiltration aus Oberflächengewässern</li> <li>• Grundwasserzuströme</li> <li>• Grundwasseranreicherung durch Versickerungsmaßnahmen</li> <li>• Sonstige</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Verdunstungsprozesse bei flurnahem Grundwasser</li> <li>• Exfiltration in Oberflächengewässer</li> <li>• Grundwasserabströme</li> <li>• Grundwasserentnahmen</li> <li>• Sonstige</li> </ul>
Summe positive Bilanzgrößen	Summe negative Bilanzgrößen

Über einen längeren Zeitraum (d.h. *quasistationärer* Zustand) betrachtet müssen die Summen der positiven und negativen Bilanzgrößen gleich sein. Temporäre Änderungen des Speichervorrats im betrachteten System gleichen sich langfristig aus. Alle ermittelten Bilanzgrößen müssen auf Plausibilität und Sensitivität geprüft werden. Unsicherheiten der Bilanz und rein rechnerisch ermittelte Bilanzgrößen müssen benannt werden.

Je nach Güte und Belastbarkeit der Grundlagendaten kann die im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* aufgestellte Bilanz im Rahmen der Plausibilitätsprüfung der nachfolgenden Grundwassermodellierung als Prüfkriterium herangezogen werden.



## 2.2 Herkunft der Grundlagendaten für Grundwassermodelle

Die für eine hydrogeologische Systemanalyse bzw. für ein nachfolgendes Grundwassermodell erforderlichen Daten und ihre Bezugsquellen in NRW sind in der Tabelle 3 zusammenfasst.

Tabelle 3: Herkunft der Grundlagendaten für Grundwassermodelle (NRW)

Datenbedarf	Herkunft	Bezugsquelle
Räumliche Abgrenzung	Topographische Karten	BR Köln (ehem. LVermA)
Geländehöhe	Topographische Karten, Digitales Geländemodell	BR Köln (ehem. LVermA)
Geologischer und hydrogeologischer Aufbau	Kartenwerke, Datenbanken, Schichtprofile	Geologischer Dienst, Standorterkundung, Wasserwirtschaftsverbände, Wasserversorger
Grundwasserhydraulische Kenngrößen	Pumpversuche, Korngrößenverteilungen, Hydrol. Karten u.a.	Standorterkundung, ggf. Wasserversorger, Geologischer Dienst, LANUV (Hydrol. Kartenwerk)
Pegelstände Oberflächen-gewässer, Abflüsse	Datenbanken	LANUV, UWB, Wasserwirtschaftsverbände, Bundesanstalt f. Gewässerkunde, Wasser- und Schifffahrtsämter, Kommunen
Grundwasserstände	Datenbanken	Landesgrundwasserdienst (LANUV), UWB, Wasserversorger, Standorterkundung, <i>Monitoring</i> ,
Grundwasserbeschaffenheit	Datenbanken	Standorterkundung, <i>Monitoring</i> , Landesgrundwasserdienst (LANUV), UWB
Grundwassernutzungen	Datenbanken	UWB, BR, Wasserversorger, Industriebetriebe
Klimadaten	Datenbanken	Deutscher Wetterdienst, LANUV, Kommunen, Wasserwirtschaftsverbände
Mittlere Grundwasserneubildung	Datenbank HYGRIS C, weitere Datenbanken	LANUV, Geologischer Dienst
Bodentypen, -arten	Kartenwerke, Datenbanken, Schichtprofile	Geologischer Dienst, Standorterkundung, Bodenschätzung
Hangneigung, Reliefenergie	Digitales Geländemodell	BR Köln (ehem. LVermA)
Flächennutzung	z.B. GIS-Daten (ATKIS)	BR Köln (ehem. LVermA)

## 2.3 Grobentwurf des numerischen Modells

Aus der vorliegenden Problemstellung des Altlastenstandortes muss eine klare Formulierung der Fragestellung abgeleitet werden, die mit dem Grundwassermodell behandelt werden soll. Aus dieser Fragestellung ergeben sich die Anforderungen, die an den Modellaufbau zu stellen sind.

Der Grobentwurf für das *numerische Grundwassermodell* basiert auf den Ergebnissen der *hydrogeologischen Systemanalyse* des Bilanzraums. Der Grobentwurf beinhaltet konkrete Vorstellungen zur notwendigen Größe und Abgrenzung (*Randbedingungen*) des *Modellraums*.

Auf Grundlage der standortspezifischen Gegebenheiten und der Analyse des Systems muss nach Formulierung der Aufgabenstellung entschieden werden, ob eine 3D-Simulation erforderlich ist, oder ob die Verhältnisse auch durch eine 2D-Modellierung hinreichend genau abgebildet werden können. Grundsätzlich ist bei Fragen des Stofftransportes häufiger damit zu rechnen, dass eine 3D-Modellierung erforderlich wird. Dies muss bereits beim Aufbau des Strömungsmodells berücksichtigt werden. Möglicherweise wäre im Einzelfall für ein reines Strömungsproblem eine 2D-Modellierung bereits ausreichend.

Gibt es Hinweise auf ausgeprägte 3D-Effekte, die durch das Messstellennetz nicht hinreichend abgebildet werden, sollte vor dem Aufbau eines numerischen Modells die Verbreiterung der Datenbasis erwogen werden. Wird eine 3D-Situation unzulässig auf zwei Dimensionen reduziert, kann dies zu einem fehlerhaften Modellkonzept führen. Können entsprechende vertikal differenzierte Messdaten nicht zur Verfügung gestellt werden, müssen die zwangsläufig entstehenden Unsicherheiten eines Modells in Kauf genommen werden.

Mit zunehmender Mächtigkeit des *Grundwasserleiters* nimmt i.d.R. auch seine *Heterogenität* zu, so dass die Annahme eines aus einer einzigen *homogenen* Schicht bestehenden *Grundwasserleiters* nicht mehr unbedingt zutreffend ist. Aber auch in *homogenen Grundwasserleitern* wachsen mit Zunahme der Mächtigkeit des betrachteten Systems generell die Einflüsse vertikaler Strömungskomponenten, die eine dreidimensionale Betrachtung erforderlich machen können.

Werden Mehrschichtsysteme betrachtet, so ist eine dreidimensionale Strömungsmodellierung notwendig, um das System zutreffend abbilden zu können. Weitere Hinweise zur räumlichen Dimensionalität finden sich in Kapitel 3.2.1.

Bereits im Grobentwurf sollte für das numerische Modell das zeitliche Verhalten festgelegt werden. Dabei gilt die Regel, dass je weniger Dynamik im System vorliegt, desto eher kann eine *stationäre* Strömungssimulation hinreichend sein. Eine *stationäre* Strömungsmodellierung ist möglich, wenn die *hydrogeologische Systemanalyse* folgende Befunde ergibt:

- Die Zeitreihen der Grundwasserstände weisen im Vergleich zur wassererfüllten Mächtigkeit des *Grundwasserleiters* nur eine geringe Schwankungsbreite auf.
- Die Grundwasserstandsganglinien weisen keinen Trend auf.
- Aus der Analyse von Zeitreihen der Grundwasserstände ergeben sich nur geringfügige temporäre Änderungen der Grundwasserfließrichtung.
- Grundwasserentnahmen erfolgen mit nur geringer Schwankungsbreite der Entnahmeraten.
- Eine *instationäre* Interaktion zwischen Oberflächengewässern und dem Grundwasser hat keinen Einfluss auf das *Aussagegebiet* bzw. den *Aussageraum*



Treffen die vorgenannten Punkte in wesentlichem Umfang nicht zu, ist in der Regel vom Erfordernis einer *instationären* Modellierung auszugehen. Dabei entscheiden die standortspezifische Situation und die Aufgabenstellung über die erforderliche zeitliche Auflösung des Modells.

Für eine *stationäre Modellkalibrierung* sollten nach Möglichkeit Mittelwerte mehrjähriger regelmäßiger Grundwasserstandsmessungen quasistationärer Zustände verwendet werden.

Eine *Modellkalibrierung* auf Basis einer einzigen oder vereinzelter Stichtagsmessungen ohne Berücksichtigung des zeitlichen Verhaltens ist kritisch zu bewerten. Eine *instationäre* Strömungsprognose auf Basis einer *stationären Kalibrierung* ist nicht fachgerecht.

Weitere Hinweise zur zeitlichen Dimensionalität finden sich in Kapitel 3.2.2.

Die Wahl des Lösungsverfahrens bzw. Modelltyps (Finite Elemente, Finite Differenzen) sollte im Grobentwurf nicht grundsätzlich festgelegt werden. Vor- und Nachteile unterschiedlicher Modelltypen sind im Einzelfall gegeneinander abzuwägen. Bei ausreichend feiner Diskretisierung sind die *Finite Elemente Methode* und die *Finite Differenzen Methode* als gleichwertig zu betrachten. Ein Auswahlkriterium kann darin bestehen, ob das Modell in einer späteren Phase beim Auftraggeber eingesetzt werden soll und welche Software dort verfügbar ist bzw. verfügbar gemacht werden soll.

In erster Linie ist für die Wahl des Lösungsverfahrens von ausschlaggebender Bedeutung, welche Anforderungen sich aus der Fragestellung und der Systemanalyse für die Modellierung ergeben, und welcher Modelltyp bzw. welche Software diese Anforderungen erfüllt. I.d.R. sind es eher Fragen des Stofftransportes, die zur Wahl bzw. zum Ausschluss eines Modelltyps bzw. einer bestimmten Software führen können. Oft muss zwischen unterschiedlichen Anforderungen der Aufgabenstellung ein Kompromiss gefunden werden.



#### Prüfhinweise

- ✓ *Wurden für den Grobentwurf des numerischen Modells hydraulisch vernünftige Umrundungen gewählt?*
- ✓ *Welche Dimensionalität soll bzw. muss das Modell besitzen?*
- ✓ *Ist die Datengrundlage ausreichend für eine 3D Modellierung?*
- ✓ *Welches zeitliche Verhalten des numerischen Modells ist vorgesehen?*

## 3 Arbeitsschritte zur Strömungsmodellierung

Die nachfolgenden Kapitel beschreiben die Arbeitsschritte, die beim detaillierten Aufbau eines Strömungsmodells abgearbeitet werden müssen. Der Aufbau des numerischen Modells knüpft unmittelbar an den Aufbau des *hydrogeologischen Systems* mit dem Ergebnis eines Grobentwurfs des numerischen Modells an und bildet dessen logische Fortsetzung.

Je nach Detaillierungsgrad der Vorarbeiten sind eine Reihe der erforderlichen Überlegungen zu einzelnen notwendigen Arbeitsschritten für den Aufbau eines *numerischen Grundwasserströmungsmodells* im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* erfolgt und daher bereits in Kapitel 2 beschrieben. Sie werden in diesem Kapitel z.T. im Zusammenhang dargestellt.

### 3.1 Definition der Aufgabenstellung

Wie bereits in den Kapiteln 1.3 und 1.4 beschrieben, besteht ein ganz wesentlicher Arbeitsschritt beim Aufbau eines *numerischen Grundwasserströmungsmodells* in einer möglichst exakten Definition der Aufgabenstellung. Sie bestimmt entscheidend alle nachfolgenden Arbeitsschritte und sollte mit allen am Projekt Beteiligten einvernehmlich festgelegt werden.

In Abhängigkeit von der Komplexität des Einzelfalls kann es dabei sinnvoll sein, die Aufgabenstellung in nacheinander zu erreichende Teilaufgaben zu gliedern. Liegt der Schwerpunkt z.B. auf einer späteren Betrachtung zum Stofftransport, ist der Aufbau eines Strömungsmodells ein abgrenzbares Teilziel, welches vor der *Stofftransportsimulation* durchzuführen ist. Bei einer solchen Fallgestaltung muss die Aufgabenstellung für ein Stofftransportmodell jedoch bereits vor der Erstellung des Strömungsmodells bekannt sein.

Eine klar definierte und ggf. gegliederte Aufgabenstellung ist auch hilfreich, um festlegen zu können, wann eine Aufgabe bzw. eine Teilaufgabe erfüllt ist.

### 3.2 Dimensionalität

#### 3.2.1 Räumliche Dimensionalität (2D, 3D)

Das aus der *hydrogeologischen Systemanalyse* entwickelte *hydrogeologische Modell* (siehe Kapitel 2) beinhaltet bereits implizit die Beantwortung der Frage nach der räumlichen Dimensionalität des *numerischen Grundwasserströmungsmodells*.

Im relativ häufig anzutreffenden einfachsten Fall eines *hydrogeologischen Modells* kann das numerische Strömungsmodell auf einen einzigen *Grundwasserleiter* reduziert werden, dessen Mächtigkeit gering ist gegenüber seiner horizontalen Erstreckung. In diesem Fall sind die Vertikalkomponenten der Grundwasserströmung meist vernachlässigbar klein gegenüber den horizontalen Komponenten. Das Strömungsproblem kann daher vereinfacht werden auf die zwei räumlichen Dimensionen einer Ebene. Man spricht daher auch von zweidimensionaler (2D) horizontal-ebener Strömung. In diesem Zusammenhang muss noch einmal hervorgehoben werden, dass praktisch alle klassischen analytischen Berechnungsansätze der Grundwasserströmung, wie z.B. die gängigen Pumpversuchsauswerteverfahren nach DUPUIT/THIEM, THEIS, JACOB, HANTUSH, STALLMAN u.a. (KRUSEMAN, G.P., DE RIDDER, N.A., 1994), ebenfalls auf einem zweidimensionalen Ansatz beruhen.

Handelt es sich zum Beispiel um ein ausgedehntes *Aussagegebiet* im 100er bis 1000er m-Bereich bei einem gleichzeitig nur sehr gering mächtigen *Grundwasserleiter* in der Größenordnung von wenigen Metern, ist der Aufwand für eine dreidimensionale Strömungsmodellierung meist nicht gerechtfertigt, auch wenn in der Folge eine *Stofftransportsimulation* durchgeführt werden soll.

In vielen Fällen entspricht auch die Datenlage im Feld dieser zweidimensionalen Näherung. Sehr häufig sind Grundwassermessstellen "vollkommen" ausgebaut, d.h. ihre Filterstrecke erfasst den gesamten *Grundwasserleiter*. Messungen der Grundwasserstände (besser Grundwasserdruckhöhen bzw. Piezometerhöhen) aus solchen Messstellen liefern einen mittleren Wert über das gesamte Vertikalprofil des *Grundwasserleiters*. Piezometerhöhenunterschiede in der Vertikalen sind anhand solcher Messstellen nicht auflösbar, es handelt sich hier also um vertikal undifferenzierte zweidimensionale Daten der Piezometerhöhen. Eine solche Datenlage spricht gegen den Einsatz eines 3D-Modells. Liegen aus solchen geringmächtigen *Grundwasserleitern* vertikal differenzierte Daten zu *Piezometerhöhen* vor, sind häufig nur sehr geringe Unterschiede zwischen den einzelnen Filterlagen zu beobachten. Dann ist in vielen Fällen die oben formulierte Vereinfachung auf ein zweidimensionales Strömungsproblem zulässig. Eine zweidimensionale Grundwasserströmungsmodellierung ist in diesen einfach gelagerten Fällen sinnvoll und fachlich gerechtfertigt.

Zeigt das *hydrogeologische Modell*, dass der zu betrachtende *Grundwasserleiter* Zusicckerungen aus über- bzw. unterlagernden Schichten bzw. durch *Grundwasserneubildung* erhält, kann das numerische Strömungsmodell vielfach immer noch auf ein zweidimensionales System reduziert werden. Die Zusicckerungen können über flächenhafte *Quell-* bzw. *Senkenterme* oder ggf. auch *Leakageknoten* berücksichtigt werden.

Die vereinfachte zweidimensionale Herangehensweise stößt auf Grenzen, wenn die Vertikalkomponenten der Strömung nicht mehr vernachlässigt werden können, wie z.B.:

- in der Nähe von Brunnen mit starker Absenkung,
- in der Nähe von unvollkommenen Vorflutern,
- bei unvollkommenen Brunnen,
- wenn mehrere *Grundwasserleiter* zu betrachten sind,
- bei mächtigen *Grundwasserleitern*.

Soll neben der Grundwasserströmung eine Stofftransportbetrachtung erfolgen, kann auch die Stoffverteilung innerhalb des *Grundwasserleiters* Veranlassung für eine dreidimensionale Betrachtung geben. Hat die *hydrogeologische Systemanalyse* z.B. ergeben, dass die Mächtigkeit des *Grundwasserleiters* groß ist im Vergleich zur Ausdehnung einer Schadstofffahne in vertikaler Richtung, so kann dies für das Erfordernis einer dreidimensionalen Modellierung sprechen.

Die Anzahl der variablen Parameter eines numerischen Modells steigt bei dreidimensionaler Betrachtung drastisch an. Für ein dreidimensionales Strö-



#### Prüfhinweise

- ✓ Wurden bei der Festlegung der Dimensionalität des numerischen Strömungsmodells die Erkenntnisse des hydrogeologischen Modells adäquat berücksichtigt?
- ✓ Ist ggf. eine 2D-Simulation ausreichend?
- ✓ Gibt es Gründe, die für eine 3D-Simulation sprechen?
- ✓ Ist die Datengrundlage ausreichend für eine 3D-Simulation?
- ✓ Wurde die Festlegung der Dimensionalität des Modells hinreichend begründet?

mungsmodell muss auch gewährleistet sein, dass vertikal differenzierte Messdaten der zu modellierenden Zielgröße (hier *Piezometerhöhe*) zur Verfügung stehen.

In Fällen, in denen mehrere *Grundwasserstockwerke* potentiell betroffen sind, ist eine dreidimensionale Modellierung bereits vom Grundsatz her notwendig. Handelt es sich bei der vorgesehenen Modellierung lediglich um Fragen der Strömung, kann das Modell ggf. auf so genannte 2½ D-Modelle vereinfacht werden. In diesem Fall wird auf die Simulation der Strömung in gering durchlässigen Schichten verzichtet. Die Wasser leitenden Schichten werden dann über Leakageterme gekoppelt. Ist dagegen auch eine stockwerkübergreifende *Stofftransportsimulation* vorgesehen, ist dieser vereinfachende Ansatz i.d.R. ausgeschlossen.

Zusammenfassend ergeben sich für die Wahl der Dimensionalität des Strömungs- bzw. *Transportmodells* die in Tabelle 4 aufgelisteten und im Einzelfall abzuwägenden Hinweise:

Tabelle 4: Kriterien zur Wahl der Modelldimensionalität

2D-Simulation	3D-Simulation
gering mächtiger <i>Grundwasserleiter</i> im Vergleich zur horizontalen Ausdehnung der Grundwasserbelastung	mächtiger <i>Grundwasserleiter</i> im Vergleich zur horizontalen Ausdehnung der Grundwasserbelastung
keine differenzierte Schichtausbildung	differenzierte Schichtausbildung
keine Stockwerksgliederung	Stockwerksgliederung
Schadstoffbelastung nicht auflösbar in der Vertikalen	Schadstoffbelastung ist differenziert in der Vertikalen
Vertikalgradienten vernachlässigbar	Vertikalgradienten nicht vernachlässigbar
Datenlage beschränkt auf vollkommene Messstellen	Tiefendifferenzierte Daten liegen vor

### 3.2.2 Zeitliche Dimensionalität (stationär/instationär)

Aus der Fragestellung für die Modellrechnung ergibt sich die zeitliche Dimensionalität, für die das Modell aufgebaut werden soll. Anhand der vorliegenden Daten muss geprüft werden, ob eine stationäre oder instationäre Modellierung möglich ist.

Bei *stationärer* Betrachtung ist eine zeitliche Entwicklung der *Piezometerhöhen* nicht möglich. Es wird davon ausgegangen, dass im Grundwasser ein zeitlich stabiles Strömungsregime herrscht, welches sich im Gleichgewicht mit den *Randbedingungen* befindet. In der Natur sind *stationäre* Verhältnisse grundsätzlich nicht gegeben, jedoch können ggf. unter günstigen Umständen "*quasistationäre*" Verhältnisse beschrieben werden, die diese Vereinfachung erlauben. Entsprechende Kriterien sind in Kapitel 2.3 genannt.



#### Prüfhinweis

- ✓ Wurde eine belastbare Begründung für die Grundsatzentscheidung des Modellkonzeptes (stationär oder instationär) gegeben?

Treffen die in Kapitel 2.3 genannten Kriterien nicht zu, muss in der Regel vom Erfordernis einer *instationären* Strömungsmodellierung ausgegangen werden.

## 3.3 Räumliche und zeitliche Auflösung des Strömungsmodells

### 3.3.1 Räumliche Auflösung

Nachdem die Grundsatzentscheidung über die Dimensionalität des Modells getroffen worden ist, muss die räumliche Auflösung des *Modellgitters* ("*Diskretisierung*") diskutiert werden.

Strömungsmodelle können in allen Maßstäben aufgebaut werden, demzufolge kann eine strenge Regel für die erforderliche Auflösung eines Modells nicht genannt werden. Die Festlegung muss im Einzelfall stets aus der konkreten Fragestellung, den örtlichen Gegebenheiten und nicht zuletzt aus der Güte bzw. Dichte der Datenbasis abgeleitet werden.

Horizontale Gitter- bzw. Knotenabstände von einigen 10er Metern bis hin zu mehreren 100 Metern sind oft hinreichend für eine *numerische Grundwasserströmungsmodellierung*. Im Bereich kleinräumig differenzierter Verhältnisse (Brunnen, Gewässer etc.) kann aber auch eine horizontale Modellauflösung mit Gitterweiten von wenigen Metern erforderlich werden. Eine höhere Modellauflösung als die, die für eine reine Strömungssimulation notwendig ist, kann aber insbesondere dann erforderlich werden, wenn nachfolgend zur Strömungsmodellierung eine Simulation des Stofftransportes geplant ist.



#### Prüfhinweise

- ✓ *Wie ist die Auflösung des Modells begründet?*
- ✓ *Ist bei der gewählten Modellauflösung eine ggf. später vorgesehene gitterbasierte Transportmodellierung berücksichtigt worden?*
- ✓ *Kann zu diesem Zweck das Modellgitter nachträglich verdichtet werden?*

Bezüglich der räumlichen Auflösung bieten Finite-Elemente-Modelle gegenüber Finite-Differenzen-Modellen eine höhere Flexibilität, da die Gitterabstände der Modellknoten beliebig verkleinert werden können. Auf diese Weise kann das *Modellgitter* beliebig an vorgegebenen Punkten (Messstellen, Brunnen etc.) orientiert werden.

Bei den Finite-Differenzen-Modellen werden zur Verfeinerung üblicherweise Detailmodelle "ausgeschnitten", wenn dies erforderlich wird. Daten zu vorgegebenen Messpunkten, die nicht auf exakt auf Gitterpunkten liegen, werden durch Interpolation ermittelt.

Mit der aktuell zur Verfügung stehenden Computer Generation und den heute verbreiteten Softwarepaketen können FE- und FD-Modelle mit einigen hunderttausend Modellknoten problemlos beherrscht werden.

In dreidimensionalen Modellen entscheiden neben der Fragestellung letztlich die Ergebnisse der Erkundung bzw. das *hydrogeologische Modell* über die notwendige räumliche Auflösung in der Vertikalen. Bei geschichtetem Aufbau des Untergrundes wird oft einer hydrostratigraphischen Einheit eine Modellschicht zugeordnet. In anderen Fällen müssen solche Einheiten aber auch noch deutlich feiner *diskretisiert* werden. Letztlich muss in der Praxis stets ein Kompromiss gefunden werden zwischen der EDV-technischen Handhabbarkeit eines Modells sowie der notwendigen und verfügbaren Datendichte für ein dem konkreten Problem angemessen hoch aufgelöstes Modell.



### 3.3.2 Zeitliche Auflösung

Ergibt sich aus der *hydrogeologischen Systemanalyse* das Erfordernis einer *instationären* Strömungsmodellierung, ist eine Entscheidung über die zeitliche Diskretisierung des Modells zu treffen. Der Grad der Auflösung der *zeitlichen Diskretisierung* ergibt sich aus der Analyse der zeitlichen Dynamik der maßgeblichen Randbedingungen des Modells (z.B. Flusswasserspiegel, *Grundwasserneubildungsrate*, Brunnenschaltzeiten) und der Reaktionsgeschwindigkeit der *Piezometerhöhen* (Amplitude, zeitliche Verzögerung) innerhalb des Modellgebietes. Weitere Hinweise sind in Kapitel A2.1.4 enthalten.

Die *zeitliche Diskretisierung* erfolgt in vielen Modellen in Form von zwei Gliederungsebenen. Innerhalb der übergeordneten zeitlichen Gliederungsebene werden die *Randbedingungen* des Systems als konstant angenommen, wie z.B. eine konstante Entnahmerate eines Brunnens. Diese zeitliche Einteilung ist für das Strömungsmodell die wesentliche. Für die Dauer dieser Zeitabschnitte gibt es keine verbindliche Regel, sie ergibt sich aus der Datenanalyse und der Aufgabenstellung. Üblicherweise besitzen diese Zeitabschnitte eine Ausdehnung von Stunden über Tage bis hin zu einigen Wochen.

Ein solcher *Modellzeitschritt* im vorgenannten Sinn kann in den meisten Programmen noch feiner aufgegliedert werden, um eine höhere zeitliche Auflösung zu erzielen, z.B. wenn die Entwicklung der Grundwasserstände während eines Modellzeitschritts mit konstanter Pump-rate simuliert werden soll. Innerhalb dieser feineren Zeitschrittunterteilung behalten die *Randbedingungen* des übergeordneten Abschnitts Gültigkeit.



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist die im Modell gewählte zeitliche Auflösung hinreichend zur Abbildung der Grundwasserdynamik?
- ✓ Konnte ein geeigneter Simulationszeitraum für die Modellkalibrierung festgelegt werden?

Mit der Entscheidung für eine *instationäre* Simulation der Grundwasserströmung entsteht auch ein entsprechender Datenbedarf, um das Modell anhand gemessener Felddaten kalibrieren zu können.

Im Idealfall liegen sowohl aus dem engeren *Aussagegebiet* als auch aus dem weiter gespannten Modellraum längere Zeitreihen von *Piezometerhöhenmessungen* und ggf. Messungen der Wasserstände von Oberflächengewässern vor, so dass anhand dieser Daten ein aussagekräftiger *Modellzeitraum* ausgewählt werden kann, der dann in angepasste Modellzeitschritte unterteilt wird.

Wenn nicht die Zeit zur Verfügung steht, neue und exakt auf die Fragestellung zugeschnittene Daten über einen repräsentativen Zeitraum hinweg zu erheben, muss auf vorhandene historische Daten zurückgegriffen werden. In solchen Fällen ist zu berücksichtigen, dass die verfügbare Datenbasis nicht immer allen Erfordernissen des Modellkonzeptes gerecht wird. In komplex gelagerten Fällen sollte daher stets auch eine gezielte Erfassung neuer Daten in Betracht gezogen werden. Die aus solchen Daten abgeleiteten Erkenntnisse können oft auf historische Zeiträume übertragen werden.

### 3.4 Modellgeometrie (horizontaler/vertikaler Aufbau)

Anhand des aus der *hydrogeologischen Systemanalyse* entwickelten *hydrogeologischen Modells* (siehe Kapitel 2.1.1) können hydraulisch sinnvolle Grenzen für das numerische Modell festgelegt werden.

Idealerweise wird bereits das räumliche *hydrogeologische Modell* (siehe Kapitel 2.1.2) in einem Detaillierungsgrad aufgebaut, der es erlaubt, dessen Grundlagendaten unmittelbar dem numerischen Modell zur Verfügung zu stellen.

Aus den zur Verfügung stehenden Schichtenverzeichnissen von Bohrungen werden hierbei die Ober- und Unterkanten der zu modellierenden hydrostratigraphischen Einheiten entnommen und deren Hangend- und Liegendfläche entwickelt. Zur Regionalisierung der punktförmig vorliegenden Informationen kommen i.d.R. geostatistische Methoden zum Einsatz. Das Methodenspektrum reicht hierbei von der einfachen Interpolation durch Triangulation bis hin zum Kriging-Verfahren unter Berücksichtigung der räumlichen Kontinuität der Daten (Variographie).



#### Prüfhinweise

- ✓ Wurden die Ergebnisse des hydrogeologischen Modells in angemessener Detailtiefe auf das numerische Modell zu übertragen?

Die Regionalisierung dieser Strukturdaten erfolgt meist unmittelbar auf das gewählte *Modellgitter*. Zur Dokumentation und Plausibilitätskontrolle dienen Profilschnittserien, Isohypsen der Hangend- und Liegendflächen sowie Isopachenkarten (Linien gleicher Mächtigkeit).

Die Vorgehensweise ist prinzipiell für jede modellierte Einheit gleich, unabhängig davon, ob eine 2D- oder 3D-Modellierung durchgeführt wird. Zusammen mit der Höhenlage der Geländeoberfläche ergibt sich ein erstes räumliches Bild des numerischen Modells, das durch spezielle Programme ggf. anschaulich in drei Dimensionen visualisiert werden kann.

Die Geometrie des numerischen Modells sollte alle geometrischen Merkmale des *hydrogeologischen Modells* abbilden. Ist dies nicht der Fall, muss die Auflösung des numerischen Modells überprüft werden.

Für eine weitere Verfeinerung der *Diskretisierung* können je nach Bedarf die einzelnen Modelleinheiten in der Horizontalen als auch in der Vertikalen weiter untergliedert werden.

### 3.5 Randbedingungen der Grundwasserströmung

Ein *numerisches Grundwasserströmungsmodell* bedarf der Definition von Randbedingungen. Nähere Erläuterungen zum mathematischen Hintergrund der *Randbedingungen* können dem Anhang in Kapitel A1.1.5 entnommen werden.

*Randbedingungen* definieren das Verhalten der *Grundwasserströmung* an den Rändern des betrachteten Strömungsfeldes. Jedes *Grundwasserströmungsfeld* ist auch in der Natur durch natürliche Grenzen umschlossen. In Kapitel 2.1.1 wurden mögliche natürliche Grenzen eines Strömungsfeldes beschrieben, die durch adäquate mathematische *Randbedingungen* in einem numerischen Modell abgebildet werden können.

Zur Verfügung stehen drei unterschiedliche Typen von *Randbedingungen*:

**Randbedingung 1. Art (DIRICHLET-Typ):** Bei der DIRICHLET-*Randbedingung* (auch als H-*Randbedingung* bezeichnet) ist die *Piezometerhöhe* als Festpotenzial vorgegeben. Beispiele für *Festpotenziale* sind z.B. Grenzen der Grundwasserströmung an offenen Gewässern, wie z.B. Flüssen, Seen, Meer.

**Randbedingung 2. Art (NEUMANN-Typ):** Bei der NEUMANN-*Randbedingung* ist ein konstanter Gradient vorgegeben. Diese Situation entspricht einem konstanten Volumenstrom über den Modellrand ("*Ranzufluss*", auch als *Q-Randbedingung* bezeichnet), z.B. am Rand des *Grundwasserleiters* am Übergang zu einem Gebirge mit bekanntem Wasserfluss. Ein Sonderfall ist die *Randbedingung 2. Art* mit der Flussrate "0", wodurch eine undurchlässige Berandung, mithin auch eine Stromlinie abgebildet werden kann.

**Randbedingung 3. Art (CAUCHY-Typ):** Die *Randbedingung 3. Art* ist eine Kombination der ersten beiden Arten von *Randbedingungen*. Man spricht auch von *Leakage-Randbedingung* (siehe Kapitel 3.8.3). Sie wirkt wie ein *Festpotenzialknoten* verbunden mit einem hydraulischen Widerstand. Beispiele für den Einsatz einer *Leakage-Randbedingung* sind wie beim *Festpotenzial* z.B. Grenzen der Grundwasserströmung an offenen Gewässern, die nicht vollkommen an das Grundwasser angebunden sind (z.B. aufgrund einer Kolmationsschicht) und einen "halbdurchlässigen" Rand darstellen.

Aus der *hydrogeologischen Systemanalyse* ergibt sich, welche *Randbedingungen* im *numerischen Grundwasserströmungsmodell* des konkreten Einzelfalles Verwendung finden können. Man sollte nicht der Versuchung unterliegen, einen *Modellraum* aus Gründen vermeintlicher Sparsamkeit zu klein zu wählen. Die Modellränder sollten vom zentralen *Aussagegebiet* so weit entfernt liegen, dass sie die Strömungssituation im *Aussagegebiet* nicht mehr prägend beeinflussen. Es wäre ungünstig, wenn sich z.B. bei einer späteren Prognoserechnung herausstellt, dass die Auswirkung eines geplanten Brunnens aufgrund zu nah gewählter Modellränder nicht mehr adäquat simuliert werden kann.

Grundsätzlich sollte jedes Strömungsmodell wenigstens einen Modellknoten beinhalten, der durch eine *Randbedingung* erster oder dritter Art definiert ist. In diesen beiden Arten von *Randbedingungen* ist eine feste Potenzialhöhe direkt oder indirekt enthalten. Dadurch ist die Eindeutigkeit der numerischen Lösung gewährleistet. Ohne wenigstens eine an einem Punkt festgelegte *Piezometerhöhe* können numerische Instabilitäten auftreten.

Der Verlauf eines offenen Gewässers mit Anbindung an den *Grundwasserleiter* eignet sich z.B. sehr gut für die Anwendung eines *Festpotenzials* (*Randbedingung erster Art*). Gegenstand der *hydrogeologischen Systemanalyse* ist es, entsprechend dem Verlauf der absoluten Wasserstandshöhen entlang des Gewässers, Zahlenwerte (in m NN bzw. m NHN) für die *Festpotenzialknoten* des numerischen Modells zur Verfügung zu stellen. In Abhängigkeit von der *zeitlichen Diskretisierung* kann bei *instationären* Modellen die *Piezometerhöhe* des *Festpotenzials* Schwankungen unterliegen.

Ein *Festpotenzial* muss im numerischen Modell sorgfältig und mit Bedacht festgelegt werden. Es ist zu betonen, dass an einem Modellknoten mit festgelegter Potenzialhöhe sich diese nicht ändern kann, unabhängig davon, ob an diesem Knoten eine Grundwasserentnahme stattfindet oder nicht. Im Modell wird per Definition immer entsprechend Wasser erzeugt, um die festgelegte Potenzialhöhe zu halten. Während solche Bedingungen in der Nähe eines offenen Gewässers mit guter Anbindung an den *Grundwasserleiter* durchaus herrschen können, sind sie an anderer Stelle aber i.d.R. unrealistisch. So ist z.B. die Verwendung eines *Festpotenzials* am Fuß eines Gebirges in Nachbarschaft zu einem auskeilenden Talgrundwasserleiter nicht adäquat, auch wenn dort dauerhaft kaum schwankende Grundwasser-



stände herrschen. Würde dort eine Grundwasserentnahme simuliert, würde das *Festpotenzial* beliebig Wasser im System erzeugen.

Ist die Anbindung eines Oberflächengewässers zum Grundwasser behindert, zum Beispiel durch die Ausbildung einer *Kolmationsschicht* an der Gewässersohle, können solche Verhältnisse besser durch "*Leakageknoten*" (*Randbedingung dritter Art*) abgebildet werden als durch ein *Festpotenzial*. In den so genannten "*Leakagefaktor*" geht der Quotient aus *Durchlässigkeitsbeiwert* und Dicke der *Kolmationsschicht* ein. Anschaulich kann man sich den *Leakagefaktor* als einen hydraulischen Widerstand vorstellen, der die Wirkung des gleichzeitig im *Leakageknoten* definierten festen Potenzials auf das Grundwasser dämpft. Je größer der *Leakagefaktor* gewählt wird, desto ähnlicher wirkt der *Leakageknoten* wie ein *Festpotenzial*.

Hat der zu modellierende *Grundwasserleiter* eine natürliche Begrenzung - z.B. an einem aufsteigenden Gebirgsrand, kann eine *Randbedingung zweiter Art* zur Anwendung kommen. Diese Form der *Randbedingung* beschreibt einen ggf. zeitlich variablen *Randzufluss* z.B. aus dem angrenzenden Gebirge. Die Abschätzung solcher Zustromraten ist Gegenstand der *hydrogeologischen Systemanalyse*. Mit der *Randbedingung zweiter Art* entsteht ein Strömungsvektor in den *Modellraum* hinein.

Eine negative Flussrate ist ebenfalls möglich, wenn ein Abstromrand modelliert werden soll. Die Bestimmung einer entsprechenden Abstromrate ist ebenfalls Gegenstand der *hydrogeologischen Systemanalyse*.

Einen Sonderfall der *Randbedingung zweiter Art* bildet die Zuflussrate mit dem Wert "0". Auf diese Weise zeigt der Strömungsvektor weder in das Modellgebiet hinein noch hinaus, sondern ist parallel zu seinem Rand orientiert. Auf diese Weise wird eine undurchlässige Berandung modelliert, entlang derer die Strömung parallel orientiert ist. Diese besondere *Randbedingung zweiter Art* stellt folglich immer eine Stromlinie dar und findet u.a. Verwendung zur Modellierung von ortsfesten Wasserscheiden.

Diese Form der *Randbedingung zweiter Art* kann auch immer dann genutzt werden, wenn parallel zur Grundwasserfließrichtung keine anderen hydrogeologisch sinnvollen Modellränder gefunden werden können und eine Grundwasserstromlinie eine Modellberandung darstellen soll. Vorsicht ist in diesem Fall aber immer geboten, da ein solcher Rand während der Simulation natürlich ortsfest bleibt. Ändert sich aber in der Natur tatsächlich in einem *instationären* Fließregime die Strömungsrichtung an einem solchen Rand, würde dies durch das Modell nicht adäquat abgebildet. Eine *Randbedingung zweiter Art* mit Flussrate "0" sollte daher immer so weit entfernt wie möglich vom zentralen *Aussagegebiet* des Modells angelegt werden. Es ist besser, den Modellraum größer zu wählen, als einen zu nah gelegenen Modellrand festzulegen, der das Geschehen im *Aussagegebiet* beeinflusst.

Bei der Festlegung der *Randbedingungen* des Grundwasserströmungsmodells sollten folgende Grundregeln und Hinweise berücksichtigt werden:

- *Festpotenzialknoten* an seitlichen Rändern und am Zustromrand sind zu vermeiden.
- *Leakageknoten* sind flexibler als *Festpotenzialknoten*.
- Stromlinienränder sind sparsam zu verwenden und weit entfernt vom *Aussagegebiet* anzuordnen.
- Im Zustrom sind definierte *Randzuflüsse* gegenüber *Festpotenzialen* vielfach vorzuziehen.
- Liegende Modellbegrenzung ist als Stromlinie, ggf. in Form von *Leakageknoten* zu gestalten.

Die nachfolgende Abbildung 4 zeigt beispielhaft eine typische Anordnung unterschiedlicher Randbedingungen.

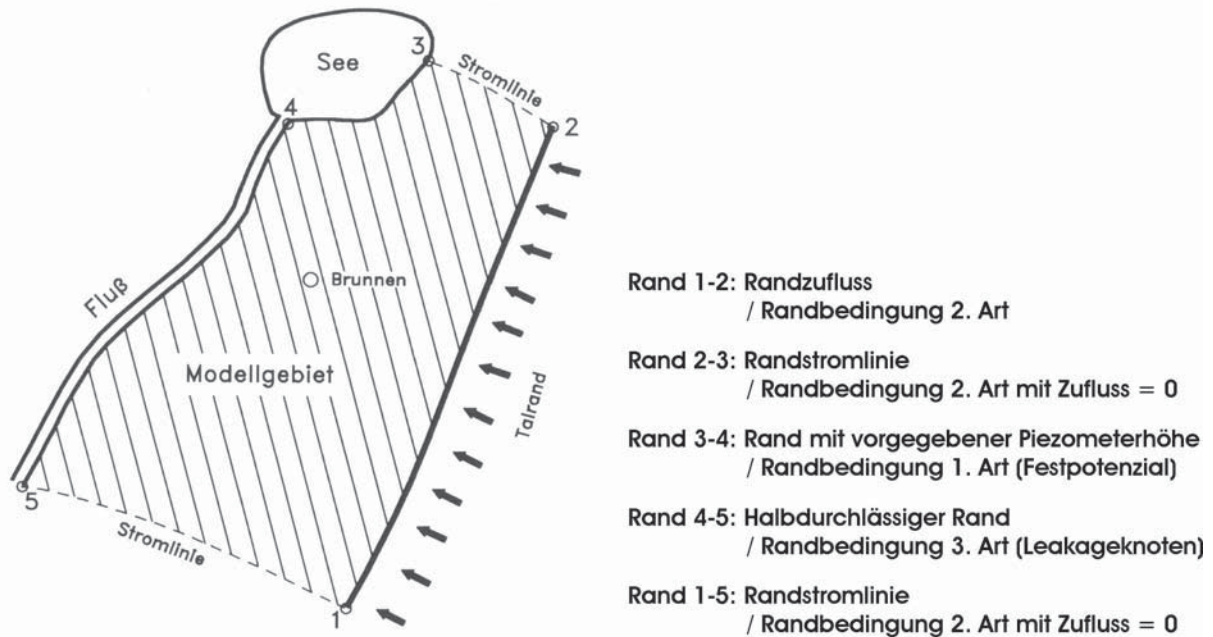


Abbildung 4: Anordnung von *Randbedingungen* in einem Modellgebiet (ergänzt nach KINZELBACH, W. und RAUSCH, R. 1995)

In ausgedehnten Flachlandaquifern kann es vorkommen, dass in angemessener Entfernung keine natürlichen Aquiferbegrenzungen gefunden werden können. Wenn hinzu kommt, dass nur relativ einfach gelagerte Strömungsprobleme betrachtet werden sollen, wie z.B. eine optimale Brunnenkonstellation, wird man bemüht sein, die numerische Modellierung auf einen sinnvollen kleineren Ausschnitt des *Aquifers* zu beschränken, um den Gesamtaufwand zu begrenzen.



#### Prüfhinweise

- ✓ Wurden die Randbedingungen des numerischen Modells an natürlichen Rändern orientiert?
- ✓ Wurden die Randbedingungen adäquat umgesetzt?
- ✓ Besitzt das Modell noch hinreichende Freiheitsgrade?

In solchen Fällen können zunächst die seitlichen Modellbegrenzungen entsprechend der *hydrogeologischen Systemanalyse* als Stromlinienränder (= undurchlässiger Rand) modelliert werden. Am Abstromrand des Modells wird häufig der Verlauf einer gemessenen Grundwasserhöhengleiche als Festpotenzialrand definiert. Am Zustromrand sollte dagegen besser ein *Randzufluss* Verwendung finden. Wichtig ist aber auch in solch einem Fall, dass sich die Modellränder in so großem Abstand vom zentralen *Aussagegebiet* befinden, dass sie die *Strömung* dort kaum mehr beeinflussen. Alternativ können an den Zu- und Abstromrändern *Leakageknoten* angewendet werden, mit deren Hilfe ein sehr weit entferntes *Festpotenzial* modelliert werden kann.

## 3.6 Quell- und Senkenterme, sonstige besondere Modellelemente

### 3.6.1 Brunnen

Brunnen werden im numerischen Modell mathematisch durch einen zusätzlichen *Quell-* bzw. *Senkenterm* in der Strömungsgleichung berücksichtigt. Es handelt sich bei diesen um eine *Randbedingung zweiter Art*. Nähere Angaben finden sich im Anhang in den Kapiteln A1.1.4 und A1.1.5.

Brunnen mit dokumentierten signifikanten Entnahmeraten und Absenktrichtern gehören zu den Bestandteilen numerischer Modelle, die für eine gelungene *Kalibrierung* des Modells von herausragender Bedeutung sein können. Durch eine Brunnenentnahme wird dem *Grundwasserleiter* punktförmig ein starkes Signal aufgeprägt, das eine charakteristische Fernwirkung erzielt (Absenkungstrichter, unterer Kulminationspunkt, Lage des Einzugsgebietes, Entnahmbreite u.a.). Solche Charakteristika können die *Modellkalibrierung* wesentlich erleichtern. Brunnenentnahmeraten sind wichtige Datenquellen, die im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* zu recherchieren, aufzubereiten und auf Verlässlichkeit zu prüfen sind.



#### Prüfhinweise

- ✓ Wurden bei *instationären Simulationen* die unterschiedlichen *Entnahme- bzw. Infiltrationsraten von Brunnen* berücksichtigt?
- ✓ Wie wurde eine *flächendifferenziert ermittelte Grundwasserneubildungsrate* auf das *Modellgitter* übertragen?

Infiltrationsbrunnen werden analog wie Entnahmebrunnen behandelt, jedoch erhält die Infiltrationsrate im Gegensatz zu einer Entnahme ein positives Vorzeichen.

### 3.6.2 Grundwasserneubildung

Die *Grundwasserneubildung* wird im numerischen Modell mathematisch ebenfalls durch einen zusätzlichen *Quellterm* in der Strömungsgleichung berücksichtigt. Nähere Angaben finden sich im Anhang in den Kapiteln A1.1.4 und A1.1.5.

Weitere Erläuterungen zur Ermittlung der *Grundwasserneubildung* unter *stationären* und *instationären* Bedingungen sind dem Kapitel 2.1.11 zu entnehmen.

Bei der *Diskretisierung* der *Grundwasserneubildung* muss beachtet werden, dass das vorgehene *Modellgitter* oft nicht mit den flächendifferenzierten Daten der *Grundwasserneubildung* zusammenfällt. Es sollte eine Plausibilitätskontrolle durch summarischen Vergleich der diskretisierten Daten und der Eingangsdaten erfolgen.

### 3.6.3 Seen, Fließgewässer, Wasserschiffahrtsstraßen, Drainagen

Seen mit Grundwasseranschluss (z.B. Auskiesungen) können im numerischen Modell sehr einfach durch einen extremen *Durchlässigkeitsbeiwert* und durch eine *Speicherwirksame Porosität = 1* abgebildet werden. Auf diese Weise wird erreicht, dass sich im Bereich des Sees praktisch kein Gradient der *Piezometerhöhe* ausbildet (=ebene Seefläche) und der See gleichzeitig ein der Realität entsprechendes Speicherpotenzial aufweist. Einige Rechenprogramme bieten zur Modellierung von Seen noch etwas komplexere Ansätze, insbesondere im Zusammenhang mit Zu- und Abläufen aus den Seen.

Sollen kleinere Fließgewässer im Modell abgebildet werden, sind als Datengrundlage mindestens die Gewässersohlhöhen und Wasserstände entlang des Gewässers zu ermitteln. Dann kann das linienhafte Gewässer in einem einfachen Ansatz als eine Reihe von *Leakageknoten* modelliert werden. Eine Reihe von Rechenprogrammen bietet zu diesem Themenbereich auch höherwertige Ansätze, die den Abfluss im Gewässer selbst und seine Wechselwirkungen mit dem Grundwasser (*Effluenz, Influenz*) in die Modellierung mit einbeziehen. Mit diesen Ansätzen kann eine integrale Betrachtung des Wasserhaushaltes unter vollständiger Berücksichtigung des Grund- und Oberflächenwasserabflusses realisiert werden.

Wasserschiffahrtsstraßen lassen sich ebenfalls als *Leakageknoten* behandeln. Die relative Anbindung an die grundwasserführende Schicht wird durch Variation des *Leakagekoeffizienten* modelliert.

Die meisten Rechenprogramme bieten auch einfachere Ansätze zur Berücksichtigung von Drainagen. Steigt die *Piezometerhöhe* im Grundwasser über eine im Modell definierte Sohlhöhe an, wird dem Grundwassersystem Wasser entzogen. Auch hier handelt es sich im Prinzip um *Leakageknoten*, die allerdings nur unter den genannten Bedingungen im Modell aktiviert werden. Solche *Leakageknoten* lassen sich auch anwenden, um die Auswirkungen von Kanalisationsnetzen zu modellieren, die aufgrund ihrer Höhenlage eine Vorflutfunktion für das Grundwasser aufweisen.

### 3.7 Anfangsbedingungen

Mit den Anfangsbedingungen wird die Piezometerhöhenverteilung innerhalb des Modells zu Beginn einer Simulation festgelegt. Während für eine *stationäre* Simulation keine besonderen *Anfangsbedingungen* benötigt werden, müssen solche für *instationäre* Simulationen beim Modellaufbau definiert werden.

Üblicherweise werden im Zuge der *hydrogeologischen Systemanalyse* anhand von Stichtagsmessungen für typische Strömungszustände Grundwasserhöhengleichenpläne erzeugt. Im Idealfall kann für den für die *Modellkalibrierung* ausgewählten Modellzeitraum der Startpunkt der Simulation durch einen solchen Grundwasserhöhengleichenplan als *Anfangsbedingung* definiert werden.

Ist dies nicht gegeben, müssen die *Anfangsbedingungen* für den ausgewählten Modellzeitraum geschätzt werden. Dies sollte anhand der im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* gewonnenen Standortkenntnisse näherungsweise möglich sein. Je nach Güte der Schätzung bzw. Güte des konstruierten Grundwasserhöhengleichenplanes kann bei einer *instationären* Simulation zu Beginn eine "Einschwingphase" benötigt werden, bis sich das System auf die *Randbedingungen* des Modells eingestellt hat. In dieser Einschwingphase sind die Berechnungsergebnisse zu verwerfen, da erst die Wirkung der fehlerhaften *Anfangsbedingung* abklingen muss, was mit zunehmender Simulationsdauer aber meistens gewährleistet ist.



#### Prüfhinweise

- ✓ Auf welcher Grundlage beruht bei einem instationären Modell die gewählte Anfangsbedingung?
- ✓ Passt die Anfangsbedingung zum Simulationszeitraum oder muss mit einer Einschwingphase gerechnet werden?



## 3.8 Modellparametrisierung

Ein Ergebnis der *hydrogeologischen Systemanalyse* (siehe Kapitel 2.1.4) ist die Schätzung einer räumlichen Verteilung der *Aquiferparameter* für jede zu modellierende hydrostratigraphische Einheit. Grundlage dieser Schätzung sind Erkundungsdaten bzw. Ergebnisse einer Datenrecherche.

### 3.8.1 Durchlässigkeitsbeiwert, Transmissivität

Mit Felddaten, die stets mit Angaben aus Literatur und Kartenwerken abgeglichen werden sollten (siehe Kapitel 2.1.4), kann oft bereits eine gute Startwertverteilung der Durchlässigkeitsverteilung ermittelt werden.

Zuverlässige Felddaten zum bedeutsamsten *Aquiferparameter* der Grundwasserströmungsmodellierung, dem *Durchlässigkeitsbeiwert* ( $k_f$ -Wert) bzw. der Transmissivität (siehe Kapitel A1.1.4), liefern Pumpversuche. Daten aus 1-Bohrlochversuchen (i.d.R. Kurzpumpversuche) haben eine begrenzte räumliche Aussagekraft, während Großpumpversuche Aussagen über wesentlich größere Bereiche erlauben. Detaillierte kleinräumige Daten können u.a. auch über Slug-Tests und Flowmeter Messungen gewonnen werden.

Die genannten Versuche liefern Daten zum *Durchlässigkeitsbeiwert* in horizontaler Richtung. Ist eine 3D-Simulation vorgesehen, besteht zusätzlicher Datenbedarf hinsichtlich der Größe der vertikalen *Durchlässigkeitsbeiwerte* der modellierten Einheiten. Gängige Versuchsanordnungen zur Ermittlung dieser Kenngrößen liegen nicht vor, so dass in der Regel zunächst eine Schätzung vorgenommen wird. Üblicherweise beträgt der vertikale *Durchlässigkeitsbeiwert* in geschichteten Lockergesteinen etwa die Hälfte bis ein Hundertstel des horizontalen *Durchlässigkeitsbeiwertes*. Die Bestimmung im Einzelfall ist ein Ergebnis der *Kalibrierung*, wenn dafür geeignete Daten zur Verfügung stehen.

### 3.8.2 Speicherwirksame Porosität, Speicherkoeffizient

Im Anhang (siehe Kapitel A1.1.4) wird die Bedeutung des *Speicherkoeffizienten* bzw. der *speicherwirksamen Porosität* erläutert und dargelegt, aus welchem Grund sich ungespannte und gespannte *Aquifere* bezüglich ihres Speichervermögens unterschiedlich verhalten.

Da in üblicherweise eingesetzten Rechenprogrammen i.d.R. keine einschränkende Entscheidung getroffen werden muss, ob ungespannte oder gespannte Verhältnisse im modellierten Grundwassersystem herrschen, kann meist unabhängig die *speicherwirksame Porosität* für den Fall einer *freien Grundwasser Oberfläche* (d.h. ungespannten) wie auch der gespannte *spezifische Speicherkoeffizient* definiert werden. Programmintern wird je *Modellzeitschritt* berechnet, ob gespannte oder ungespannte Verhältnisse herrschen. Entsprechend wird beim *Speicherkoeffizient* zwischen der *Speicherwirksame Porosität* und dem auf der Elastizität des *Grundwasserleiters* bzw. der geringen Kompressibilität des Wassers beruhenden *Speicherkoeffizient* für gespannte Verhältnisse unterschieden. Im gespannten Fall berechnen viele Rechenprogramme ebenfalls intern den *Speicherkoeffizienten* aus dem *spezifischen Speicherkoeffizienten* und der Mächtigkeit.

Die Abschätzung von Startwerten für die *Speicherwirksame Porosität* bzw. den gespannten *spezifischen Speicherkoeffizient* erfolgt im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse*.

Die das Speicherverhalten von *Aquiferen* kennzeichnenden Werte sind meist relativ wenig sensitive Parameter, die häufig keinen großen örtlichen Schwankungen unterliegen.

### 3.8.3 Leakagefaktoren

*Leakagefaktoren* sind durch Feldmessungen nur schlecht bestimmbar und gehören daher zu den Kalibriergrößen, die lediglich im günstigen Fall durch Felddaten auf Plausibilität geprüft werden können. Wenn z.B. ein Oberflächengewässer im Modellgebiet abgebildet wird, können Abflussmessungen im Gewässer mit der Wasserbilanz (siehe Kapitel 0.5A2.2.3) des Modells verglichen werden. Insgesamt gelingt es nur eher selten, *Leakagefaktoren* zur Beschreibung des hydraulischen Widerstandes zwischen Oberflächengewässern, Wasserschiffahrtsstraßen, Drainagen einschließlich Kanalisationsnetzen und *Grundwasserleiter* anhand von Feldmessungen verlässlich zu ermitteln. Es ist die Aufgabe der *hydrogeologischen Systemanalyse*, geeignete Startwerte für *Leakagefaktoren* zu bestimmen bzw. zu schätzen. Feldbegehungen mit Erfassung der Eigenschaften des Gewässerbettes können wertvolle Hinweise für diese Schätzungen liefern.

In manchen Rechenprogrammen werden *Leakagefaktoren* auch genutzt, um den vertikalen Austausch zwischen *Grundwasserstockwerken* zu modellieren.

## 3.9 Modellkalibrierung

Der zentrale Arbeitsschritt bei der Grundwassermodellierung besteht in der *Modellkalibrierung* bzw. der *Modelleichung*. Beide Begriffe werden synonym verwendet.

Ziel der *Modellkalibrierung* ist es, berechnete *Piezometerhöhen* mit gemessenen Werten möglichst gut in Übereinstimmung zu bringen. Dazu werden die *Aquiferparameter* (siehe Kapitel 3.8) beim Eichprozess in realistischer Bandbreite solange variiert, bis dieses Ziel bestmöglich erreicht ist.

Bei einer stationären Kalibrierung wird dafür ein entweder ein charakteristischer Zeitpunkt ausgewählt, der den mittleren Verhältnissen entspricht oder es wird mit repräsentativen Mittelwerten gearbeitet (s. dazu Kapitel 2.1.8.2 und 2.3). Für eine *instationäre Kalibrierung* dagegen wird ein Zeitraum zugrunde gelegt, der idealerweise den typischen Schwankungsbereich der Grundwasserstände im Modellgebiet wiedergibt.

Die Problematik der *Kalibrierung* von Grundwasserströmungsmodellen besteht in der grundsätzlich immer unvollständigen Kenntnis der exakten Zahlenwerte der sensitiven *Aquiferparameter* und ihrer räumlichen Verteilung. Ein hoher Erkundungsumfang kann das Datendefizit zwar verringern, aber niemals vollständig beseitigen. *Grundwasserleiter* sind natürliche geologische Körper, welche in allen Betrachtungsmaßstäben systematisch nicht erfassbare Inhomogenitäten und ggf. Anisotropien aufweisen. Ein *numerisches Grundwasserströmungsmodell* jedoch vereinfacht zwangsläufig die natürlichen Verhältnisse, in dem es entsprechend seiner räumlichen Auflösung Aquifereigenschaften über mehr oder weniger große Volumina mittelt. Ein hundertprozentiges Abbild der Natur kann mit einem Modell also niemals erreicht werden, so dass eine exakte Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Werten vom Grundsatz her nicht erwartet werden kann. Das Ziel der *Kalibrierung* besteht in dem Bestreben, die resultierenden Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen *Piezometerhöhen* zu minimieren, um so das Modell der Natur bestmöglich anzunähern.

Bei der *Kalibrierung* eines Modells gibt es zahlreiche Strategien, die verfolgt werden können. Ausgehend von den Erkenntnissen der *hydrogeologischen Systemanalyse* gibt es i.d.R. meist schon eine gute Vorstellung über den möglichen Wertebereich der *Durchlässigkeitsbeiwerte* des oder der zu modellierenden *Grundwasserleiter*. Diese bilden nahezu immer den zunächst wichtigsten Kalibrierparameter. Ggf. ist bereits vorab eine geologisch



begründbare Zonierung der Durchlässigkeit zu vermuten. Im Zusammenspiel der ggf. auf konkreten Daten beruhenden Startwertverteilung der *Durchlässigkeitsbeiwerte* mit den sorgfältig erarbeiteten *Rand-* und *Anfangsbedingungen* gibt der erste Modelllauf bereits Aufschluss darüber, ob das Modell die Strömungssituation im Prinzip zutreffend abbildet. Mit den weiteren Kalibrierschritten wird nun sukzessive eine Verbesserung des Ergebnisses gesucht.

Es ist zu anzuraten, die Ergebnisse der einzelnen Kalibrierschritte während des Prozesses (intern) zu dokumentieren, da auch Verschlechterungen eintreten können. Die Überprüfung des Kalibrierfortschrittes erfolgt anhand von Ganglinien (siehe Abbildung 5), Grundwasserhöhengleichenplänen (Piezometerhöhenverteilung, siehe Abbildung 6), und Streudiagrammen, in denen gerechnete (Ordinate) gegen gemessene Werte (Abszisse) aufgetragen werden (siehe Abbildung 7 und Abbildung 8). Ganglinien erlauben u.a. den Vergleich der Messfrequenz vorhandener Daten mit der gewählten *zeitlichen Diskretisierung* des Modells.

Stellt man die aus Messwerten konstruierten Grundwasserhöhengleichen und die mit dem Modell berechneten in einer Abbildung zusammen dar, lassen sich wichtige Hinweise zur Beurteilung des einzelnen Kalibrierungsschrittes ableiten. So lässt sich z.B. feststellen, in welchen Bereichen die Modellanpassung schon gut gelungen ist, und in welchen Bereichen die berechneten und die gemessenen Grundwasserhöhengleichen noch stark voneinander abweichen. Es lässt sich erkennen, ob die generelle Fließrichtung, Wasserscheiden, Hochpunkte, punktuelle Eingriffe oder die Anbindung von Gewässern mit dem Modell den Erwartungen entsprechend erfasst werden.

Der Grundwasserhöhengleichenplan stellt eine Momentaufnahme zu einem ausgewählten Zeitpunkt dar. Bei einer *instationären* Simulation wird diese Darstellung idealerweise ergänzt durch Grundwasserstandsganglinien an ausgewählten Messstellen. Auch hier werden Messwerte und Modellergebnisse an einzelnen Punkten gegenübergestellt (siehe Abbildung 5). In der Zusammenschau von Gleichenplan und Ganglinie lässt sich erkennen, wie sich die Modellanpassung über den betrachteten Zeitraum darstellt. So kann zum Beispiel beurteilt werden, ob die erzielte Übereinstimmung gleich bleibt oder ob sich die Abweichung systematisch verändert. Auf solchen Grundlagen können die weiteren Arbeitsschritte der *Kalibrierung* konzipiert werden.

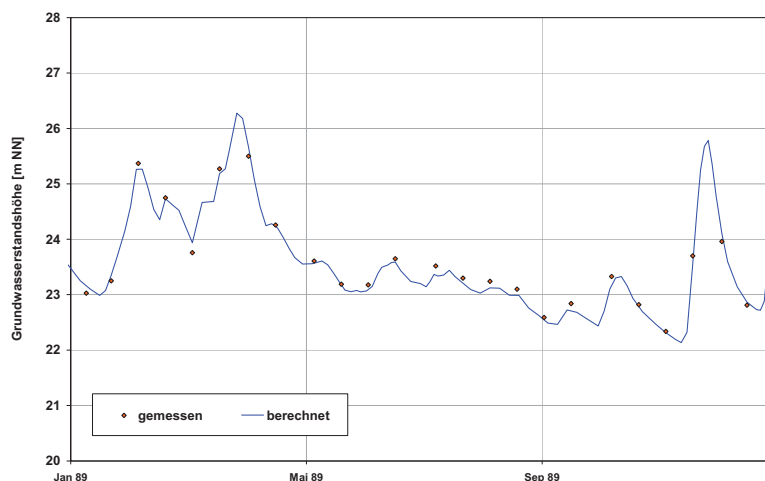


Abbildung 5: Gegenüberstellung gemessener und berechneter Grundwasserstände in Ganglinienform

Streudiagramme (siehe Abbildung 7 und Abbildung 8) eignen sich besonders zur quantitativen Prüfung der Kalibrierergebnisse. Sie können sowohl bei *stationärer* als auch *instationärer* Simulation angewendet werden. Es werden je *Modellzeitschritt* (bei *stationärer*

Simulation gibt es nur einen einzigen "Modellzeitschritt") alle Messstellen in die Auswertung einbezogen. Im praktisch nicht zu realisierenden Idealfall liegen alle Punkte exakt auf der Diagonalen des Diagramms, d.h. der berechnete Wert entspricht exakt dem gemessenen. Anhand des Diagramms lässt sich nun erkennen, ob die auftretenden Abweichungen vom Idealwert einer Systematik unterliegen oder nicht. Bilden die Datenpunkte z.B. bereits annähernd eine Gerade, deren Neigung jedoch steiler ist als die Ideallinie, so ist die gewählte Verteilung der *Durchlässigkeitsbeiwerte* tendenziell zu klein, d.h. auf der Anstromseite sind die berechneten Werte zu hoch. Ist sie flacher, sind die *Durchlässigkeitsbeiwerte* zu groß. Streuen die Werte stark und unsystematisch, muss die Durchlässigkeitsverteilung zonar überprüft werden<sup>1</sup>.

Streudiagramme können bei *instationärer* Simulation (siehe Abbildung 8) auch auf gemessene Ganglinien einzelner Messstellen angewendet werden. Dazu werden die Simulationsergebnisse aller *Modellzeitschritte* eines oder mehrerer Messpunkte den gemessenen Werten gegenübergestellt und bewertet. Einige Rechenprogramme bieten dazu komfortable Werkzeuge an, welche zwischen gemessenen Daten zeitlich interpolieren, um so Daten für die definierten Simulationszeitschritte zu liefern. Oft weichen die Datenpunkte im Diagramm in charakteristischer Weise von der Ideallinie ab, die dem Modellierer konkrete Hinweise liefern können, durch welche Parameteränderung das Ergebnis verbessert werden kann.

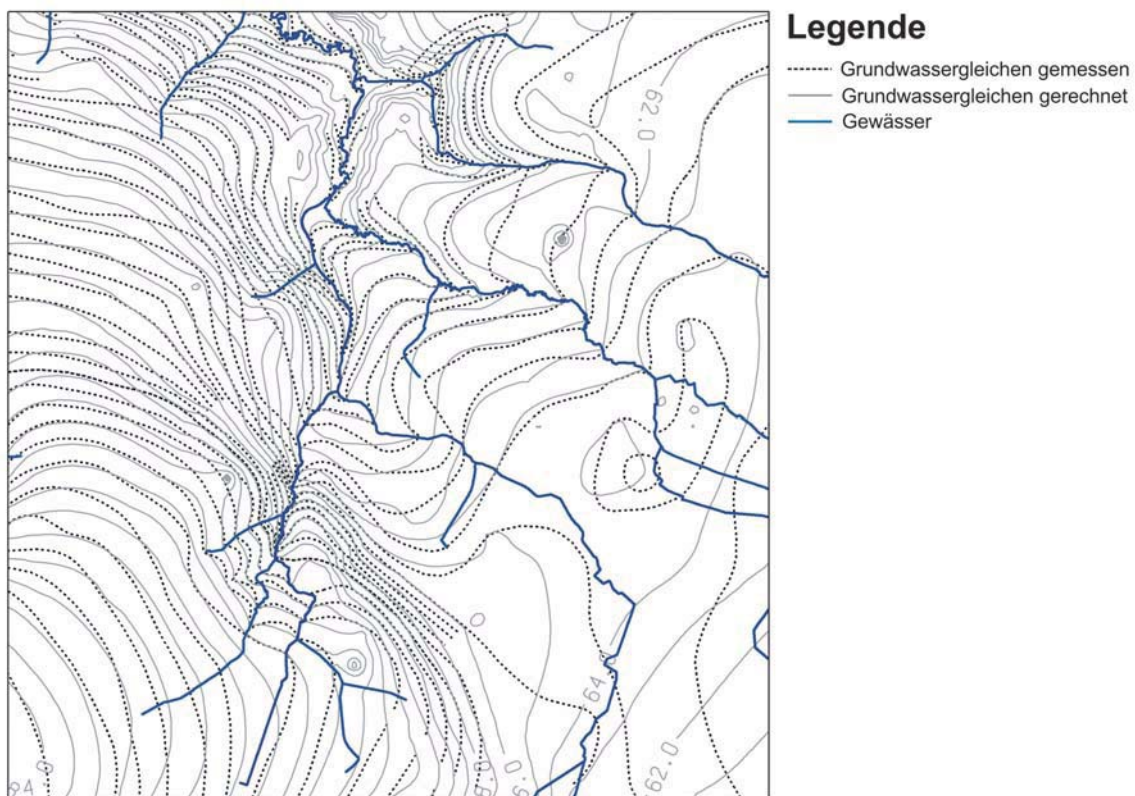


Abbildung 6: Gegenüberstellung gemessener und berechneter Grundwasserstände in Form von Grundwasserhöhengleichen

<sup>1</sup> In diesem Zusammenhang ist noch einmal darauf hinzuweisen, wie gewissenhaft mit *Festpotenzialknoten* umgegangen werden muss. Ist z.B. der *Modellraum* sowohl am Abstromrand als auch am Zustromrand durch *Festpotenziale* begrenzt, und es fehlen Kalibrierhilfen wie z.B. eine Grundwasserentnahme, reagiert das Modell nicht mehr sensitiv auf globale Änderungen des *Durchlässigkeitsbeiwertes*. Das Modell ist in solchen Fällen mehrdeutig und nicht optimal konzipiert.

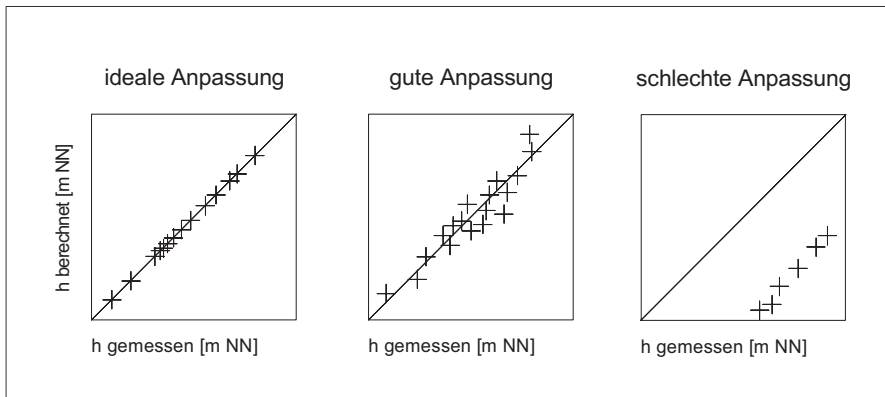


Abbildung 7: Streudiagramme mit Gegenüberstellung von gemessenen und berechneten **Piezometerhöhen**

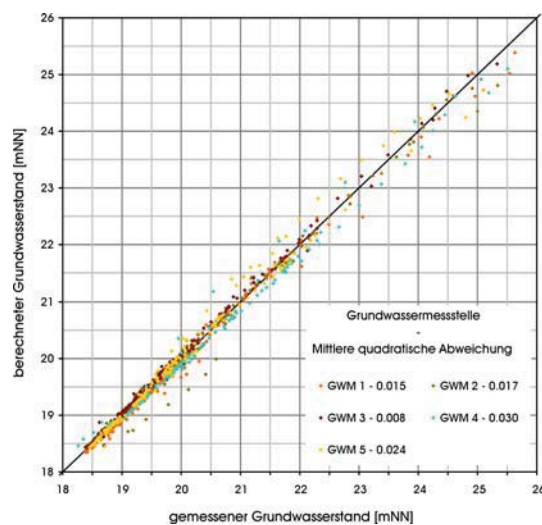


Abbildung 8: Beispiel eines Streudiagramms zur Dokumentation einer *instationären Modellkalibrierung* durch Gegenüberstellung von gemessenen und berechneten *Piezometerhöhen*

Häufig wird im Zuge der *Modellkalibrierung* eine mehr oder weniger räumlich differenzierte Zonierung der *Durchlässigkeitsbeiwerte* entstehen, die immer kritisch unter hydrogeologischen Aspekten auf Plausibilität zu prüfen ist. Dazu sollte die gewonnene Verteilung in angemessener Auflösung grafisch dokumentiert sein. Eine gute Strategie bei der *Kalibrierung* ist es, die Anzahl differenzierter Parameterzonen möglichst gering zu halten und krasse Wertesprünge zwischen benachbarten Zonen zu vermeiden.

Es ist oft sinnvoller, Abweichungen zwischen Messungen und Berechnungen in Kauf zu nehmen, als ein Modell zu "überparametrisieren", wenn dies nicht durch entsprechende Befunde zu rechtfertigen ist. Bereiche größerer Abweichungen von den Vorgaben der *hydrogeologischen Systemanalyse* sollten ggf. einer vertiefenden Erkundung unterzogen werden.

Alternierend zur Optimierung der *Durchlässigkeitsbeiwerte* sind auch alle anderen Modellparameter zu prüfen und ggf. anzupassen. Dies gilt insbesondere auch für eventuell implementierte *Leakageknoten*. Bei *stationärer* Simulation ist der *Speicherkoefizient* wegen der Unabhängigkeit der Simulation von der Zeit ohne Bedeutung. Bei *instationären* Simulationen erfolgt die *Kalibrierung* des *Speicherkoefizienten* i.d.R. zum Schluss.

Besonderes Augenmerk ist bei der *Modellkalibrierung* auf die *Grundwasserneubildung* zu richten. Die gleichzeitige Anpassung von *Grundwasserneubildung* und *Durchlässigkeitsbeiwert* ist nicht möglich, da durch systematische Vergrößerung bzw. Verkleinerung der beiden Parameter ähnliche Strömungsbilder erzeugt werden können. Hierbei handelt es sich um ein sogenanntes "inverses" Problem. In der Praxis zeigt sich häufig, dass durch eine sorgfältige und differenzierte Ermittlung der *Grundwasserneubildung* im Rahmen der *hydrogeologischen Systemanalyse* die Variationsbreite der *Grundwasserneubildung* deutlich eingeschränkt werden kann, so dass die Notwendigkeit der *Kalibrierung* der *Grundwasserneubildung* eingeschränkt wird. Die *Grundwasserneubildung* bedarf dann während der *Modellkalibrierung* nur noch in geringem Ausmaß einer Sensitivitätsprüfung.

Die Bedeutung von Grundwasserentnahmen für eine gelungene *Modellkalibrierung* wurde bereits betont. In diesem Zusammenhang ist darauf hinzuweisen, dass es aber meistens problematisch ist, Brunnenwasserstände in einem *numerischen Grundwasserströmungsmodell* zu reproduzieren. Dies hat zum einen mathematische Gründe (wie beim FD-Differenzen Ansatz), andererseits weist nahezu jeder Brunnen spezielle Effekte (Eintrittsverluste, Skineffekte u.a.) auf, die mit Modellen nicht nachgebildet werden können. Bei Brunnenanlagen im *Modellraum* sollte das Modell nach der *Kalibrierung* die *Piezometerhöhen* in gewissem Abstand vom Brunnen, die Lage des Kulminationspunktes, die Entnahmebreite und die Lage der Längsachse durch das Einzugsgebiet reproduzieren können.

Für die *Modellkalibrierung* können automatische Verfahren eingesetzt werden, auf deren Erläuterung im Rahmen dieser Arbeitshilfe verzichtet wird. Ob deren Anwendung sinnvoll ist, sollte im Einzelfall geprüft und entschieden werden. In jedem Fall ist eine kritische Würdigung der erzeugten Parameterverteilungen unter hydrogeologischen Aspekten anzuraten.

Eine objektive Bewertung der Güte einer *Modellkalibrierung* kann anhand der oben erläuterten Streudiagramme erfolgen. Die berechneten Werte werden am Ende des Kalibrierprozesses sowohl höher als auch niedriger als die Messwerte liegen. Durch Bildung der Varianz aller Datenpunkte, d.h. durch ihre mittlere quadratische Abweichung von den gemessenen Zielwerten, kann ein objektives Gütekriterium ermittelt werden. Die Quadratwurzel dieses Wertes ergibt die absolute mittlere Abweichung von den gemessenen Zielwerten.

Der so gewonnene Wert alleine ist noch kein hinreichendes Gütekriterium. Er kann durch Division in Beziehung gesetzt werden einerseits zur *instationären* Schwankungsbreite der *Piezometerhöhen* im *Modellraum* insgesamt oder auch zur Variationsbreite der *Piezometerhöhen* des *Modellraumes* im *stationären* Fall. Als Faustregel kann die Güte einer *Kalibrierung* mit einer Abweichung < 5 % als sehr gut, mit 5 - 10 % als gut und mit >10 % als eher kritisch bezeichnet werden, wobei neben dieser Einstufung auch immer die Komplexität des Einzelfalles und die Güte der Datengrundlage zu berücksichtigen ist.



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist die räumliche Verteilung der kalibrierten Modellparameter dokumentiert?
- ✓ Passt das resultierende Wertespektrum mit den Ergebnissen der hydrogeologischen Systemanalyse überein?
- ✓ Ist die Verteilung plausibel?
- ✓ Gibt es "erzwungene" Bereiche?
- ✓ Wurden einfache oder komplexe Parameterverteilungen ermittelt?
- ✓ Gibt es auffällige Bereiche? Ursachen? Bedeutsam für das Aussagegebiet?
- ✓ Ist das Kalibrierergebnis z.B. anhand von Streudiagrammen u.a. dokumentiert?
- ✓ Wie ist die Kalibriergüte unter Berücksichtigung der Datengrundlage und der Komplexität des Standortes zu beurteilen?
- ✓ Mussten zusätzliche Annahmen (insbesondere an den Modellrändern) getroffen werden, die denen des hydrogeologischen Modells widersprechen?



Ist eine größere Abweichung festzustellen, die durch Einsetzen realistischer Bandbreiten der *Aquiferparameter* nicht verbessert werden kann, muss die Qualität der Messdaten geprüft und gegebenenfalls die *hydrogeologische Systemanalyse* vertieft werden. Wurden hier ggf. entscheidende Einflussfaktoren nicht richtig erkannt oder nicht richtig bewertet, kann dies zu einem nicht zutreffenden Modellkonzept geführt haben.

Eine *Modellkalibrierung*, die lediglich auf einer möglichst genauen Abbildung der *Piezometerhöhen* beruht, ohne quantitativ Grundwasserflüsse zu berücksichtigen, unterliegt immer der Gefahr einer Mehrdeutigkeit. Dies gilt insbesondere bei kleinen Modellgebieten, die von *Festpotenzialen* bzw. *Leakageknoten* an den Rändern geprägt sind. Daher sind vorhandene Grundwasserentnahmen im Modellgebiet stets eine wertvolle Kalibrierhilfe. Im günstigen Fall können auch Abflussänderungen in Fließgewässern zu *Kalibrierung* genutzt werden. Stehen solche Daten nicht zur Verfügung, ist die Durchführung von Tests zur Bestimmung von *Durchlässigkeitsbeiwerten* unbedingte Voraussetzung für eine erfolgreiche *Kalibrierung*.

### 3.10 Modellvalidierung

Ist die *Kalibrierung* eines Modells erfolgreich abgeschlossen, folgt als nächster Arbeitsschritt die *Modellvalidierung*. Diese hat zum Ziel, die *Kalibrierung* eines Modells anhand eines anderen Datensatzes mit möglichst deutlich abweichenden hydrologischen Bedingungen auf seine Belastbarkeit zu prüfen. Streng genommen ist erst ein validiertes Modell für Prognosezwecke geeignet.

Wurde eine *stationäre Kalibrierung* durchgeführt, wäre z.B. eine ebenfalls *quasistationäre* Situation für einen anderen Zeitpunkt mit bzw. ohne Nutzung eines Brunnens eine gute Möglichkeit ein Modell zu validieren. Die Dokumentation und Beurteilung der Güte der *Modellvalidierung* kann analog der *Modellkalibrierung* erfolgen. Ist das Ergebnis zufriedenstellend, können mit diesem Modell *stationäre* Prognosesimulationen durchgeführt werden.

Für *instationäre* Simulationen gilt prinzipiell das Gleiche, allerdings kann ggf. dann auf eine *Modellvalidierung* verzichtet werden, wenn der *instationäre* Simulationszeitraum der erfolgreichen *Kalibrierung* lang ist und unterschiedliche hydrologische Bedingungen geherrscht haben.

### 3.11 Wasserbilanz

Jedes Grundwassermodell sollte die Möglichkeit bieten, eine Prüfung der Wasserbilanz für jeden Zeitschritt des Modells vorzunehmen. In dieser Bilanz werden Zu- und Abflüsse aus dem *Modellraum* gegenübergestellt.

Die Wasserbilanz dient einerseits der Plausibilitätsprüfung der Eingabedaten, zum anderen kann die Güte der numerischen Lösung geprüft werden. Kapitel 2.1.9 enthält Angaben zu den wichtigsten Bilanzgrößen, die in den meisten Modellen ausgegeben werden können.



#### Prüfhinweis

- ✓ Ist die Wasserbilanz dokumentiert?
- ✓ Lässt sich anhand der Wasserbilanz die Korrektheit der numerischen Lösung prüfen?

In Kapitel A2 des Anhangs wird erläutert, wie *numerische Grundwasserströmungsmodelle* arbeiten, und welche wesentlichen steuernden Größen zu beachten sind. Die Wasserbilanz eines Zeitschritts erlaubt eine Beurteilung, ob die bei den heute überwiegend angewendeten

iterativen Gleichungslösern zu definierenden Konvergenzkriterien hinreichend klein gewählt wurden.

Eine Wasserbilanz zum Ende des Simulationszeitraumes sollte stets dokumentiert sein. Bei *instationären* Modellen eignet sich dazu eine kumulative *Bilanz* über den gesamten Simulationszeitraum. Sind in dieser kumulativen Bilanz die Größen des positiven Speicherzuwachses und der negativen Speicherabgabe ähnlich, kann der gewählte *instationäre* Simulationszeitraum hinsichtlich der Speicherung als ausgeglichen betrachtet werden.

### 3.12 Sensitivitätsanalyse

Im Zuge der *Modellkalibrierung* können nur solche *Aquiferparameter* bestmöglich angepasst werden, die sich sensitiv auf das Simulationsergebnis auswirken. In praktisch jedem Modell sind aber auch Parameter enthalten, die durch die Standorterkundung oft nicht genau quantitativ bestimmt werden können, wie z.B. u.a. *Leakagefaktoren*, das *speicherwirksame Hohlraumvolumen* oder die vertikale Durchlässigkeit.

Durch eine gezielte Variation solcher Parameter in sinnvoller Bandbreite wird durch eine Sensitivitätsanalyse geprüft, wie sich Änderungen dieser Parameter auf das Simulationsergebnis auswirken. Reagiert der Parameter sensitiv auf die gemessenen *Piezometerhöhen*, kann er ggf. durch die *Kalibrierung* dem wahrscheinlich wahren Wert angenähert werden. Reagiert der Parameter dagegen wenig sensitiv oder gar insensitiv, kann oft anhand der Wasserbilanz geprüft werden, ob und in welchem Ausmaß sich diese Parameterunsicherheit auf die Bandbreite späterer Modellaussagen auswirkt.

Kann die Auswirkung der Variation des unsicheren Parameters durch eine weitere Variation eines anderen Parameters ausgeglichen werden (inverses Problem, z.B. Durchlässigkeit und *Grundwasserneubildung*), enthält das Modell eine Mehrdeutigkeit, die nur durch weitergehende Erkundung bzw. Intensivierung der *hydrogeologischen Systemanalyse* aufgefangen werden kann.

Die Prüfung des Einzelfalls ergibt, ob die ermittelte Parameterunsicherheit bzw. ggf. auch eine Mehrdeutigkeit als verbleibende Modellunsicherheit akzeptiert werden kann. Dabei muss auf Grundlage der Ergebnisse diskutiert werden, wie weit der deterministische Ansatz einer Modellierung verfolgt werden kann und ab wann bewusst Unsicherheiten eines Modells in Kauf genommen werden, die ggf. durch die Anwendung von Szenariotechniken (siehe Kapitel 3.13) quantifiziert werden können.

Die meisten Modellanwendungen im Grundwasserbereich basieren auf einem deterministischen Ansatz. Verkürzt bedeutet dies, dass alle Modellparameter bezüglich ihrer Größe und räumlichen Verteilung als bekannt angesehen werden. Insofern liefert ein *deterministisches Modell* immer ein eindeutiges Ergebnis. Wie bereits erläutert, stellt der deterministische Ansatz eines mit einer bestimmten räumlichen Auflösung diskretisierten Modells jedoch immer eine starke Vereinfachung der natürlichen Verhältnisse dar. Im natürlichen Untergrund treten *Heterogenitäten* in allen Betrachtungsmaßstäben auf, die im Detail nicht vorhergesagt werden können und daher einen Zufallscharakter aufweisen. Modellansätze unter Berücksichtigung solch zufälliger Anteile werden in sogenannten *stochastischen Modellen* verfolgt.



#### Prüfhinweise

- ✓ Enthält die Ausarbeitung zum numerischen Modell Aussagen zur verbleibenden Parameterunsicherheit?
- ✓ Ist aus der Sensitivitätsanalyse ein weiterer Erkundungsaufwand abzuleiten, oder kann die verbleibende Parameterunsicherheit akzeptiert werden?



In solchen Modellen wird der unbekannte bzw. unsichere Parameter auf Grundlage statistischer und geostatistischer Kenngrößen räumlich mit Hilfe von Zufallsgeneratoren variiert. Eine solche Modellierung liefert kein eindeutiges Ergebnis. Vielmehr werden zahlreiche statistisch gleichwertige Realisationen erzeugt. Die Ergebnisse der Modellrealisationen können dann statistisch ausgewertet werden.

Bezüglich der Parameterunsicherheit deterministischer Grundwassermodelle ist auf das "Virtueller Aquifer" Projekt ([www.virtual-aquifer.de](http://www.virtual-aquifer.de)) hinzuweisen. Unter anderem beschäftigt sich diese Projektgruppe mit stochastischen Ansätzen zur Erzeugung von Parameterfeldern und stellt die Auswirkungen solcher Felder deterministisch bestimmten Lösungen gegenüber.

### 3.13 Prognose

Durch das kalibrierte und validierte Modell kann vielfach bereits die Aufgabenstellung erfüllt sein, indem die im Rahmen der Standorterkundung bzw. der *hydrogeologischen Systemanalyse* getroffenen Aussagen mit dem numerischen Modell quantifiziert werden.

In vielen Fällen ist es das Ziel eines *numerischen Grundwasserströmungsmodells*, künftige Entwicklungen zu prognostizieren. Dabei können Handlungsalternativen mit verschiedenen Simulationsvarianten untersucht und verglichen werden. Mögliche Fragestellungen für Prognosen können Kapitel 1.3 entnommen werden.

Strömungsmodelle dienen häufig dem Zweck, Auswirkungen von Eingriffen in das hydraulische System vorherzusagen.

Die Bandbreite möglicher Eingriffe in das grundwasserhydraulische System ist vielfältig. Es handelt sich in vielen Fällen um veränderte *Quell-* bzw. *Senkenterme* wie z.B. Brunnenanlagen, aber auch um hydraulische Barrieren, wie z.B. Dichtwände und zahlreiche andere denkbare Eingriffe. Bei der Entwicklung von Prognosen ist darauf zu achten, dass die Auswirkungen der durch die Simulation zu prüfenden Eingriffe nicht von so großer Reichweite sein dürfen, dass ggf. die Ränder des Modellraums die Ergebnisse der Prognose beeinflussen (siehe Kapitel 2.1.1).

Prognosen können in Abhängigkeit von Fragestellung und Modellkonzept *stationär* und *instationär* simuliert werden. Soll die Auswirkung eines hydraulischen Eingriffes *instationär* simuliert werden, muss auch ein *instationär* kalibriertes Modell zur Verfügung stehen. Dagegen ist es aber möglich, ein *stationäres* Strömungsfeld zu nutzen, um eine *Stofftransportmodellierung* durchzuführen, die ja stets *instationär* erfolgt.

Die Schwierigkeit einer prognostischen Simulation besteht grundsätzlich zunächst darin, dass die das Modell steuernden *Randbedingungen* eines in der Zukunft liegenden Zeitraums nur in gewissem Rahmen vorhergesagt und im Modell festgelegt werden können. Bei *instationären* Prognosen kann es daher hilfreich sein, den gleichen historischen Simulationszeitraum zu wählen, der schon bei der *Modellkalibrierung* bzw. der *Validierung* verwendet wurde. Auf diese Weise können die Auswirkungen einer Prognose unmittelbar einem gemessenen historischen Zustand ("Was wäre gewesen, wenn...") mit bekannten *Randbedingungen* gegenübergestellt werden. Voraussetzung für dieses Vorgehen ist ein hinreichend langer, repräsentativer Kalibrierzeitraum.



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist gewährleistet, dass die Bedingungen der Prognosesimulation nicht durch die Modellränder signifikant beeinflusst werden?

Für viele Fragestellungen bietet es sich an, für die *Randbedingungen* (wie z.B. *Grundwasserneubildung*, *Festpotenziale* oder Entnahmen) langjährige Mittelwerte zu verwenden. Soll ein worst-case-Szenario betrachtet werden, müssen die *Randbedingungen* so festgelegt werden, dass sie die ungünstigste hydrologische Situation, die untersucht werden soll, widerspiegeln.

Die Ergebnisse bzw. Auswirkungen einer Prognose können durch Grundwasserhöhengleichpläne, Gangliniendiagramme, die Wasserbilanz, Flurabstandspläne und insbesondere durch Differenzenpläne dokumentiert werden.

Eine wesentliche Stärke von Prognosesimulationen unterschiedlicher Handlungsvarianten besteht darin, dass durch die Bildung von Differenzen der Modellergebnisse deren unterschiedliche Auswirkungen heraus gearbeitet werden können. Da die im Vorfeld der Prognose erreichte Modellgenauigkeit bei allen Varianten gleich ist, relativiert sich ihre Bedeutung beim Variantenvergleich.

Wurde bereits im Zuge der *Kalibrierung* eine Modellunsicherheit festgestellt, kann es ratsam sein, Prognosesimulationen unter Anwendung einer *Szenariotechnik* durchzuführen, indem man unsichere Parameter in sinnvollem Rahmen variiert und für eine Prognose mehrere Simulationen rechnet, um auf diese Weise bei den Ergebnissen die Bandbreite der Modellunsicherheit zu berücksichtigen.

## 4 Arbeitsschritte zur Transportmodellierung

### 4.1 Definition der Aufgabenstellung

Die Aufgabenstellung für die Transportmodellierung ist bereits vor der Erstellung des Strömungsmodells festzulegen (s. Kap. 1.3 und 1.4). Das numerische *Transportmodell* baut immer auf einem *numerischen Grundwasserströmungsmodell* auf. Daher wird im Zuge der Transportmodellierung kein eigenes Rechengitter erstellt, sondern es wird der Modellaufbau aus der Strömungsmodellierung übernommen. Dies bedeutet natürlich, dass die Anforderungen der Transportmodellierung an das Rechengitter (siehe Kapitel 3.3.1) bereits beim Aufbau des Strömungsmodells berücksichtigt werden müssen.

Einige Simulationsmodelle bieten die Möglichkeit, nicht das gesamte Strömungsmodellgebiet, sondern nur einen Ausschnitt davon zur Transportsimulation zu verwenden. Dies kann sinnvoll sein, wenn der für den Transport interessierende Bereich in ein sehr viel größeres Strömungsmodell eingebettet ist.

Zusätzlich zu den Parametern des Strömungsmodells gibt es eine Reihe von Modellparametern, die ausschließlich für die *Stofftransportsimulation* relevant sind. Diese werden im Folgenden vorgestellt. Neben der Dateneingabe werden in diesem Kapitel ebenfalls der Prozess der *Kalibrierung* und mögliche Anwendungen des Transportmodells vorgestellt.

### 4.2 Auswahl des numerischen Verfahrens

Während bei der Strömungsmodellierung fast ausschließlich *Gitterverfahren* (*Finite-Differenzen*, *Finite-Elemente*) zur Anwendung kommen, werden in vielen Transportmodellen unterschiedliche numerische Verfahren zur Lösung der *Transportgleichung* angeboten (siehe Kapitel A2.2).

Die Auswahl des numerischen Verfahrens ist daher Teil der Dateneingabe bei der Transportmodellierung. Dabei hängt es u.a. von der Fragestellung des Modells und von den hydrochemischen *Randbedingungen* ab, welche der Verfahren geeignet sind (siehe Kapitel A2.2).

Für das gewählte Verfahren sind anschließend die Steuerparameter zur Gleichungslösung einzugeben. Für deren Auswahl gibt es keine generelle Regel, denn man kann hier mit unterschiedlichen

Parameterkombinationen zum selben Ergebnis gelangen. Wichtig ist, dass auf die Einhaltung der Massenbilanz für das Modellgebiet geachtet wird.

Falls ein *Gitterverfahren* zur Transportsimulation eingesetzt wird, muss dem Modell noch die räumliche Gewichtung der *Advektionsterme* vorgegeben werden (*Gewichtungsverfahren*, siehe Kapitel A2.2.1). Da diese Gewichtung das Ergebnis merklich beeinflussen kann, sollte die Auswahl immer kurz erläutert werden. Außerdem ist bei *Gitterverfahren* auf die Einhaltung der numerischen Kriterien (siehe *Peclet-* und der *Courant-Zahl* in Kapitel A2.2.2) zu achten. Andernfalls besteht die Gefahr, dass das Ergebnis durch *numerische Dispersion* oder *Oszillation* verfälscht wird. Detaillierte Angaben und Prüfhinweise zu numerischen Lösungsverfahren sind in Kapitel A2.2 zu finden.



#### Prüfhinweis

- ✓ Wurde die Wahl des Diskretisierungsverfahrens begründet?
- ✓ Wurde die Massenbilanz überprüft?

## 4.3 Festlegung der Rand- und Anfangsbedingungen

### 4.3.1 Simulation der Schadstoffquelle

Der Nachbildung des Schadstoffeintrags kommt eine zentrale Rolle bei der Erstellung des *Transportmodells* zu. Allerdings ist in den allermeisten Anwendungsfällen weder die Schadstoffmasse im Untergrund noch die Kinetik des Schadstoffübergangs in das Grundwasser bekannt. Diese Größen müssen daher abgeschätzt und im Rahmen der *Modellkalibrierung* angepasst werden (s.u.).

Typisch für Fragestellungen aus dem Altlastenbereich ist ein Schadstoffeintrag an einem oder an mehreren eng umgrenzten Orten. Der Eintrag wird daher oft vereinfachend als punktförmig betrachtet. In industriell stark genutzten Gebieten kann es bei einer Vielzahl von Einzeleinträgen jedoch vorkommen, dass der Schadstoffeintrag flächenhaften Charakter annimmt.

Die meisten *Transportmodelle* sind auf die gesättigte Zone beschränkt. Dies hat zur Folge, dass der Schadstoffeintrag in der ungesättigten Zone nur indirekt berücksichtigt werden kann.

Bei fast allen *Transportmodellen* sind die folgenden Möglichkeiten zur Implementierung eines Schadstoffeintrags ins Grundwasser vorgesehen:

- **Annahme einer oder mehrerer Zellen mit Festkonzentration (siehe Kapitel A2.1.6):** Hierbei wird ein zeitlich konstanter Schadstoffeintrag *simuliert*. Die *Festkonzentrationszelle* repräsentiert den Ort des Übergangs von Schadstoff aus dem Boden ins Grundwasser. Zu beachten ist, dass sich die *Schadstofffracht* im Grundwasser (= Produkt aus Konzentration und Abfluss) in Abhängigkeit von der Grundwasserströmung ändert. Wenn beispielsweise im Abstrom eines Schadstoffeintrags ein Brunnen in Betrieb genommen wird, erhöht sich die *Schadstofffracht* im Vergleich zur natürlichen Strömung, da die Grundwasserströmung durch den Brunnenbetrieb erhöht wird und die Konzentration gleich bleibt.
- **Vorgabe eines Schadstoffeintrags (Masse pro Zeit, englisch: „mass loading rate“):** Mit dieser *Randbedingung* wird ein Schadstoffeintrag mit konstanter *Fracht* simuliert. Die Schadstoffkonzentration im Grundwasser ergibt sich aus der Eintragsrate und der Strömungsgeschwindigkeit. Im Gegensatz zur *Festkonzentrationsbedingung* ändert sich die *Fracht* bei Variation der Strömung nicht. Daher würde sich bei Inbetriebnahme eines Sanierungsbrunnens wie im obigen Beispiel die Schadstoffkonzentration verringern, da die *Fracht* eine *Randbedingung* darstellt und konstant bleibt.
- **Eintrag über die Grundwasserneubildung:** Dem aus der *Grundwasserneubildung* zufließenden Sickerwasser wird die Konzentration des Schadstoffs zugeordnet. Liegt die Quelle in der ungesättigten Zone, und der Schadstoffeintrag erfolgt ausschließlich über das Sickerwasser, kann dieser Ansatz genutzt werden. In vielen Fällen erfolgt der Schadstoffeintrag jedoch nur untergeordnet über das Sickerwasser, sondern vielmehr über den direkten Kontakt zwischen schadstoffbelastetem Boden und Grundwasser. Die Nachbildung des gesamten Schadstoffeintrags im Modell kann dann nicht ausschließlich über das Sickerwasser erfolgen, sondern es werden zusätzliche *Quellterme* erforderlich (s.o.).

Ein Schadstoffherd in einer Modellzelle kann näherungsweise auch dadurch simuliert werden, dass dieser Zelle ein sehr großer *Adsorptionskoeffizient* und eine entsprechende Schadstoffanfangskonzentration zugeordnet wird. Dieser Ansatz ähnelt einer *Festkonzentra-*

*tionsrandbedingung*, allerdings mit allmählich abnehmender Schadstoffkonzentration. Der zeitliche Rückgang der Schadstoffkonzentration ist dabei vor allem vom *Adsorptionskoeffizienten* abhängig.

*Multispeziesmodelle*, d.h. Modelle, die ein ganzes System miteinander *wechselwirkender Spezies* berücksichtigen (s. Kap. A 1.2.5.1), bieten die Möglichkeit, direkt den Schadstoff an der Bodenmatrix bzw. in einer immobilen nicht wässrigen Phase und den Schadstoffübergang ins Grundwasser zu simulieren. Der Multispeziesansatz ist sehr flexibel und erlaubt verschiedene Optionen hinsichtlich der *Schadstofffracht* im Grundwasser und der zeitlichen Entwicklung der Schadstoffquelle.

Unabhängig von der gewählten Methode zur Simulation des Schadstoffeintrags besteht grundsätzlich das Problem, dass der Schadstoffvorrat im Untergrund oft nicht einmal näherungsweise bekannt ist und dass daher Aussagen zur langfristigen Entwicklung des Schadstoffeintrags sehr unsicher sind.



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist die Methode zur Implementierung der Schadstoffquellen dokumentiert?
- ✓ Sind Anzahl und Quellstärke der Schadstoffherde im Modell angegeben?

### 4.3.2 Weitere Randbedingungen

Zusätzlich zur Festlegung des Schadstoffeintrags sind noch weitere Angaben zum Verhalten des Schadstoffs am Rand des Modellgebiets erforderlich bzw. möglich.

Zunächst muss für jede Zelle, in der im Strömungsmodell ein Wasserzufluss von außen vorgegeben ist, auch die Konzentration des Schadstoffs in diesem Wasser vorgegeben werden. Zuflüsse im Strömungsmodell sind u.a. die *Grundwasserneubildung* aus Niederschlag oder die Infiltration aus Oberflächengewässern (siehe Kapitel 3.5).

In vielen Modellen wird für diese Zuflüsse standardmäßig eine Konzentration von Null angenommen. Dies kann für die Betrachtung des Schadstofftransports häufig richtig sein; falls aber auch die Zuflüsse schadstoffbelastet sind, müssen die entsprechenden Konzentrationen vorgegeben werden. Andernfalls berechnet das Modell fälschlicherweise eine Schadstoffverdünnung.



#### Prüfhinweis

- ✓ Sind Aussagen zur Wahl der Konzentrationsrandbedingung an Zuflussrändern des Strömungsmodells getroffen?

An Abflussrändern des Strömungsmodells sind meist keine gesonderten Angaben im *Transportmodell* erforderlich. Hier werden in der Regel modellintern festgelegte *Randbedingungen* angenommen (z.B. *Transmissionsrandbedingung*, siehe Kapitel A2.2.7).

### 4.3.3 Anfangsbedingungen

Wie bereits in Kapitel 3.13 erwähnt, wird die *Stofftransportsimulation* immer *instationär*, d.h. zeitabhängig, sein, so dass ein Ergebnis auch von der gewählten *Anfangsverteilung* des betrachteten Stoffs abhängt.



Dies bedeutet, dass die Konzentrationen für alle Modellspezies überall im Modellgebiet zu Beginn der Transportberechnungen vorgegeben werden müssen. Das Festlegen einer sinnvollen *Anfangsverteilung* ist daher ein entscheidender Schritt der Modellierung. Hier sind unterschiedliche Strategien möglich, die im Einzelnen im Kapitel zur Kalibrierung des Transportmodells (siehe Kapitel 4.5) näher beschrieben werden.

## 4.4 Transportparameter

Das Transportmodell baut immer auf einem Strömungsmodell auf. Insofern sind natürlich auch alle Parameter des Strömungsmodells für die *Stofftransportmodellierung* relevant (beispielsweise beeinflusst die Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeiten die Ausbreitungsrichtung einer Schadstofffahne). Im Folgenden werden jedoch nur diejenigen Parameter diskutiert, die ausschließlich für das Standardtransportmodell relevant sind. Diese sind die *effektive Porosität*, die *Dispersivitäten*, *Retardierungsfaktoren* und die Parameter zur Charakterisierung des Abbau- bzw. Reaktionsverhaltens.



### Prüfhinweise

- ✓ Wird der Einfluss der Transportparameter auf das Ergebnis diskutiert?
- ✓ Sind die im Modell verwendete Werte plausibel?

### 4.4.1 Effektive Porosität

Die *effektive Porosität* (häufig als  $n_e$  abgekürzt und oft in % des Gesamtvolumens angegeben) verknüpft die *Filtergeschwindigkeiten*, die im Rahmen der Strömungsmodellierung ermittelt wurden, mit den im Transportmodell benötigten *Abstandsgeschwindigkeiten* (siehe Kapitel A1.2.1). Der Begriff *effektive Porosität* bedeutet, dass damit derjenige Teil der Gesamtporosität des Untergrunds gemeint ist, der effektiv am Strömungsgeschehen und damit am Stofftransport beteiligt ist. Die effektive Porosität wird deshalb auch transportwirksame Porosität genannt. Sie kann, muss aber nicht identisch sein mit der *speicherwirksamen Porosität*, d.h. desjenigen Anteils am Porenraum, der bei einer Grundwasserabsenkung entwässert werden kann und der im Rahmen von Pumpversuchsauswertungen bestimmt werden kann. Die Begriffe der *effektiven Porosität* und der *speicherwirksamen Porosität* sind formal streng auseinanderzuhalten, da beide Parameter von ihrer Natur her grundsätzlich verschiedene Eigenschaften beschreiben. Dennoch wird, wenn keine anderen Daten vorhanden sind, die *speicherwirksame Porosität* häufig zur Abschätzung der transportwirksamen bzw. *effektiven Porosität* herangezogen.

Die *effektive Porosität* spielt insbesondere in *instationären* Situationen eine große Rolle, weil sie den Zeitmaßstab der Ausbreitung steuert. Ein hoher Wert von  $n_e$  führt zu relativ langsamen Ausbreitungsgeschwindigkeiten, ein kleinerer Wert entsprechend zu höheren Geschwindigkeiten. Die *effektive Porosität* wird immer ein sensibler Parameter sein, wenn eine oder mehrere der folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- Die Schadstofffahne breitet sich aktuell aus bzw. die Ausbreitung ist durch historische Konzentrationsmessungen dokumentiert und soll nachgebildet werden.
- Die Schadstofffahne wird aktuell kleiner, z.B. infolge hydraulischer Sanierungsmaßnahmen.
- Der Schadstoffeintrag ist zeitlich stark variabel.



Bei der modellhaften Nachbildung nahezu *stationärer* Fahnen, wie sie sich beispielsweise im Abstrom von seit Jahrzehnten aktiven Schadensherden ausbilden können, ist der Wert von  $n_e$  meist nur von untergeordneter Bedeutung.

Die Bestimmung der *effektiven Porosität* ist gerade bei großräumigeren Modellanwendungen, wie sie bei der Altlastenbearbeitung auftreten können, nicht einfach. Während für Modellgebiete im Meter- oder Zehnermeterbereich die Möglichkeit besteht, die *effektive Porosität* direkt mit Hilfe eines Tracerexperiments zu bestimmen, ist diese Vorgehensweise bei größerer Modellausdehnung nicht praktikabel. Die *effektive Porosität* ist außerdem eine *skalierende Größe*, d.h. ihr Wert ist auch abhängig von der Größe des betrachteten Gebiets. Daher ist es in der Regel auch nicht sinnvoll, einen Wert, der mithilfe eines kleinräumigen Tracerexperiments bestimmt wurde, für ein großräumiges Modell zu verwenden.

Für größere Modellgebiete gibt es zwei Möglichkeiten zur Festlegung der *effektiven Porosität*. Einmal ist es grundsätzlich denkbar, eine im Modellgebiet befindliche Schadstofffahne heranzuziehen. Dies setzt jedoch voraus, dass die Ausbreitung der Fahne über mehrere Jahre hinweg dokumentiert wurde. Außerdem müssen, je nach betrachtetem Wasserinhaltsstoff, Retardierungsprozesse berücksichtigt werden (siehe Kapitel A1.2.4.2).  $n_e$  kann dann entweder unmittelbar (Geschwindigkeit = Ausbreitungsstrecke pro Zeit) oder im Zuge der *Modellkalibrierung* quantifiziert werden.

Die zweite Möglichkeit besteht darin, *anthropogene Spurenstoffe* zur Bestimmung von  $n_e$  heranzuziehen. Die Idee hierbei ist, die Ausbreitung eines weit verbreiteten, chemisch weitgehend inerten Wasserinhaltsstoffs mit bekannter Eintragungsgeschichte (z.B. Tritium<sup>2</sup>, FCKW<sup>3</sup>, SF<sub>6</sub><sup>4</sup>) im Modell nachzubilden. Dazu muss das Modellgebiet jedoch so groß sein, dass möglichst alle Zuflüsse in das Modellgebiet über die *Grundwasserneubildung* aus Niederschlag erfolgen und nicht über *Randzuflüsse*, denn die Spurenstoffkonzentrationen sind nur für das Niederschlagswasser bekannt. Für Tritium ist zu beachten, dass hier ältere Werte vorhanden sein müssen (möglichst von vor 1995), da das Tritiumsignal mittlerweile infolge radioaktiven Zerfalls nicht mehr signifikant ist. In jedem Fall bedeutet die Bestimmung der *effektiven Porosität* mithilfe *anthropogener Spurenstoffe* einen erheblichen Mehraufwand, weil sie eine vollständige zusätzliche Transportmodellierung erfordert. Dies ist gegebenenfalls bei der Abschätzung des Gesamtaufwands der Modellrechnungen zu beachten. Dieser Mehraufwand ist in aller Regel nur gerechtfertigt, wenn das Transportgeschehen stark durch *instationäre* Prozesse geprägt ist (s.o.).

Falls keine verlässlichen Daten zur *effektiven Porosität* vorliegen oder ermittelt werden können, kann die Auswirkung der daraus resultierenden Parameterunsicherheit durch Sensitivitätsanalyse geprüft werden, beispielsweise im Rahmen einer *Szenariotechnik*.

Werte für die *effektive Porosität* reichen vom einstelligen Prozentbereich (z.B. bei stark geklüfteten oder porösen Festgesteinsaquiferen) bis zu 25 % - 35 % bei unverfestigten sandig-kiesigen *Aquiferen*. Tendenziell wird der Wert für  $n_e$  mit der Modellgebietsgröße zunehmen, da der transportwirksame Anteil des gesamten Porenraums mit zunehmender Aufenthaltszeit des



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist dokumentiert, wie die effektive Porosität bestimmt wurde?

<sup>2</sup> Radioaktives Wasserstoffisotop, das im Zuge oberirdischer Atombombenversuche Anfang der 60er Jahre in die Atmosphäre freigesetzt wurde.

<sup>3</sup> Fluorchlorkohlenwasserstoffe: Treibgase und Kältemittel, die sich seit den 40er Jahren in der Atmosphäre anreichern

<sup>4</sup> Schwefelhexafluorid: Isolations- und Schutzgas, dessen Gehalt in der Atmosphäre seit Jahrzehnten stetig ansteigt.

Wasserinhaltsstoffs größer wird. Typischerweise wird für das gesamte Modellgebiet oder zumindest für einzelne hydrogeologische Einheiten nur ein einheitlicher Wert angesetzt, da über die räumliche Variabilität von  $n_e$  meist sehr wenig bekannt ist. Die *effektive Porosität* kann natürlich nicht größer werden als die Gesamtporosität des Untergrunds. Wenn bei einer Modellanwendung *effektive Porositäten* von mehr als 35 % bestimmt wurden, ist das Hinweis darauf, dass entweder die *Filtergeschwindigkeiten* zu hoch sind (Fehler im Strömungsmodell) oder dass eine *Retardierung* nicht berücksichtigt wurde.

#### 4.4.2 Dispersivitäten

Die *Dispersivität* hat die Dimension einer Länge (typischerweise in der Einheit Meter angegeben) und ist ein Maß für die Vermischung der Wasserinhaltsstoffe (siehe Kapitel A1.2.3). Sie ist ein so genannter *skalierender Parameter*, d.h. ihr Wert ist auch eine Funktion der Größe des Modellgebiets bzw. der Fahnenausdehnung. Viele Transportmodelle verlangen die Eingabe einer *Längsdispersivität* und von Faktoren, die das Verhältnis zwischen *Längs-* und *Quersdispersivität* festlegen. Modellintern werden daraus in Kombination mit den *Abstandsgeschwindigkeiten* die *Dispersionskoeffizienten* berechnet.

In aller Regel sind keine unabhängigen Messungen für die *Dispersivitäten* vorhanden. Selbst wenn Markierungsversuche durchgeführt werden, sind die daraus abgeleiteten *Dispersivitäten* nur auf der Größenskala des Markierungsexperiments gültig. Diese liegt üblicherweise im Zehnermeter-Bereich oder kleiner. Markierungsversuche auf größerer Skala sind hingegen kaum praktikabel. Dies bedeutet, dass die *Dispersivitäten* für das gesamte Modellgebiet abgeschätzt bzw. im Rahmen der *Modellkalibrierung* angepasst werden müssen.

Eine Obergrenze für die *Dispersivität* folgt aus dem *Dispersionskonzept*, das verlangt, dass der Wert der *Längsdispersivität* deutlich kleiner als die Erstreckung des Modellgebiets sein muss. Ein Wert für die *Dispersivität* in der Größenordnung des Modellgebiets ist daher unrealistisch bzw. weist auf einen konzeptionellen Mangel hin.

Um die Unsicherheiten hinsichtlich der Wahl der *Dispersivitäten* zu verringern, können Szenarien mit unterschiedlichen *Dispersivitäten* berechnet werden, z.B. *worst-case* Betrachtungen. Dabei kommt es auf die betrachtete Zielgröße an, was als *worst-case* zu betrachten ist. Wenn das Zentrum der Schadstofffahne betrachtet wird, ergeben sich bei einer Annahme kleinerer *Dispersivitäten* die geringsten Vermischungen und damit die größten Schadstoffkonzentrationen. Ein kleiner Dispersivitätswert wäre hier daher der ungünstigste Fall. Betrachtet man jedoch den Fahnenrand, können hohe *Quersdispersivitäten* und daraus folgenden starke Quervermischungen zu relativ hohen Schadstoffkonzentrationen führen.

Bei Verwendung eines gitterbasierten *Transportmodells* (*Finite-Differenzen-Verfahren*, *Finite-Elemente-Verfahren*) muss immer auch die *numerische Dispersion* berücksichtigt werden (siehe Kapitel A2.2). Sie kann das Berechnungsergebnis bei kleinen *Dispersivitäten* stark verfälschen. Kommt der Vermischung eine Schlüsselrolle bei der Simulation zu und sind die *Dispersivitäten* klein, muss daher bei *Gitterverfahren* eine sehr hohe räumliche Auflösung vorgenommen werden (*Gitterweite* höchstens doppelt so groß wie die *Dispersivität*, siehe Kapitel A2.2.2). Besser noch ist es, ein *gitterunabhängiges Verfahren* wie das *Charakteristiken-Verfahren* oder die *Random-Walk-*



#### Prüfhinweis

- ✓ Wurde bei Verwendung eines Gitterverfahren der Einfluss numerischer Dispersion oder von Oszillationen abgeschätzt?
- ✓ Wird der zu erwartende Einfluss der Dispersion auf das Modellergebnis diskutiert?

*Methode* einzusetzen (siehe Kapitel A2.2.4), da diese sowohl die Längs- als auch die Quervermischung unverfälscht nachbilden.

#### 4.4.3 Retardierungsfaktoren

Bei Betrachtung eines einzelnen Wasserinhaltsstoffes können die Auswirkungen der *effektiven Porosität* und der *Retardierung* häufig nicht eindeutig unterschieden werden. Beide wirken auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Wasserinhaltsstoffes: Die *effektive Porosität* über die *Abstandsgeschwindigkeit* des Wassers, der *Retardierungskoeffizient* über die relative Geschwindigkeit des Wasserinhaltsstoffes im Vergleich zur Wassergeschwindigkeit (siehe Kapitel A1.2.4.2).

Zur Unterscheidung der beiden Effekte ist es sehr hilfreich, wenn mehrere Wasserinhaltsstoffe mit unterschiedlichem Retardierungsverhalten betrachtet werden, z.B. Chlorid (unretardiert) und der möglicherweise retardierende Schadstoff oder mehrere Schadstoffe mit unterschiedlichem *Retardierungsverhalten* (siehe Tabelle 6 in Kapitel A1.2.4.2).

Auch aus Retardierungsexperimenten mit Aquifermaterial können Werte für den *Retardierungsfaktor* gewonnen werden. Wegen der generell *heterogenen* Verteilung, die für die retardierungsrelevanten Parameter zu erwarten ist, müssen hier jedoch immer mehrere Proben untersucht werden, um ein repräsentatives Bild erhalten zu können.

Wie die *effektive Porosität* ist auch der *Retardierungsfaktor* nur für *instationäre* Situationen sensitiv, beispielsweise bei Inbetriebnahme eines Sanierungsbrunnens oder bei einer sich bewegenden Fahne. Bei der *Retardierung* ist immer auch zu beachten, dass der *Retardierungsfaktor* nicht nur die Ausbreitungsgeschwindigkeit, sondern auch die Schadstoffmasse im Modell beeinflusst. Ein stark retardierender Schadstoff bewegt sich daher nicht nur relativ langsam, er verfügt auch über ein großes Schadstoffreservoir.

Einige Modelle verlangen direkt die Eingabe eines *Retardierungsfaktors*, andere verlangen die Eingabe der Sorptionskoeffizienten und der Schüttdichte des Mediums („bulk density“), um daraus intern *Retardierungsfaktoren* zu ermitteln. Zur besseren Übersicht sollten im Modellbericht immer die *Retardierungsfaktoren* und ihre Herleitung aufgeführt sein.

Die meisten Transportmodelle bieten auch nichtlineare Sorptionsmodelle (siehe Kapitel A1.2.4.2). Da über die Sorptionsparameter im Feldmaßstab jedoch häufig nur sehr wenig bekannt ist, ist das einfache *lineare Sorptionsmodell* in vielen Fällen ausreichend, und der Einsatz nichtlinearer Modelle muss gut begründet sein.



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist dokumentiert, ob eine Retardierung des Stofftransports berücksichtigt wurde und falls ja, wie die Parameter festgelegt wurden?

#### 4.4.4 Abbau- bzw. Reaktionsparameter

Die Berücksichtigung eines Stoffabbaus oder einer Umwandlung ist immer dann sinnvoll, wenn entweder experimentelle Daten auf einen *Schadstoffabbau* hinweisen, oder wenn Abbauprodukte im *Aquifer* festgestellt werden, oder wenn sich im Rahmen der *Modellkalibrierung* zeigt, dass das Modell die Schadstoffkonzentration mit zunehmendem Abstand vom Schadstoffherd überschätzt, d.h. wenn die berechneten Konzentrationen mit zunehmender Fließstrecke systematisch höher werden als die Messwerte.

Ein *Abbauparameter erster Ordnung* (siehe Kapitel A1.2.4.1) dürfte in allen Transportmodellen implementiert sein. Verlangt wird in der Regel der *Abbaukoeffizient*, der die Dimension 1/Zeit aufweist. Dieser Wert kann aus experimentellen Untersuchungen gewonnen werden, wobei zu beachten ist, dass sich im *Aquifer* infolge langer Aufenthaltszeiten auch *Abbauprozesse* bemerkbar machen können, die in vergleichsweise kurzzeitigen Laborexperimenten noch nicht feststellbar sind.

Einige Modelle bieten die Möglichkeit, weitere *Abbauparameter* zu verwenden. Ein Beispiel ist die sog. Michaelis-Menten-Kinetik. Für kleine Schadstoffkonzentrationen entspricht die *Abbaurrate* aus dieser Kinetik derjenigen eines *Abbaumodells erster Ordnung*. Für steigende Konzentrationen reduziert sich im Michaelis-Menten-Modell die *Abbaurrate*, d.h. sie steigt nicht mehr proportional zur Schadstoffkonzentration, sondern strebt einem Grenzwert (maximale *Abbaurrate*) entgegen. Mit diesem Ansatz kann verhindert werden, dass der Schadstoffabbau für hohe Schadstoffkonzentrationen überschätzt wird. Weitergehende Hinweise zur Wahl geeigneter *Abbauparameter* können SCHÄFER, D. ET AL (2007) entnommen werden.

Da die Ermittlung der *Abbauparameter* im Feld sehr aufwändig sein kann, können sie auch aus der Literatur übernommen werden (siehe Kapitel A1.2.4.1). Dabei ist aber darauf zu achten, dass die hydrochemischen Bedingungen im *Aquifer* mit denen übereinstimmen, die für die entsprechend ausgewählten Koeffizienten in der Literatur beschrieben wurden (z.B. aerob oder anaerob oder ggf. Art des Prozesses). Die Übernahme von Literaturdaten kann insbesondere für *Szenarienberechnungen* sinnvoll sein, z.B. zum Vergleich einer Situation ohne Abbau mit einer Situation mit typischerweise zu erwartendem Abbau.

In den meisten Anwendungsfällen werden die *Abbauparameter* jedoch nicht von vornherein festgelegt, sondern im Rahmen der *Modellkalibrierung* angepasst. Die zentrale Schwierigkeit bei dieser Anpassung besteht darin, die Auswirkung von Verdünnung bzw. Umströmung von denen möglicher *Abbauprozesse* zu unterscheiden. Deshalb ist es erforderlich, klar zu dokumentieren, aus welchen Gründen die Simulation mit Abbau plausibler ist als eine ohne Abbau.

Die Verwendung eines *Abbauparameters erster Ordnung* in einem Einzelspezies-Modell kann eine akzeptable Näherung zur Simulation des Schadstoffabbaus sein, wenn alle anderen für den Abbau erforderlichen Reaktionspartner (z.B. Oxidationsmittel) überall in ausreichender Konzentration vorhanden sind, so dass die *Abbaurrate* nur noch von der Konzentration des Schadstoffs selbst abhängt. Eine bessere Unterscheidung zwischen hydrochemischen und hydraulischen Prozessen erlauben *Multispeziesmodelle* (siehe Kapitel A1.2.5). Allerdings wird dann der Aufwand bei der Datenerhebung und bei der *Modellkalibrierung* wesentlich höher.



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist dokumentiert, ob Reaktionsprozesse berücksichtigt wurden und falls ja, wie die Parameter festgelegt wurde?
- ✓ Falls keine Reaktionsprozesse simuliert werden: Ist sichergestellt, dass die Schadstoffverfrachtung nicht erheblich überschätzt wird oder dass keine relevanten *Abbauprodukte* zu erwarten sind?

Grundsätzlich denkbar wäre es auch, einen möglichen Abbau im Modell völlig zu ignorieren, um damit zur ungünstigsten Abschätzung des Schadstofftransports zu kommen (*worst-case*). Diese Vorgehensweise ist jedoch häufig nicht zu empfehlen, weil damit das Gefahrenpotenzial leicht abbaubarer Schadstoffe (z.B. viele Mineralölkohlenwasserstoffe) drastisch überschätzt werden kann, und weil damit außerdem nicht beachtet wird, dass es *Abbauprozesse* gibt, bei denen das Abbau- bzw. Umsetzungsprodukt selbst einen Schad-



stoff darstellt, der relativ hohe Konzentrationen erreichen kann und damit möglicherweise problematischer wird als das Ausgangsprodukt, wie z.B. bei der Umwandlung von Tetrachlorethen (PER) unter reduzierenden Bedingungen über Zwischenprodukte zu Vinylchlorid.

## 4.5 Kalibrierung des Transportmodells

Ziel der Transportkalibrierung ist es, die Modellparameter innerhalb plausibler Grenzen so zu variieren, bis die in den Messstellen beobachteten Stoffkonzentrationen oder Konzentrationsverläufe im Modell nachgebildet werden können. Dies ist ganz analog zur Vorgehensweise bei der Strömungsmodellierung, bei der es um die Nachbildung gemessener Wasserstände oder Zeitreihen der Wasserstände geht.

Variiert werden können dabei zunächst die *Rand-* und *Anfangsbedingungen* des Stofftransports und die Transportparameter (s.o.). Es kann jedoch auch vorkommen, dass sich bei der Transportkalibrierung die Notwendigkeit zur Überarbeitung des Strömungsmodells ergibt.

### 4.5.1 Anpassung der Anfangsbedingungen

Falls im Modellgebiet eine ausreichende Zahl von Messstellen vorhanden ist, wäre es grundsätzlich denkbar, die *Anfangsverteilung* des Schadstoffs im Modellgebiet auf der Basis einer oder mehrerer Stichtagsmessungen zu interpolieren bzw. zu extrapolieren und die Transportberechnungen am entsprechenden Stichtag beginnen zu lassen.

Bei Verwendung einer interpolierten Konzentrationsverteilung als *Startbedingung* muss jedoch berücksichtigt werden, dass diese Verteilung zunächst nicht exakt zu den im Modell angenommenen *Randbedingungen* (beispielsweise hinsichtlich der Schadstofffreisetzung) passen wird. Es kommt daher zu einer sog. *numerischen Einschwingphase*, in der die modellinterne Anpassung zwischen Vorgabewerten und *Randbedingungen* stattfindet. Die berechneten Konzentrationen können in diesem Zeitraum durch numerische Effekte verfälscht sein. Denkbar ist beispielsweise, dass die aus der Interpolation resultierenden Bereiche mit den höchsten Schadstoffkonzentrationen nicht mit den im Modell angenommenen Positionen der Schadstoffherde zusammenfallen.

Alternativ dazu kann der Beginn der Simulationsrechnungen soweit in die Vergangenheit zurückverlegt werden, dass von einem noch unbelasteten *Aquifer* als Startbedingungen ausgegangen werden kann (*ab initio Rechnung*) oder dass zumindest die zuvor beschriebene *numerische Einschwingphase* zu Beginn des interessierenden Simulationszeitraums abgeschlossen ist. Die Festlegung der *Anfangsverteilung* für den eigentlich betrachteten Simulationszeitraum erfolgt damit in einer vorlaufenden Modellrechnung und gehört zur *Modellkalibrierung*, denn Ziel dieser Vorberechnungen ist es ja, die gewünschte Konzentrationsverteilung zu Beginn des anschließenden Simulationszeitraums nachzubilden.



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist dokumentiert, wie die Anfangsverteilung der Schadstoffkonzentrationen ermittelt wurde?
- ✓ Sind die Anfangsbedingungen so gewählt, dass die Ergebnisse des Transportmodells nicht durch numerische Effekte verfälscht werden?

Der Nachteil dieser letzteren Vorgehensweise ist, dass der gesamte Simulationszeitraum einschließlich der Vorberechnungen sehr lang werden kann (mehrere Jahrzehnte sind möglich), und dass für diesen Zeitraum auch Informationen zur Grundwasserströmung

ermittelt werden müssen (beispielsweise zum langjährigen Betrieb von Wasserfassungen). Eine Berechnung der Startkonzentrationen durch eine vorgeschaltete Simulation wie zuvor dargestellt ist jedoch der direkten Verwendung einer interpolierten Stichtagsmessung grundsätzlich vorzuziehen, auch wenn dadurch der Aufwand zur Datenerhebung und der Rechenaufwand erhöht werden.

#### 4.5.2 Anpassung der Transportparameter

Durch die Variation der *effektiven Porosität* und des *Retardierungskoeffizienten* lässt sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit eines Schadstoffs steuern. Selbstverständlich müssen die Werte innerhalb plausibler Grenzen gewählt werden. So wäre eine *effektive Porosität* von mehr als 35 % oder eine starke *Retardierung* für eine polare Verbindung wie Vinylchlorid kein akzeptables Ergebnis einer *Modellkalibrierung*. Da beide Parameter auf zeitliche Effekte der Stoffausbreitung wirken, können sie auch nur bei Vorliegen von Konzentrationszeitreihen und unter deutlich *instationären* Bedingungen (Ausbreitung oder Schrumpfen einer Fahne) angepasst werden.

Die Veränderung der *Dispersivitäten* erlaubt, die Verdünnung des Schadstoffs zu steuern. Bei mehr oder weniger *stationären* Fahnen ist es dann vor allem die *Querdispersivität*, die als sensitiver Parameter wirkt (siehe Kapitel A1.2.3).

Die Berücksichtigung eines Schadstoffabbaus oder -umbaus und die Anpassung der entsprechenden Parameter werden im Kapitel über die Reaktionsparameter (siehe Kapitel 4.4.4) diskutiert.



##### Prüfhinweise

- ✓ Sind die im Rahmen der Modellkalibrierung ermittelten Parameter plausibel?
- ✓ Wird diskutiert, welche Transportparameter sensitiv sind und welche nicht?

#### 4.5.3 Rückkopplung mit dem Strömungsmodell

Die bisher vorgestellten Maßnahmen zur *Kalibrierung* des *Transportmodells* betreffen ausschließlich die Transportberechnungen, d.h. das Strömungsmodell bleibt unverändert. Es kann jedoch erforderlich werden, im Zuge der *Kalibrierung* des *Transportmodells* auch das Strömungsmodell anzupassen.

Eine solche Situation kann sich ergeben, wenn beispielsweise die beobachtete Ausbreitungsgeschwindigkeit des Schadstoffs bei Annahme plausibler Porositäten und *Retardierungsfaktoren* nicht mehr nachgebildet werden kann. Dann könnte es auch sein, dass die hydraulische Durchlässigkeit nicht korrekt abgeschätzt war und dass deshalb bereits die *Filtergeschwindigkeiten* aus dem Strömungsmodell nicht korrekt sind.

Eine weitere typische Situation, die den Rückgriff auf das Strömungsmodell erfordert, entsteht bei der Transportmodellierung, wenn die simulierte Ausbreitungsrichtung nicht mit der beobachteten übereinstimmt. Die Ausbreitungsrichtung kann im *Transportmodell* allein gar nicht angepasst werden, d.h. hier ist immer das Strömungsmodell zu verändern, z.B. durch Anpassung der räumlichen Verteilung der hydraulischen Durchlässigkeiten oder der Zu- und Abflüsse.



##### Prüfhinweise

- ✓ Ist gewährleistet, dass sich bei einer Anpassung des Strömungsmodells im Rahmen der Transportkalibrierung die Ergebnisse des Strömungsmodells nicht verschlechtern?



Die *Kalibrierung* des *Transportmodells* unter Rückgriff auf das Strömungsmodell ist relativ aufwändig, denn es muss gewährleistet sein, dass bei einer Veränderung des Strömungsmodells nicht nur das Ergebnis der Transportmodellierung verbessert wird, sondern dass auch das Ergebnis der Strömungsmodellierung (d.h. die Nachbildung der beobachteten *Piezometerhöhen*) nicht wesentlich schlechter wird.

#### 4.5.4 Qualitätskriterien der Transportkalibrierung

Bei der Strömungskalibrierung kann die Qualität des Ergebnisses grafisch anhand eines Streudiagramms veranschaulicht werden bzw. es kann gezeigt werden, dass die Abweichung zwischen gemessenen und berechneten Wasserständen minimiert wurde.

Diese Vorgehensweise kann nicht unverändert für die Transportkalibrierung übernommen werden. Dies liegt vor allem an der Natur der zugrundeliegenden Prozesse. Die Grundwasserströmung beschreibt letztlich eine Ausbreitung von Druck, die relativ gleichmäßig in alle Raumrichtungen erfolgt. Der dispersive Teil der Schadstoffausbreitung geschieht auch in dieser Form, die in aller Regel dominierende advective Ausbreitung erfolgt jedoch nicht gleichmäßig, sondern sie ist immer räumlich gerichtet. Daher gibt es im typischen Fall der Abstromfahne eines Schadstoffherds oder einer Altlast immer relativ viele Messstellen, in denen kein oder sehr wenig Schadstoff gemessen wird, weil sie außerhalb oder am Rand der Fahne liegen. Die Messstellen im zentralen Bereich der Fahne können dagegen extrem hoch belastet sein. Die Spanne zwischen den Messwerten ist beim Stofftransport daher sehr viel größer als bei der Grundwasserströmung und die Messwerte sind auch meist viel ungleichmäßiger verteilt. Ein Streudiagramm bzw. eine formale Berechnung der mittleren Abweichung, wie sie bei der Strömungskalibrierung Anwendung finden (siehe Kapitel 3.9), sind daher bei der Transportkalibrierung häufig nicht sehr aussagekräftig.



##### Prüfhinweise

- ✓ Ist die Bewertung der Transportkalibrierung nachvollziehbar?
- ✓ Werden mögliche Unstimmigkeiten zwischen gemessenen und berechneten Konzentrationen offen gelegt und diskutiert?

Stattdessen muss mehr Dokumentationsaufwand in die kritische Erläuterung und Diskussion der Ergebnisse investiert werden. So kann es für die *Modellkalibrierung* schon ausreichend sein, wenn zumindest der Trend der Schadstoffausbreitung oder charakteristische Eigenschaften richtig erfasst wurden. Dies kann beispielsweise durch den grafischen Vergleich zwischen der aus Messwerten interpolierten und der berechneten Schadstofffahne dokumentiert werden.

Eine besondere Bedeutung bei der *Kalibrierung* kommt aktiven Förderbrunnen zu, da diese eine gewisse räumliche Mittelung der Schadstoffverteilung leisten. Daher sind die dort gemessenen Konzentrationen aussagekräftiger als Konzentrationsmessungen in passiven Messstellen, die sehr viel stärker von lokalen Zufälligkeiten beeinflusst sind. Dies ist anders als im Fall der Strömungskalibrierung, bei der Wasserstände aus aktiven Brunnen u.a. wegen Brunneneffekten für die *Modellkalibrierung* häufig nur bedingt verwendet werden können (siehe Kapitel 3.9).

Hilfreich für die *Kalibrierung* des *Transportmodells* können auch gemessene Konzentrationsganglinien an Messstellen sein, wenn sich an diesen Messstellen die hydraulische Situation, z.B. aufgrund eines beginnenden Sanierungsbetriebs, deutlich ändert.

## 4.5.5 Modellvalidierung

Als *Validierung* eines Modells wird häufig bezeichnet, wenn es gelingt, mit dem für einen bestimmten Stichtag oder für einen ausgewählten Zeitraum kalibrierten Modell auch die gemessenen Konzentrationen aus einem anderen Zeitraum oder für veränderte *Randbedingungen* nachzubilden. Zeitlich variable Eingangsgrößen wie *Grundwasserneubildung*, *Randzuflüsse* oder Schadstoffeinträge werden dabei entsprechend angepasst.

Eine weitere Möglichkeit der *Modellvalidierung* besteht darin, Abbauraten oder Sorptionskoeffizienten zunächst anhand der beobachteten Konzentrationsverteilung anzupassen und danach die daraus ermittelten Parameterwerte mit solchen aus unabhängigen Feld- oder Laboruntersuchungen zu vergleichen.

Gelingt die Nachbildung für den neuen Zeitraum nicht oder weichen die im Modell ermittelten Werte von denen der unabhängigen Messungen deutlich ab, wird eine Überprüfung und Anpassung der Modellparameter erforderlich. Die *Modellvalidierung* ist damit letztlich eine Fortführung der *Modellkalibrierung*.

In der praktischen Anwendung können *Transportmodelle* nur selten validiert werden, da meist keine ausreichenden Messdaten dokumentiert sind, um neben der *Kalibrierung* eine unabhängige *Validierung* vornehmen zu können.

## 4.6 Anwendung des Transportmodells

### 4.6.1 Darstellung des Ist-Zustands

Das kalibrierte *Transportmodell* gibt zunächst Auskunft über die Schadstoffmassen und deren räumlich-zeitliche Veränderung für den gesamten *Modellraum* oder für ausgewählte Teilbereiche. Die *Schadstofffracht* als Kombination von Konzentration und Abfluss erlaubt eine genauere Beurteilung der Schadstoffsituation als die Betrachtung der Konzentration allein. Es ist beispielsweise möglich, dass in einem Teilbereich des *Aquifers* zwar hohe Schadstoffkonzentrationen festgestellt werden, dass dort aber der Wasserumsatz so gering ist, dass die in diesem Bereich auftretende *Schadstofffracht* wiederum gering ist.

Eine weitere unmittelbare Anwendung des *Transportmodells* kann darin bestehen, Schadstofffahnen im *Modellraum* potenziellen Verursachern zuzuordnen (denn jede Schadstofffahne im Modell hat ja einen genau definierten Ursprung). Bei mehreren Schadensherden kann im Modell deren jeweilige relative Bedeutung für die im Abstrom gemessenen Schadstoffkonzentrationen ermittelt werden. Das *Transportmodell* kann hier einen sehr wichtigen Beitrag zur Unterstützung der weiteren Erkundung des Modellgebiets leisten.



#### Prüfhinweise

- ✓ Ist die Aufgabenstellung hinsichtlich der Nachbildung des Ist-Zustands klar definiert?
- ✓ Konnten die erwarteten Ergebnisse erbracht werden?

Um Missverständnisse zwischen Auftraggeber und Modellierer zu vermeiden, ist es wichtig, die Aufgabenstellung für das *Transportmodell* bereits im Vorfeld klar zu definieren, d.h. es muss deutlich werden, zu welchen Aspekten des Schadstofftransports im Rahmen der Darstellung des Ist-Zustands Aussagen erwartet werden (siehe Kapitel 4.1).

## 4.6.2 Prognoseberechnungen

Die Vorhersage von Absolutwerten der Schadstoffkonzentrationen mit dem *Transportmodell* für einen bestimmten Zeitpunkt in der Zukunft ist sehr unsicher. Einmal liegt das an der meist sehr begrenzten Kenntnis des Untergrunds hinsichtlich der Strömungs- und Transportparameter, zum anderen aber auch an der Unkenntnis der zukünftigen hydraulisch-hydrologischen Situation (z.B. Entwicklung der *Grundwasserneubildung* und der Grundwasserförderung im *Modellraum*).

Die Stärken der *Stofftransportmodellierung* liegen vielmehr in der Prognose relativer Entwicklungen, d.h. wie verändert sich die Schadstoffsituation in der Zukunft bei Veränderung hydraulischer oder hydrochemischer *Randbedingungen*. Für derartige Aussagen ist speziell die *Szenariotechnik* geeignet.

Dabei wird meist ein so genannter *Basislauf* festgelegt, und danach werden die Ergebnisse unterschiedlicher Szenarien mit dem Ergebnis des *Basislaufs* verglichen. Typische Szenarien sind unterschiedliche Betriebsweisen von Sanierungsbrunnen, Variation von *Abbauprozessen*, Berücksichtigung der Auswirkungen verschiedener Sicherungs- oder Sanierungsvarianten, usw. Auch wenn im Rahmen der *Szenariotechnik* nicht auf die Prognose von Absolutkonzentrationen gezielt wird, so ist sie dennoch ein sehr hilfreiches Werkzeug, um Entscheidungsfindungen im Altlastenbereich zu unterstützen.

Eine sehr große Unsicherheit besteht bei Prognoseberechnungen fast immer hinsichtlich des mobilisierbaren Schadstoffvorrats im Untergrund. Mangels genauerer Kenntnisse wird in vielen Modellen von einem praktisch unbegrenzten Schadstoffvorrat ausgegangen (*worst-case* Annahme).

Auch für die *Randbedingungen* des Strömungsmodells müssen bei der Prognose des Schadstofftransports Annahmen getroffen werden, beispielsweise hinsichtlich der zukünftigen Betriebsweise von Sanierungsbrunnen.



### Prüfhinweise

- ✓ Sind die hydrochemischen und hydraulischen Randbedingungen für die Prognoseberechnungen dokumentiert?
- ✓ Werden die Unsicherheiten der Prognoseergebnisse diskutiert?

## 5 Grundwasserregionen in NRW

Nordrhein-Westfalen kann grob in vier größere Grundwasserregionen unterteilt werden:

- Niederrheinische Bucht
- Münsterland und Nördliches Ruhrgebiet
- Ostwestfalen
- Südliches Ruhrgebiet, Bergisches Land, Sauerland, Siegerland und Eifel

Diese Grundwasserregionen können gemäß Abbildung 9 (LINDER, B.; ELFERS, H.; SCHLIMM, W.; SCHUSTER, H.; 2007) weiter untergliedert werden.

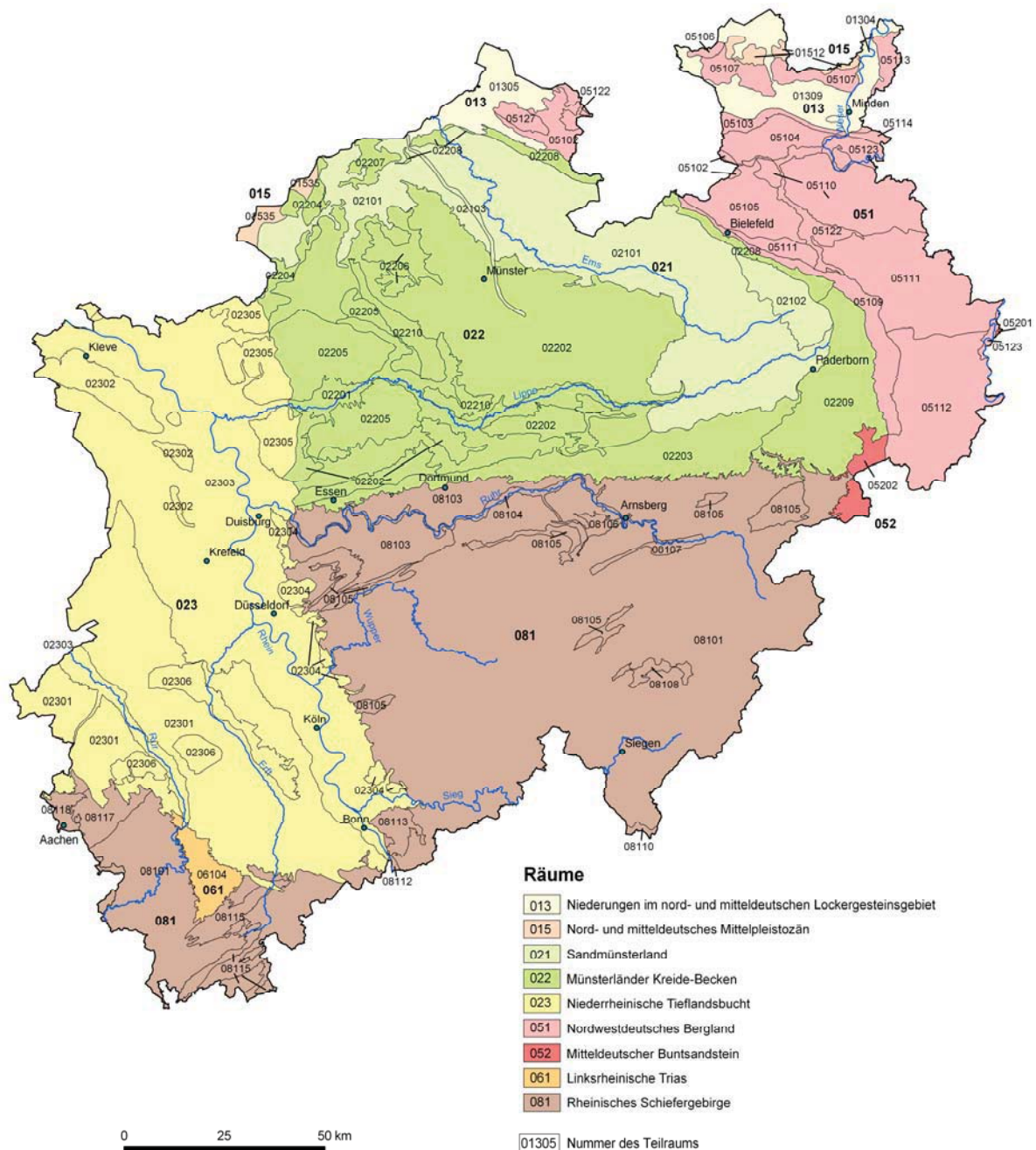


Abbildung 9: Hydrogeologische Raumgliederung in NRW (LINDER, B.; ELFERS, H.; SCHLIMM, W.; SCHUSTER, H.; 2007)



Die nachfolgende Kurzbeschreibung der genannten Regionen erfolgt mit dem Ziel, eine erste grobe Orientierungsmöglichkeit zu bieten, in welchen Bereichen der Aufbau von *numerischen Grundwassermodellen* in der Altlastenbearbeitung sinnvoll sein kann und wo eher nicht. Im konkreten Einzelfall sind Abweichungen vom Tenor der nachfolgenden Einschätzung möglich.

### Niederrheinische Bucht

Die Niederrheinische Bucht birgt mit ihren mächtigen tertiären und quartären Lockersedimenten ein bedeutendes Porenaquifersystem, welches von herausragender wasserwirtschaftlicher Bedeutung ist. Charakteristisch sind seine ausgeprägte Bruchtektonik und die Ausbildung von zahlreichen *Grundwasserstockwerken*. Im Süden der Niederrheinischen Bucht wird die Grundwassersituation maßgeblich durch den Braunkohlentagebau geprägt.

Grundwassermodelle können im gesamten Bereich der Niederrheinischen Bucht aufgebaut werden. Aufgrund der großen Mächtigkeit der grundwasserführenden Schichten insgesamt muss beim Aufbau von Modellen ein besonderes Augenmerk auf die Interaktion mit tieferen *Grundwasserstockwerken* gerichtet werden. Aufgrund des in weiten Bereichen ausgeprägten Flachlandcharakters mit einem vergleichsweise weitständigen Vorflutsystem ist die Definition von natürlichen Modellrändern nicht immer einfach.

### Münsterland und Nördliches Ruhrgebiet

Im Münsterland und Nördlichem Ruhrgebiet dominieren in der Fläche präquartäre Locker- und Festgesteine der Kreide und des Karbons mit örtlich sehr unterschiedlich ausgeprägter Grundwasserführung.

Eine quartäre Bedeckung ist im Münsterland und nördlichem Ruhrgebiet weitflächig vorhanden. Aufgrund der Nähe zu den quartären Vereisungsgebieten ist die lithologische Ausbildung der quartären Ablagerungen vertikal und horizontal differenzierter ausgebildet (Löss, Grundmoräne, Bach- und Flussablagerungen, Schmelzwasserablagerungen u.a.) als z.B. im südlichen Teil der Niederrheinischen Bucht. Dies spiegelt sich auch in der eher lokalen Ausbildung von Grundwasservorkommen in den quartären Lockergesteinen wider.

Die Kluftgrundwasserleiter des Ruhrkarbons sind sehr stark bergbaulich gestört. In diesem Bereich ist die Anwendbarkeit von Grundwasserströmungsmodellen im Wesentlichen auf die Porengrundwasserleiter der quartären Talfüllungen beschränkt.

Im Bereich der Niederterrassen der Emscher und der Lippe sind gute Voraussetzungen zum Aufbau von Grundwasserströmungsmodellen gegeben. Hier sind ggf. noch aktive bzw. zu erwartende Bergsenkungen zu beachten. Ebenfalls gut geeignet sind der Münsterländer Kiessandzug, bzw. das Quartär des Münsterschen Beckens und der Bereich der Uremsrinne. Von Vorteil ist diesen Bereichen, dass meist wenig durchlässige Kreideschichten das Liegende des Quartärs bilden.

Die ausgedehnten Kalkstein-Kluftaquifere im Süden und Osten des Münsterlandes sind i.d.R. nur eingeschränkt geeignet für den Aufbau von Grundwassermodellen der hier diskutierten Thematik, auch wenn diese eine z.T. hohe Ergiebigkeit aufweisen. Eher nicht geeignet sind die oft glazial überprägten Bereiche der kreidezeitlichen Kalk- bzw. Tonmergel im zentralen Münsterland.

Im Bereich der mächtigen Halterner Sande herrschen dagegen gute Voraussetzungen für den Aufbau von Modellen.



### Ostwestfalen

Die Grundwasserergiebigkeit der Poren- und Kluftgrundwasserleiter in Ostwestfalen ist gering. Grundwasserströmungsmodelle können aber im Bereich der Urweserrinne und des heutigen Wesertales sinnvoll aufgebaut werden aufgrund der dort vorliegenden Porengrundwasserleiter. Der Vorteil dieser Bereiche liegt in einer wenig durchlässigen Liegendschicht und gut abgrenzbaren Teilräumen aufgrund der geringen Verbreitung der quartären Grundwasserleiter.

Bezüglich des weit verbreiteten Quartärs gelten die Ausführungen zum Münsterland und nördlichem Ruhrgebiet auch für Ostwestfalen.

### Südliches Ruhrgebiet, Bergisches Land, Sauerland, Siegerland und Eifel

Im Bergischen Land, Sauerland, Siegerland und der Eifel dominieren wenig durchlässige Kluftgrundwasserleiter. Ausnahmen bilden die allerdings wenig verbreiteten paläozoischen Kalkzüge im Bereich um Warstein, Brilon und Attendorn auf rechtsrheinischer Seite, und linksrheinisch im Aachener Raum bzw. in der Eifel. Der Aufbau von Grundwasserströmungsmodellen in diesen Bereichen ist jedoch nur unter starken Vereinfachungen möglich und daher im Rahmen der Altlastenbearbeitung i.d.R. nicht geeignet.

Grundsätzlich geeignet für den Aufbau von Grundwasserströmungsmodellen sind jedoch die Talfüllungen der größeren Flüsse wie Ruhr, Sieg und Wupper.

## ANHANG

### A1 Physikalische Grundlagen

In den nachfolgenden Kapiteln zu den Grundlagen der Grundwasserströmung und des Stofftransportes werden physikalische Größen in neutraler Dimension bezeichnet mit

L = Länge  
M = Masse  
T = Zeit.

Wegen der erforderlichen Beschränkung auf die wesentlichen theoretischen Grundlagen wird an dieser Stelle auf vertiefende Literatur hingewiesen, in der z.T. auch numerische Lösungsmethoden behandelt werden. Ohne Anspruch auf Vollständigkeit seien an dieser Stelle genannt: BEAR, J. (1979), DOMENICO, P.A. & SCHWARTZ, F.W. (1998), LANGGUTH, H.R. & VOIGT, R.(2003), APPELO, C. A. J. & POSTMA, D. (2005), KINZELBACH, W. (1992), RAUSCH, R., SCHÄFER, W., THERRIEN, R., WAGNER, C. (2005).

#### A1.1 Grundwasserströmung

##### A1.1.1 HUBBERT-Potenzial

Das Grundwasser als Teilkomponente des Wasserkreislaufs ist ständig in Bewegung. Diese wird hervorgerufen durch die Schwerkraft und die durch diese hervorgerufenen Druckkräfte. M.K. HUBBERT veröffentlichte 1940 (HUBBERT, 1940) eine geschlossene auf physikalischen Gesetzen beruhende Theorie zur Grundwasserbewegung.

Die gesamte mechanische Energiehöhe  $h_{ges}$  eines nicht kompressiblen Wasserteilchens konstanter Dichte lässt sich demnach mit der Gleichung von BERNOULLI beschreiben. Sie ist die Summe aus Druckenergie, Lageenergie und kinetischer Energie:

$$h_{ges} = \frac{p}{\rho \cdot g} + z + \frac{v^2}{2g} \quad \text{Gleichung A1-1}$$

mit:

$h_{ges}$	=	Energiehöhe	L
$p$	=	Druck	$ML^{-1}T^{-2}$
$\rho$	=	Dichte des Wassers	$ML^{-3}$
$g$	=	Erdbeschleunigung	$LT^{-2}$
$z$	=	Ortshöhe über Bezugsniveau	L
$v$	=	Geschwindigkeit	$LT^{-1}$

Im Grundwasser ist die *Fließgeschwindigkeit* so gering, dass der Term der kinetischen Energie (im Gegensatz zur Strömung in Oberflächengewässern), in den die *Fließgeschwindigkeit* quadratisch eingeht, ignoriert werden kann. Damit reduziert sich die gesamte Energiehöhe zum HUBBERT-Potenzial bzw. zur *Piezometerhöhe*  $h$ .

Die *Piezometerhöhe*  $h$  an einem Messpunkt im *Grundwasserleiter* mit der Ortshöhe  $z$  ist eine der entscheidenden Größen zur Beschreibung der Grundwasserbewegung. Sie vereinigt den hydrostatischen Druck und die Lage relativ zum Bezugsniveau:

$$h = \frac{p}{\gamma} + z = \frac{p}{\rho \cdot g} + z \quad \text{Gleichung A1-2}$$

mit:	$h$	=	Piezometerhöhe	L
	$p$	=	Druck	ML <sup>-1</sup> T <sup>-2</sup>
	$\gamma$	=	Wichte des Wassers	ML <sup>-2</sup> T <sup>-2</sup>
	$\rho$	=	Dichte des Wassers	ML <sup>-3</sup>
	$g$	=	Erdbeschleunigung	LT <sup>-2</sup>
	$z$	=	Ortshöhe über Bezugsniveau	L

Unterschiede in der Piezometerhöhenverteilung sind die Auslöser einer Grundwasserbewegung, die stets bestrebt ist, einen Zustand minimaler Energiehöhe zu erreichen. Zwischen zwei Messpunkten entlang einer Fließlinie kann der Gradient (s.u.) definiert werden.

Die Grundwasserbewegung erzeugt im Untergrund ein dreidimensionales Strömungsfeld, das physikalisch und mathematisch Analogien zum Wärmefluss durch feste Körper und dem Fließen elektrischen Stroms aufweist.

Die das dreidimensionale Strömungsfeld beschreibende Bewegungsgleichung lässt sich aus dem DARCY -Gesetz und der Kontinuitätsbedingung ableiten.

### A1.1.2 DARCY -Gesetz

Das DARCY Gesetz besagt, dass die Durchflussrate durch eine mit wassergesättigtem Bodenmaterial gefüllte Röhre proportional ist zum Produkt aus hydraulischem Gradient und Querschnittsfläche. Die Proportionalitätskonstante ist dabei der *Durchlässigkeitsbeiwert*  $k_f$  mit der Dimension einer Geschwindigkeit (LT<sup>-1</sup>). Der *Durchlässigkeitsbeiwert* ist die Kenngröße für den hydraulischen Widerstand, den der Boden dem Durchfluss entgegensetzt. Die Analogie des DARCY-Gesetzes zum Ohm'schen Gesetz und des *Durchlässigkeitsbeiwertes* zum elektrischen Widerstand ist augenfällig.

Das DARCY-Gesetz kann mathematisch in unterschiedlicher Weise formuliert werden. Eine verbreitete Formulierung lautet:

$$Q = k_f \cdot i \cdot F = k_f \cdot \frac{\Delta h}{\Delta l} \cdot F \quad \text{Gleichung A1-3}$$

mit:	$Q$	=	Durchflussrate	L <sup>3</sup> T <sup>-1</sup>
	$k_f$	=	Durchlässigkeitsbeiwert	LT <sup>-1</sup>
	$k_f$	=	$K$ in internationaler Schreibweise	LT <sup>-1</sup>
	$i$	=	hydraulischer Gradient $\Delta h/\Delta l$	1
	$F$	=	Durchflussquerschnitt	L <sup>2</sup>

Diese Formulierung geht unmittelbar unter Berücksichtigung von Gleichung A1-2 auf das DARCY Experiment (siehe Abbildung 10) zurück. Eine mit wassergesättigtem Bodenmaterial gefüllte Röhre mit der Querschnittsfläche  $F$  wird kontinuierlich von Wasser mit der Durchflussrate  $Q$  durchströmt. An den Enden der Röhre befinden sich im Abstand  $\Delta l$  Manometerröhrchen, in denen sich unterschiedliche *Piezometerhöhen*  $h_1$  und  $h_2$  einstellen. Aus der Piezometerhöhendifferenz und dem Abstand  $\Delta l$  zwischen den Piezometern errechnet sich der hydraulische Gradient zwischen zwei Punkten entlang des Fließweges:

$$i = \frac{h_1 - h_2}{\Delta l} = \frac{\Delta h}{\Delta l} \quad \text{Gleichung A1-4}$$

Durch den Übergang zur infinitesimal kleinen Fließstrecke ergibt sich die differentielle Schreibweise:

$$i = \frac{dh}{dl} \quad \text{Gleichung A1-5}$$

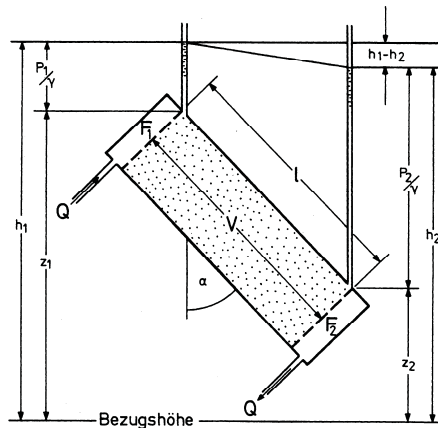


Abbildung 10: Prinzipskizze zum DARCY-Experiment  
(aus LANGGUTH, H.R. & VOIGT, R., 2003)

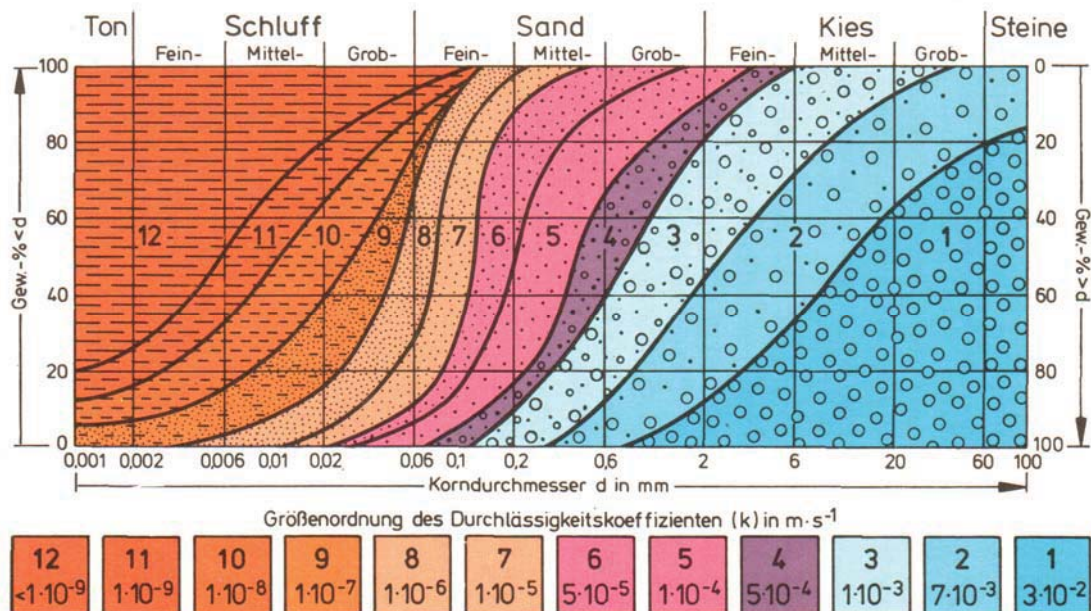


Abbildung 11: *Durchlässigkeitsbeiwerte* und Korngrößenklassen nach BREDDIN  
(aus STORK, W., 1980)

Die Abbildung 11 veranschaulicht die Größenordnung des *Durchlässigkeitsbeiwertes* in Abhängigkeit von der Korngrößenverteilung des *Grundwasserleiters*.

Der *Durchlässigkeitsbeiwert* ist nicht nur eine Eigenschaft des Bodens, sondern auch des durchströmenden Fluids, dessen wesentliche physikalische Kenngrößen seine Viskosität und Dichte sind. Über diese Eigenschaften kann der *Durchlässigkeitsbeiwert*  $k_f$  in die vom Fluid unabhängige Permeabilität  $k$  als reine Bodeneigenschaft mit der Dimension  $L^2$  umgerechnet werden.

$$k = k_f \cdot \frac{\eta}{\gamma} \quad \text{Gleichung A1-6}$$

mit:	$k$	=	spezifische <i>Permeabilität</i>	$L^2$
	$k_f$	=	<i>Durchlässigkeitsbeiwert</i> des Fluids	$LT^{-1}$
	$\eta$	=	dynamische Viskosität des Fluids	$ML^{-1}T^{-1}$
	$\gamma$	=	Wichte des Fluids	$ML^{-2}T^{-2}$

Durch Umstellung der Gleichung A1-3 ergeben sich die Kenngrößen des spezifischen Durchflusses  $q$  bzw. der Filtergeschwindigkeit  $v$ :

$$\frac{Q}{F} = q = v = k_f \cdot \frac{dh}{dl} \quad \text{Gleichung A1-7}$$

mit:	$Q$	=	Durchfluss	$L^3T^{-1}$
	$k_f$	=	<i>Durchlässigkeitsbeiwert</i>	$LT^{-1}$
	$dh/dl$	=	hydraulischer Gradient	1
	$F$	=	Durchflussquerschnitt	$L^2$
	$q$	=	spezifischer Durchfluss	$LT^{-1}$
	$v$	=	<i>Filtergeschwindigkeit</i>	$LT^{-1}$

Für eine Berechnung der Grundwasserströmung ist die *Filtergeschwindigkeit* neben dem Gradienten die entscheidende Größe. Bei Fragestellungen des Stofftransportes müssen zusätzliche Überlegungen angestellt werden.

Die *Filtergeschwindigkeit* stellt keine reale Geschwindigkeit eines Wasserteilchens dar. Sie beschreibt lediglich die querschnittsbezogene Durchflussrate. Dagegen beschreibt die mittlere *Abstandsgeschwindigkeit*  $v_a$  des Grundwassers den Zeitbedarf für die Fließdauer zwischen zwei an die Erdoberfläche projizierten Punkten entlang der Grundwasserfließrichtung. Sie ergibt sich durch Division der Filtergeschwindigkeit mit der durchflusswirksamen bzw. transportwirksamen *Effektive Porosität*  $n_e$  (Dimension 1), da nur dieser Anteil eines Durchflussquerschnitts für die Wasserbewegung zur Verfügung steht:

$$v_a = \frac{v}{n_e} = \frac{k_f \frac{dh}{dl}}{n_e} \quad LT^{-1} \quad \text{Gleichung A1-8}$$

Bei der effektiven Porosität handelt es sich um eine nicht leicht bestimmbare Größe (s. Kapitel 4.4.1, 4.5.2, A1.2.1). Die *Effektive Porosität* ist zu unterscheiden von der *Speicherwirksame Porosität*. Hierbei handelt es sich um den durch Schwerkraft entwässerbaren Hohlraumanteil des Grundwasserleiters.

*Effektive Porosität* und *Speicherwirksame Porosität* können gleiche Zahlenwerte aufweisen, müssen es aber nicht. Beide Parameter beschreiben unterschiedliche Eigenschaften des Grundwasserleiters und sind formal auseinanderzuhalten.



Typische Werte für die leichter bestimmbare *Speicherwirksame Porosität* eines Lockergesteins können der Abbildung 12 entnommen werden. Die *Speicherwirksame Porosität* kann aus der Gesamtporosität über die Korndichte und die Rohdichte von Gesteinsproben näherungsweise abgeschätzt werden.

Die *Speicherwirksame Porosität* entspricht nicht der Gesamtporosität, da ein Porenanteil dem auf elektrostatischen Anziehungskräften zwischen Wasser und Feststoffmatrix beruhenden Haftwasseranteil zuzuordnen ist und daher durch die Schwerkraft alleine nicht entwässert werden kann. Die *speicherwirksame Porosität* kann in ungespannten Grundwasserleitern durch Pumpversuche oder durch Laborversuche an ungestörten Proben bestimmt werden. Die Begriffe *nutzbare Porosität*, *speichernutzbare Porosität* und *speicherwirksame Porosität* werden oft synonym verwendet, wobei die Porosität oft auch als Hohlraumvolumen bzw. Porenvolumen bezeichnet wird. Angaben zur dimensionslosen Porosität im Allgemeinen erfolgen entweder in Prozent oder in Volumenanteilen zwischen 0 und 1.

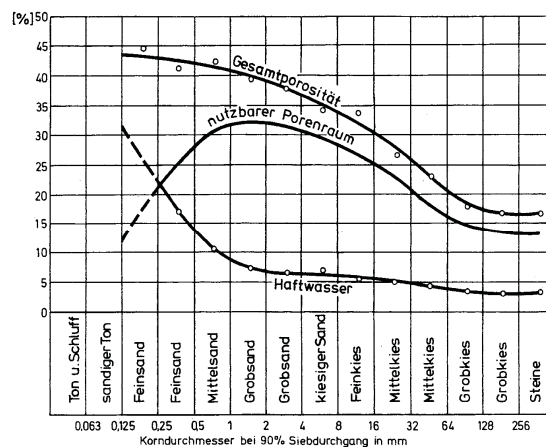


Abbildung 12: Gesamtporenraum und *nutzbare Porosität* (aus LANGGUTH, H.R. & VOIGT, R., 2004)

Die tatsächliche *Fließgeschwindigkeit*, die sogenannte Bahngeschwindigkeit des Wassers im Porenkanal weicht in der Realität von der mittleren *Abstandsgeschwindigkeit* ab, da bei mikroskopischer bis makroskopischer Betrachtung Wasserteilchen unterschiedlich lange Wege zurücklegen. Näheres zu diesem Themenbereich ist dem Kapitel A1.2 zu den Grundlagen des Stofftransports zu entnehmen.

Die *Filtergeschwindigkeit* ist eine vektorielle Größe, da sie neben einem Betrag auch eine Richtung im Strömungsfeld aufweist. In der Mathematik ist der Gradient im kartesischen Koordinatensystem  $x, y, z$  gemäß Definition stets aufwärts, d.h. in Richtung des höheren Potentials, orientiert. Das Grundwasser fließt der Schwerkraft folgend jedoch immer vom höheren zum niedrigeren Potential. Der Gradient erhält damit bei vektorieller Schreibweise des DARCY-Gesetzes ein negatives Vorzeichen.

$$\vec{v} = -k_f \cdot \frac{dh}{dl} \quad \text{Gleichung A1-9}$$

mit:  $\vec{v}$  = Vektor der *Filtergeschwindigkeit*  $LT^{-1}$   
 $k_f$  = *Durchlässigkeitsbeiwert*  $LT^{-1}$   
 $dh/dl$  = hydraulischer Gradient 1

Die vorstehende Formulierung des DARCY-Gesetzes bezieht sich bezüglich des Gradienten immer noch auf das eindimensionale Experiment aus Abbildung 10. Erweitert auf den dreidimensionalen Raum im kartesischen Koordinatensystem und bezogen auf ein infinitesimales Kontrollvolumen, ergeben sich folgende Schreibweisen des DARCY-Gesetzes, die ebenfalls häufig in der Literatur verwendet werden:

$$\vec{v} = -k_f \cdot \nabla h = -k_f \cdot \text{grad } h \quad \text{Gleichung A1-10}$$

mit:	$\vec{v}$	=	Vektor der <i>Filtergeschwindigkeit</i>	LT <sup>-1</sup>
	$k_f$	=	<i>Durchlässigkeitsbeiwert</i>	LT-1
	$h$	=	<i>Piezometerhöhe</i>	L
	$\nabla$	=	$\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z$	L-1
	grad	=	Gradient $\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z$	L-1

Im *isotropen* Fall handelt es sich bei dem *Durchlässigkeitsbeiwert*  $k_f$  um eine skalare Größe, die im *anisotropen* Fall durch den Durchlässigkeitstensor  $K$  zu ersetzen ist.

$$\vec{v} = -K \nabla h = - \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{pmatrix} \nabla h \quad \text{Gleichung A1-11}$$

### A1.1.3 Kontinuitätsbedingung

Die

Abbildung 13 zeigt die Zu- und Abflüsse an einem Kontrollvolumen  $\Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$  mit den Kantenlängen  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  und  $\Delta z$ . Die Zuflüsse über die Seiten besitzen die Größen  $q_x$ ,  $q_y$  und  $q_z$ . Die Abflüsse über die gegenüberliegenden Seiten sind jeweils um einen Betrag  $\partial q_x / \partial x \cdot \Delta x$ ,  $\partial q_y / \partial y \cdot \Delta y$  bzw.  $\partial q_z / \partial z \cdot \Delta z$  abweichend von den Zuflüssen. Über alle Seiten des Kontrollvolumens kann eine Massenbilanz gebildet werden.

Die Kontinuitätsbedingung besagt, dass bei der Strömung von Wasser konstanter Dichte durch ein Kontrollvolumen die Summe der Zu- und Abflüsse gleich der Summe des im Kontrollvolumen gespeicherten Wasservolumens plus der Zu- und Abflüsse externer *Quellen und Senken* ist. Vereinfachend sagt die Kontinuitätsbedingung, dass kein Wasser verloren geht: Was hineinfließt, muss auch wieder hinausfließen, oder es wird zwischengespeichert und später wieder abgegeben.

In einem *stationären* dreidimensionalen quellen- und senkenfreien Strömungsfeld bedeutet die Kontinuitätsbedingung, dass sich in einem infinitesimalen Kontrollvolumen die flächenspezifischen Flüsse  $q$  über die Seiten zu Null addieren. Dies kann durch folgende Differentialgleichung ausgedrückt werden:

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = 0 \quad \text{Gleichung A1-12}$$

Besitzt das *stationäre* Strömungsfeld eine *Quelle*  $R$  - wie z.B. die *Grundwasserneubildung* - ergibt sich:

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = R \quad \text{Gleichung A1-13}$$

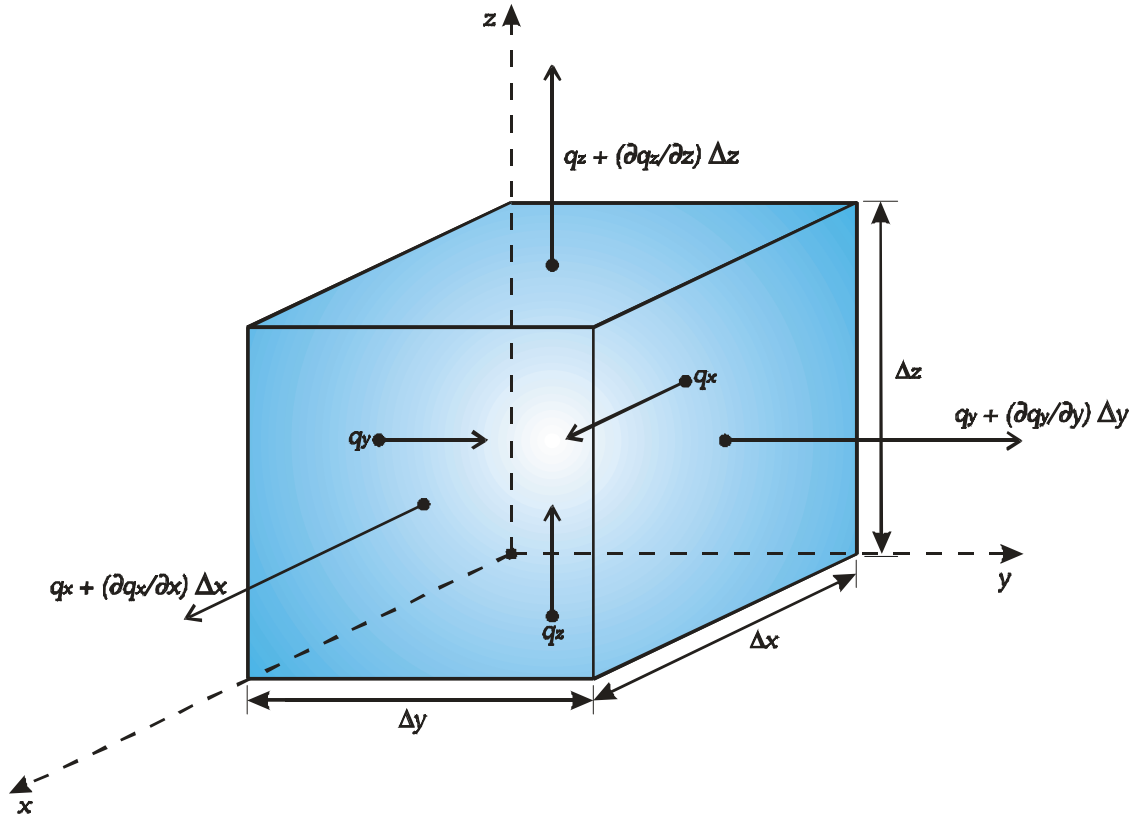


Abbildung 13: Zu- und Abflüsse an einem Kontrollvolumen  
(nach WANG, H.F. & ANDERSON, M. P. 1982)

da in diesem Fall der Volumenstrom über die Seiten des Kontrollelements gleich dem Volumenstrom aus der Quelle sein muss.

Für den allgemeinen *instationären* Fall muss noch ein weiterer Term hinzugefügt werden, der das im Zeitintervall  $\Delta t$  im Kontrollvolumen zusätzlich eingespeicherte bzw. aus dem Speichervorrat freigegebene Wasservolumen berücksichtigt. Der Term enthält daher den *spezifischen Speicherkoeffizienten*  $S_{sp}$ , den neben dem *Durchlässigkeitsbeiwert* zweiten wichtigen Kennwert eines *Grundwasserleiters*.

$$\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = R - S_{sp} \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{Gleichung A1-14}$$

### A1.1.4 Bewegungsgleichung des Grundwassers

Kombiniert man nun diese Kontinuitätsbedingung mit dem DARCY-Gesetz

$$q = \vec{v} = -K \cdot \frac{dh}{dl} \quad \text{Gleichung A1-15}$$

erhält man schließlich die allgemeine Bewegungsgleichung der gesättigten Strömung des Grundwassers in drei Dimensionen:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( -K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( -K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) = R - S \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{Gleichung A1-16}$$

bzw. ausmultipliziert:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} K_{xx} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} K_{yy} + \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} K_{zz} = S \frac{\partial h}{\partial t} - R \quad \text{Gleichung A1-17}$$

Häufig kann die Vertikalkomponente der Grundwasserströmung vernachlässigt werden. Dies gilt z.B., wenn die Mächtigkeit eines Grundwasserleiters gering ist im Vergleich zu seiner horizontalen Erstreckung und ein Aufbau aus mehreren Schichten nicht vorliegt. Auf diese Weise kann das Strömungsproblem auf zwei Dimensionen reduziert werden. In diesem Fall muss anstelle der  $z$ -Komponente noch die wassererfüllte Mächtigkeit  $m$  berücksichtigt werden. Für den Fall isotropen gespannten Grundwassers gilt:

$$T = k_f \cdot m \quad \text{Gleichung A1-18}$$

mit:	$T$	=	<i>Transmissivität</i>	$L^2 T^{-1}$
	$k_f$	=	<i>Durchlässigkeitsbeiwert</i>	$LT^{-1}$
	$m$	=	<i>Mächtigkeit</i>	$L$

Für die Strömungsgleichung ergibt sich dann im zweidimensionalen *isotropen gespannten* Fall:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = \frac{1}{T} \left( S \frac{\partial h}{\partial t} - R \right) \quad \text{Gleichung A1-19}$$

Im Fall des *Grundwasserleiters* mit *freier Oberfläche* ist die Transmissivität keine Konstante mehr, sondern hängt von der *Piezometerhöhe* ab.

$$m = h - b \quad \text{Gleichung A1-20}$$

mit:	$m$	=	<i>Mächtigkeit</i>	$L$
	$h$	=	<i>Piezometerhöhe</i>	$L$
	$b$	=	<i>Höhenlage Aquiferbasis</i>	$L$

Für die Strömungsgleichung ergibt sich somit im zweidimensionalen *isotropen Grundwasserleiter* mit *freier Oberfläche*:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} = \frac{1}{(h-b)k_f} \left( n_0 \frac{\partial h}{\partial t} - R \right) \quad \text{Gleichung A1-21}$$

Bei der Bewegungsgleichung der Grundwasserströmung handelt es sich um eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung.

Zu beachten ist, dass im Fall der *freien Grundwasseroberfläche* der Speicherkoeffizient  $S$  durch das *nutzbare Porenvolumen*  $n_0$  zu ersetzen ist. Während im *gespannten* Fall der *Grundwasserleiter* stets wassergesättigt ist, und somit die Speicherung lediglich auf die Elastizität des Korngerüsts und die extrem geringe Kompressibilität des Wassers zurückzuführen ist, ist die Speicherung beim Grundwasserleiter mit *freier Oberfläche* mit einer Auffüllung bzw. Entleerung des Porenvolumens verbunden.

Gespannte und ungespannte (= freie) *Grundwasserleiter* unterscheiden sich bezüglich ihres *Speicherkoeffizienten* daher sehr deutlich. Während bei einem ungespannten *Aquifer* der *Speicherkoeffizient* der oben erläuterten *speicherwirksamen Porosität* entspricht, ist er bei gespannten *Aquiferen* um Größenordnungen kleiner. Wird die *freie Grundwasseroberfläche* abgesenkt, so gibt der Boden entsprechend seinem Hohlraumanteil Wasser frei. Wird

dagegen bei einem gespannten *Grundwasserleiter* der Druckspiegel gesenkt, so stammt dabei frei werdendes Wasser lediglich aus einer geringen Elastizität des Korngerüsts und der extrem geringen Kompressibilität des Wassers. In einen gespannten *Grundwasserleiter*, dessen Hohlraumvolumen ja bereits gefüllt ist, passt nur noch extrem wenig zusätzliches Wasser hinein. Der dimensionslose *Speicherkoeffizient* kann pro Meter wassererfüllter Mächtigkeit angegeben werden als *spezifischer Speicherkoeffizient* mit der Dimension  $1/L$  und besitzt eine Größenordnung von etwa  $1 \cdot 10^{-6} \text{ m}^{-1}$  für wenig elastische *Aquifere*. Schwach konsolidierte gespannte *Aquifere* können auch noch deutlich höhere Werte (Wertebereich ca.  $5 \cdot 10^{-6} \text{ m}^{-1}$ ) aufweisen, die aber immer noch um Größenordnungen kleiner sind als das *speicherwirksame entwässerbare Porenvolumen* bei ungespannten *Aquiferen*. Daten zum Speicherkoeffizienten liefern Pumpversuche.

### A1.1.5 Randbedingungen

Zur Lösung von Differentialgleichungen ist stets die Formulierung von Randbedingungen erforderlich. Diese definieren das Verhalten der Strömung an den Rändern des betrachteten Strömungsfeldes. Es werden drei verschiedene Typen von *Randbedingungen* unterschieden, deren Verwendung in numerischen Modellen in Kapitel 3.5 näher erläutert wird.

- Randbedingung 1. Art (DIRICHLET-Typ)
- Randbedingung 2. Art (NEUMANN-Typ)
- Randbedingung 3. Art (CAUCHY-Typ)

Für die Bewegungsgleichung der Grundwasserströmung existieren nur für sehr einfach gelagerte *Randbedingungen* analytische Lösungen wie z.B. zur Berechnung der Graben-anströmung oder zur Berechnung der Absenkung in der Umgebung eines Brunnens. Allgemeine analytische Lösungen partieller Differentialgleichungen 2. Ordnung sind Gegenstand der mathematischen Forschung. Zur Lösung des Strömungsproblems greift man daher auf numerische Methoden zurück. Näheres dazu folgt im Kapitel A2.



## A1.2 Stofftransport

### A1.2.1 Advektion

Die Advektion ist der Stofftransport entlang von Bahnlinien der Grundwasserströmung. Der advective Transport stellt somit die Schnittstelle zwischen Strömungs- und *Transportmodell* dar. Die Transportgeschwindigkeit wird aus der bei der Strömungssimulation berechneten *Filtergeschwindigkeit*  $v$  bestimmt (siehe Kapitel A1.1.2).

Der Modellparameter, mit dessen Hilfe die *Filtergeschwindigkeiten* in die für das *Transportmodell* benötigten *Abstandsgeschwindigkeiten* umgerechnet werden, ist die *effektive Porosität*:

$$u = \frac{v}{n_e} \quad \text{Gleichung A1-22}$$

mit	$u$	=	$v_a = \text{Abstandsgeschwindigkeit}$	L/T
	$v$	=	<i>Filtergeschwindigkeit</i>	L/T
	$n_e$	=	<i>effektive Porosität</i>	-

Die *effektive Porosität* (auch transportwirksames Porenvolumen genannt) wird zwar bei der Strömungsmodellierung noch nicht benötigt, dennoch verlangen auch einige Strömungsmodelle bereits die Eingabe dieses Wertes, um gegebenenfalls advective Ausbreitungsgeschwindigkeiten im Rahmen von Bahnlinienberechnungen durchführen zu können. Der advective Massenfluss ergibt sich dann zu

$$J_{adv} = u c \quad \text{Gleichung A1-23}$$

mit	$J_{adv}$	=	<i>advectiver Massenfluss</i>	M/L <sup>2</sup> /T
	$u$	=	$v_a = \text{Abstandsgeschwindigkeit}$	L/T
	$c$	=	Konzentration	M/L <sup>3</sup>

### A1.2.2 Diffusion

Die molekulare *Diffusion* (BROWNSCHE Molekularbewegung) ist ein Vermischungsprozess auf der Molekül-Ebene. Er entsteht aus der regellosen Bewegung der Moleküle und führt zu einem Konzentrationsausgleich.

Der diffusive Massenfluss kann oberhalb der molekularen Skala analog zum Darcy-Gesetz als sog. Fluss-Gradienten-Gesetz formuliert werden. Dabei ist der Massenfluss proportional zum antreibenden Konzentrationsgradienten. Der Proportionalitätsfaktor ist der molekulare Diffusionskoeffizient. Der diffusive Fluss wird mit Hilfe des FICKSCHEN Gesetzes beschrieben:

$$J_{diff} = -D_m \frac{\partial c}{\partial x} \quad \text{Gleichung A1-24}$$

mit	$J_{diff}$	=	diffusiver Massenfluss	M/L <sup>2</sup> /T
	$D_m$	=	molekularer Diffusionskoeffizient	L <sup>2</sup> /T
	$\partial c / \partial x$	=	Konzentrationsgradient (hier in x-Richtung)	M/L <sup>3</sup> /L

Die molekulare *Diffusion* bewirkt unabhängig von Richtung und Betrag der Strömungsgeschwindigkeit des Grundwassers einen Ausgleich von Konzentrationsunterschieden. Dabei gelangen gelöste Stoffe von Orten höherer Konzentration zu Orten niedrigerer Konzentration. Diese Ausbreitung wirkt gleichmäßig in alle Raumrichtungen. Der Diffusionskoeffizient ist nahezu unabhängig von der Konzentration, er ist jedoch stoffspezifisch und temperaturabhängig.

Im porösen Medium ist der wirksame Diffusionskoeffizient aufgrund der *Tortuosität* des Mediums geringer als in der freien Lösung (z.B. in Oberflächengewässern). Die *Tortuosität* ist eine Folge der Porenraumstruktur, die zu einer Wegverlängerung führt. Für den Diffusionskoeffizienten im porösem Medium gilt demnach

$$D_{m \text{ Aquifer}} = \tau D_{m \text{ Wasser}} \quad \text{Gleichung A1-25}$$

mit  $\tau$  = Tortuositätsfaktor

$\tau$  ist definiert als Verhältnis der Länge eines Aquiferbereiches zur tatsächlichen Strecke, die ein Wasserinhaltsstoff darin zurückgelegt hat. Die Werte für  $\tau$  sind demnach  $< 1$  und liegen für poröse Medien typischerweise zwischen 0,56 bis 0,88.

Der Beitrag der molekularen *Diffusion* zum Gesamttransport im Grundwasser ist sehr klein und kann im Allgemeinen vernachlässigt werden, wenn die *Abstandsgeschwindigkeit* der Grundströmung größer als 0,1 m/d ist. Bei stagnierendem Grundwasser ist die *Diffusion* jedoch, abgesehen von möglichen Reaktionen, der einzige verbleibende Transportprozess. Auch in sehr gering durchlässigen Bereichen, wie z.B. Tonbarrieren um Deponien, ist die molekulare *Diffusion* in der Regel der dominierende Transportprozess.

Mit einer stark vereinfachten Rechnung lässt sich die diffusive Transportgeschwindigkeit abschätzen (z.B. NERETNIEKS, 2002):

$$l = 2.2 \sqrt{D_m t} \quad \text{Gleichung A1-26}$$

mit  $l$  = Transportstrecke, für die die Konzentration gerade die Hälfte der Maximalkonzentration beträgt L  
 $t$  = Zeit T

Setzt man z.B. für  $t = 1$  Jahr und für  $D_m = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ , so ergibt sich für die Transportstrecke 0,18 m. Das bedeutet, dass die typische diffusive Transportgeschwindigkeit im Grundwasser im Bereich von Dezimetern pro Jahr liegt. Die typische advective Transportgeschwindigkeit liegt dagegen im Bereich von etwa 10 - 100 m pro Jahr und mehr und ist somit in der Regel um zwei bis drei Größenordnungen höher.

Generell bewirkt die *Diffusion* eine Vermischung im mm- bis cm-Bereich. Aber auch bei größerskaligen Prozessen ist es die molekulare Diffusion, die letztendlich, im Zusammenwirken mit der Dispersion (s.u.), für eine irreversible Vermischung sorgt.

### A1.2.3 Dispersion

Auf der Porenebene, d. h. bei kleinskaliger Betrachtung, existieren nur *Advektion* und molekulare *Diffusion* als Transportprozesse. Ebenso wie bei der Grundwasserströmung ist jedoch auch beim Transport eine Beschreibung auf der Porenebene nicht praktikabel. Der stattdessen verwendete *Kontinuumansatz* mit der Modellzelle als kleinster Einheit bringt es mit sich, dass die sog. Dispersion als weiterer Transportprozess zu berücksichtigen ist.

Innerhalb einer Pore entstehen unterschiedliche Geschwindigkeiten auf Grund des annähernd parabolischen Geschwindigkeitsprofils, das sich zwischen den Porenwänden einstellt. Wegen der unterschiedlichen Porenquerschnitte sind aber auch die mittleren Geschwindigkeiten in den einzelnen Poren unterschiedlich. Diese Geschwindigkeitsverteilung führt zu einer Aufweitung scharfer Stofffronten. Da die Geschwindigkeitsverteilung innerhalb einer Modellzelle nicht aufgelöst, sondern durch eine einzige mittlere Geschwindigkeit repräsentiert wird (s.o.), erscheint die Aufweitung einer Stofffront in Form einer zusätzlich zur molekularen *Diffusion* wirksamen Vermischung. Diese wird *korngerüstbedingte Dispersion* genannt. Abbildung 14 veranschaulicht die wesentlichen Ursachen der *korngerüstbedingten Dispersion*.

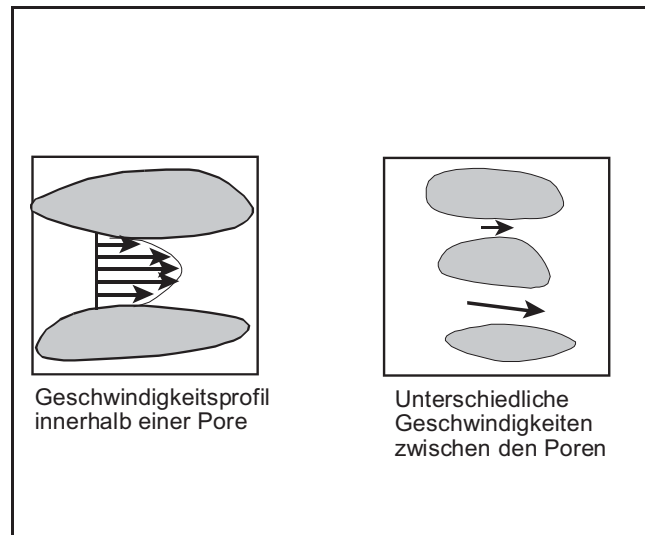


Abbildung 14: Ursachen für die *korngerüstbedingte Dispersion*

Was das Auseinanderziehen einer Fahne angeht, wird der Diffusionseffekt im Allgemeinen durch den Beitrag der *korngerüstbedingten Dispersion* übertroffen. Sie ist z.B. der wesentliche Vermischungsprozess in *homogenen* Laborsäulen.

In einem völlig *homogenen Grundwasserleiter* gäbe es nur die *korngerüstbedingte Dispersion*. Natürliche *Grundwasserleiter* sind jedoch immer *heterogen*. Dadurch kommt es auch auf Skalenebenen oberhalb des Porenbereichs zu einer ungleichförmigen Geschwindigkeitsverteilung und damit zu einer Aufweitung von Stofffronten. Da die Ausdehnung der *Heterogenitäten*, die diese Geschwindigkeitsvariationen hervorrufen (z.B. Ton-, Sand- oder Kieslinsen und Schichtung), größtenteils oberhalb der Auflösung des Rechengitters angesiedelt ist (d.h. die *heterogenen* Strukturen erstrecken sich über mehr als eine *Gitterzelle*), könnten sie im *Transportmodell* prinzipiell direkt berücksichtigt werden. Dazu wäre aber die detaillierte Kenntnis des Aquiferaufbaus notwendig, die im Allgemeinen nicht gegeben ist. Die Vermischungseffekte, die durch die Nichtberücksichtigung der Heterogenitätsstruktur des *Aquifers* und damit der Geschwindigkeitsvariabilitäten oberhalb der Porenebene hervorgerufen werden, müssen daher in aller Regel in Form der sog. *Makrodispersion* parametrisiert werden. Ein Beispiel für solche *Heterogenitäten* zeigt die Abbildung 15. Die Größe der Pfeile ist dort proportional zur *Abstandsgeschwindigkeit*. Helle Flächen repräsentieren Zonen mit geringer Durchlässigkeit, dunklere Flächen Zonen mit hoher Durchlässigkeit. Die Durchlässigkeitsverteilung wurde statistisch erzeugt. Die *Makrodispersion* wird meist zum dominanten Vermischungsprozess bei der Simulation der Stoffausbreitung in *Aquiferen*.

Es hat sich gezeigt, dass die *Dispersionseffekte* nach einer gewissen Transportstrecke der Wasserinhaltsstoffe (nach Erreichen eines sogenannten asymptotischen Zustands) analog zur molekularen *Diffusion* mit dem FICKSCHEN Gesetz beschrieben werden können:

$$J_{disp} = -D \frac{\partial c}{\partial n} \quad \text{Gleichung A1-27}$$

mit  $J_{disp}$  = dispersiver Massenfluss  $M/L^2/T$   
 $D$  = Dispersionskoeffizient  $L^2/T$   
 $\partial c / \partial n$  = Konzentrationsgradient  $M/L^3/L$

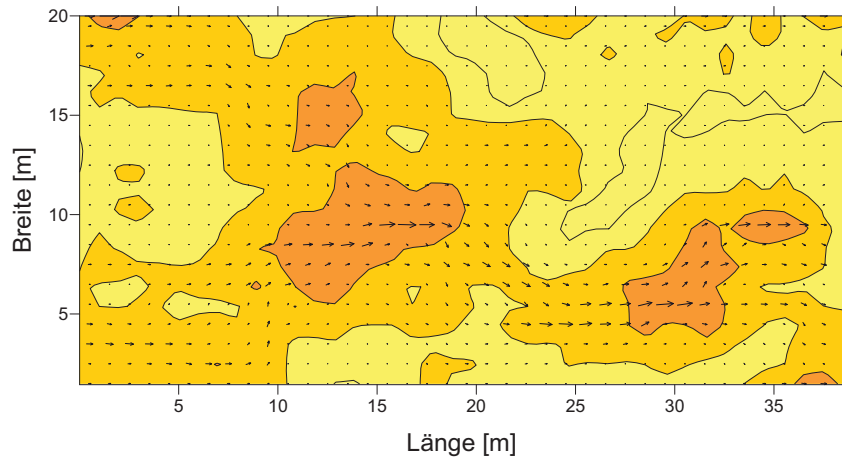


Abbildung 15: Größerskalige Geschwindigkeitsvariabilitäten infolge einer *heterogenen* Durchlässigkeitsverteilung.

Wie die molekulare *Diffusion* ist auch die *Dispersion* ein irreversibler Prozess. Es gibt jedoch einige wesentliche Unterschiede zwischen *Diffusion* und *Dispersion*:

- Der *Dispersionskoeffizient* ist typischerweise um viele Größenordnungen größer als der molekulare Diffusionskoeffizient.
- Die molekulare *Diffusion* wirkt *isotrop* (d.h. gleichmäßig in alle Raumrichtungen), die *Dispersion* ist auch im *isotrop* aufgebauten idealen Medium bereits gerichtet. Dabei ist die *Dispersion* in Strömungsrichtung (*longitudinale Dispersion*) immer größer als quer dazu (*transversale Dispersion*).
- Der molekulare Diffusionskoeffizient ist unabhängig von der Größe des betrachteten Gebiets, der *Dispersionskoeffizient* hingegen ist eine so genannte *skalierende Größe*, d. h. er wächst mit zunehmender Erstreckung des betrachteten Gebiets.

Der *Dispersionskoeffizient* hängt von der *Abstandsgeschwindigkeit* des Grundwassers ab. Er kann mit Hilfe der sog. *Dispersivität* oder Vermischungslänge berechnet werden. Für ein gleichförmiges Strömungsfeld gilt:

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_L u \\ D_T &= \alpha_T u \end{aligned} \quad \text{Gleichung A1-28}$$

mit  $D_L$  = Koeffizient der *Längsdispersion*  $L^2/T$   
 $D_T$  = Koeffizient der *Querdispersion*  $L^2/T$   
 $\alpha_L$  = *longitudinale Dispersivität*  $L$   
 $\alpha_T$  = *transversale Dispersivität*  $L$   
 $u$  =  $v_a$  = *Abstandsgeschwindigkeit*  $L/T$

Die *Dispersivität* kann als Mischungslänge verstanden werden. Sie ist eine Eigenschaft des porösen Mediums und hängt vom Grad der Ungleichförmigkeit (*Heterogenität*) des Aquiferaufbaus und von der Skala ab, auf der der Transport betrachtet wird. Für *homogene* Einkornsande liegt die *Dispersivität* im Bereich des Korndurchmessers, in natürlichen *Aquiferen* wird die *Dispersivität* sehr viel größer. Einen empirischen Zusammenhang zwischen der Größe des betrachteten Gebiets und der *Dispersivität* zeigt die Abbildung 16. Die *Dispersivitäten* in Abbildung 16 stammen entweder aus der Auswertung aktiver Tracer-tests (überwiegend für kleinere Gebiete möglich), aus der Interpretation von beobachteten Schadstofffahnen (für mittelgroße und große Untersuchungsgebiete), oder aus der Auswertung des Transportverhalten von sog. Umwelttracern wie atmosphärischem Tritium (für große Untersuchungsgebiete).

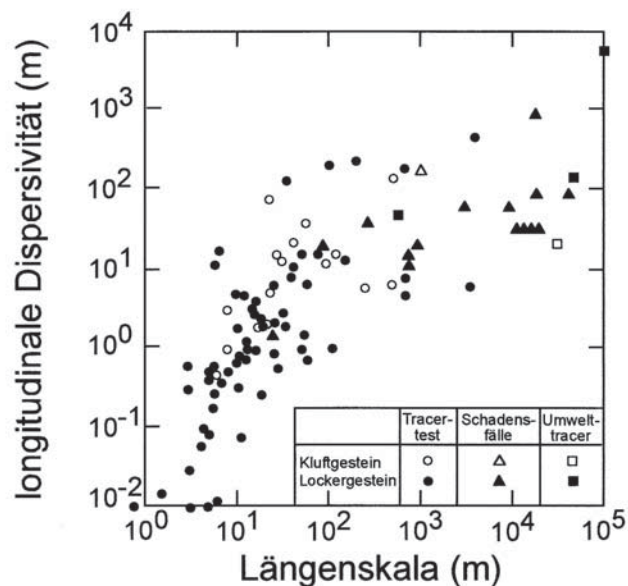


Abbildung 16: Zusammenhang zwischen *longitudinaler Dispersivität* und Größe des Untersuchungsgebiets (aus RAUSCH ET AL., 2002, nach GELHAR ET AL., 1985)

Die korrekte Anwendung des Dispersionskonzepts setzt voraus, dass die Ausdehnung der verursachenden *Inhomogenitäten* (z.B. Feinsandlinsen in einem ansonsten grobsandigen *Aquifer*) deutlich kleiner ist als das Modellgebiet. Der Einfluss von *Inhomogenitäten*, deren Erstreckung so groß wie oder größer als das Modellgebiet ist, wie z.B. langgestreckte *durchlässige* Rinnenstrukturen, kann mit dem *Makrodispersionsansatz* nur in grober Näherung beschrieben werden.

#### A1.2.4 Einfache Reaktionsmodelle

Viele Wasserinhaltsstoffe unterliegen zusätzlich zu den bereits vorgestellten Transportprozessen *Advektion*, *Diffusion* und *Dispersion* auch chemischen, biochemischen oder physikalisch-chemischen Wechselwirkungen. Beispielsweise können viele organische Verbindungen im Grundwasser an die Aquifermatrix sorbieren oder mikrobiell abgebaut werden. Ein *konservativer Transport*, d.h. eine *Verfrachtung* ohne die letztgenannten *Wechselwirkungen*, trifft eigentlich nur für einige wenige Substanzen (z.B. Chlorid) exakt zu.

Alle gebräuchlichen Transportmodelle können daher zusätzlich zum nicht-reaktiven *Stofftransport* auch *Reaktionsprozesse* nachbilden. In der einfachsten Form sind dies der *Abbau erster Ordnung* und die *Retardierung*.



### A1.2.4.1 Abbau erster Ordnung

Beim *Abbau erster Ordnung* ist die Konzentrationsänderung eines Stoffes pro Zeiteinheit proportional zu seiner eigenen Konzentration. Der Proportionalitätsfaktor ist der *Abbaukoeffizient*:

$$\frac{dc}{dt} = -\lambda c \quad \text{Gleichung A1-29}$$

mit  $c$  = Stoffkonzentration L<sup>3</sup>/T  
 $t$  = Zeit T  
 $\lambda$  = Abbaukoeffizient 1/T

Ein Beispiel für einen Prozess, der sehr gut mit einem Ansatz erster Ordnung beschrieben werden kann, ist der Zerfall einer radioaktiven Substanz. Für bestimmte *Randbedingungen* (z.B. stark verdünnte Schadstoffe) kann dieser Ansatz auch zur Beschreibung des chemischen oder biochemischen Abbaus von organischen Schadstoffen herangezogen werden.

Ein Abbauterm erster Ordnung ist in fast allen Transportmodellen vorhanden. Er kann u.a. überschlägig zur Simulation eingesetzt werden, wenn es Hinweise darauf gibt, dass der beobachtete Stoff einem Abbau unterliegt bzw. aus der Wasserphase eliminiert wird.

Die *Abbaukoeffizienten* für organische Schadstoffe sind jedoch oft a priori nicht bekannt und von Fall zu Fall sehr unterschiedlich, da die jeweiligen Redoxverhältnisse, der pH-Wert und weitere Parameter die mikrobielle Dynamik stark beeinflussen. Häufig können sie nur im Nachhinein aus einer Massenbilanz abgeschätzt werden. Für viele organische Verbindungen sind aber auch so genannte *Halbwertszeiten* in der Literatur dokumentiert (z.B. SUAREZ & RIFAI, 1999, WABELS & TEUTSCH, 2008). Diese Werte wurden in Laborversuchen oder unter Feldbedingungen ermittelt und sind ein grobes Maß für die Abbaubarkeit einer Verbindung bei gegebenen Milieuparametern (z.B. unter aeroben oder anaeroben Bedingungen in typischen Aquifermaterialien). Beispiele für *Halbwertszeiten* sind in Tabelle 5 aufgelistet.

Aus der *Halbwertszeit*  $t_{1/2}$  lässt sich die in Modellen üblicherweise benötigte Abbaurrate bestimmen:

$$\lambda = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} \quad \text{Gleichung A1-30}$$

Tabelle 5: Beispiele für mittlere *Halbwertszeiten* in Tagen für ausgewählte Grundwasser-schadstoffe (aus SUAREZ und RIFAI, 1999)

Mittlere <i>Halbwertszeit</i> d	Aerobe Bedingungen	Anaerobe Bedingungen / reduktive Dechlorierung
Benzol	2	87
Toluol	3	3
m-Xylol	4	11
o-Xylol	8	46
Tetrachlorethen (PER)	693	10
Trichlorethen (TRI)	139	8
Vinylchlorid	8	6

Die in Tabelle 5 gezeigten *Halbwertszeiten* sind jeweils Mittelwerte aus stark streuenden Einzelergebnissen. Sie sind daher nicht als feste Konstanten zu verstehen, die unmittelbar in ein Grundwassermodell übernommen werden können, sondern vielmehr Richtwerte, die eine generelle Tendenz zeigen. Beispielsweise erkennt man die relative gute Abbaubarkeit der

BTX-Verbindungen (Benzol, Toluol, Xylol) in aeroben *Aquiferen*, während Benzol unter anaeroben Bedingungen beständiger ist. Deutlich wird auch die geringe Abbaubarkeit von PER und TRI unter aeroben Bedingungen, während die Dechlorierung in anaeroben *Aquiferen* relativ schnell ablaufen kann.

Weitere Daten zu *Abbauparametern* können unter der Rubrik „Information System Contaminants“ auf der Internetseite [www.virtual-aquifer.de](http://www.virtual-aquifer.de) gefunden werden. Auch das Excel-Arbeitsblatt der LABO Arbeitshilfe „Sickerwasserprognose“ enthält eine Sammlung zu Abbaukoeffizienten für organische Schadstoffe im Grundwasser (<http://www.labo-deutschland.de/sicker.htm>).

Eine umfangreiche Literaturliste zu möglichen *Abbauprozessen* im Grundwasser liefert der Anhang 4 des Merkblatts Nr. 3.8/3 „Natürliche Schadstoffminderung bei Grundwasserverunreinigungen durch Altlasten und schädliche Bodenverunreinigungen - Natural Attenuation“ des Bayerischen Landesamts für Wasserwirtschaft:  
<http://www.stmugv.bayern.de/umwelt/boden/vollzug/doc/lfw383a4.pdf>

Im allgemeinen Fall sind die chemischen oder biochemischen Reaktionsraten einer Verbindung im Untergrund jedoch immer auch eine Funktion der Konzentrationen weiterer Reaktionspartner. Solche Systeme miteinander *wechselwirkender Stoffe* können dann nicht mehr adäquat mit einfachen Abbaumodellen nachgebildet werden, sondern verlangen den Einsatz von *Multispeziesmodellen* (siehe Kapitel A1.2.5). Diese erfordern i.d.R. auch die Verwendung spezieller Abbaukinetiken (siehe auch SCHÄFER, D. ET AL. 2007)

#### A1.2.4.2 Retardierung (Sorption/Desorption)

Die *Retardierung* eines Wasserinhaltsstoffes kommt durch dessen Wechselwirkung mit dem Aquifermaterial zustande. Verschiedene Arten von Wechselwirkungen werden häufig unter dem Begriff Sorption zusammengefasst.

Bei der linearen Sorption wird der Zusammenhang zwischen gelöster und adsorbierter Konzentration über eine *lineare Isotherme* beschrieben:

$$c_a = k_d c_g \quad \text{Gleichung A1-31}$$

mit	$c_a$	=	Konzentration des Stoffes am Aquifermaterial	M/M
	$c_g$	=	gelöste Konzentration des Stoffes	M/L <sup>3</sup>
	$k_d$	=	Adsorptionskoeffizient oder <i>Verteilungskoeffizient</i>	L <sup>3</sup> /M

Für den linearen Fall lässt sich ein *Retardierungsfaktor*  $R$  definieren:

$$R = \left( 1 + \frac{\rho_{mat} n_{mat} k_d}{n_e} \right) \quad \text{Gleichung A1-32}$$

mit	$R$	=	<i>Retardierungsfaktor</i> -
	$\rho_{mat}$	=	Dichte des Feststoffes M/L <sup>3</sup>
	$n_{mat}$	=	relativer Anteil der Feststoffmatrix am Gesamtvolumen -
	$n_e$	=	<i>effektive (transportwirksame) Porosität</i> -

Häufig findet man  $\rho_{mat} n_{mat}$  zur Schüttdichte ("bulk density")  $\rho_b$  zusammengefasst. Anschaulich bedeutet der *Retardierungsfaktor*, dass der Transport eines retardierten Stoffes bezüglich des Wassertransports um den Faktor  $R$  verzögert ist.

Einige Grundwassermodelle verlangen die Eingabe des *Verteilungskoeffizienten*  $k_d$  und berechnen daraus intern den *Retardierungsfaktor*  $R$ , bei anderen Modellen muss  $R$  direkt eingegeben werden.

Organische Verbindungen weisen immer eine mehr oder weniger stark ausgeprägte *Retardierung* auf. Für viele organische Schadstoffe wurden empirische Beziehungen zwischen physikalisch-chemischen Stoffeigenschaften und *Verteilungskoeffizienten* bzw. *Retardierungsfaktoren* im *Aquifer* aufgestellt. Beispielsweise gibt es aus Laborversuchen abgeleitete Abschätzungen für den *Verteilungskoeffizienten*  $k_{OC}$  eines organischen Schadstoffs zwischen den organischen Bestandteilen des Aquifermaterials (z.B. Humus) und Wasser (KARICKHOFF ET AL., 1979; BRIGGS, 1981; SCHWARZENBACH & WESTALL, 1981). Die  $k_{OC}$ -Werte sind auf den Gehalt an natürlichem organischem Kohlenstoff im *Aquifer* bezogen. Man erhält den *Verteilungskoeffizienten*  $k_d$ , wenn man den  $k_{OC}$ -Wert mit dem Gehalt des Bodens an organischem Kohlenstoff  $f_{OC}$  multipliziert:

$$k_d = f_{OC} k_{OC} \quad \text{Gleichung A1-33}$$

Diese Näherung ist nur für Kohlenstoffgehalte von mehr als 0,1% gültig. Bei geringerem Gehalt des *Aquifers* an organischem Material werden Wechselwirkungen der organischen Wasserinhaltsstoffe mit der mineralischen Matrix, insbesondere mit Tonmineralien, maßgebend.

In Tabelle 6 sind die *Retardierungsfaktoren* ausgewählter Schadstoffe für einen hypothetischen *Aquifer* mit  $n_e = 0,3$ ,  $n_{mat} = 0,7$ ,  $\rho_{mat} = 2,65 \text{ kg l}^{-1}$  und  $f_{OC} = 0,1\%$  dargestellt. Die  $k_{OC}$ -Werte sind aus MONTGOMERY & WELKOM (1990) entnommen.

In einigen *Grundwassermodellen* können neben der *linearen Sorption* auch nichtlineare Adsorptionsprozesse simuliert werden. Dabei kommt beispielsweise die *FREUNDLICH-Isotherme* zur Anwendung:

$$c_a = k c_g^n \quad \text{Gleichung A1-34}$$

mit  $k$ : Freundlich-Konstante (Dimension abhängig von  $n$ )  
 $n$ : Freundlich-Exponent -

Für  $n = 1$  wird die *FREUNDLICH-Isotherme* zur *linearen Isotherme*. Für  $n < 1$  werden die kleineren Konzentrationen stärker adsorbiert, es ergibt sich eine so genannte konvexe Isotherme. Für  $n > 1$  werden die größeren Konzentrationen stärker adsorbiert, es ergibt sich eine konkave Isotherme.

Tabelle 6: Beispiele für *Retardierungsfaktoren* ausgewählter organischer Grundwasser-schadstoffe in einem hypothetischen *Aquifer* mit  $n_f = 0,25$ ,  $n_{mat} = 0,7$ ,  $\rho_{mat} = 2,65 \text{ kg l}^{-1}$  und  $f_{OC} = 0,1\%$ , ermittelt anhand der  $k_d$ -Wert Methode.

Stoff	Herkunft / Verwendung	Summenformel	$k_{OC}$ $\text{l kg}^{-1}$	$R$ -
Tetrachlorethen (PER)	Lösemittel	$\text{C}_2\text{Cl}_4$	250	2,9
Vinylchlorid	Abbauprodukt	$\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}$	2,5	1,0
Benzol	Treibstoffzusatz	$\text{C}_6\text{H}_6$	60	1,5
o-Xylol	Lösemittel	$\text{C}_8\text{H}_{10}$	130	2,0
Monochlorbenzol	Pestizidproduktion	$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$	120	1,9
1,2,4-Trichlorbenzol	Pestizidproduktion	$\text{C}_6\text{H}_3\text{Cl}_3$	950	8,1
Naphthalin	Kokerei, Gaswerk	$\text{C}_{10}\text{H}_8$	1150	9,5
Acenaphthen	Kokerei, Gaswerk	$\text{C}_{14}\text{H}_{10}$	4000	29,7

Eine weitere nichtlineare Beschreibung der Adsorption liefert die *LANGMUIR-Isotherme*:

$$c_a = \frac{c_{a,max} k_L c_g}{1 + k_L c_g} \quad \text{Gleichung A1-35}$$

mit  $k_L = \text{Langmuir-Konstante } L^3 M^{-1}$   
 $c_{a,max} = \text{Maximale adsorbierte Konzentration (Sättigungskonzentration) } M M^{-1}$

Die *LANGMUIR-Isotherme* ist eine sogenannte Sättigungs-Isotherme. Für kleine gelöste Konzentrationen  $c_g$  ist der Nenner näherungsweise 1, und es ergibt sich ein lineares Verhalten. Für große Konzentrationen  $c_g$  nähert sich die adsorbierte Konzentration  $c_a$  der maximal möglichen Konzentration  $c_{a,max}$  an, und die *Retardierung* wird geringer.

Die Abbildung 17 veranschaulicht die Wirkungsweise unterschiedlicher Isothermen auf den Stofftransport. Alle Konzentrationsverteilungen wurden für den gleichen Zeitpunkt dargestellt. Abbildung (a) zeigt die Stoffausbreitung ohne *Retardierung*. In Abbildung (b) sieht man die Auswirkung einer linearen *Retardierung* auf den *Stofftransport* mit einem *Retardierungsfaktor* von 2. Die Abbildung (c) veranschaulicht die Auswirkung einer *Freundlich-Isotherme* mit einem Exponenten von 0,8 (konvexe Isotherme), und (d) zeigt die Verteilung bei Annahme einer *Freundlich-Isotherme* mit einem Exponenten von 1,3 (konkave Isotherme). Die geringere Maximalkonzentration in der Abbildung (a) (ohne *Retardierung*) wird dadurch verursacht, dass hier der Wasserinhaltsstoff schon weiter transportiert wurde als in den übrigen drei Fällen und dass sich deshalb die *Dispersion* bereits stärker entfalten konnte.

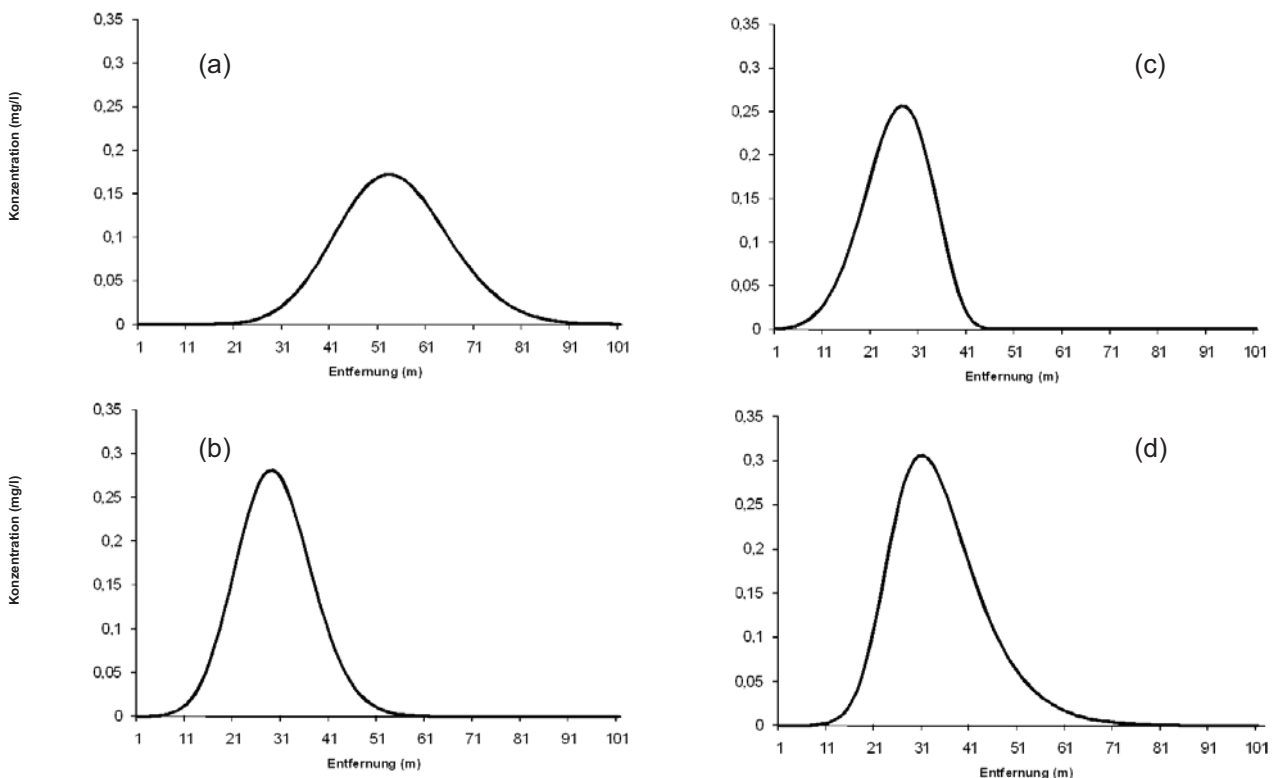


Abbildung 17: Auswirkungen verschiedener Adsorptionsisothermen auf den Stofftransport für eine hypothetische eindimensionale Situation.

## A1.2.5 Biogeochemische Wechselwirkungen in Reaktionssystemen

Bei den bisher dargestellten Reaktionsprozessen wurde davon ausgegangen, dass es ausreicht, einen einzelnen Wasserinhaltsstoff zu betrachten. Im allgemeinen Fall sind die chemischen oder biochemischen Reaktionsraten einer Verbindung im Untergrund jedoch immer auch eine Funktion der Konzentrationen weiterer Reaktionspartner. Solche Systeme miteinander *wechselwirkender Stoffe* können dann nur noch mit *Multispeziesmodellen* adäquat nachgebildet werden.

### A1.2.5.1 Multispeziesmodelle

Grundsätzlich unterliegt jede reaktive Substanz im Untergrund sowohl hydraulischen als auch hydrochemischen Prozessen. Beide Prozessgruppen wirken auf die Stoffkonzentration ein. Eine zentrale Aufgabe bei der Beurteilung des Ausbreitungsverhaltens eines oder mehrerer Schadstoffe im Grundwasser anhand von gemessenen Stoffkonzentrationen ist es daher, die Wirkungen der beiden Prozessgruppen auseinander zu halten.

Die Informationen über die hydraulischen Parameter sind für die präzise Bestimmung des Strömungsfelds in aller Regel nicht detailliert genug, und die Informationen über Transport- und Reaktionsparameter sind gewöhnlich noch lückenhafter. Aufgrund der daraus resultierenden Unsicherheiten ist es häufig kaum möglich, zuverlässig zwischen Transport- und Reaktionseffekten zu unterscheiden, falls nur ein einzelner Wasserinhaltsstoff betrachtet wird.

Hier setzen nun *Multispezies*-Transportmodelle an, denn sie erlauben es, gleichzeitig das Transport- und Reaktionsverhalten eines ganzen Systems *wechselwirkender Spezies* nachzubilden. Dadurch kann die Unsicherheit in den Modellaussagen beträchtlich verringert werden, beispielsweise kann ein nicht korrektes Strömungsmodell, dessen Fehler bei der isolierten Betrachtung einer einzelnen Spezies unbemerkt bliebe und zu einer Fehlbeurteilung des Ausbreitungsverhaltens führen könnte, offenkundig werden, wenn zusätzlich auch die Reaktionspartner dieser Spezies mit betrachtet werden.

Typische Anwendungsbereiche für *Multispezies*-Transportmodelle im Altlastenbereich sind:

- Entwurf und Auswertung von Säulenversuchen zum reaktiven Stofftransport, z.B. Abbauversuche für Schadstoffe zur Ermittlung von Reaktionsparametern, Sorptionsexperimente für Schwermetalle zur Quantifizierung des Adsorptions- und Desorptionsverhaltens.
- Prognose, Planung, Steuerung und Bewertung von biologischen oder chemischen in situ Sanierungsmaßnahmen, z.B. in situ Sanierung eines organischen Schadstoffs durch Zugabe eines Oxidationsmittels, in situ Fixierung von Schwermetallen durch Kontrolle der Redoxverhältnisse im *Aquifer*.
- Prognose und Überwachung des natürlichen Schadstoffabbaus und Rückhalts im Untergrund („Monitored Natural Attenuation, *MNA*“).

Eine für die Modellanwendung wichtige Klassifizierung der Reaktionen ist hinsichtlich der Reaktionsgeschwindigkeit möglich. Eine Reaktion wird als schnell bezeichnet, wenn deren Reaktionsraten groß sind im Vergleich zur Transportrate. Die *Reaktionskinetik* wird dann im Modell nicht aufgelöst. Wenn diese schnellen Reaktionen auch reversibel sind, können sie als Gleichgewichtssysteme beschrieben werden. Umgekehrt wird eine *Reaktion* als langsam



bezeichnet, wenn die *Reaktionsrate* kleiner ist als die Transportrate. Die *Quell- und Senkenterme* des *Stofftransports* müssen in diesem Fall explizit in Form von Ratengleichungen mit individuellen *Reaktionskinetiken* vorgegeben werden.

#### A1.2.5.2 Beispiele für Reaktionssysteme

Ein typisches Kennzeichen vieler Altlasten ist, dass sie als Quellen für organische Wasserinhaltsstoffe dienen. Ein großer Teil dieser organischen Verbindungen sind unter aeroben und/oder anaeroben Verhältnissen thermodynamisch instabil, d.h. sie sind potenziell reaktiv. Welche biogeochemischen Prozesse jedoch tatsächlich und in welchem Umfang ablaufen, hängt sehr stark von den jeweiligen hydraulischen und hydrochemischen Randbedingungen im Untergrund einer Altlast ab. Es ist daher ein zentrales Ziel vieler Anwendungen von *Multispeziesmodellen*, die Reaktionsprozesse für einen konkreten Fall zu quantifizieren.

In der folgenden Tabelle 7 werden drei für *Multispeziesmodelle* wichtige Reaktionssysteme dargestellt. Natürlich kann die Auflistung der Reaktionspartner nicht vollständig oder allgemeingültig sein, sondern sie umfasst lediglich einige charakteristische Vertreter. Auch bei den Reaktionsprozessen wurde nur eine Auswahl der möglichen Prozesse wiedergegeben. Zu beachten ist weiterhin, dass auch in einem *Multispeziesmodell* summarische Modellspezies gebildet werden können, wenn diese sich hinsichtlich ihres Transportverhaltens und ihrer Abbaubarkeit ähnlich verhalten und wenn eine Aufteilung in Einzelspezies nicht praktikabel ist (z.B. aliphatische Mineralölkohlenwasserstoffe).

Tabelle 7: Beispiele für Reaktionssysteme und deren Nachbildung in *Multispeziesmodellen*. <sup>1</sup>Summarische Spezies.

Schadstoffgruppe	Modellspezies	Ausgewählte Reaktionsprozesse
Mineralölkohlenwasserstoffe (MKW)	<b>Schadstoffe:</b> Benzol, Toluol, Xylol, Ethylbenzol, sonstige Aromaten <sup>1</sup> , aliphatische Kohlenwasserstoffe <sup>1</sup> <b>Reaktionspartner:</b> Sauerstoff, Nitrat, Sulfat, Eisenoxid <b>Reaktionsprodukte:</b> gelöstes Eisen, Methan, anorganischer Kohlenstoff, Eisensulfid	Schadstoffabbau unter aeroben, denitrifizierenden, sulfat- und eisenreduzierenden und methanogenen Bedingungen
Chlorierte Kohlenwasserstoffe (CKW)	<b>Ausgangsschadstoffe:</b> Tetrachlorethen (PER), Trichlorethen (TRI) <b>Reaktionspartner:</b> aliphatische Kohlenwasserstoffe (KW), Wasserstoff, Sauerstoff, Nitrat, Sulfat, Eisenoxid <b>Reaktionsprodukte:</b> TRI, cis-1,2-Dichlorethen (CIS), Vinylchlorid (VC), Ethen, gelöstes Eisen, Methan, anorganischer Kohlenstoff	Reduktive Dechlorierung von PER, TRI, CIS und VC; Oxidation von TRI, CIS, VC; Reduktion von KW; Oxidation von KW unter aeroben, denitrifizierenden, sulfat- und eisenreduzierenden und methanogenen Bedingungen
Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK)	<b>Schadstoffe:</b> Naphthalin, Acenaphthylen, Acenaphthen, Fluoren, Phenanthren, Anthracen, Fluoranthren, restliche PAK <sup>1</sup> <b>Reaktionspartner:</b> Sauerstoff <b>Reaktionsprodukte:</b> anorganischer Kohlenstoff, Metabolite	Aerober Schadstoffabbau; Sorption

Die Abbildung 18 zeigt die Berechnungsergebnisse eines *Multispeziesmodells* für ausgewählte Modellspezies. Dargestellt ist eine typische Altlastensituation, in der abbaubare organische Schadstoffe in Form von Kohlenwasserstoffen aus mehreren Altablagerungen ins Grundwasser freigesetzt werden, was wiederum eine Folge von biogeochemischen Reaktionen auslöst.

Die Kohlenwasserstoffe strömen zunächst mit dem Grundwasser ab. Gleichzeitig kommt es zu einem aeroben Schadstoffabbau, der sich in einem Verbrauch von gelöstem Sauerstoff zeigt. Dieser Abbau wird durch aerobe Bakterien realisiert, die vor allem im Anstrombereich der Altablagerungen und an den Fahnenrändern aktiv sind, weil sich dort schadstoff- und sauerstoffhaltiges Grundwasser mischt. Im anaeroben Abstrombereich der Altablagerungen entwickeln sich eisenreduzierende Bakterien (nicht gezeigt), deren Abbautätigkeit sich in erhöhten Gehalten an gelöstem Eisen im Grundwasser manifestiert.

Weitere Beispiele für die Simulation des reaktiven Stofftransports mit *Multispeziesmodellen* finden sich unter der Rubrik „Simulation System - Verification“ auf der Internetseite [www.virtual-aquifer.de](http://www.virtual-aquifer.de). Vertiefende Informationen zu *Multispeziesmodellen* für reaktiven Stofftransport können der Handlungsempfehlung KORA Kapitel A5 und der Synopse des Themenverbundes „Modellierung Prognose“ mit dem Titel „Systemanalyse, Modellierung und Prognose der Wirkungen natürlicher Schadstoffminderungsprozesse - eine rezente Synopse“ entnommen werden. Hinweise zur Wahl geeigneter Abbaukinetiken können SCHÄFER, D. ET AL (2007) entnommen werden.

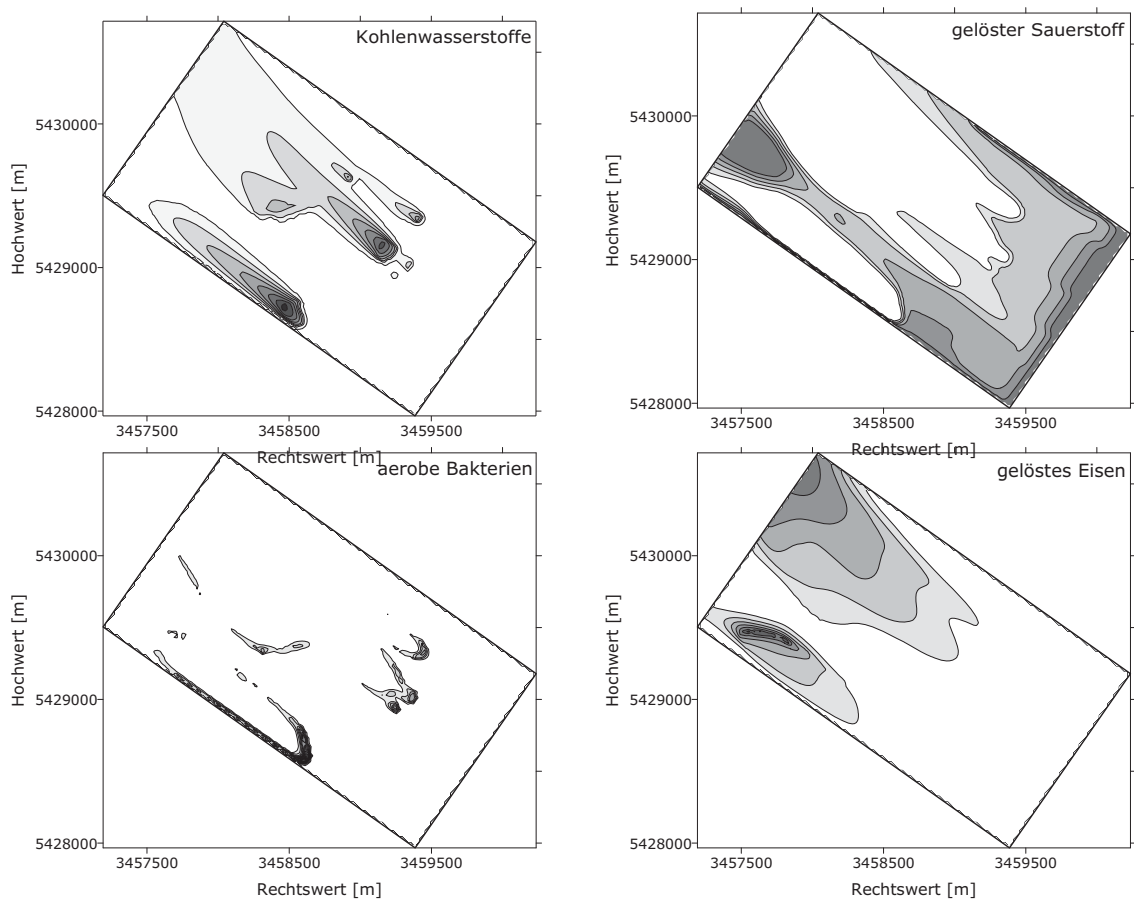


Abbildung 18: Berechnete Konzentrationen für ausgewählte Modellspezies.

## A2 Numerische Lösung der Strömungs- und Transportgleichung

### A2.1 Strömung

#### A2.1.1 Einführung

In Kapitel A1.1 wurde erläutert, dass die Grundwasserströmung durch eine partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung beschrieben werden kann. Für diese Differentialgleichung wurden bisher nur für sehr stark vereinfachende Annahmen analytische Lösungen entwickelt. Um beliebige Geometrien von *Grundwasserleitern*, Vorflutern, Brunnen und auch den Einfluss von *Heterogenitäten* berechnen zu können, bedient man sich daher besser numerischer Verfahren.

Bei den numerischen Verfahren wird die räumlich kontinuierliche Lösung der partiellen Differentialgleichung der Grundwasserströmung - die Piezometerhöhenverteilung - durch eine nach unterschiedlichen Verfahren bestimmte Lösung an einer endlichen Anzahl von Gitterpunkten angenähert.

Als Lösungsmethoden haben sich das *Finite Differenzen* Verfahren ("FD") und die Methode der *Finiten Elemente* ("FE") durchgesetzt. Eine geringere Verbreitung hat die Methode der Finiten Volumen gefunden. Daher wird auf diese Methode nachfolgend nicht weiter eingegangen.

Dem FD- und FE-Verfahren ist gemeinsam, dass das zu betrachtende Gebiet in eine endliche Zahl von Teilflächen diskretisiert, d.h. aufgegliedert wird. Auffälligster Unterschied zwischen den beiden Methoden ist die Art der *Diskretisierung*. Während beim FD-Verfahren der *Modellraum* im Grundriss betrachtet in rechteckige, oft quadratische Zellen aufgeteilt wird, kann das FE-Modellnetz aus einem unregelmäßigen Netz von Elementen praktisch beliebiger Form (Dreiecke, Vierecke u.a., auch in gemischter Form) bestehen. Bei dreidimensionaler Betrachtung handelt es sich beim FD-Verfahren um würfel- oder quaderförmige Zellen, bei der FE-Methode um vielfältige Formen wie z.B. Tetraeder, Prismen, Dreiecks- oder Viereckspyramiden und andere.

Das FD-Verfahren liefert als Ergebnis eine mittlere *Piezometerhöhe* der einzelnen Modellzelle, wohingegen das FE-Verfahren die *Piezometerhöhe* an den Eckpunkten der Elemente berechnet. Zum Beispiel würde die Piezometerhöhenverteilung einer *freien Grundwasser Oberfläche* nach dem FD-Verfahren eine treppenförmige Gestalt annehmen. Das Ergebnis des FE-Verfahrens kann z.B. bei der Verwendung von Dreieckselementen mit einer aus vielen einzelnen Ebenen (den Elementen) aufgespannten facettierten Oberfläche beschrieben werden.

Beide Verfahren nähern die exakte Lösung der Differentialgleichung auf unterschiedliche Art und Weise an. Bei bekannter Parameterverteilung und vergleichbarer *Diskretisierung* sind die Ergebnisse beider Methoden gleichwertig (DVGW, 2004). Die Genauigkeit der Ergebnisse beider numerischer Lösungsverfahren ist letztlich nur eine Frage der Feinheit der *Diskretisierung*.

Oft wird die Frage in den Raum gestellt, welche Lösungsmethode zu bevorzugen ist. Eine definitive Antwort auf diese Frage gibt es nicht. Beide Lösungsmethoden haben eine weite Verbreitung gefunden und keiner Methode ist es bisher gelungen, die andere zu verdrängen.

Ein Vorteil der FE-Methode ist seine größere Flexibilität beim Aufbau des *Modellgitters*. Da die Elemente in Form und Größe variabel sein können, kann das *Modellgitter* sehr gut an die natürlichen Verhältnisse angepasst werden. Bereiche von besonderem Interesse bzw. Bereiche mit höherer Erkundungsdichte können praktisch beliebig verdichtet werden, während Bereiche mit geringerer Informationsdichte weitständiger diskretisiert werden können. Das *FD-Modellgitter* ist dagegen normalerweise rechteckig aufgebaut und von daher nicht so flexibel wie das *FE-Modellgitter*. Aufgrund des FD-Prinzips von maximal vier (2D) bzw. sechs Nachbarzellen im 3D-Modell sind Verdichtungen des *Modellgitters* zwar möglich, diese ziehen sich dann aber durch das ganze Modell hindurch (siehe Abbildung 19). Die Hauptachsen eines möglichen *Anisotropietensors* sind beim FD-Netz stets parallel den Gitterachsen orientiert. Ändert sich im Feld die Richtung eines solchen Tensors, kann dies im klassischen FD-Netz nicht abgebildet werden. Manche FD-Modelle können die genannten Nachteile durch die Anwendung curvilinearere Gitter in gewissem Maß kompensieren.

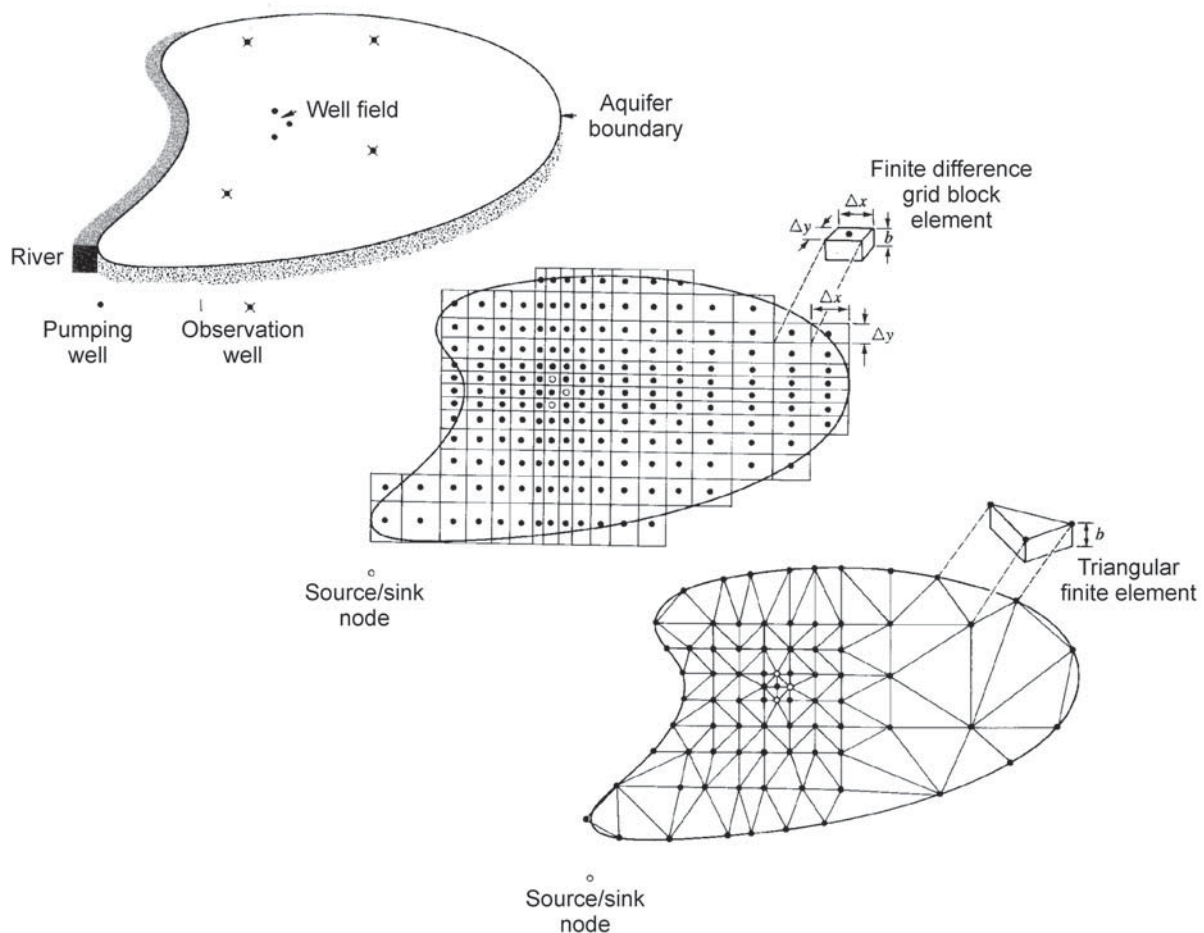
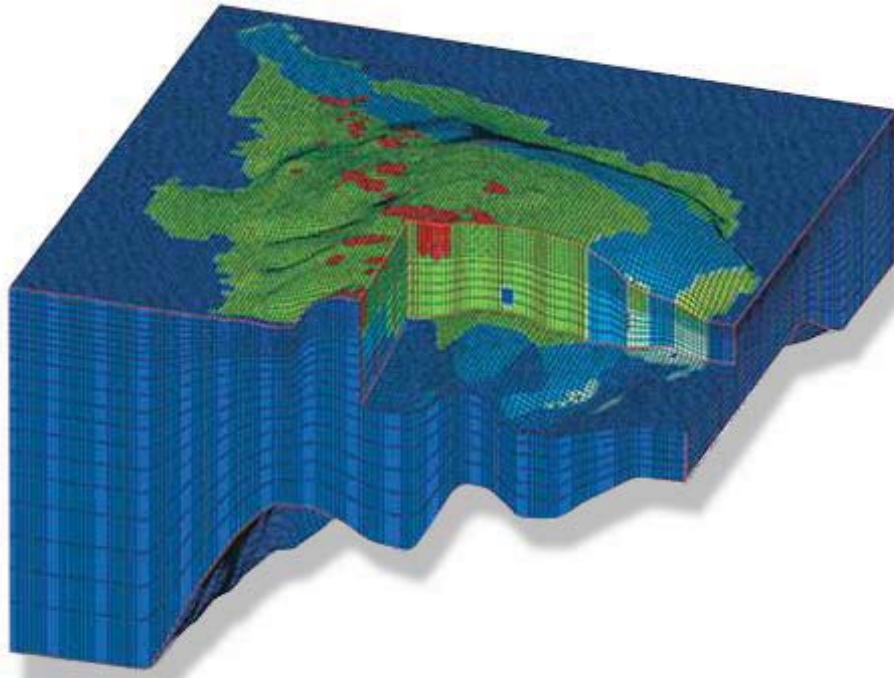


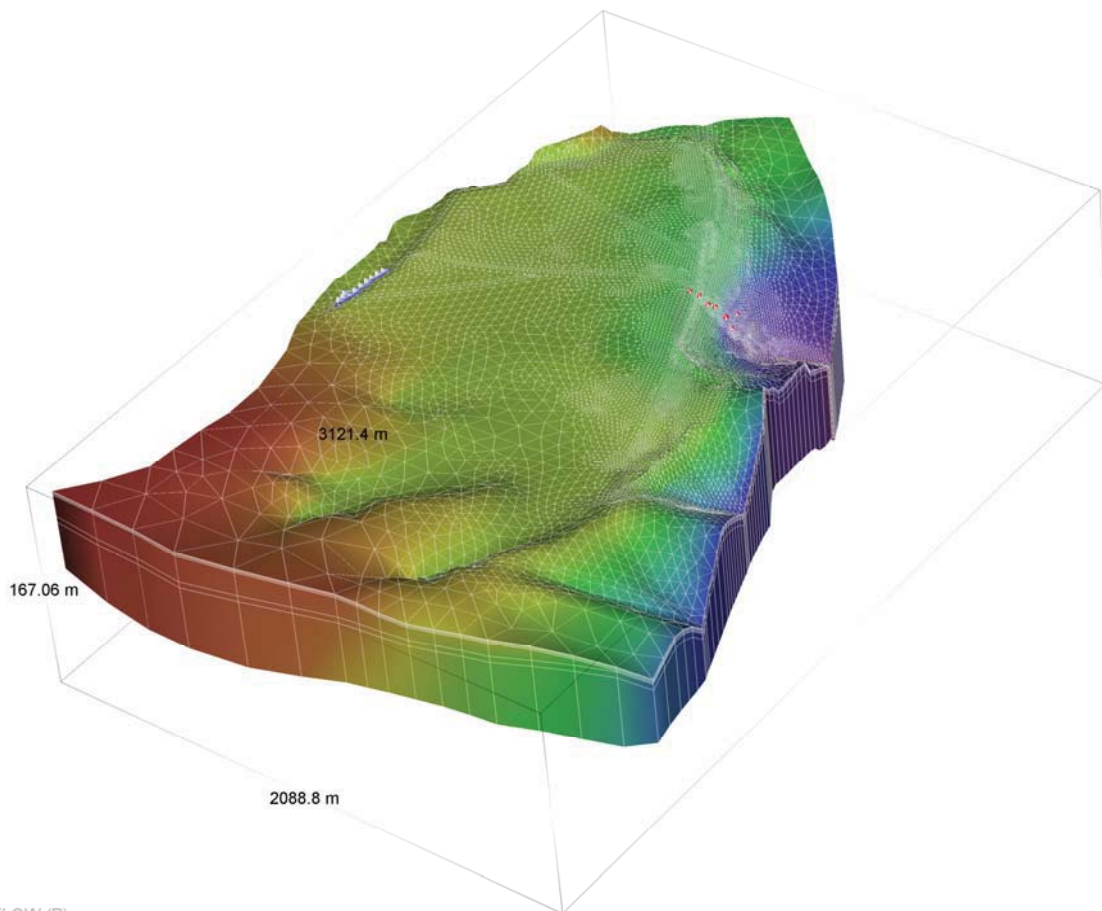
Abbildung 19: Diskretisierungsprinzipien: Modellgebiet (links), Finite Differenzen Gitter (mitte), Finite Elemente Gitter (rechts)  
(verändert nach WANG, H.F. & ANDERSON, M. P. 1982)

Generell kann man sagen, dass eine Hervorhebung der Nachteile des FD-Verfahrens gegenüber dem FE-Verfahren vielfach eher historisch begründet ist und aus einer Zeit stammt, in der mit Speicher- und Rechenzeit noch besonders sparsam umgegangen werden musste. Mit der heutigen Rechnergeneration können relativ problemlos Modelle mit mehreren Hunderttausend bis Millionen Zellen bzw. Knoten verarbeitet werden (siehe Abbildung 20), so dass sehr feine räumliche Diskretisierungen auch mit dem FD-Verfahren realisiert werden können.





Quelle: HydroGeoLogic Inc.



Quelle: DHI-WASY GmbH

Abbildung 20: Komplexe 3D Modellgitter. *Finite Differenzen* (oben), *Finite Elemente* (unten)



Bei Zellabständen von wenigen Zehnermetern bis hinunter in den Meterbereich kann das FD-Verfahren meist allen Erfordernissen der Praxis gerecht werden. Die Entscheidung für die eine oder andere Methode ist eine Frage des Einzelfalls und nicht ausschließlich von fachlichen Erfordernissen geprägt.

Eine ausführliche mathematische Herleitung der *FD-* und *FE-Methode* ist nicht Ziel dieser Arbeitshilfe und würde auch deren Rahmen sprengen. Zur Theorie numerischer Modelle gibt es eine Reihe sehr guter Lehrbücher. Insbesondere zur Anwendung numerischer Verfahren im Themenfeld Grundwasser sei auf die Arbeiten von KINZELBACH (1986), KINZELBACH & RAUSCH (1995), ISTOK (1989) und WANG & ANDERSON (1982) hingewiesen. In den folgenden Kapiteln werden nur die Grundzüge der Verfahrensweisen skizziert.

### A2.1.2 Finite Differenzen Verfahren

Beim FD-Verfahren wird die kontinuierliche Lösung der Differentialgleichung durch die Bildung von Differenzenquotienten angenähert.

Dazu wird das Modellgebiet räumlich in eine endliche Anzahl von rechteckigen Zellen bzw. Blöcken diskretisiert. Man unterscheidet flächenzentrierte und knotenzentrierte *Modellgitter*. Bei den flächenzentrierten *Diskretisierungsverfahren* liegen die Berechnungspunkte im Mittelpunkt der durch das *Modellgitter* bestimmten Zellen oder Blöcke. Beim knotenzentrierten Verfahren liegen die Berechnungspunkte dagegen auf den Kreuzungspunkten des Gitters. Die zugehörigen Zellen ergeben sich dann aus den Mittelsenkrechten der Verbindungslinien zwischen den Knoten. Beide Verfahren sind mathematisch identisch. Weit verbreitete Anwendung haben die flächenzentrierten Gitter gefunden.

Die *FD-Methode* lässt sich anhand der Wasserbilanz einer 2-D Modellzelle für den *gespannten Aquifer* erläutern. Gesucht ist die unbekannte Piezometerhöhenverteilung an  $n$  Modellzellen am Ende eines bestimmten Zeitintervalls.

Eine Modellzelle des FD-Verfahrens besitzt im 2D-Fall vier benachbarte Zellen, über die ein Wasseraustausch erfolgen kann. Zusätzlich kann über die Dachfläche ein *Quell-* bzw. *Senkenterm* berücksichtigt werden. Aus Gründen der Kontinuität ist in einem Zeitintervall die Summe der Wasserflüsse über die Seiten und Dachfläche einer Modellzelle gleich dem Volumen des Wassers, das in diesem Zeitintervall in der Modellzelle gespeichert oder aus dem Speichervorrat abgegeben wurde (siehe Kapitel A1.1.3, Gleichung A1-12). Im *stationären* Fall ist die Summe der Wasserflüsse gleich Null.

Die Wasserflüsse über die Seiten der Modellzelle können mit Hilfe des Darcy-Gesetzes über den Gradienten und die *Transmissivität* zwischen benachbarten Zellen zu einem noch festzulegenden Zeitpunkt (siehe Kapitel A1.1.4) während des Zeitintervalls angenähert werden. Ersetzt man in der Kontinuitätsgleichung die Wasserflüsse durch die äquivalenten Terme des Darcy-Gesetzes, erhält man nach einigen algebraischen Umformungen die Knotengleichung für die betrachtete Modellzelle, in der als Unbekannte beim *impliziten Lösungsschema* (siehe Kapitel A1.1.4) nur noch die *Piezometerhöhen* der betrachteten Zelle und seiner vier Nachbarn zum Ende des Zeitintervalls enthalten sind.

In einem FD-Modell können die einzelnen Modellzellen abweichende hydraulische Eigenschaften besitzen. Haben benachbarte Zellen eine unterschiedliche *Transmissivität*, so muss zwischen diesen Modellzellen eine geeignete mittlere *Transmissivität* bestimmt werden. Dazu wird in der Regel das entsprechend der Zelldimensionen gewichtete harmonische Mittel der beiden *Transmissivitäten* verwendet.

Wird die zuvor beschriebene Knotengleichung für  $n$  Modellzellen aufgestellt, erhält man im Fall des *gespannten Grundwasserleiters* ein lineares Gleichungssystem bestehend aus  $n$  Gleichungen mit  $n$  unbekanntem *Piezometerhöhen*. Auf der linken Seite der einzelnen Gleichungen stehen die unbekanntem *Piezometerhöhen* der jeweils fünf beteiligten Modellzellen mit ihren Koeffizienten, die die einzelnen Zellabstände und hydraulischen Eigenschaften der einzelnen Zellen berücksichtigen. Die rechte Seite der Gleichung besteht aus einem *Quell- bzw. Senkenterm* sowie dem im Zeitschritt gespeicherten/entleerten Wasservolumen. Ein solches Gleichungssystem kann mit verschiedenen Verfahren entweder direkt oder iterativ gelöst werden.

Die Übertragung des FD-Verfahrens auf andere Aquifertypen (Mehrschichtaquifere, *freie Grundwasseroberfläche* u.a.) ist möglich.

Im 3D Fall besitzt jede Modellzelle sechs Nachbarzellen. Die Berechnung des vertikalen Wasseraustauschs erfolgt in diesem Fall analog über die vertikale Durchlässigkeit der einzelnen Modellzellen und den aus der Zellgeometrie abgeleiteten harmonischen Mittelwerten der *Transmissivität*.

Bei *Aquifere*n mit *freier Grundwasseroberfläche* ist die *Transmissivität* keine konstante Größe, sondern hängt unmittelbar von der *Piezometerhöhe* ab. Dadurch wird das entstehende Gleichungssystem nichtlinear und kann ausschließlich mit iterativen Verfahren gelöst werden.

### A2.1.3 Finite Elemente Verfahren

Die mathematische Herleitung der *FE-Methode* ist gegenüber der des FD-Verfahrens deutlich komplizierter. Das FE-Verfahren kann nach der weit verbreiteten GALERKIN Methode (Methode der gewichteten Residuen) kurz umrissen wie folgt erläutert werden.

Das Modellgebiet wird in eine endliche Anzahl unregelmäßig geformter Elemente diskretisiert. Die Eckpunkte der Elemente bilden die Modellknoten, für die die *Piezometerhöhen* berechnet werden. Innerhalb der Elemente sind die hydraulischen Eigenschaften konstant. Von Element zu Element können sie dagegen unterschiedlich sein.

Gesucht ist wieder die unbekanntem *Piezometerhöhenverteilung* an  $n$  Modellknoten am Ende eines bestimmten Zeitintervalls. Im Gegensatz zur *FD-Methode* ist die *Piezometerhöhe* nicht nur an den *Modellknoten*, sondern auch innerhalb der Elemente definiert. Im einfachen Fall ist die unbekanntem *Piezometerhöhe* an einem beliebigen Punkt z.B. innerhalb eines Dreieckelementes durch eine lineare Interpolation zwischen den Modellknoten definiert. Diese Interpolationsfunktion spielt beim GALERKIN Verfahren eine entscheidende Rolle.

Beim Verfahren der gewichteten Residuen nach GALERKIN wird für die zu lösende Differentialgleichung zunächst eine Näherungslösung definiert bestehend aus Werten für die *Piezometerhöhe* an den Modellknoten und einer zugehörigen Ansatz- bzw. Gewichtungsfunktion. Wird diese Näherungslösung in die Differentialgleichung eingesetzt, ist diese nicht mehr exakt erfüllt. Es verbleibt ein Residuum. Das Residuum ist ein Maß für die Ungenauigkeit der Näherungslösung.

Ziel des GALERKIN Verfahrens ist es, an  $n$  Modellknoten die Summe der gewichteten Residuen Null werden zu lassen. Dazu werden die Produkte aus Residuen und zugehöriger Gewichtungsfunktion integriert und Null gesetzt. Beim GALERKIN Verfahren werden für diese Gewichtung die bereits erwähnten Interpolationsfunktionen herangezogen. Wird in das Integral anstelle des Residuums die Näherungslösung für die Differentialgleichung eingesetzt, so entsteht nach partieller Integration und Einsetzen der Interpolationsfunktion beim *gespannten*

*Grundwasserleiter* ein System von  $n$  linearen Gleichungen mit  $n$  unbekanntem *Piezometerhöhen*.

Das Gleichungssystem kann in Matrixform überführt werden. Die Gleichung enthält dann eine Spaltenmatrix der *Piezometerhöhen* zum Ende des Zeitintervalls. In die quadratische Koeffizientenmatrix der *Piezometerhöhen* geht neben der Geometrie der einzelnen Elemente auch deren hydraulische Leitfähigkeit ein. Sie wird daher als "globale Durchlässigkeitsmatrix" bezeichnet. Eine weitere Spaltenmatrix enthält die zeitlichen Ableitungen der *Piezometerhöhen*, und deren ebenfalls quadratische Koeffizientenmatrix berücksichtigt die Speicherung in den einzelnen Elementen. Auf der rechten Seite der Gleichung befinden sich zwei Spaltenmatrizen der *Randzuflüsse* und sonstiger *Quellen bzw. Senken*.

Ganz ähnlich wie beim FD-Verfahren sind die Koeffizientenmatrizen des FE-Verfahrens nur sehr dünn besetzt, da nur die Eigenschaften der an einen Modellknoten angrenzenden Elemente ("Patch") zu dessen *Piezometerhöhe* beitragen. Die Koeffizienten der nicht zum Patch des Modellknotens gehörenden Elemente sind jeweils gleich Null.

Das Gleichungssystem kann mit verschiedenen Verfahren entweder direkt oder iterativ gelöst werden.

Die Anwendung des FE-Verfahrens ist bei allen denkbaren Aquifertypen möglich.


#### **A2.1.4 Lösung der Gleichungssysteme und zeitliche Diskretisierung**

Der Simulationszeitraum eines *instationären* Modells wird sowohl beim FD- als auch beim FE-Verfahren in einzelne Phasen zeitlich aufgeteilt, d.h. zeitlich diskretisiert. Innerhalb der einzelnen Phasen bleiben die System bestimmenden *Randbedingungen* (siehe Kapitel A1.1.5) konstant. Von Phase zu Phase können sich die *Randbedingungen* dagegen ändern. Jede Phase kann in weitere Zeitintervalle unterteilt werden, um eine höhere zeitliche Auflösung zu erhalten. Das erste Zeitintervall einer *instationären* Simulation bedarf der Definition einer *Anfangsbedingung* (siehe Kapitel 3.7). Jeweils das Ergebnis des vorangegangenen Zeitintervalls bildet die *Anfangsbedingung* des folgenden Intervalls.

Die Vorgehensweisen zur Berechnung des *instationären* Flusses sind beim FD- und FE-Verfahren sehr ähnlich und werden daher an dieser Stelle gemeinsam erläutert. In beiden Verfahren werden hinsichtlich des zeitlichen Aspekts Differenzenverfahren eingesetzt.

Bei der Beschreibung des FD- und FE-Verfahrens wurde in beiden Fällen ein Zeitintervall genannt, zu dessen Ende jeweils die unbekanntem *Piezometerhöhen* an den Modellknoten bzw. den Modellzellen berechnet werden.

Ausgehend von einer stets zu definierenden *Anfangsbedingung* (siehe Kapitel A2.1.5) zu Beginn des Zeitintervalls ist das Ziel, eine neue *Piezometerhöhenverteilung* am Ende des Zeitintervalls  $t + \Delta t$  zu berechnen. Hierzu muss festgelegt werden, zu welchem Zeitpunkt innerhalb des Zeitintervalls die *Piezometerhöhengradienten* angenähert werden sollen. Man unterscheidet hierbei *explizite* und *implizite Verfahren*.



**Prüfhinweis**

✓ *Welches Lösungsschema wird angewendet?*

Beim *expliziten* Lösungsschema wird dieser Zeitpunkt  $t'$  innerhalb des Zeitintervalls  $t + \Delta t$  mit den bekannten *Piezometerhöhen* zum Zeitpunkt  $t$ , d.h. zu Beginn des Zeitintervalls, fest-

gelegt. Man benutzt also die Ergebnisse des vorangegangenen Zeitschritts. Auf diese Weise können die gesuchten unbekanntenen *Piezometerhöhen* "explizit" für jede Zelle bzw. Knoten berechnet werden ohne die neuen Werte der Nachbarknoten berücksichtigen zu müssen. Der Nachteil dieses einfachen Verfahrens liegt in der erforderlichen sehr kleinen Zeitschrittweite, da sonst die Lösung instabil wird. Es müssen beim *expliziten Verfahren* strenge Stabilitätskriterien eingehalten werden. Bei langen Simulationszeiträumen ergeben sich neben erheblichen Rechenzeiten zudem häufig nicht zu vernachlässigende Rundungsfehler. In der Praxis finden *explizite Lösungsverfahren* nur selten Anwendung.

Bei *impliziten Verfahren* wird für den Zeitpunkt  $t'$  ein beliebiger Zeitpunkt innerhalb des Zeitintervalls  $t + \Delta t$  herangezogen. In diesem Fall sind die unbekanntenen *Piezometerhöhen* "implizit" in den zuvor beschriebenen Gleichungssystemen enthalten. Wird der Zeitpunkt zum Ende des Zeitintervalls verwendet, spricht man vom "vollständig impliziten" Schema. Wird das Verfahren mit dem Zeitpunkt zur Hälfte des Zeitintervalls angewandt, entspricht dies dem CRANK-NICHOLSON-Schema.

Die Anwendung impliziter Schemata führt zu Gleichungssystemen, die mit direkten und iterativen Verfahren gelöst werden können.

Direkte Gleichungslöser (z.B. GAUSS-JORDAN-Verfahren) lösen das Gleichungssystem in einem Schritt. Nachteil der direkten Verfahren ist der sehr große Speicherbedarf. Üblicherweise werden heute iterative Gleichungslöser (IADI-, GAUSS-SEIDEL-, PCG-, MULTI-GRID-Verfahren u.a.) verwendet, die nach unterschiedlichen Verfahrensweisen arbeiten.



#### Prüfhinweis

- ✓ Welche Gleichungslöser wird eingesetzt?

Gemeinsam ist allen iterativen Verfahren, dass sie mit "gerateten" Anfangswerten arbeiten, das Ergebnis wieder einsetzen und sich auf diese Weise dem tatsächlichen Ergebnis annähern. Je besser die geratene Lösung ist, desto schneller wird das Berechnungsergebnis erzielt.

Um zu entscheiden, wann ein Berechnungsergebnis hinreichend "richtig" ist, müssen bei den iterativen Verfahren sogenannte "Konvergenzkriterien" definiert werden. Diese werden während der Berechnung als Abbruchkriterium eingesetzt. Wenn die Änderung des Ergebnisses zwischen zwei Iterationen das Konvergenzkriterium unterschreitet, wird die Iteration abgebrochen und zum nächsten Zeitschritt übergegangen. Je nach Verfahren sind die Kriterien zur Prüfung der Konvergenz unterschiedlich definiert. Es können keine absoluten Regeln zur Festlegung der Größe der Konvergenzkriterien angegeben werden. Sie sind vom Einzelfall abhängig und sollten begründet werden. Zu schwache Konvergenzkriterien führen zu einem verfrühten Abbruch der Iteration und einem falschen Ergebnis. Zu strenge Kriterien verlängern die Rechenzeit unnötig ohne zu einer qualitativen Verbesserung des Ergebnisses zu führen. Im ungünstigen Fall kommt es zur *Oszillation* der Ergebnisse und es wird keine Konvergenz erreicht.



#### Prüfhinweise

- ✓ Welche Konvergenzkriterien werden verwendet?
- ✓ Nach welchen Kriterien wurden diese festgelegt?

Die beste Methode zur Optimierung der Konvergenzkriterien ist die Kontrolle des Ergebnisses über die Wasserbilanz des Gesamtmodells: Das Verhältnis zwischen den Summen aller Zu- und Abflüsse sollte möglichst nahe an Eins liegen. Der Unterschied (d.h. der Fehler) sollte in der Regel Bruchteile eines Prozentes der Wasserflüsse nicht überschreiten. Im Zweifel eignet sich ein Vergleich von Ergebnissen mit unterschiedlichen Konvergenzkriterien

zu deren Beurteilung. Die Wahl fallbezogener Konvergenzkriterien ist ein wichtiger Schritt zur wirtschaftlichen Optimierung von Simulationen.

### A2.1.5 Anfangsbedingungen

Für numerische Lösungen der Grundwasserströmung ist grundsätzlich die Definition von *Anfangsbedingungen* erforderlich. Die *Anfangsbedingung* beschreibt den Zustand des Systems zu Beginn des Zeitintervalls  $t + \Delta t$  am Beginn der Simulation. Als *Anfangsbedingungen* können für *instationäre* Simulationen gemessene Piezometerhöhenverteilungen herangezogen werden.

Können diese z.B. aufgrund des vorhandenen Messstellennetzes nur mit geringer Güte entwickelt werden, bedarf das Modell bei *instationären* Simulationen einer Anpassungsphase an die *Randbedingungen* des Systems. Es muss daher beachtet werden, dass in der Anfangsphase *instationäre* Modelle nur in Ausnahmefällen Messergebnisse gut nachvollziehen können.



#### Prüfhinweis

- ✓ Wie wurden die Anfangsbedingungen entwickelt?

Für *stationäre* Berechnungen sind *Anfangsbedingungen* vom Grundsatz her eigentlich nicht erforderlich, da die Lösung mit dem Erreichen der *Stationarität* ausschließlich von den *Randbedingungen* gesteuert und damit unabhängig von den *Anfangsbedingungen* wird. *Stationäre* Simulationen können nur über iterative Verfahren erfolgen. Iterative Verfahren benötigen jedoch einen geratenen Startwert. Insofern kann die *Anfangsbedingung* bei *stationären* Simulationen eine willkürlich festgelegte sein. Je näher sie der *stationären* Lösung entspricht, desto kürzer ist jedoch die Rechenzeit bis zur Konvergenz.

### A2.1.6 Randbedingungen der Grundwasserströmung

Für die Lösung partieller Differentialgleichungen 2. Ordnung mit numerischen Verfahren ist neben den *Anfangsbedingungen* auch die Definition von *Randbedingungen* erforderlich, mit denen das *Strömungsverhalten* an den Rändern aber ggf. auch innerhalb des Modells vorgegeben wird. Die *Randbedingungen* sind die prägenden Bestandteile eines Modells und müssen sorgfältig erarbeitet werden. Näheres zu diesem Thema findet sich in den Kapiteln 2.1.1, 3.5 und A1.1.5.

Es sind als mögliche *Randbedingungen* zu nennen:

- *Randbedingung* 1. Art (DIRICHLET-Typ): *Festpotenzial*, d.h. vorgegebene *Piezometerhöhe*.
- *Randbedingung* 2. Art (NEUMANN-Typ): konstanter Gradient senkrecht zum Rand, entspricht konstantem *Randzufluss*.
- *Randbedingung* 3. Art (CAUCHY-Typ): Linearkombination aus 1. und 2. Art, *Leakage-Randbedingung*, *Festpotenzial* mit hydraulischem Widerstand.

*Randbedingungen* werden in numerischen Modellen nach der *FE-* bzw. *FD-Methode* prinzipiell ähnlich behandelt. Bei *Festpotenzialen* ist die Knoten- oder Zellgleichung



unabhängig vom Geschehen an den Nachbarknoten explizit ohne weitere Berechnung gelöst. *Randzuflüsse* sind in den Gleichungssystemen der *FE-* bzw. *FD-Methode* jeweils auf der rechten Seite der Gleichungen enthalten. Erhält die betreffende Modellzelle bzw. das betreffende Element des Patches keinen *Randzufluss*, ist der entsprechende Term der Gleichung gleich Null. Flüsse über *Leakageknoten* werden analog den *Randzuflüssen* behandelt.

Die mathematische Behandlung der *Festpotenziale* zeigt die Gefahr bei deren Anwendung. Die Festpotenzialhöhe bleibt bei der Simulation konstant unabhängig von den Bedingungen an den Nachbarknoten. Wird in einem Nachbarknoten stark abgesenkt, z.B. durch eine Grundwasserentnahme, ändert sich die *Piezometerhöhe* am *Festpotenzialknoten* nicht. Auf diese Weise kann im Modell beliebig viel Wasser erzeugt werden. *Festpotenziale* als Randdefinition sollten daher in der Regel tatsächlich auch nur da angewendet werden, wo der Untergrund entsprechend "unendlich" viel Wasser zu Verfügung stellen kann. In allen anderen Fällen ist bei der Anwendung von *Festpotenzialen* große Vorsicht geboten.

Unterschiede zwischen der *FE-* bzw. *FD-Methode* bestehen bezüglich der Behandlung von *Quellen und Senken*. Während bei der *FD-Methode* alle Arten von *Quellen und Senken* (*Grundwasserneubildung, Randzuflüsse, Brunnen* etc.) gleich behandelt werden, kann bei der *FE-Methode* zwischen flächenhaften (z.B. *Grundwasserneubildung*), linienhaften (z.B. *Fließgewässer*) und punktförmigen *Quellen und Senken* (z.B. *Brunnen*) unterschieden werden.



#### Prüfhinweise

- ✓ Welche Arten von Randbedingungen werden verwendet?
- ✓ Spiegeln die Randbedingungen natürliche Gegebenheiten wider?
- ✓ Welche Randbedingungen wurden gewählt, wenn keine natürlichen Gegebenheiten genutzt werden können?

Bei vergleichsweise grober *Diskretisierung* ist die *FE-Methode* diesbezüglich der *FD-Methode* im Vorteil. Bei feiner *Diskretisierung* wird dieser Vorteil wieder überdeckt von den in der Regel mangelnden Kenntnissen der geometrischen und hydraulischen Eigenschaften im Detail, so dass beide Verfahren dann wieder gleichwertig sind.

## A2.2 Transport

Zu lösen ist die allgemeine *Transportgleichung* (dargestellt für den nichtreaktiven Transport):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla(uc) + \nabla(D \nabla c) + \sigma \quad \text{Gleichung A2-1}$$

mit	$c$	=	Stoffkonzentration M/L <sup>3</sup>
	$t$	=	Zeit T
	$u$	=	Abstandsgeschwindigkeit L/T
	$D$	=	Diffusions-/Dispersionskoeffizient L <sup>2</sup> /T
	$\nabla$	=	Nabla-Operator in drei Dimensionen ( $\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z$ )
	$\sigma$	=	Externer Quell/Senkenterm M/L <sup>3</sup> /T

Wie bei der Strömungsmodellierung ist das Ziel auch bei der *Stofftransportmodellierung*, eine numerische Näherungslösung der Differenzialgleichung zu finden, da deren exakte Lösung nicht bestimmt werden kann. Ein wesentlicher Unterschied zwischen Strömungs- und Transportmodellierung besteht jedoch in den zugrundeliegenden Prozessen und damit in der Differenzialgleichung, die zur Prozessbeschreibung herangezogen wird.

Bei der Grundwasserströmung handelt es sich letztlich um die Ausbreitung einer Störung (z.B. Wasserspiegelabsenkung durch Entnahme) in alle Raumrichtungen. Die Strömungsgleichung gehört zur Gruppe der parabolischen bzw. elliptischen Differenzialgleichungen. Zur Lösung dieser Art von Differenzialgleichung sind die sog. *Euler-Verfahren* oder *Gitterverfahren* (z.B. *Finite Differenzen*, *Finite Elemente*) sehr gut geeignet. Andere *Diskretisierungsverfahren* sind daher auch nicht gebräuchlich (siehe Kapitel A2.1.1).

Der Stofftransport im Grundwasser hingegen weist zwei unterschiedliche Aspekte auf. Einmal gibt es die diffusiv/dispersive Stoffausbreitung, bei der es sich, wie bei der Grundwasserströmung, um die Ausbreitung einer Störung (z.B. Schadstoffeintrag) in alle Raumrichtungen handelt. Entsprechend kann der *diffusiv/dispersive Stofftransport* auch wieder sehr gut auf der Basis eines *Gitterverfahrens* beschrieben werden. Der *advektive Stofftransport* hingegen bedeutet die Ausbreitung einer Störung entlang charakteristischer Bahnlinien, d.h. nur in eine Raumrichtung. Die zugehörige Differenzialgleichung ist von hyperbolischem Typ. Diese Art Gleichungen lässt sich numerisch am besten mit sog. Lagrange- oder *particle-tracking-Verfahren* lösen (z.B. *Charakteristikenmethode*, *Random-Walk-Verfahren*, s.u.), *Gittermethoden* sind hierfür grundsätzlich weniger gut geeignet.

Die duale Natur der *Transportgleichung* hat weitreichende Folgen. Zunächst ist es so, dass es kein *Diskretisierungsverfahren* gibt, das für beide Aspekte des *Stofftransports* optimal geeignet ist. Stattdessen bieten viele Transportmodelle mehrere alternative *Diskretisierungsverfahren* an. Dies wiederum erfordert vom Bearbeiter, dass er das für die gegebene Situation am besten geeignete Verfahren erkennen und auswählen muss. Letztlich wird eine Transportmodellierung dadurch meist deutlich aufwändiger als eine Strömungsmodellierung, und es besteht die Gefahr, dass allein durch die Wahl eines ungeeigneten *Diskretisierungsverfahrens* ein fehlerbehaftetes Ergebnis produziert wird. Bei der Strömungsmodellierung ist dies so nicht der Fall.

## A2.2.1 Gitterverfahren (Euler-Verfahren)

Zu den numerischen Lösungsverfahren, die auf der *Diskretisierung* der Differentialgleichung auf Gittern beruhen, zählen die bereits für die Strömungsmodellierung beschriebenen *Finite-Differenzen-Verfahren* (FD) und die *Finite-Elemente-Verfahren* (FE) (siehe Kapitel A2.1.2 und A2.1.3). Zur Verwendung kommen in geringerem Umfang auch Finite-Volumen-Verfahren (FV).

Das Prinzip des FD-Verfahrens besteht darin, die Differenzialgleichung zur Beschreibung des Stofftransports durch Differenzenquotienten in Raum und Zeit anzunähern. Die Unbekannte, nach der die *Transportgleichung* gelöst wird, ist die Stoffkonzentration im Grundwasser. Die Verwendung von Differenzen anstelle von Differenzialen führt, wie bei der *Strömungsmodellierung*, dazu, dass das Modellgebiet kein räumliches Kontinuum mehr darstellt, sondern dass es auf einem *Modellgitter* diskretisiert werden muss. Die Konzentrationen werden daher z. B. beim FD-Verfahren nicht überall im Modellgebiet berechnet, sondern nur an diskreten Gitterpunkten. Diese Gitterpunkte werden auch Berechnungspunkte oder Knoten genannt.

Ebenso wird das zeitliche Kontinuum durch diskrete Zeitpunkte ersetzt, für die die neuen Konzentrationen berechnet werden. Beim *expliziten Verfahren* werden in den Differenzentermen die Konzentrationen zum Anfangszeitpunkt  $t$  benutzt. Deshalb können die Knotengleichungen unabhängig voneinander gelöst werden. Der Vorteil des *expliziten Verfahrens* ist, dass es nur einen geringen Speicherbedarf aufweist. Der Nachteil ist, dass numerische Stabilitätskriterien (s.u.) sehr streng zu befolgen sind und dass daraus meist sehr kleine Zeitschrittweiten resultieren. Im Gegensatz zur Strömungsmodellierung sind *explizite Verfahren* bei der *Transportmodellierung* jedoch durchaus gebräuchlich.

Beim *impliziten Verfahren* werden alle Konzentrationen in den räumlichen Differenzentermen zum neuen Zeitpunkt  $t + \Delta t$  angesetzt. Die neuen Konzentrationen am Knoten selbst hängen damit auch von den neuen Konzentrationen an den Nachbarknoten ab. Die Knotengleichungen können daher nicht mehr separat gelöst werden. Stattdessen muss für  $n$  Knoten ein Gleichungssystem mit  $n$  Gleichungen für  $n$  Unbekannte gelöst werden.

Eine Besonderheit bei der *Diskretisierung* der *Transportgleichung* mit einem *Gitterverfahren* ist die Bildung des *advektiven* Transportterms  $u \cdot c$  (Produkt aus *Abstandsgeschwindigkeit* und Konzentration, siehe Kapitel A1.2.1). Weil beispielsweise beim FD-Verfahren die Geschwindigkeiten zwischen den Zellen bekannt sind

(sie werden aus den Gradienten der berechneten *Piezometerhöhen* ermittelt), die Konzentrationen jedoch in der Zellmitte, ist eine eindeutige Zuordnung von Geschwindigkeit und Konzentration für den Advektionsterm nicht möglich. Viele Modelle bieten deshalb mehrere Kombinationsmöglichkeiten an. Bei der so genannten *upwind-Gewichtung* wird die Geschwindigkeit mit der Konzentration der im Oberstrom gelegenen Zelle multipliziert, bei der sog. *zentralen Gewichtung* mit dem arithmetischen Mittelwert der Konzentrationen der beiden benachbarten Zellen. Die Wahl des *Gewichtungsverfahrens* kann sich deutlich auf das Berechnungsergebnis auswirken (siehe Kapitel A2.2.2)

Die Unterschiede zwischen FD-Verfahren und FE-Verfahren können in Analogie zur Strömungsmodellierung betrachtet werden (siehe Kapitel A2.1.2, A2.1.3). Sie werden deshalb hier nicht mehr gesondert diskutiert.



### Prüfhinweise

- ✓ Gibt es eine Aussage zur räumlichen Gewichtung der Differenzenterme?

Die Anwendung eines *Gitterverfahrens* zur *Diskretisierung* der *Transportgleichung* führt, wie im Fall der Strömungsgleichung, bei impliziter *zeitlicher Diskretisierung* zu einem linearen Gleichungssystem. Allerdings sind die Koeffizientenmatrizen beim Stofftransport im Gegensatz zu denen bei der Grundwasserströmung nicht symmetrisch. Es kommen daher zwar zum Teil andere Gleichungslöser zur Anwendung, die grundsätzliche Vorgehensweise ist jedoch dieselbe (siehe Kapitel A2.1.4) und wird hier nicht mehr wiederholt.

*Gitterverfahren* sind relativ robuste Lösungsverfahren, die deshalb auch zur Simulation des Stofftransports weit verbreitet sind. Bei Einsatz eines *Gitterverfahrens* zur *Stofftransportsimulation* muss das Gitter aus der Strömungsmodellierung übernommen werden. Daher muss in diesem Fall bereits das Strömungsgitter den Anforderungen der Transportmodellierung genügen (z.B. hinsichtlich der räumlichen Auflösung). Das aktive Modellgebiet für den Stofftransport kann jedoch kleiner sein als das für die Grundwasserströmung.



#### Prüfhinweis

- ✓ *Welcher Gleichungslöser wird eingesetzt?*
- ✓ *Welche Konvergenzkriterien werden verwendet?*
- ✓ *Wurde die Massenbilanz überprüft?*

Der Nachteil der *Gitterverfahren* besteht darin, dass die *Diskretisierung* des Advektionsterms auf einem Gitter zu ungenauen oder fehlerhaften Lösungen führen kann (*numerische Dispersion* und *Oszillationen* der Lösung). Dies wird im folgenden Kapitel eingehender diskutiert.

### A2.2.2 Numerische Kriterien für Gitterverfahren

Das Phänomen der *numerischen Dispersion* lässt sich anschaulich am Beispiel einer scharfen Konzentrationsfront darstellen (siehe Abbildung 21). Diese verlässt zum Zeitpunkt  $t$  den Knoten 1 durch advektiven Transport. Nach dem Zeitschritt  $\Delta t$  erreicht die Front eine Position zwischen Knoten 1 und 2 (unteres Bild). Die *Diskretisierung* auf dem *Gitter* verlangt jedoch, dass der Wasserinhaltsstoff gleichmäßig über die gesamte Zelle 2 verteilt wird (die Gitterzelle ist die kleinste räumliche Einheit des Modells). Aus Gründen der Massenerhaltung muss die resultierende Konzentration in Zelle 2 daher kleiner sein als die ursprüngliche Konzentration an der Stofffront. In der Folge wird die Stofffront aufgeweitet, was einer zusätzlichen Vermischung entspricht. Dieser künstliche Vermischungsprozess wird *numerische Dispersion* genannt.

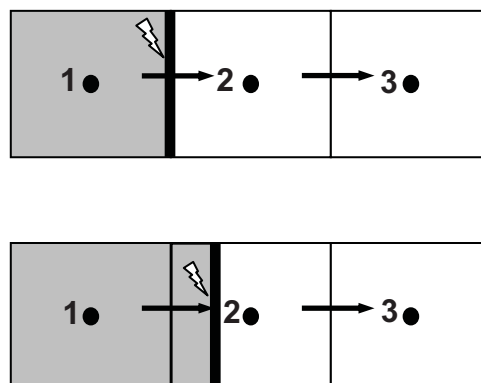


Abbildung 21: Schematische Darstellung der Ursachen *numerischer Dispersion*.

Das Kriterium zur Bewertung der *numerischen Dispersion* ist die dimensionslose *Gitter-PECLET-Zahl*  $Pe_g$ .

$$Pe_g = \frac{\Delta x}{\alpha_L} \quad \text{Gleichung A2-2}$$

mit  $\Delta x =$  Gitterweite  $L$   
 $\alpha_L =$  Längsdispersivität  $L$

Die *Gitter-PECLET-Zahl*  $Pe_g$  sollte immer kleiner gleich 2 sein. Dadurch wird der parabolische Charakter der Differentialgleichung hervorgehoben. Die *numerische Dispersion* wird dann klein gegen die „echte“ physikalische *Dispersion*. Bei gegebener *Dispersivität*  $\alpha_L$  (siehe Kapitel A1.2.3) ergibt sich aus dem *PECLET-Kriterium* ein Richtwert für die Gitterweite, der nicht überschritten werden sollte.

Eine weitere Möglichkeit, die *numerische Dispersion* zu verringern, besteht in der Wahl eines zentralen Differenzschemas im Raum (siehe Kapitel A2.2.1). Grundsätzlich sind zentrale Schemata genauer als *upwind-gewichtete* Differenzen. Allerdings kann ihre Anwendung zu unphysikalischen *Oszillationen* in der Lösung führen (sog. Über- und Unterschwinger). Dieser Effekt ist in Abbildung 22 verdeutlicht. Berechnet wurde der Transport eines nicht reaktiven Stoffes durch ein eindimensionales Gebiet. Die *Dispersion* wurde zu Null gesetzt, d.h. ohne *numerische Dispersion* sollte sich der Stoff in Form des dargestellten Rechteck-Pulses durch das Gebiet bewegen. Die obere Abbildung zeigt die Ergebnisse zu einem gegebenen Zeitpunkt bei Verwendung eines *upwind-gewichteten* Differenzschemas. Deutlich wird die starke künstliche Vermischung infolge *numerischer Dispersion*. Die untere Abbildung wurde mithilfe eines *zentral gewichteten* Differenzschemas erzeugt. Hier ist der Effekt der *numerischen Dispersion* geringer, dafür entstehen Über- und Unterschwinger der Lösung (*Oszillationen*).

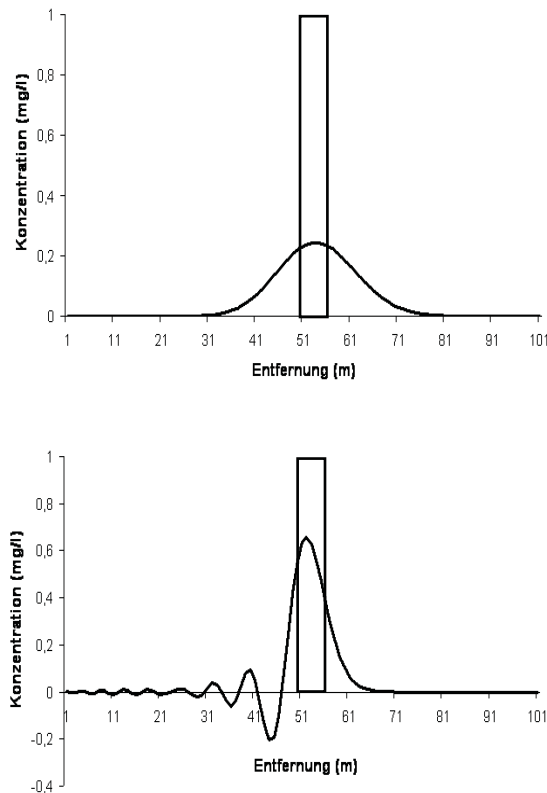


Abbildung 22: Auswirkungen von numerischer Dispersion und Oszillationen auf den Schadstofftransport.



*Oszillationen* zeigen eine unzureichende *Diskretisierung* zwar deutlicher auf als die *numerische Dispersion*, es ist allerdings zu bedenken, dass negative Konzentrationen beim Transport große numerische Probleme verursachen können, wenn zusätzlich chemische *Reaktionen* berechnet werden sollen.

Eine weitere dimensionslose Kenngröße zur Beschreibung der *Diskretisierung* in *Gitterverfahren* ist die *Courant-Zahl*  $Co$ :

$$Co = \left| \frac{u \Delta t}{\Delta x} \right| \quad \text{Gleichung A2-3}$$

mit  $u = v_a = \text{Abstandsgeschwindigkeit L/T}$   
 $\Delta t = \text{zeitliche Schrittweite T}$   
 $\Delta x = \text{Gitterweite L}$

Die *Courant-Zahl* ist das Verhältnis zwischen der Schrittweite des *advektiven* Transports und der *Gitterweite*. Bei einer expliziten *zeitlichen Diskretisierung* muss die *Courant-Zahl* immer kleiner 1 sein, d.h. beim advektiven Transportschritt darf keine Zelle übersprungen werden. Nichteinhaltung dieses Kriteriums führt in diesem Fall zum Abbruch des Rechenprogramms. Eine implizite *zeitliche Diskretisierung* erlaubt zwar grundsätzlich größere *Courant-Zahlen*, allerdings erhöhen diese die Auswirkungen der *numerische Dispersion* bzw. der *Oszillationen*.

In Analogie zur *Gitter-Peclet-Zahl*, mit deren Hilfe ein Richtwert für die maximale *Gitterweite* abgeleitet werden kann, ergibt sich aus der Einhaltung des *Courant-Kriteriums* bei vorgegebener *Gitterweite* ein Richtwert für die maximale *zeitliche Schrittweite*. Der Modell Anwender ist daher bei der Festlegung der räumlichen und *zeitlichen Diskretisierung* stärker eingeschränkt als bei der reinen Strömungsmodellierung.



#### Prüfhinweis

- ✓ Wurden die Einhaltung des Peclet- und Courant-Kriteriums diskutiert?
- ✓ Wurde der Einfluss numerischer Dispersion oder von Oszillationen abgeschätzt?

Als generelle Regel kann man festhalten, dass der Einfluss von *numerischer Dispersion* und *Oszillationen* gering gehalten werden kann, wenn das *Gitter-PECLET-Kriterium* erfüllt ist ( $Pe_g < 2$ ). Außerdem sollte auch in impliziten Schemata das *COURANT-Kriterium* eingehalten werden ( $Co < 1$ ). Dies ist in der Praxis nicht immer möglich. Man sollte sich aber des dadurch entstehenden Fehlers bewusst sein. Beispielsweise werden steile Konzentrationsgradienten, wie sie an Schadstofffronten auftreten können, dann nicht immer befriedigend nachgebildet.

### A2.2.3 Charakteristiken-Verfahren (Lagrange-Verfahren)

*Charakteristiken-Verfahren* zeichnen sich durch eine sehr gute Nachbildung des Advektionsterms aus, es können sich jedoch Schwierigkeiten bei der *Simulation* des Dispersionssterms ergeben.

Ein Beispiel für ein *Charakteristiken-Verfahren* ist das *MOC-Verfahren* (Method of Characteristics). Es verwendet eine sog. *particle-tracking-Technik* zur Lösung des Advektionsterms. Dabei wird zu Beginn der Simulation eine größere Zahl virtueller Partikel im Modellgebiet entweder zufällig oder mit einer festen Ordnung verteilt. Jedem dieser Partikel sind eine Position und eine Konzentration zugeordnet, d.h. ein Partikel repräsentiert die Schadstoff-

konzentration in seiner Umgebung. Die Bewegung der Partikel im Modellgebiet wird dann mithilfe der im Rahmen der Strömungsmodellierung ermittelten Geschwindigkeitsverteilung beschrieben.

In Abbildung 23 wird beispielhaft dargestellt, wie sich eine Anzahl von Partikeln in einem Zeitschritt im Modellgebiet bewegen. Die schwarzen Rechtecke symbolisieren die Startpositionen der Partikel zu Beginn des Zeitschritts, die weißen Rechtecke die Positionen am Ende des Zeitschritts. Die Punkte sind die Mitten der Zellen des Strömungsgitters.

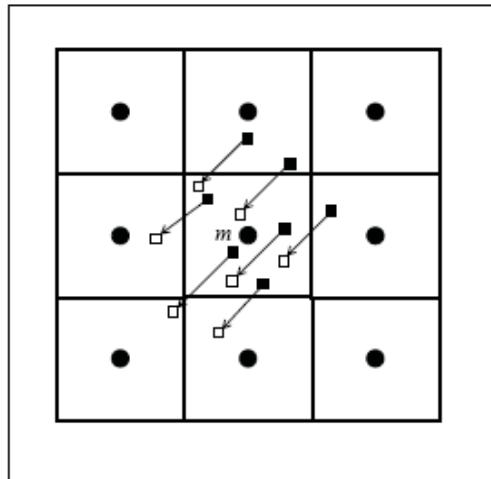


Abbildung 23: Bewegung von Partikeln beim MOC-Verfahren (aus ZHENG UND WANG, 1999).

Nachdem die neuen Positionen aller Partikel am Ende des Zeitschritts bestimmt wurden, wird für jede Gitterzelle die Konzentration als Mittelwert aller in der Zelle befindlichen Partikelkonzentrationen berechnet. Auf der Basis dieser Zellkonzentrationen wird dann der dispersiv/diffusive Stofftransport auf dem Gitter des Strömungsmodells berechnet (z.B. mit einem Finite-Differenzen-Verfahren). Die dispersiv/diffusiven Konzentrationsänderungen werden schließlich den Konzentrationen der einzelnen Partikel in der jeweiligen Zelle hinzugezählt, bzw. (bei einer Verringerung der Konzentration) von diesen abgezogen. Diese Vorgehensweise wird für jeden Zeitschritt wiederholt.

Der Vorteil des MOC-Verfahrens ist, dass es im Wesentlichen frei von *numerischer Dispersion* ist (siehe Kapitel A2.2.2). Die Behandlung des advektiven Transports mit einem Partikelverfahren gewährleistet beispielsweise, dass scharfe Konzentrationsfronten erhalten bleiben, unabhängig davon, an welcher Position des Strömungsgitters sie sich befinden. Allerdings ist insbesondere in drei Raumdimensionen ein erheblicher Speicher- und Verwaltungsaufwand für die Partikel notwendig. Außerdem garantiert das MOC-Verfahren keine lokale Massenerhaltung, denn infolge der künstlichen Aufspaltung des Transportschritts in einen advektiven und in einen dispersiv/diffusiven Teilschritt und des ständigen Wechsels zwischen dem Partikelverfahren für die *Advektion* und dem Gitterverfahren für die *Diffusion* und *Dispersion* kann es bei dieser Methode zeitweise zu Fehlern in der Massenbilanz kommen.



#### Prüfhinweis

- ✓ Ist das verwendete Charakteristiken-Verfahren beschrieben?
- ✓ Wurde der Einfluss lokaler Massenbilanzfehler diskutiert?

## A2.2.4 Random-Walk-Verfahren

Ein weiterer Vertreter der Partikelmethode ist das *Random-Walk-Verfahren*. Es stammt aus der statistischen Physik und ist ein reines *particle-tracking-Verfahren*. Ebenso wie beim advektiven Teilschritt des zuvor beschriebenen *MOC-Verfahren* wird der Stofftransport mit Hilfe von Partikeln beschrieben, die sich in einem Strömungsfeld bewegen. Dieses Strömungsfeld erhält man wiederum aus der vorgeschalteten Lösung des Strömungsproblems. Die Bewegung im Strömungsfeld beschreibt zunächst nur den rein advektiven Transport, sie zeichnet also die Bahnlinien nach.

Die Beschreibung des dispersiv/diffusiven Transports mit dem *Random-Walk-Verfahren* basiert darauf, dass die analytische Lösung der *Transportgleichung* eine sog. Gauß-Verteilung darstellt und damit formal verwandt ist mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer Normalverteilung.

Die Verteilung der Partikel zu einem bestimmten Zeitpunkt kann daher als Normalverteilung (Gaußverteilung) angesehen werden. Die mittlere advektive Bewegung der Partikel entspricht dann dem Mittelwert der Normalverteilung, die *diffusiv/ dispersiv/diffusive* Bewegung kann als Streuung um den Mittelwert entsprechend einer Standardabweichung interpretiert werden.

Die Vorgehensweise beim *Random-Walk-Verfahren* besteht darin, dass zunächst an einer oder mehreren Stellen im Modellgebiet (z.B. an Schadstoffherden) Partikel mit einer gegebenen Anfangsmasse gestartet werden. Der Weg, den ein einzelnes Partikel innerhalb eines Zeitschritts zurücklegt, ergibt sich dann aus der Kombination eines advektiven Schritts entlang einer Bahnlinie des Strömungsmodells und eines mit einem Zufallsgenerator erzeugten dispersiv/diffusiven Schritts. Aus der Überlagerung vieler Partikel, die nach dieser Vorschrift im Modellgebiet bewegt werden, ergibt sich eine Partikelwolke, die die gewünschte mittlere advektive Bewegung und die Verbreiterung entsprechend der vorgegebenen Diffusions- und Dispersionskoeffizienten aufweist.

Abbildung 24 zeigt die Funktionsweise des *Random-Walk-Verfahrens* anhand einer Berechnung zur Ausbreitung eines kurzzeitigen Schadstoffeintrags. Zur Generierung einer Konzentrationsverteilung könnten die Partikel beispielsweise auf dem hellgrau hinterlegten Strömungsgitter ausgezählt werden (Gitterweite 10 m x 10 m).

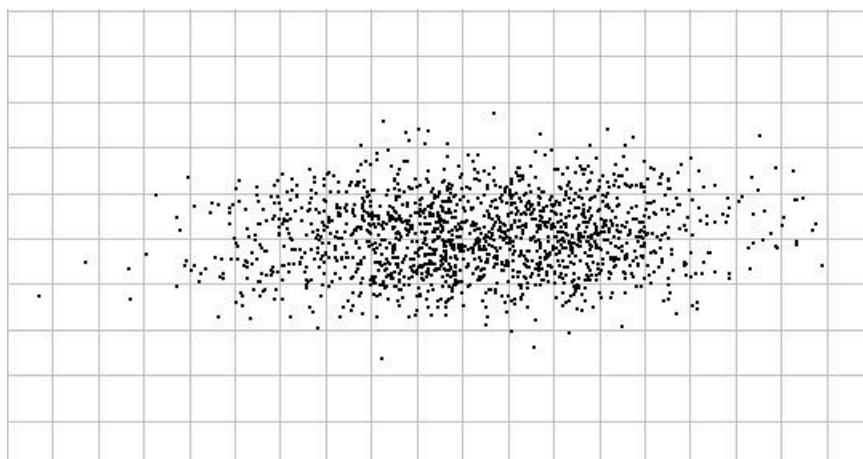


Abbildung 24: Beispiel für eine mit dem *Random-Walk-Verfahren* berechnete Partikelverteilung

Um aus der berechneten Partikelverteilung eine Konzentrationsverteilung bestimmen zu können, muss über ein bestimmtes Raumvolumen im Modellgebiet gemittelt werden. Üblicherweise wird zur Mittelung das Gitter aus der Strömungsberechnung verwendet. Grundsätzlich ist das *Random-Walk-Verfahren* jedoch unabhängig vom *Modellgitter* der Strömungsberechnung. Dies unterscheidet es vom *Charakteristiken-Verfahren*, bei dem zwar der advective Teilschritt gitterunabhängig berechnet wurde, der dispersiv/diffusive Teilschritt aber auf einem Gitter diskretisiert wurde. Die kleinste darstellbare Konzentration ergibt sich, wenn sich ein einziger Partikel in einer Zelle aufhält (Konzentration = Masse des Partikels geteilt durch das Wasservolumen in der Zelle).

Das *Random-Walk-Verfahren* bietet eine Reihe von Vorteilen. Es ist eine robuste Methode, die auf jedes Strömungsmodell aufgesetzt werden kann. Es liefert keine künstliche Vermischung oder *Oszillationen*, es ist lokal und global massenerhaltend, und der benötigte Speicherplatz ist relativ gering. Den Vorteilen der Methode stehen einige Nachteile gegenüber.

Die Entkopplung von Partikel- und Wasserbewegung infolge des dispersiv/diffusiven Zufallsschritts führt letztlich dazu, dass die Bewegung eines einzelnen Partikels erratisch ist, und dass erst die Betrachtung einer Vielzahl von Partikeln ein interpretierbares Bild liefert. Gerade am Rand von Schadstofffahnen, wo sich typischerweise relativ wenige Partikel befinden, werden dadurch raue Konzentrationsverteilungen produziert, an die sich der Betrachter erst gewöhnen muss. Da zur Berechnung möglichst glatter Konzentrationsverteilungen sehr viele Teilchen notwendig sind, kann der Rechenzeitbedarf groß werden.



#### Prüfhinweis

- ✓ Ist die kleinste darstellbare Konzentration aufgeführt?
- ✓ Wird der Einfluss der Zufallsbewegung auf die berechneten Konzentrationen diskutiert?

### A2.2.5 Vergleich der Diskretisierungsverfahren

Keines der zuvor vorgestellten Verfahren zur *Stofftransportsimulation* ist den anderen unter allen Umständen und in jeder Hinsicht überlegen (dies erklärt auch ihre Koexistenz). Vielmehr ist die Frage nach dem optimalen Verfahren sehr problemspezifisch bzw. fallspezifisch zu beantworten, d.h. je nach Randbedingungen, Rechnerleistung und Anforderungen an die Ergebnisse kann sich jeweils ein anderes Verfahren als angemessen herausstellen.

Mit der Zeit wird sich beim Benutzer zwar typischerweise eine Vorliebe für eines der Verfahren herausbilden, und in den verbreiteten Simulationsmodellen wird jeweils auch nur eine begrenzte Anzahl von Methoden zur Verfügung gestellt, dennoch sollte man bei der Bearbeitung eines Transportproblems immer auch die grundsätzliche Tauglichkeit des verwendeten Verfahrens überprüfen. Im Folgenden sind die wichtigsten Vor- und Nachteile der einzelnen Verfahren stichwortartig zusammengestellt:



#### Prüfhinweis

- ✓ Wurde die Wahl des Diskretisierungsverfahrens begründet?

### Explizite Zeit-Diskretisierung

- + : geringer Speicherplatzbedarf
- : kleine Zeitschrittweiten erforderlich

### Implizite Zeit-Diskretisierung

- + : große Zeitschrittweiten sind möglich, dadurch verringert sich der Rechenaufwand
- : bei entsprechend hoher Knotenzahl können sehr große Gleichungssysteme entstehen

### Finite-Differenzen-Verfahren (FD)

- + : leicht verständliche Methode, Massenerhaltung gewährleistet
- : starre Modellgeometrie (Rechteck-Raster), lokale Verfeinerung nur bedingt möglich, *numerische Dispersion* oder *Oszillationen* treten auf

### Finite-Elemente-Verfahren (FE)

- + : sehr flexible Modellgeometrien realisierbar, lokale Verfeinerung und Gitteradaption möglich, Massenerhaltung gewährleistet
- : Generell aufwändiger als *Finite-Differenzen-Verfahren*, Probleme mit Rechengitter bei *anisotropen/komplexen Aquifergeometrien*, *numerische Dispersion* oder *Oszillationen* treten auf

### Charakteristiken-Verfahren (MOC)

- + : keine *numerische Dispersion* oder *Oszillationen*
- : Massenerhaltung nicht immer gewährleistet, Speicher- und Verwaltungsaufwand für Partikel kann sehr groß werden

### Random-Walk-Verfahren (RW)

- + : Frei von *numerischer Dispersion* oder *Oszillationen*, Massenerhaltung gewährleistet
- : teilweise Entkopplung von Partikel- und Wasserbewegung, dadurch nicht interpretierbare Konzentrationen z.B. am Rand von Stofffahnen

Die Entwicklung numerischer Verfahren zur Simulation des Stofftransports ist noch nicht abgeschlossen. Es ist daher zu erwarten, dass in Zukunft immer leistungsfähigere Verfahren zum Einsatz kommen, mit denen dann ein möglichst großes Spektrum von Modell Anwendungen abgedeckt werden kann. Die duale Natur der *Transportgleichung*, die aus ihrer Kombination aus parabolischem und hyperbolischem Anteil resultiert, wird es aber immer erfordern, dass der Modellanwender die Tauglichkeit des von ihm verwendeten Verfahrens für den jeweiligen Anwendungsfall im Auge hat. Bei der Strömungsmodellierung tauchen Probleme dieser Art in der Regel nicht auf.



## A2.2.6 Kopplung zwischen Transport- und Reaktionsprozessen

Die Terme für die *Retardierung* und den *Abbau erster Ordnung* (siehe Kapitel A1.2.4) können direkt in die *Transportgleichung* eingebaut werden. So unterscheidet sich die Gleichung für den retardierten Stofftransport nur im *Retardierungsfaktor*  $R$  von der Gleichung für den rein advektiv/dispersiven Transport, und der Abbaubauern wird der rechten Seite der *Transportgleichung* hinzugefügt:

$$R \frac{\partial(c)}{\partial t} = -\nabla(uc) + \nabla(D \nabla c) + \sigma - \lambda c \quad \text{Gleichung A2-4}$$

mit	$c$	=	Stoffkonzentration $M/L^3$
	$t$	=	Zeit $T$
	$u$	=	Abstandsgeschwindigkeit $L/T$
	$D$	=	Diffusions-/Dispersionskoeffizient $L^2/T$
	$\nabla$	=	Nabla-Operator in drei Dimensionen ( $\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z$ )
	$\sigma$	=	Externer Quell/Senkenterm $M/L^3/T$
	$R$	=	Retardierungsfaktor -
	$\lambda$	=	Abbaurrate $1/T$

Da beide Reaktionsterme linear sind, kann die *Transportgleichung* auch unter Einbeziehung einer *Retardierung* und eines *Abbaus erster Ordnung* mit den zuvor vorgestellten *Diskretisierungs-* und *Lösungsverfahren* für lineare Gleichungen behandelt werden. Bei den *Gitterverfahren (Finite-Differenzen, Finite-Elemente)* wird der Abbaubauern einfach der rechten Seite hinzugefügt und dann werden alle Terme durch  $R$  dividiert. Bei den *Charakteristiken-Verfahren* wird die *Retardierung* für die *Advektion* über eine entsprechend verringerte Partikelgeschwindigkeit berücksichtigt. Da die übrigen Transportvorgänge beim *Charakteristiken-Verfahren* mit einem *Gitterverfahren* simuliert werden, können *Retardierung* und *Abbau erster Ordnung* in der zuvor beschriebenen Weise behandelt werden.

Auch beim *Random-Walk-Verfahren* wird die Auswirkung der *Retardierung* auf den advektiven Transport in Form einer reduzierten Partikelgeschwindigkeit berücksichtigt. Eine chemische Reaktion erster Ordnung wird üblicherweise so implementiert, dass sich die Schadstoffmassen der Partikel gemäß der Kinetik der Reaktion erster Ordnung mit der Zeit verringern.

Anstelle einer einzigen *Transportgleichung*, wie sie beim Transport einer einzelnen Substanz gelöst werden muss, erfordern *Multispeziesmodelle* die simultane Lösung der reaktiven *Transportgleichung* für alle beteiligten Spezies. Dies führt zu einem Gleichungssystem, das aus Differentialgleichungen (z.B. des advektiv/dispersiven Transports) und algebraischen Ausdrücken (z.B. aus den Gleichgewichtsreaktionen) zusammengesetzt ist. Die Lösung dieses Systems in einem einzigen Schritt ist numerisch aufwändig. Einfacher ist es, Transport- und Reaktionsberechnung zu trennen ("operator splitting", *Mehrschritt-Verfahren*). Die gekoppelte *Transportgleichung* entsteht dann als Summe aus den Teilgleichungen für den physikalischen Stofftransport und für die geochemischen Umsetzungen.

Das ursprüngliche *Mehrschritt-Verfahren* führt zu einer zusätzlichen numerischen Ungenauigkeit, da Transport und Reaktion künstlich entkoppelt wurden. Dieser zusätzliche numerische Fehler kann durch Iteration zwischen den beiden Teilgleichungen minimiert werden („sequential iterative approach“). Die Lösung der Gleichungssysteme muss der Anzahl der Iterationen



### Prüfhinweis

- ✓ Wurde im Falle eines Zweischrittverfahrens der numerische Fehler abgeschätzt?

entsprechend wiederholt werden. Mit zunehmender Anzahl von Iterationen nähern sich die Konzentrationsänderungen, die in den beiden Teilgleichungen berechnet werden, einander an und konvergieren gegen die Lösung des Problems, die das Einschritt-Verfahren liefern würde. Vor- und Nachteile der Zweischritt-Verfahren werden u.a. in VALOCCHI & MALMSTEAD (1992), MORSHED & KALUARACHCHI (1995) und SAALTINK ET AL. (2001) diskutiert.

Ein iteratives Zweischrittverfahren kann sehr rechenintensiv und damit sehr zeitaufwändig werden. Praktisch geht man bei der Anwendung eines entsprechenden *Multispeziesmodells* daher häufig so vor, dass bei der *Modellkalibrierung* zunächst ohne Iteration gearbeitet wird. Der Modellierer sollte dann aber überprüfen, dass der dadurch entstehende numerische Fehler gering ist. Andernfalls muss entweder der Zeitschritt verringert oder ständig ein iteratives Zweischrittverfahren verwendet werden.

### A2.2.7 Anfangs- und Randbedingungen

Wie im Fall der Strömungsgleichung sind auch zur Lösung der Differenzialgleichungen des Stofftransports *Anfangs-* und *Randbedingungen* erforderlich.

Während bei reinen Strömungsproblemen häufig *stationäre* Lösungen ausreichend bzw. angemessen sind, wird die Simulation des Stofftransports in aller Regel ein *instationäres* Problem darstellen. Dadurch gewinnt die Bereitstellung realistischer *Anfangsbedingungen* große Bedeutung. Die Möglichkeiten zur Festlegung der *Anfangsbedingungen* wurden im Kapitel A2.1.5 diskutiert.

Bei den *Randbedingungen* können, wie bei der Strömungsmodellierung (siehe Kap. A2.1.6), wieder formal drei Arten unterschieden werden:

- *Randbedingung 1. Art* (DIRICHLET-Typ): *Festkonzentration*, hierbei wird die Konzentration in der Zelle fest vorgegeben.
- *Randbedingung 2. Art* (NEUMANN-Typ): Vorgabe des diffusiv/dispersiven Flusses. Diese *Randbedingung* ist vor allem an Rändern interessant, die für die Strömung undurchlässig sind. In den meisten Modellen wird der diffusiv/disperse Fluss an solchen Strömungsrändern (z.B. entlang von Bahnlinien) vereinfachend zu Null gesetzt. Dadurch entsteht auch für den Stofftransport ein völlig undurchlässiger Rand.
- *Randbedingung 3. Art* (CAUCHY-Typ): Vorgabe der gesamten Stofffracht. In vielen Programmen wird diese *Randbedingung* entweder mithilfe eines Brunnens und einer Infiltration von Wasser mit vorgegebener Konzentration oder mithilfe eines direkten Stoffeintrags ohne Wasserfluss realisiert.

Eine Besonderheit bei der *Transportmodellierung* stellt der Abstromrand der Grundwasserströmung dar. Hier ist zunächst nur der advective Stoffaustrag bekannt, während der diffusiv/disperse Austrag nicht direkt berechnet werden kann, da der Konzentrationsgradient über den Rand hinweg nicht bekannt ist. Bei vielen Modellen wird hier automatisch eine sog. *Transmissions-Randbedingung* gewählt. Dabei wird der letzte bekannte



#### Prüfhinweise

- ✓ Welche Arten von *Randbedingungen* werden verwendet?
- ✓ Werden die berechneten Konzentrationen durch *Stromlinienränder* oder *Abstromränder* beeinflusst?

Gradient über den Rand hinaus extrapoliert, sodass der diffusiv/dispersive Fluss über den Rand dem diffusiv/dispersiven Zufluss in die Randzelle hinein entspricht (siehe Abbildung 25).

Die vereinfachenden Annahmen zum diffusiv/dispersiven Transport an einem Bahnlinsenrand der Strömung und am Abstromrand des Modells können die berechneten Konzentrationsverteilungen verfälschen. Bei der Simulation des Schadstofftransports sollte das Modellgebiet daher so groß gewählt werden, dass die Schadstofffahne möglichst nicht seitlich an einen Stromlinienrand anstößt und dass der Abstromrand weit genug vom relevanten Fahnenbereich entfernt liegt.

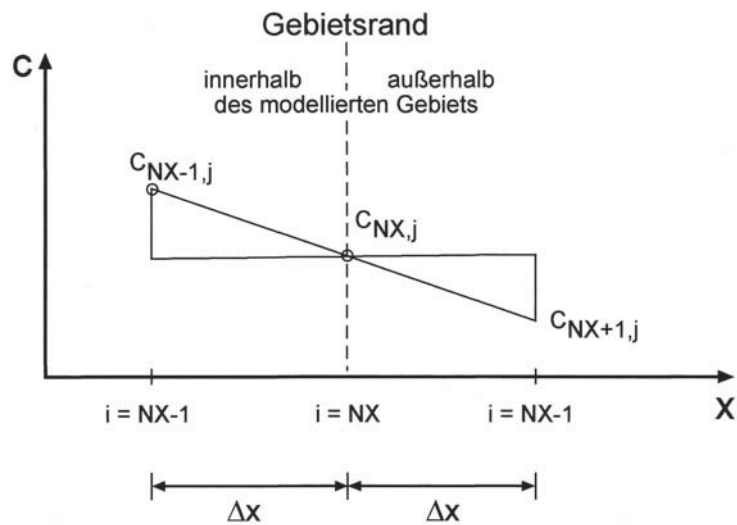


Abbildung 25: Umsetzung der *Transmissions-Randbedingung* an einem Ausstromrand des Transportmodells (aus RAUSCH et al., 2002)

## A3 Hinweise zur Ausschreibung und Vergabe von Grundwassermodellen

Die bei der Erstellung eines *hydrogeologischen Modells* und eines nachfolgenden *numerischen Grundwassermodells* durchzuführenden Arbeiten sind ebenso wie alle gutachtlichen Leistungen geistig-schöpferischer Natur, die im Rahmen einer freiberuflichen Tätigkeit erbracht werden. Diese Leistungen, die im Regelfall nicht eindeutig und erschöpfend in Leistungsverzeichnissen beschrieben werden können, lassen sich daher nicht mit Bauleistungen oder sonstigen Lieferleistungen vergleichen.

Für die Vergabe derartiger Leistungen ist oberhalb der Schwellenwerte die Verdingungsordnung für freiberufliche Leistungen (VOF) anzuwenden.

Das Vergabeverfahren sieht in diesen Fällen ein Verhandlungsverfahren mit mehreren Bewerbern und mit vorausgehender Vergabebekanntmachung und Teilnahmewettbewerb vor. Für die Entscheidung über die Auftragserteilung sind neben dem Preis/Honorar fachliche Kriterien mit zu berücksichtigen.

Werden die EU-Schwellenwerte nicht erreicht, sind von öffentlichen Auftraggebern die Vergabegrundsätze für Gemeinden (GV) nach §25 Gemeindehaushaltsverordnung (Kommunale Vergabegrundsätze) - Runderlass des Innenministeriums v. 22.03.2006 - zu beachten. Für die Vergabe von Leistungen unterhalb des Schwellenwertes der VOF ist demnach kein formelles Vergabeverfahren vorgesehen, es kann jedoch ähnlich verfahren werden.

Grundsätzlich gilt hier, dass analog der Honorarordnung für Architekten und Ingenieure (HOAI) die Leistungen nicht einem Preiswettbewerb auszusetzen sind und freihändig, nach Verhandlung mit nur einem Bieter, vergeben werden können.

In beiden Fällen oberhalb und unterhalb des Schwellenwertes kann die Vergabe durch einen Ideenwettbewerb oder durch Leistungsverzeichnisse erfolgen.

Ein Ideenwettbewerb kommt in Betracht bei komplexen Standortbedingungen, wenn keine standardisierte Vorgehensweise möglich ist und Modellierungsschritte nicht im einzelnen vorgegeben werden können.

Hierbei werden vorab alle in Betracht kommenden Bieter ausgewählt und zur Teilnahme aufgefordert. Es wird die vorgeschlagene konzeptionelle Vorgehensweise aus fachlicher Sicht - getrennt vom Kostenangebot - bewertet. Nach Auswahl des tragfähigsten Konzeptes ist das Angebot hinsichtlich seiner wirtschaftlichen Angemessenheit zu prüfen, ggf. darüber zu verhandeln und der Auftrag dann freihändig zu erteilen.

Wie beim förmlichen VOF-Auswahlverfahren kann die Vergabeentscheidung aber auch durch einen vorab festgelegten Bewertungsschlüssel, der sowohl alle fachlichen Aspekte als auch den Angebotspreis berücksichtigt, transparent gemacht werden.

Aufgrund des mit der Aufstellung eines solchen Konzeptes verbundenen erheblichen Aufwands sollte grundsätzlich immer eine angemessene Teilnahmevergütung vorgesehen werden.

Voraussetzung für einen erfolgreichen Ideenwettbewerb sind aussagekräftige Standortunterlagen. Je ausführlicher die Erkundung des Altlastenstandortes erfolgt ist, und je fortgeschrittener die Erkenntnisse zur Analyse des hydrogeologischen Systems ausfallen, desto sicherer kann der für den Aufbau eines Grundwassermodells erforderliche Aufwand abgeschätzt werden. Insofern kann es sinnvoll sein, den Aufbau des hydrogeologischen Modells als Synopse der Systemanalyse in einem getrennten Schritt unabhängig mit deutlichem zeitlichen Vorlauf zur numerischen Modellierung zu vergeben.

Neben aussagekräftigen Standortdaten ist die Formulierung einer konkreten Aufgabenstellung eine unabdingbare Grundvoraussetzung für einen Ideenwettbewerb.

Leistungsverzeichnisse können dann zur Anwendung kommen, wenn ähnliche Fälle in gleichartig gelagertem Umfeld standardisiert zu modellieren sind und auf Erfahrungen mit bereits vorliegenden Modellen zurückgegriffen werden kann. Bei der Auswahl des Bewerbers sind in diesem Fall aber auch noch fachliche Aspekte zu berücksichtigen, so dass nicht nur die Wirtschaftlichkeit des Angebotes für die Wahl entscheidend ist.



## A4 Anwendungsbeispiele

Nachfolgend werden drei Anwendungsbeispiele vorgestellt. Ziel ist es, das Anwendungsspektrum von Grundwassermodellen im Rahmen der Altlastenbearbeitung aufzuzeigen.

Bei den ersten beiden Anwendungsbeispielen wird gezeigt, wie Grundwassermodelle genutzt werden können, Messergebnisse besser interpretieren zu können, auf diese Weise das Prozessverständnis zu erweitern und ggf. das Konzept des numerischen Modells weiter zu entwickeln.

Im dritten Beispiel wird ein komplexes Modell eines urbanen Gebietes mit sich überlagernden Schadstofffahnen vorgestellt.

### A4.1 Anwendungsbeispiel 1: Schwermetallbelasteter Abstrom einer Halde

#### A4.1.1 Situation

Im Rahmen der Gefährdungsabschätzung eines ehemaligen Industriestandortes wurde eine *numerische Grundwasserströmungs- und Stofftransportmodellierung* durchgeführt. In diesem Anwendungsbeispiel wird ein Teilaspekt dieses am Rhein gelegenen Standortes näher diskutiert.

Eine ehemalige Geländevertiefung wurde durch schwermetallhaltige Industrieabfälle verfüllt und aufgehaldet. In einer Abstrommessstelle werden u.a. signifikante Cadmiumgehalte festgestellt. Der überwiegende Anteil der Aufhaltung befindet sich in der ungesättigten Bodenzone. Das Haldentieftste wird bei hohen Grundwasserständen von Grundwasser eingestaut und temporär durchströmt.

Die Aufgabenstellung zu diesem Detailaspekt des Standortes lautete:

- Ermittlung der Häufigkeit und Dauer des Einstaus in der Verfüllung
- Nachvollziehen der Emissionsdynamik anhand der Konzentrationszeitreihe der Abstrommessstelle
- Prüfen des *konzeptionellen Standortmodells*

Die Grundlagendaten für das numerische Modell basieren auf den in Tabelle 8 aufgelisteten Quellen.

Tabelle 8: Herkunft der Grundlagendaten für das numerische Modell.

<b>Einflussgröße</b>	<b>Herkunft</b>
Aquifergeometrie	Bohrprofile, Hydrologisches Kartenwerk
Hydraulische Durchlässigkeit	Pumpversuchsauswertungen
Grundwasserneubildung	Wetterdaten, Bodenwasserbilanzmodell
Grundwasserentnahmen	Betriebsdaten der Betreiber
effektive Porosität	Abgeschätzt aus speicherwirksamer Porosität
Dispersivität	Anpassung im Rahmen der Modellkalibrierung
Schadstoffquellen	Vorgaben des AG (basierend auf chemischer Analytik)
Sorption	Schätzung auf Basis theoretischer Ableitung

### A4.1.2 Das Hydrogeologische Modell

Der *Grundwasserleiter* besteht aus rund 20 m mächtigen quartären sandig kiesigen Ablagerungen des Rheins mit einer hohen Wasserdurchlässigkeit. Das Liegende bilden bindige tertiäre Ablagerungen, die aufgrund ihrer geringen Durchlässigkeit nicht weiter betrachtet werden müssen. Der *Grundwasserleiter* wird überlagert von bindigen Deckschichten. Hierbei handelt es sich um Hochflutablagerungen des Rheins. Jüngstes Schichtglied ist im *Aussagegebiet* eine flächendeckend vorliegende anthropogene Auffüllung.

Die urban-industrielle Geländeoberfläche überprägt die natürliche Geländemorphologie, die in der Nähe des Rheins charakterisiert ist von flachen ehemaligen Hochflutflächen und rinnenartigen Vertiefungen in den Hochflutlehmen, die Hochwasserabflussrinnen darstellen. Bereichsweise kann in solchen Rinnen der Hochflutlehm vollständig ausgeräumt sein, an anderen Stellen gaben postglaziale Stillwasserablagerungen Anlass zum Abbau von Ziegelton, die dazu führten, dass der *Grundwasserleiter* heute lokal begrenzt keine schützende Deckschicht aufweist (siehe Abbildung 26).

Die in Rede stehende Verfüllung wurde in einer solchen Geländedepression angelegt. Anhand von Bohrungen ist nachgewiesen, dass die schadstoffhaltigen Ablagerungsmassen im Bereich eines solchen Fensters im Hochflutlehm liegen und daher bei sehr hohen Grundwasserständen in unmittelbarem Kontakt mit dem Grundwasser stehen können. Bei niedrigen Grundwasserständen kann eine Emission von Schadstoffen über die ungesättigte Sickerwasserströmung in das Grundwasser präferenziert im Bereich dieser Fehlstelle erfolgen.

Der regionale Grundwasserstrom ist in Richtung Nordost orientiert, senkrecht zum regionalen Vorfluter Rhein. Bei Hochwasser bzw. allgemein bei steigenden Rheinwasserständen wird das landseitige Grundwasser temporär rückgestaut und in Flussnähe kommt es zu einer Umkehr der Grundwasserfließrichtung. Flusswasser infiltriert dann in den *Grundwasserleiter*. Rückstau und Infiltration führen zu einem Anstieg der ungespannten Grundwasseroberfläche. Mit Erreichen der bindigen Deckschicht geht die *freie Grundwasseroberfläche* in eine *gespannte Grundwasseroberfläche* über, deren Druckhöhe bereichsweise artesische Verhältnisse annehmen kann. Die Reichweite der Fließrichtungsumkehr und das Ausmaß des Grundwasseranstiegs sind abhängig von der Dauer und der Höhe der Flusswasserspiegelschwankung.

Die Grundwasserstandsaufzeichnungen des Standortes zeigen entsprechend eine ausgeprägte Dynamik, anhand derer die zuvor erläuterten Verhältnisse gut nachvollzogen werden können. Aus der Aufgabenstellung und der Analyse des *hydrogeologischen Systems* geht unmittelbar hervor, dass eine *instationäre* Strömungsmodellierung erforderlich ist. Aufzeichnungen von Brunnenanlagen aus der Umgebung können zur *Kalibrierung* herangezogen werden.

Pumpversuche in Kombination mit Flowmetermessungen in vollkommen ausgebauten Grundwassermessstellen belegen eine charakteristische Gliederung des quartären *Grundwasserleiters*. Das untere Drittel weist einen etwa fünffach höheren *Durchlässigkeitsbeiwert* auf als der hangende Abschnitt. Aufgrund dieses Durchlässigkeitskontrastes ist eine 3D Simulation fachlich geboten, da eine *Stofftransportsimulation* vorgesehen ist. Zu beachten ist jedoch in diesem Zusammenhang, dass das zur Verfügung stehende Messstellennetz ausschließlich aus vollkommen verfilterten Messstellen besteht und keine vertikal differenzierten historischen Daten vorliegen.

Die Abbildung 26 veranschaulicht zusammenfassend die Standortverhältnisse.

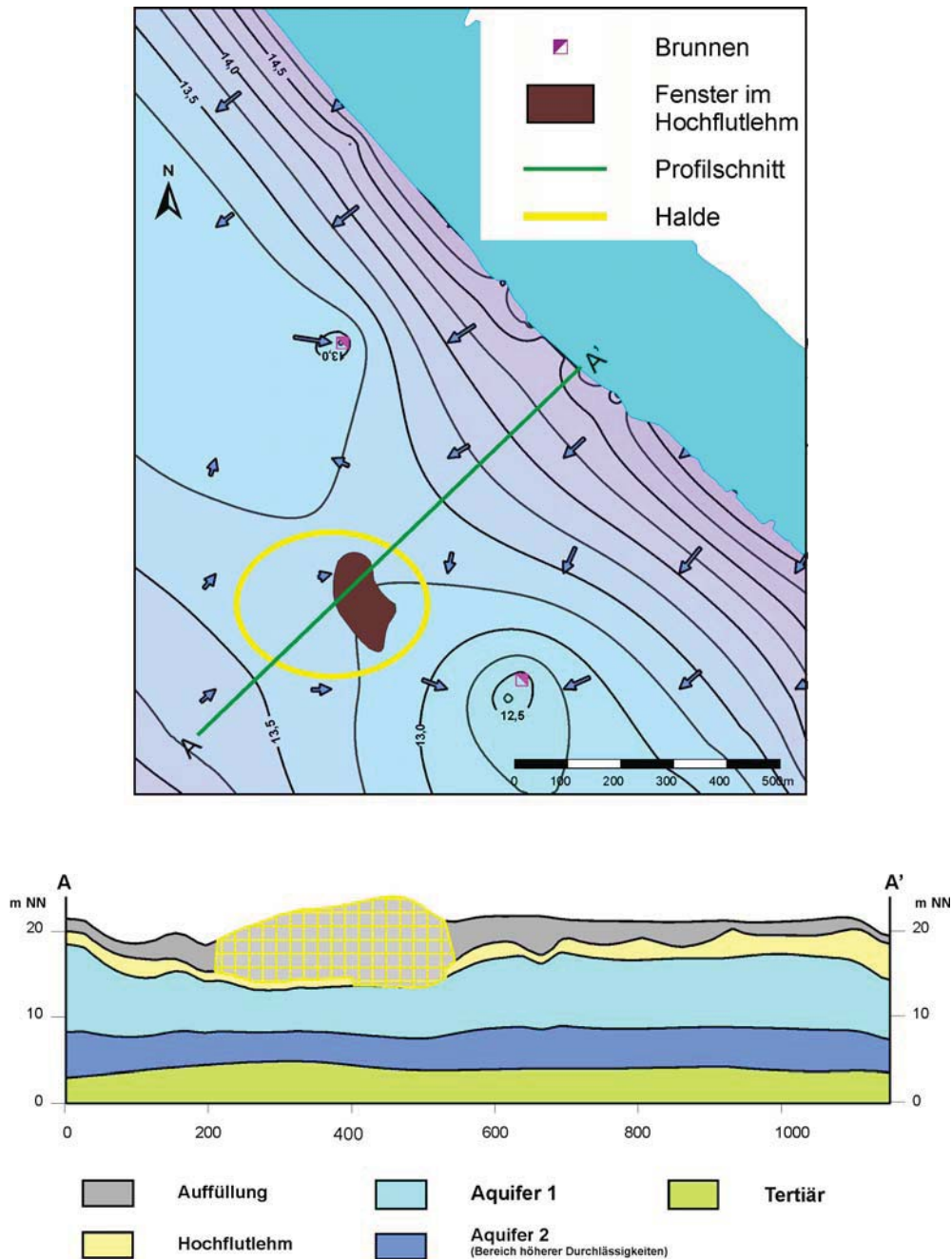


Abbildung 26: Darstellung des *hydrogeologischen Modells* im *Aussagegebiet* im Grundriss (Grundwasserhöhengleichen und Fließrichtungen bei Hochwasser im Rhein) und Profilschnitt.

### A4.1.3 Numerisches Strömungs- und Transportmodell

#### A4.1.3.1 Modellgebiet und Grundwasserströmung

Unter Berücksichtigung der grundwasserhydraulischen Situation ist eine natürliche horizontale Abgrenzung des *Modellraums* innerhalb des am Standort vorliegenden weit ausgehenden Flachlandaquifers generell schwierig. Im vorliegenden Fall konnte auf ein regionales 2D-Modell mit natürlichen Rändern zurückgegriffen werden, dessen *instationäre Piezometerhöhen* auf die Ränder des sehr viel kleineren Detailmodells als *Festpotenzialknoten* über-

tragen werden konnten. Die Ränder des Detailmodells liegen in mehreren hundert Metern Entfernung vom *Aussagegebiet*.

Das numerische Modell wurde mit dem Rechenprogramm MODFLOW-SURFACT® (HydroGeoLogic Inc., 2006) aufgebaut, einer kommerziellen Erweiterung des public-domain Rechenprogramms MODFLOW (MCDONALD UND HARBAUGH, 1988) US-amerikanischen Geologischen Dienstes.

Der *Modellraum* wurde nach der *Finite Differenzen Methode* diskretisiert mit einer einheitlichen Gitterweite von  $10 \cdot 10$  m bei 230 Modellzellen in x- und 300 Modellzellen in y-Richtung. In der Vertikalen besteht das dreidimensionale Modell aus sechs Modellschichten, so dass sich insgesamt 414.000 Rechenknoten ergeben.

Bei der Konzeptionierung des Modells wurde die Schadstoffsituation berücksichtigt. Die Problematik dieses Standortes liegt darin begründet, dass die Schadstoffquelle temporär geflutet wird und bei Mittel- bis Niedrigwasser lediglich eine Elution über den Sickerwasserfluss erfolgt. Es wurde daher ein Rechenprogramm ausgewählt, das berücksichtigen kann, dass Modellzellen nur zeitweise gesättigt sind. Mit dem genannten Rechenprogramm kann neben der gesättigten auch die ungesättigte Strömung simuliert werden. Nähere Einzelheiten dazu finden sich in Kapitel A4.1.3.2. Da der Schwerpunkt dieser Arbeitshilfe auf der Simulation gesättigter Strömung liegt, werden die Aspekte der ungesättigten Strömung dieses Anwendungsbeispiels nur soweit unbedingt erforderlich erläutert.

Die Schichten 1 und 2 repräsentieren die anthropogene Auffüllung, denen pauschaliert geschätzte hydraulische Parameter ähnlich dem eigentlichen *Grundwasserleiter* zugeordnet wurden. Die Schicht 3 stellt den Hochflutlehm dar, der als Grundwassergeringleiter ( $k_{f \text{ horizontal}} = 1 \cdot 10^{-7}$  m/s,  $k_{f \text{ vertikal}} = 1 \cdot 10^{-8}$  m/s) fungiert. In Bereichen nachgewiesener Fehlstellen ("Fenster") innerhalb des Hochflutlehms wurden die hydraulischen Eigenschaften des oberen Aquiferabschnitts angesetzt.

Der *Aquifer* selbst wurde in drei Schichten untergliedert, wobei die oberen beiden Schichten als hydraulisch identisch angenommen wurden mit etwa  $k_{f \text{ horizontal}} = 5 \cdot 10^{-4}$  m/s und  $k_{f \text{ vertikal}} = 5 \cdot 10^{-5}$  m/s. Auf Grundlage der Pumpversuchsergebnisse erhielt die tiefste Modellschicht 6 um den Faktor 5 höhere *Durchlässigkeitsbeiwerte*. Dem vertikalen *Durchlässigkeitsbeiwert* wurde auch hier ein Wert entsprechend einem Zehntel des horizontalen Wertes zugeordnet.

Die Abbildung 27 zeigt schematisch einen Schnitt durch das numerische Modell.

Das Strömungsmodell wurde *instationär* aufgebaut über einen Zeitraum von zwölf Jahren mit Zeitschrittweiten von zwei bis maximal sechs Tagen. Ausschlaggebend für diese enge Zeitschrittwahl war der Rhein, dessen Wasserstandsganglinie die prägende *Randbedingung* des Modells darstellt.

Die Ermittlung der *Sickerwasserrate* erfolgte monatsweise auf Grundlage einer flächendifferenzierten klimatischen Bodenwasserbilanz (siehe Kapitel 3.6.2). Die ermittelten Raten wurden unmittelbar der oberen Modellschicht als *Quellterm* zugeordnet, und erzeugen auf diese Weise eine ungesättigte Sickerwasserströmung, welche durch die Schichten 2 und 3 der gesättigten Bodenzone zuströmt. Temporär können auf der Schicht 3 (Hochflutlehm) gesättigte Verhältnisse herrschen. Auch im teilgesättigten Zustand kann eine Sickerwasserströmung auf der Schicht 3 in Richtung Fehlstelle erfolgen.

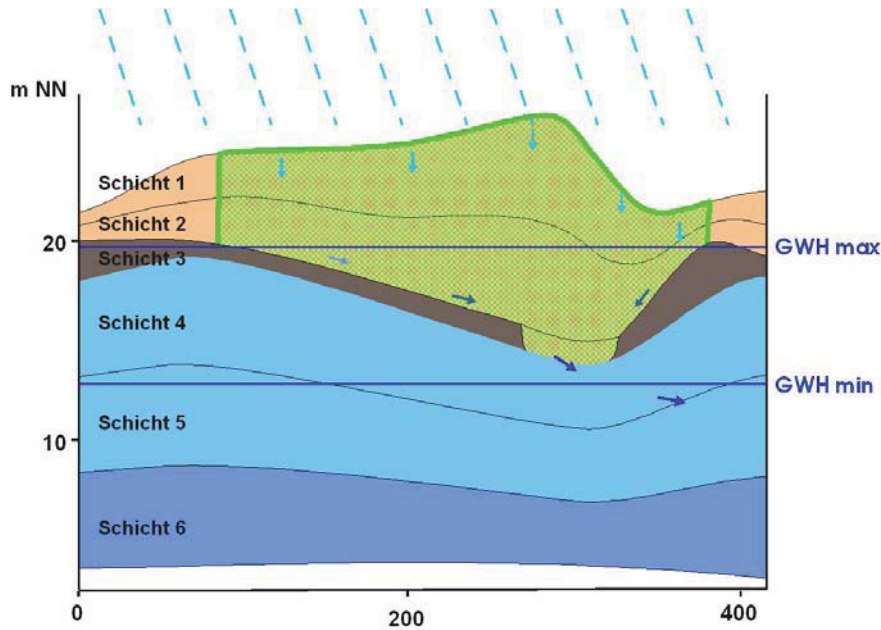


Abbildung 27: Schematische Darstellung des numerischen Modells

Die Abbildung 28 veranschaulicht beispielhaft das Ergebnis der Strömungskalibrierung der gesättigten Zone innerhalb des *Aquifers*. Bei einer mittleren quadratischen Abweichung von 0,228 und einer Schwankungsbreite der Grundwasserstände von neun Metern ergibt sich an dieser Messstelle ein mittlerer Fehler von 2,5 %, unter Berücksichtigung aller vorhandenen Messstellen von < 5 %.

Im Bereich der hier näher betrachteten Aufhaltung zeigen sich im Modellergebnis nur sehr geringe Piezometerhöhenunterschiede zwischen den Schichten 4 bis 6 des *Grundwasserleiters*, so dass die vereinfachende *Kalibrierung* der Strömung auf Grundlage zweidimensionaler Daten der vollkommenen Messstellen akzeptiert werden kann.

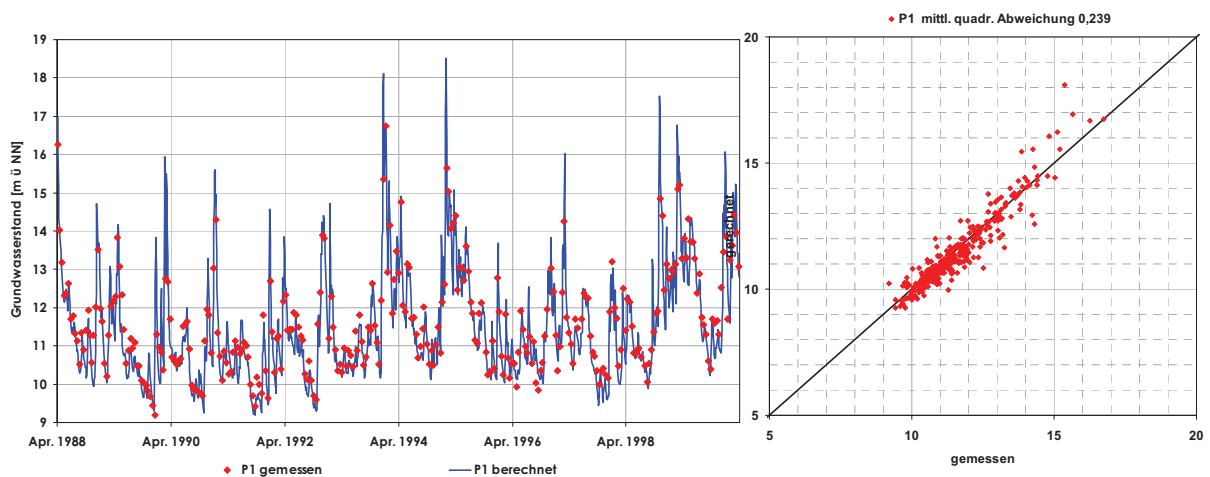


Abbildung 28: Ergebnis der Strömungskalibrierung

#### A4.1.3.2 Stofftransport

Die Stofftransportbetrachtungen erfolgten exemplarisch für Cadmium, ein für die Verfüllung charakteristisches Schwermetall des Standortes.



Auf der Basis von chemischen Analysen wurde für die Modellierung eine mittlere Quellkonzentration des Cadmiums im Sickerwasser bzw. Kontaktgrundwasser für das Ablagematerial von 0,6 mg/L vorgegeben.

Die Quellkonzentration wurde innerhalb aller Modellzellen der Aufhaltung als *Randbedingung 1. Art (Festkonzentration)* definiert. Auf diese Weise ist die emittierte Fracht stets proportional zum ungesättigten Sickerwasserfluss. Alternativ hätte auch eine zeitlich differenzierte Fracht auf Grundlage der *Grundwasserneubildungsrate* unmittelbar auf die Aquiferschichten ohne Berücksichtigung der ungesättigten Zone definiert werden können. Eine adäquate Berücksichtigung des präferentiellen Eintrags über die Fehlstelle wäre mit diesem Ansatz jedoch wesentlich schwieriger geworden.

Der gewählte Ansatz hat ferner den Vorteil, dass mit dieser Form der *Randbedingung* gleichzeitig die temporäre Flutung des Haldenkörpers und die damit verbundene Emission über das Kontaktgrundwasser gesteuert werden kann.

Der *Modellraum* ist charakterisiert durch häufige Fließrichtungswechsel des Grundwassers infolge schwankender Rheinwasserstände. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass die durch Fließrichtungswechsel hervorgerufene hydrodynamische Vermischung die Effekte der *Dispersion* i.e.S. (siehe Kapitel 4.4.2 und A1.2.3) bei weitem überwiegen. Die longitudinale *Dispersivität*  $\alpha_L$  wurde einheitlich auf 20 m abgeschätzt, die transversale horizontale *Dispersivität*  $\alpha_{Th}$  zu 2 m und die transversal vertikale *Dispersivität*  $\alpha_{Tv}$  zu 0,2 m. Erwartungsgemäß stellte die *Dispersivität* im realistischen Wertebereich am Standort keine sensitive Größe dar.

Auf der Grundlage von theoretischen Überlegungen zum Kationenaustausch an der Oberfläche des Korngerüsts der durchströmten Schichten wurde näherungsweise eine *Retardierung* des Stofftransports durch Sorptionsvorgänge (*lineare Sorptionsisotherme*) in Sand/Kies um den Faktor 3, in bindigen Böden (Hochflutlehm) um den Faktor 70 berechnet.

Der modellierte Wasserinhaltsstoff wurde als persistent angenommen.

Zur Lösung des Transportproblems wurde eine *Finite-Differenzen Methode* mit *upwind-Gewichtung* eingesetzt. Die feine räumliche *Diskretisierung* und die gewählte zeitliche Auflösung führt zur strikten Einhaltung des *Courant-* bzw. des *Peclet-Kriteriums*, so dass Fehler durch *numerische Dispersion* und/oder *Oszillationen* minimiert sind.

#### **A4.1.4 Detailergebnisse der numerischen Modellrechnungen**

Die Strömungsmodellierung ergab, dass bei signifikanten Hochwasserereignissen im Rhein durch das hydraulische Fenster im Hochflutlehm ein temporärer Einstau der Verfüllung von unten mit einer Dauer von im Mittel einem Monat eintritt. Im Simulationszeitraum von 1988 bis 2000 war dies viermal der Fall. Das mittlere Hochwasser führt nicht zu einem Einstau. Der Bereich der Verfüllung liegt noch in der Zone der Fließrichtungsumkehr bei hohen Hochwässern.

Aufgrund der Gliederung des *Grundwasserleiters* in drei Schichten liefert das *Transportmodell* an der Koordinate der Referenzmessstelle im Abstrom der Aufhaltung drei Konzentrationsganglinien, welche die mittlere Konzentration über die jeweilige Modellschicht repräsentieren.

Abbildung 29 zeigt die Simulationsergebnisse des Transportmodells auf Grundlage der vorgegebenen Quellstärken. Neben den Konzentrationsganglinien der drei Aquiferschichten ist zusätzlich der gewichtete Konzentrationsmittelwert über die Mächtigkeit und Durch-

lässigkeit der einzelnen Schichten aufgetragen, um näherungsweise eine Vergleichbarkeit der Simulationsergebnisse mit Felddaten aus einer vollkommen verfilterten Grundwassermessstelle zu ermöglichen.

Zur Einordnung des Konzentrationsverlaufs in das *instationäre* Geschehen am Standort ist in der Abbildung 29 auch der Verlauf des Grundwasserstandes und die *Sickerwasserrate* dargestellt. Erwartungsgemäß ist zu erkennen, dass sich im Abstrom der Aufhaltung mit zunehmender Tiefe ein niedrigeres Konzentrationsniveau einstellt. Die Abbildung 30 zeigt dazu schematisch das Verteilungsmuster gelöster Schadstoffe im Abstrom des hydraulischen Fensters.

In Phasen niedriger Grundwasserstände und fehlender Sickerwasserbildung ist ein Rückgang der Konzentrationen festzustellen, wohingegen mit den winterlichen Neubildungsphasen stets ein Konzentrationsanstieg verbunden ist. Der gewichtete Konzentrationsmittelwert zeigt die höchsten Werte zu den Zeitpunkten, in denen das Haldentiefste durch hohes Grundwasser temporär geflutet wurde. Dies war in den Wintern '93/'94, '94/'95, '98/'99 und '99/'00 der Fall.

Neben dem charakteristischen Jahresgang der Konzentrationen sind in den beiden oberen Aquiferabschnitten darüber hinaus höherfrequente Konzentrationsschwankungen zu erkennen. Diese zeigen eine negative Korrelation zu den Grundwasserständen. Steigende Grundwasserstände führen zu einer dispersiven Vermischung mit Grundwasser niedrigerer Konzentration aus dem Abstrom (horizontal und vertikal) und damit zu einer temporären Verdünnung, die sich mit fallendem Grundwasserstand wieder ihrem vorherigen Niveau angleicht. In der mittleren Schicht ist diese Dynamik noch gedämpft zu erkennen. Die untere Schicht zeigt schließlich nur noch den schon beschriebenen Jahresgang.

Das Strömungs- und Transportmodell spiegelt das *konzeptionelle Standortmodell* korrekt wieder.

Der Vergleich der berechneten zu den gemessenen Konzentrationen zeigt dagegen einerseits charakteristische Abweichungen, aber auch kennzeichnende Übereinstimmungen. Aus den Abweichungen und Übereinstimmungen ergeben sich wichtige Erkenntnisse für die Interpretation der Standortverhältnisse.

Die Referenzmessstelle ist vollkommen ausgebaut. Ihre Filterstrecke erfasst den gesamten quartären *Grundwasserleiter*. Eine Grundwasserprobe aus einer solchen Messstelle ist im Idealfall als Mischprobe über den gesamten wassererfüllten Bereich anzusehen. Um eine Vergleichbarkeit der Simulationsergebnisse mit den Felddaten zu ermöglichen, müssen die berechneten Konzentrationen aller Modellschichten entsprechend ihrer zum Zeitpunkt der Probenahme wassererfüllten Mächtigkeit und ihrer Durchlässigkeit gewichtet gemittelt werden.

Im Zuge der *Modellkalibrierung* mussten die vorgegebenen Quellkonzentrationen deutlich reduziert werden, um das Konzentrationsniveau der Felddaten aus der Abstrommessstelle reproduzieren zu können. Die *Kalibrierung* zeigte überdies, dass innerhalb der Ablagerung keine *Retardation* stattfindet.

Die Abbildung 31 zeigt die gemessene Konzentrationsganglinie der Abstrommessstelle und der gewichtet gemittelten Simulationsergebnisse.

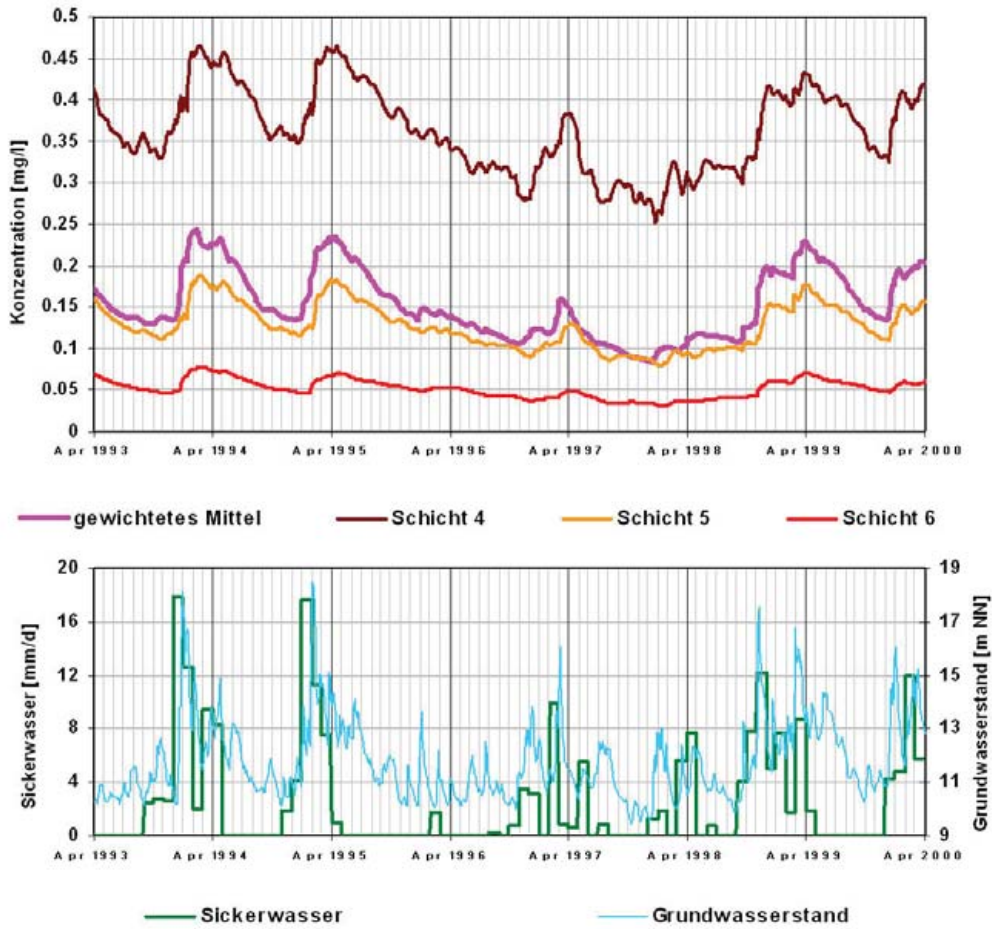


Abbildung 29: Simulierte Cadmium Konzentrationen (*Startwerte*) im Abstrom der Aufhaldung (oben), Grundwasserstände und *Sickerwasserraten* (unten)

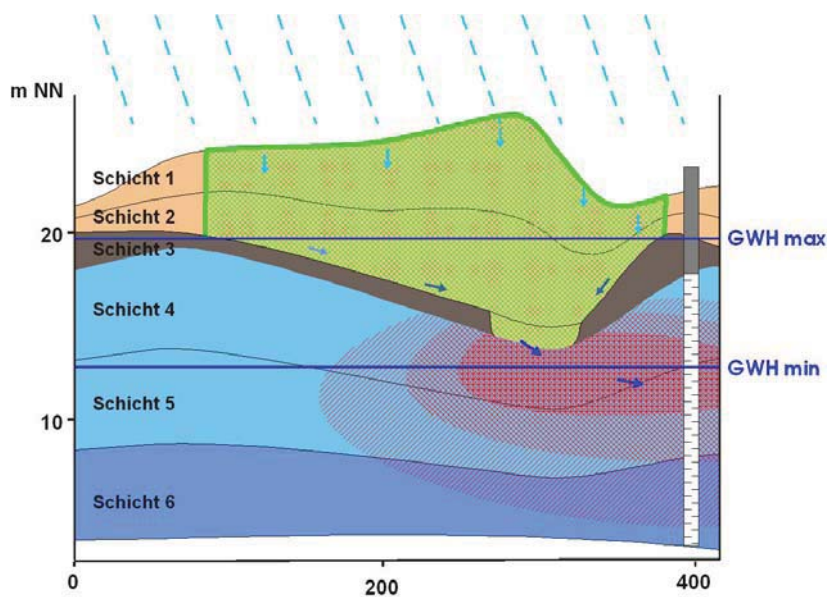


Abbildung 30: Verteilungsmuster gelöster Schadstoffe im Abstrom des hydraulischen Fensters

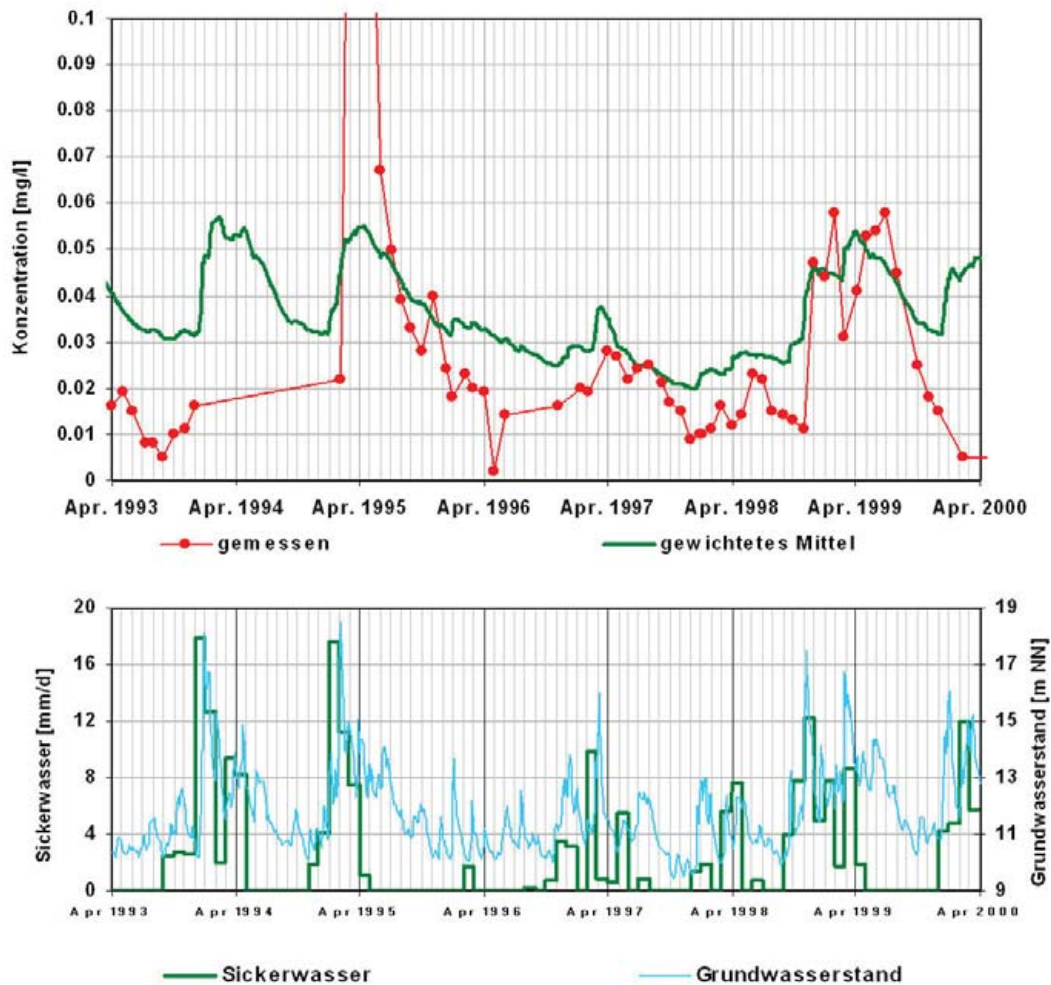


Abbildung 31: Gemessene und berechnete Konzentrationen (oben), Grundwasserstände und *Sickerwasserraten* (unten)

Folgende charakteristische Übereinstimmungen sind erkennbar:

- Höchste Konzentrationen sind jeweils bei hohem Grundwasserstand mit Flutung des Haldentiefsten (Ausnahme: Frühjahr 2000) feststellbar.
- Beide Zeitreihen zeigen einen charakteristischen Jahresgang der Konzentrationen jeweils mit einem Maximum im Frühjahr und einem Minimum im Herbst.
- Die höherfrequenten Schwankungen der berechneten Konzentrationen sind auch in der Zeitreihe der Felddaten erkennbar.

Folgende charakteristische Abweichungen sind erkennbar:

- Schnelleres Abklingen der gemessenen Konzentrationen nach einer Konzentrationsspitze.
- Bei hohen Grundwasserständen mit Flutung des Haldentiefsten zeigen die Felddaten signifikant höhere Konzentrationen als die Simulationsergebnisse.



Augenfälligster Unterschied zwischen den gemessenen und berechneten Konzentrationen besteht im höheren Konzentrationsniveau der Felddaten nach temporärer Sättigung des Haldentiefsten im Zuge von hohen Hochwasserereignissen im Rhein. Dies war in den Wintern '93/'94, '94/'95 und '98/'99 der Fall. Während im Modell aufgrund der einheitlich angenommenen Quellstärke zwar bezogen auf das gewichtete Mittel übereinstimmend mit den Felddaten relative Maxima der Konzentrationen nach Durchgang sehr hoher Grundwasserstände festzustellen sind, zeigen die Felddaten insbesondere beim '95er Hochwasser deutlich ausgeprägte signifikante Konzentrationsspitzen.

Dies erlaubt die Schlussfolgerung, dass bei der temporären Flutung durch ansteigendes Grundwasser Schadstoffe aus Zonen mobilisiert werden, die eine sehr hohe Quellstärke aufweisen. Diese Zonen werden aber von Sickerwasser offensichtlich nicht durchströmt. Denkbar ist ein geschichteter Aufbau innerhalb der Auffüllung mit eingelagerten gering durchlässigen Schichten, die tiefer liegende Zonen mit hohem Schadstoffpotenzial wirksam gegen vertikalen Sickerwassertransport abschirmen. Nur durch ansteigendes Grundwasser würden demnach diese Schadstoffquellen aktiviert. Ein seltenes Ereignis wie das '95er Hochwasser könnte nach dieser Modellvorstellung dann zu extremen Konzentrationen im Grundwasserabstrom führen.

Ein weiterer signifikanter Unterschied zwischen gemessenem und berechnetem Konzentrationsverlauf ist das schnellere Abklingen der gemessenen Konzentrationen nach einer Konzentrationsspitze. Daraus kann zunächst geschlossen werden, dass der die Messstelle prägende Quellbereich der Schadstoffe eine geringere räumliche Ausdehnung hat als im Modell angenommen. Nur so kann erklärt werden, dass nach einer Konzentrationsspitze infolge hoher *Sickerwasserraten* die Konzentrationen wieder sehr rasch abnehmen. Es kann davon ausgegangen werden, dass die mittleren Quellkonzentrationen geringer sind, als im Modell für die gesamte Verfüllung ursprünglich undifferenziert angesetzt wurde.

Zufriedenstellend bildet das Modell den relativen Konzentrationsverlauf in solchen Jahren ab, die nicht zu einer Flutung der Verfüllung geführt haben und ursächlich durch die Sickerwasserbildung verursacht werden. Das jeweils etwa gleichzeitige Erreichen der Konzentrationsspitzen im Frühjahr und der Konzentrationsminima im Herbst zwischen berechneten und gemessenen Daten zeigt, dass durch die hier nicht näher erläuterte Parametrisierung der ungesättigten Zone diese realitätsnah abgebildet wurde.

Es zeigt sich auch, dass in der Zeitreihe der Felddaten gelegentlich Konzentrationsschwankungen geringeren Ausmaßes festzustellen sind, welche durch dispersive Vermischung verursacht sind. Diese können in den Simulationsergebnissen ebenfalls erkannt werden können. Markante Beispiele zeigen sich jeweils im Februar '96, '97 und '98.

Für die Interpretation der Standortsituation ergeben sich zusammenfassend folgende Erkenntnisse.

- Das *konzeptionelle Standortmodell* wird durch die Modellierung im Prinzip bestätigt.
- Die Schadstoffquelle ist im Gegensatz zur pauschalierten Modellannahme in der Realität räumlich *heterogen* und diskret verteilt.
- Tatsächlich scheinen die Bereiche der Quelle mit hohen Konzentrationen eine deutliche geringere Ausdehnung zu besitzen als angenommen.
- Je höher und länger anhaltend ein temporärer Einstau der Ablagerung durch Grundwasseranstieg stattfindet, desto höher ist die nachfolgende Emission in das Grundwasser. Die dabei aktivierten Schadstoffquellen werden offen-



sichtlich vom normalen ungesättigten Sickerwasserfluss nicht tangiert (Stichwort "Präferentielle Fließbahnen").

- Eine Versiegelung zur Verhinderung eines Sickerwassereintrages würde die Emission in das Grundwasser vermindern, aber wegen der Sicherheit des künftigen Eintretens temporären Einstaus nicht gänzlich unterbinden.

Allgemein ergeben sich für die Anwendung von Modellen im Altlastenbereich aus diesem Beispiel folgende Erkenntnisse:

- Das Modellkonzept in 3D ist in diesem Fall standortgerecht, aber wesentliche Daten des Standortes liegen nur in 2D vor. Eine "exakte" *Kalibrierung* ist deshalb nur eingeschränkt möglich. Insbesondere, wenn historische Felddaten für eine *Modellkalibrierung* genutzt werden sollen, ist eine solche Situation bei der Altlastenbearbeitung ein relativ häufig anzutreffender Fall, der schon bei der Formulierung der Aufgabenstellung und beim Aufbau des Modellkonzeptes zu berücksichtigen ist.
- Ein Modell, das Messdaten nicht exakt wiedergibt, aber wesentliche Standortmerkmale abbildet, kann genutzt werden, um Schlussfolgerungen für das Prozessverständnis des Standortes zu ziehen bzw. ggf. die Erkundung gezielt zu vertiefen. Durch den Vergleich der Ergebnisse vereinfachender Modellannahmen mit den realen Felddaten können diese besser interpretiert werden.
- Eine Modellierung kann Erkundungsdefizite nicht ausgleichen. Belastbare quantifizierende Aussagen mit Hilfe des Modells hinsichtlich *Schadstofffrachten* können in diesem Fall nicht erwartet werden, da das Modell bezüglich der räumlichen Verteilung und Quellstärke der Schadstoffquelle deutlich "unterparametrisiert" ist.  
Von einer inversen Modellierung ohne ergänzende Felddatenerhebungen ist im vorliegenden Fall abzuraten, da die Anzahl möglicher Lösungen für plausible "wahre" Schadstoffquellenverteilungen und Quellstärken in diesem Fall sehr groß wäre. Jede weitere Modellanwendung auf einer solchen Grundlage wäre mit sehr großen Unsicherheiten behaftet.

## A4.2 Anwendungsbeispiel 2: PSM-Metabolit im Anstrom einer Wassergewinnungsanlage

### A4.2.1 Situation

Im Einzugsgebiet und im Rohwasser einzelner Brunnen einer Wassergewinnungsanlage wurde der Metabolit eines PSM (= Pflanzenbehandlungs- und Schädlingsbekämpfungsmittel) festgestellt. Der identifizierte Stoff ist toxikologisch unbedenklich und ein Umwandlungsprodukt eines in Wasserschutzgebieten bis 2006 zugelassenen Wirkstoffs. Der Metabolit wird erst dann problematisch, wenn das gehobene Wasser bei der Aufbereitung einer Ozonung unterzogen wird. Dann entstehen Nitrosamine, welche als krebserregend eingestuft sind. Beim Wasserversorger besteht eine Planungsvariante, die Aufbereitung des Rohwassers um eine Ozonung und Aktivkohlefiltration zu ergänzen.

Eine flächendeckende Beprobung des Grundwassers führte zur Identifikation eines vergleichsweise extensiv bewirtschafteten Obstanbaubetriebes als Zentrum der Belastung. Der Landwirt hat im Jahrzehnte währenden Anwendungszeitraum flächendifferenziert exakt Buch geführt über Fruchtfolgen und Aufwandmengen des Wirkstoffs. Mit dem Ruhen der Mittelzulassung in 2007 wurde auch in diesem Betrieb die Anwendung eingestellt.

Für das Wasserversorgungsunternehmen ergibt sich folgende Fragestellung:

- Welche Konzentrationsentwicklung und -verteilung ist in den Brunnen der betroffenen Wassergewinnungsanlage zu erwarten?
- Wie lange wird die Belastung im Rohwasser vorhanden bzw. unter einen unkritischen Wert gefallen sein?
- Wie lange wird die Belastung im Einzugsgebiet vorhanden sein bzw. wann wird sie unter einen unkritischen Wert gefallen sein?

Zur Klärung dieser Fragen sind Verteilung und Dauer des Stofftransportes sowohl im Sickerwasser als auch im Grundwasser zu betrachten.

Bei der Bearbeitung der Aufgabe hat der Hersteller des PSM wesentliche Aufgaben übernommen. Mit Hilfe zahlreicher eindimensionaler Simulationen des ungesättigten vertikalen Sickerwassertransportes liefert der Hersteller flächendifferenzierte historische und prognostische Zeitreihen der Sickerwasserkonzentration des Metabolits für den Übergang von der ungesättigten in die gesättigte Zone. Bei diesen eindimensionalen Simulationen gehen neben dem intensiv untersuchten und im Detail bekannten Metabolisierungsprozess des Wirkstoffs die unterschiedlichen Anwendungshistorien und Fruchtfolgen, nutzpflanzenspezifische Eigenschaften, die variablen Bodenarten und -mächtigkeiten, deren hydraulische Eigenschaften sowie schließlich Wetterdaten und Flurabstände ein.

Die ermittelten Konzentrationen werden mit der *Sickerwasserrate* als zeitabhängige *Schadstofffrachten* in ein zweidimensionales horizontales Strömungs- und *Transportmodell* als Quellkonzentrationen implementiert.

Dieses Anwendungsbeispiel wurde ausgewählt, da in diesem Fall - im Gegensatz zum Normalfall der Altlastenbearbeitung - die Quellstärke des Schadensherdes sehr gut bekannt ist. Aufgrund der umfangreichen Forschungsarbeiten des Herstellers auf diesem Gebiet kann davon ausgegangen werden, dass die Ergebnisse der 1D-Simulationen eine wesentlich höhere Genauigkeit aufweisen, als es bei einer typischen Altlastenbearbeitung in der Regel erwartet werden kann. Es ist also möglich, sich bei der *Kalibrierung* des 2D-Modells auf die eigentlichen Transportparameter zu konzentrieren.

Die Grundlagendaten für die numerischen Modelle basieren auf den in Tabelle 9 aufgelisteten Quellen.

Tabelle 9: Herkunft der Grundlagendaten für die numerischen Modelle.

<b>Einflussgröße</b>	<b>Herkunft</b>
Aquifergeometrie	Bohrprofile, Hydrologisches Kartenwerk
Geländeoberfläche	Digitales Geländemodell
Hydraulische Durchlässigkeit	Pumpversuchsauswertungen
Sickerwasserbildung	Wetterdaten
Bodenarten	Bodenkarten GD, Bodenschätzung, RKS
Bodenprofile	Bodenkarten GD, Bodenschätzung, RKS
Grundwasserentnahmen	Betriebsdaten des Wasserversorgers
Quellstärke	Anwendungsdaten des Landwirts ⇒ 1D Simulation
Dispersivität	Anpassung im Rahmen der Modellkalibrierung
Sorption	keine Sorption in gesättigter Strömung
Abbau	kein Abbau in gesättigter Strömung

#### **A4.2.2 Das Hydrogeologische Modell**

Das *hydrogeologische Modell* ist relativ einfach aufgebaut und besitzt große Ähnlichkeit mit dem des zuvor beschriebenen Anwendungsbeispiels. Ein Vorfluter befindet sich in diesem Beispiel erst in größerer Entfernung.

Der *Grundwasserleiter* besteht aus 15 - 30 m mächtigen quartären sandig kiesigen Ablagerungen des Rheins mit einer hohen Wasserdurchlässigkeit. Das Liegende bilden tertiäre schwach bindige Feinsandablagerungen und Tone, die aufgrund ihrer wesentlich geringeren *Durchlässigkeit* vernachlässigt werden können. Der *Grundwasserleiter* wird überlagert von glazialen und postglazialen bindigen Deckschichten.

Die bindigen Deckschichten bestehen aus meist zwischen 0,5 und 2 m mächtigen lehmigen Sanden bis sandigen Lehmen. Die Bodenkarte zur landwirtschaftlichen Steuerschätzung 1:5.000 (DGK5 Bo) liefert wertvolle Hinweise zur Varianz der Bodenarten und -mächtigkeiten. Kontrollsondierungen zeigten, dass dieses Kartenwerk als sehr gute Grundlage für die vertikalen 1D-Simulationen genutzt werden kann.

Die Mächtigkeit der bindigen Deckschichten unterliegt beachtlichen Schwankungen. Unterschiede von bis zu 1,5 Metern auf wenigen 10er Metern Distanz sind im Bereich des Eintrags eher die Regel als die Ausnahme. Da eine flächendeckende engständige Kartierung des Areals nicht möglich war, musste dieses Wesensmerkmal des Standortes bei der Konzeptionierung des Modells berücksichtigt werden.

Die Richtung des Grundwasserstroms ist nach Osten orientiert und unterliegt relativ geringen saisonalen Schwankungen. Die langjährige Schwankungsbreite der Grundwasserstände beträgt im Bereich der in Rede stehenden landwirtschaftlichen Nutzflächen etwa 2 m. Im Laufe eines Wasserwirtschaftsjahres sind Grundwasserstandsschwankungen bis zu einem Meter dokumentiert.

Innerhalb der quartären Sande und Kiese ist eine *freie Grundwasseroberfläche* ausgebildet, die höchstens lokal begrenzt bei sehr hohen Grundwasserständen die Unterkante der Deckschichten erreicht.

Die Brunnen des Wasserwerks liegen etwa 3 km östlich der Eintragsflächen. Die Förderung in den Brunnen ist sehr gleichmäßig. Es liegen detaillierte langjährige Aufzeichnungen vor.

### A4.2.3 Numerisches Strömungs- und Transportmodell

#### A4.2.3.1 Modellgebiet und Grundwasserströmung des 2D-Modells

Aufgrund des anders gelagerten Schwerpunktes dieser Arbeitshilfe wird auf die vertikalen 1D Simulationen der ungesättigten Sickerwasserströmung nicht im Detail eingegangen. Zur Simulation wurde das Rechenprogramm PEARL herangezogen. Diese Software wurde in den Niederlanden von drei Forschungsinstituten ([www.pearl.pesticidemodels.eu](http://www.pearl.pesticidemodels.eu)) speziell für die Anforderungen zur Prüfung des Verhaltens von PSM in der ungesättigten Bodenzone entwickelt.

Die Eingangsdaten für die Hydraulik der 1D-Modellierung bestehen zum einen aus Wetterdaten (Niederschlag, relative Luftfeuchte, Lufttemperatur) als zeitabhängige Zuflussrandbedingungen an der Geländeoberfläche unter Berücksichtigung von Verdunstungsprozessen. Als untere bewegliche Modellbegrenzung dient der *instationäre* Verlauf des Flurabstandes (Länge des 1D-Modells zum diskreten Simulationszeitpunkt) des ungespannten *Grundwasserleiters* in Form eines *Festpotenzials*.

Für das horizontale Strömungsmodell ist auch bei diesem Anwendungsbeispiel die Definition von natürlichen hydrogeologischen *Randbedingungen* im hier vorliegenden ausgedehnten Flachlandaquifer zur horizontalen Abgrenzung des *Modellraums* nicht einfach möglich. Insofern ist es ein Vorteil, dass das Einzugsgebiet des hier betrachteten Wasserwerks vollständig innerhalb eines bereits vorliegenden *instationären* regionalen zweidimensionalen Grundwasserströmungsmodells liegt. Wie beim ersten Anwendungsbeispiel wurde in ausreichender Entfernung (ca. 0,75 km nördlich und südlich) vom *Aussagegebiet* ein Detailmodell aus dem regionalen Modell ausgeschnitten. Die *instationären* Potenzialhöhen des Regionalmodells wurden auf die Grenzen des Detailmodells übertragen.

Hätte das kalibrierte Regionalmodell nicht zur Verfügung gestanden, wäre eine Definition der nördlichen und südlichen Modellgrenze des Detailmodells anhand von Stromlinien möglich gewesen, da die regionale, ostwärts orientierte Fließrichtung nur geringfügigen Schwankungen unterliegt. Im Osten (Abstrom) hätte unterhalb des unteren Kulminationspunktes der Brunnenanlage ein *Festpotenzial* mit zeitlich variabler Potenzialhöhe entlang einer Potenziallinie genutzt werden können. Die westliche Anstromgrenze wäre ebenfalls entlang einer Potenziallinie jedoch mit vorgegebenem zeitlich variablem *Randzufluss* als *Randbedingung 2. Art* definiert worden. Als Kalibrierhilfen hätten Pumpversuchsergebnisse aus den Einzelbrunnen und die Entnahmeraten selbst verwendet werden können. Für diese Art der Definition der *Randbedingungen* und *Kalibrierung* des Strömungsmodells hätten hinreichend Daten aus dem vorhandenen Messstellennetz zur Verfügung gestanden. Diese Arbeitsschritte waren aufgrund des bereits vorliegenden Regionalmodells in diesem Fall nicht erforderlich.

Das zweidimensionale numerische Detailmodell wurde mit dem Rechenprogramm MODFLOW (MCDONALD UND HARBAUGH, 1988) aufgebaut. Es handelt sich um ein Finite Differenzen Modell. Der *Modellraum* wurde mit einer einheitlichen Gitterweite von  $10 \cdot 10$  m bei 450 Modellzellen in x- und 315 Modellzellen in y-Richtung diskretisiert.

Veranlassung für die Beibehaltung des zweidimensionalen Rechenansatzes im Detailmodell war die Aquifergeometrie. Bei einer wassererfüllten Mächtigkeit von rund 15 bis 25 m und einer Längserstreckung des vorliegenden Stofftransportproblems von etwa 3000 m erschien

ein zweidimensionaler Ansatz sowohl für das Strömungsmodell als auch für das Stofftransportmodell ausreichend.

Dem Regionalmodell liegt ein mehrjähriger *instationärer* Kalibrier- bzw. Validierungszeitraum mit einer *zeitlichen Diskretisierung* in Monatsschritten zugrunde, der auf Grundlage aktualisierter Grundlagendaten (Entnahmen, *Grundwasserneubildung* etc.) bis zum Jahr 2007 erweitert wurde.

Für die Prognose der künftigen Entwicklung der Strömungssituation wurden ein feuchtes und ein trockenes Szenario entworfen. Dazu wurden bezüglich der Niederschlagsentwicklung jeweils passende Abfolgen von Jahren aus dem historischen Zeitraum ausgewählt und an den aktuellen Modellierungsstand angehängt. Die Brunnenentnahmen des Wasserwerks wurden für die Prognose auf aktuellem monatlich differenziertem Niveau beibehalten.

Die Grundwasserstandsentwicklung des historischen Kalibrierzeitraumes war im Regionalmodell im Wesentlichen durch die zeitlich variable *Grundwasserneubildung* gesteuert. Die *Grundwasserneubildung* wurde auf Basis monatlicher Wetterdaten mit Hilfe eines flächendifferenzierten *instationären* Bodenwasserbilanzmodells entwickelt. Hierbei wurde die durch das Bodenwasserbilanzmodell berechnete *Sickerwasserrate* unter Vernachlässigung der ungesättigten *Sickerwasserpassage* der *Grundwasserneubildung* vereinfachend gleichgesetzt.

#### **A4.2.3.2 Stofftransport**

Die Bereitstellung der Eingangsdaten der 1D *Stofftransportsimulationen* erfolgte durch den Wasserwerksbetreiber. Auf Grundlage der bereits erwähnten Daten zur Anwendungshistorie des PSM und zum vertikalen Bodenaufbau einschließlich ihrer hydraulischen Eigenschaften wurden die örtlich differenzierten Verhältnisse vom Wasserwerksbetreiber auf unterschiedliche Typusprofile/Anwendungshistorien abstrahiert. Diese Typusprofile wurden in der Folge differenziert nach der Bandbreite der Mächtigkeit der bindigen Deckschichten, welche eine ausschlaggebende Größe für den vertikalen Stofftransport darstellt. Es wurde zwischen maximaler und minimaler Mächtigkeit unterschieden. Die Typusprofile/Anwendungshistorien bildeten die Grundlage für die 1D *Stofftransportsimulationen*. Es wurde eine entsprechende Anzahl von Zeitreihen von *Frachten* ( $\text{MT}^{-1}$ ) durch die 1D Simulationen erzeugt und dem Horizontalmodell zur Verfügung gestellt.

Das räumliche Vorkommen der Typusprofile/Anwendungshistorien wurde vom Wasserwerksbetreiber GIS-gestützt regionalisiert und für die horizontale 2D Modellierung zur Verfügung gestellt. Innerhalb des 2D *Transportmodells* wurden die Ergebnisse der minimalen und maximalen Mächtigkeiten der Flächen gleichen Typusprofils/Anwendungshistorie der einzelnen 1D Sickerwassertransportmodelle alternierend den entsprechenden Modellzellen zugeordnet. Auf diese Weise wurde die im Gelände durch konkrete Felddaten nicht aufgelöste Unsicherheit bezüglich der tatsächlichen Mächtigkeit der bindigen Deckschichten im 2D Modell berücksichtigt.

Berechnet wurde bei den 1D-Simulationen ein Anwendungszeitraum des PSM von 1989 bis 2006, in welchem die Anwendung eingestellt wurde. Zur Prognose des Abklingens des Metabolitaustrags aus der ungesättigten Bodenzone in das Grundwasser wurden zwei unterschiedlich feuchte Zeiträume von jeweils etwa 10 Jahren Dauer an diese Simulationsläufe angehängt.

Zur Simulation des zweidimensionalen horizontalen Stofftransports wurde das Rechenprogramm MT3DMS (ZHENG UND WANG, 1999) genutzt, welches unmittelbar auf die Ergebnisse des Grundwasserströmungsmodells zurückgreifen kann.



Die aus den 1D-Simulationen gewonnenen Ergebnisse wurden wie oben erläutert räumlich differenziert als *Schadstofffrachten* in monatlicher Auflösung in MT3DMS implementiert.

Die Kalibrierung des Stofftransportmodells wurde wesentlich erleichtert durch die besonderen Eigenschaften des Metabolits, der sich im Grundwasser wie ein idealer Tracer verhält. Dies bedeutet, dass keine *Retardation* durch Sorptionsprozesse und kein Abbau berücksichtigt werden muss. Die Kalibrierung des horizontalen Stofftransportmodells beschränkt sich daher auf die Anpassung der Parameter *effektive Porosität* und *Dispersivität*.

#### A4.2.4 Bisherige Ergebnisse der numerischen Modellrechnungen

Lange Zeitreihen der räumlichen Verteilung der Metabolitgehalte im Grundwasser stehen nicht zur Verfügung. Die Simulationsergebnisse können lediglich mit Daten einer Probenahmekampagne verglichen werden. Die Abbildung 32 zeigt als Ergebnis der Transportkalibrierung die simulierte Konzentrationsverteilung des Metabolits nach 18 Simulationsjahren mit Anwendung des Wirkstoffs zum Zeitpunkt der Probenahmekampagne.

Die Transportparameter *effektive Porosität*  $n_e$  (0,2), *Längsdispersivität*  $\alpha_L$  (50 m) und *Querdispersivität*  $\alpha_T$  (5 m) wurden im Zuge der *Kalibrierung* systematisch variiert und mit der gemessenen Verteilung verglichen. Die beste Anpassung ergab sich mit den in Klammern angegebenen Werten. Die *Dispersivität* wurde skaliert und nimmt vom Eintragsareal allmählich auf die genannten Werte zu.

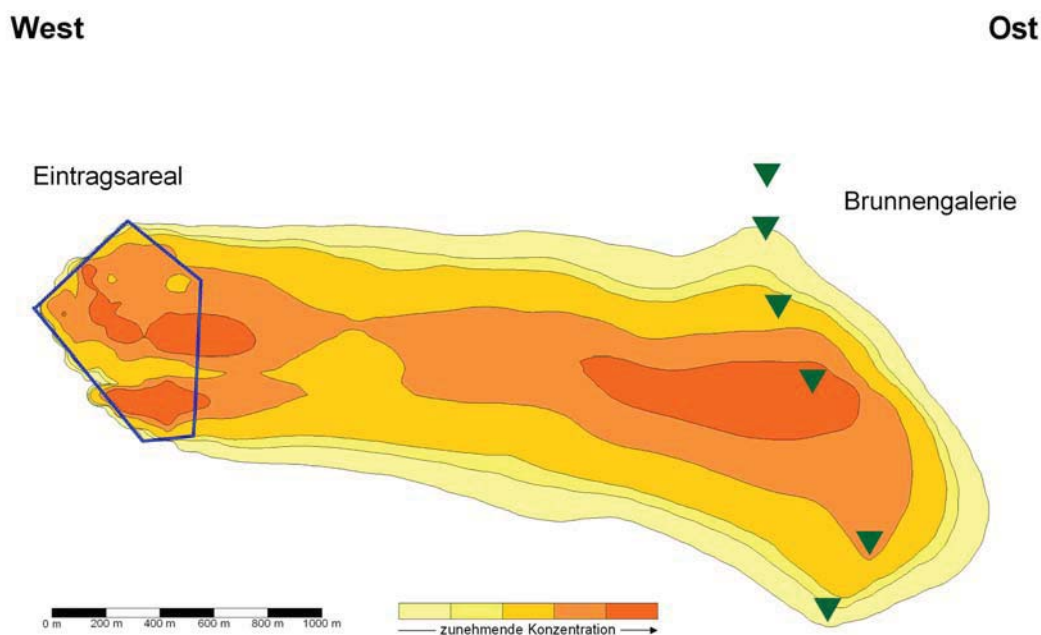


Abbildung 32: Simulierte Konzentrationsverteilung des Metabolits nach 18 Jahren Anwendungsdauer

Der im Zentrum bereichsweise eingeschnürte Bereich höherer Konzentration ist eine Folge des jahreszeitlich bedingten Austrags in den Wintermonaten aus der ungesättigten in die gesättigte Zone.

Die berechnete Konzentrationsverteilung stimmt mit der gemessenen Verteilung in kennzeichnenden Punkten überein:

- Lage der Längsachse der Fahne,
- Konzentrationshöhe am Fahnenende in Brunnennähe,
- Breite der Fahne,
- Lage eines Konzentrationsmaximums innerhalb des Eintragsareals.

Folgende entscheidende Abweichungen sind feststellbar:

- Zu niedrige simulierte Konzentrationshöhen im Zentrum des Eintragsareals,
- Zu geringer simulierter Konzentrationsgradient längs der Fahnenachse.

Die Abbildung 33 verdeutlicht die Abweichungen und lässt einen systematischen Fehler der horizontalen Transportmodellierung erkennen. Aufgetragen ist der Quotient zwischen gemessener und modellierter Konzentration entlang der Fahnenachse gegen die Entfernung vom Eintragsareal. Im Zentrum sind die gemessenen Konzentrationen also fünfzigfach höher als die berechneten.

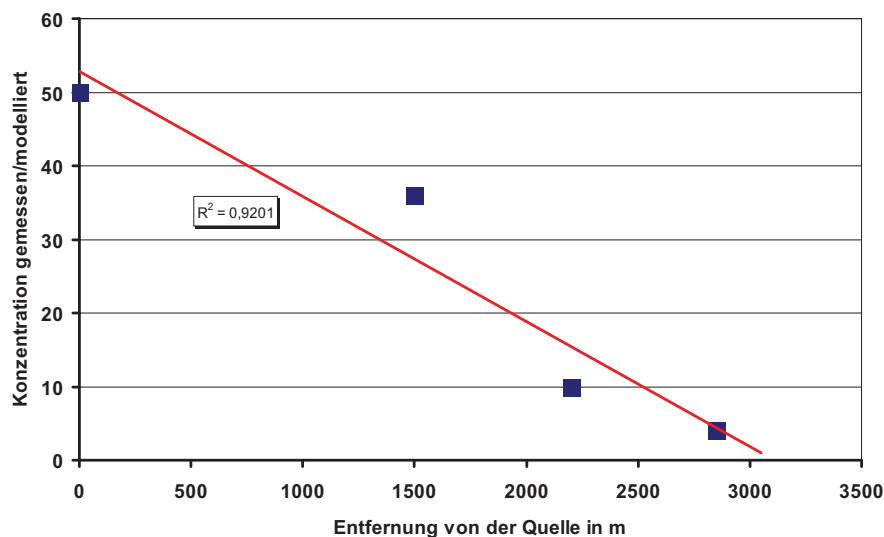


Abbildung 33: Quotient von gemessenen zu modellierten Konzentrationen in Abhängigkeit von der Entfernung zum Eintragsareal

Die Fehleranalyse zeigt, dass das *Transportmodell* erst mit sehr großer Entfernung die gemessenen Konzentrationen richtig wiedergibt. Die gemessenen Konzentrationen stammen aus unvollkommen ausgebauten Grundwassermessstellen, deren Filterstrecken nur wenige Meter in das Grundwasser eintauchen. Die Analyseergebnisse repräsentieren also lediglich die Grundwasserbeschaffenheit im oberen Teil der wassererfüllten Mächtigkeit des *Grundwasserleiters*.

Bei der Konzeptionierung des Modells wurde angenommen, dass bei einer wassererfüllten Mächtigkeit von im Mittel 20 m eine weitgehende vertikale Quervermischung des an der Grundwasseroberfläche eingetragenen Stoffs bereits nach wenigen hundert Metern erfolgt sein sollte und folglich eine annähernd homogene Konzentrationsverteilung über die wassererfüllte Mächtigkeit nach einer entsprechenden Distanz erwartet wurde. Daher wurde davon ausgegangen, dass ein zweidimensionaler Ansatz zur Abbildung der Fahne ausreichend ist.

Anhand weiterer Felduntersuchungen wird nun geprüft, ob der *Grundwasserleiter* in der Vertikalen als hydraulisch *homogen* angesehen werden kann. Voraussichtlich wird das

zugrundeliegende Strömungs- und *Transportmodell* auf drei Dimensionen erweitert werden müssen.

Liegen hinsichtlich der Durchlässigkeitsverteilung im *Grundwasserleiter* weitgehend *homogene* Verhältnisse vor, kann für die Beantwortung der Fragestellung bezüglich der voraussichtlichen Dauer bis zum Verschwinden des Metabolits aus dem Grundwasser des Einzugsgebietes das zweidimensionale *Transportmodell* herangezogen werden, da der Massentransport auch mit dem zweidimensionalen Ansatz dann korrekt *simuliert* wird. Lediglich die vertikal undifferenzierte Konzentrationsverteilung des zweidimensionalen Modells wäre mit den Felddaten weitgehend nicht in Übereinstimmung zu bringen.

Das Anwendungsbeispiel zeigt, dass zu Beginn der Überlegungen zum *konzeptionellen Standortmodell* die vorhandene Datengrundlage nicht kritisch genug bewertet wurde (hier: Messstellenausbau). Ein Beweis für die angenommene rasche vertikale *Querdispersion* war aus den Daten nicht ableitbar. Diese Annahme beruhte auf in diesem Fall nicht zutreffenden Erfahrungswerten.

Im Rahmen der Altlastenbearbeitung muss stets damit gerechnet werden, dass zunächst vereinfachende - d.h. Kosten sparende - Annahmen im Zuge eines Erkenntniszuwachses unter Umständen revidiert werden müssen.

## A4.3 Anwendungsbeispiel 3: Modellgestützte integrale Altlasten- erkundung in Stuttgart-Feuerbach

**Autoren:** Hermann-Josef Kirchholtes, Wolfgang Ufrecht (Amt für Umweltschutz der Stadt Stuttgart), Stefan Spitzberg (BOSS-Consult, Stuttgart), Wolfgang Schäfer (Steinbeis-Transferzentrum *Grundwassermodellierung*, Wiesloch).

### A4.3.1 Situation

Im Stuttgarter Stadtbezirk Feuerbach sind in einem ca. 530 ha großen Untersuchungsgebiet 300 Standorte mit Altlasten registriert. Von über 200 Altlasten ist bekannt bzw. wird vermutet, dass von dort leichtflüchtige chlorierte Kohlenwasserstoffe (LCKW) in das Grundwasser emittieren. Die Schadstoffe sind mit vertikal sprunghaft abnehmender Konzentration auf fünf *Grundwasserstockwerke* verteilt. Seit 1984 laufen seitens der in Stuttgart-Feuerbach angesiedelten Industrieunternehmen und der Stadt Stuttgart (Untere Wasserbehörde) Bemühungen der standortbezogenen Erkundung und Sanierung (Pump and treat, Bodenluftabsaugung), die bislang allerdings noch zu keiner signifikanten Entfrachtung des Untergrunds geführt haben (UFRECHT, 2003). Das Gebiet spiegelt daher nicht nur eine typische Altlastensituation in urbanen Räumen wieder, sondern zeigt auch die Probleme in der Praxis im Umgang mit solchen Flächen auf.

Im Rahmen des von der EU geförderten Projekts MAGIC (Management of Groundwater at Industrially Contaminated Sites, 2005 - 2008, [www.magic-cadses.com](http://www.magic-cadses.com)) erfolgte in Feuerbach ein integrale Untersuchung des Grundwassers mit dem Ziel, die Schadstoffausbreitung auf der Skala des Projektgebiets nachvollziehen zu können und die Lage und Quellstärke der einzelnen Schadensherde zu bestimmen. Als zentrale Werkzeuge wurden ein *Hydrogeologisches Modell* und ein *numerisches Grundwasserströmungs- und Transportmodell* für den Standort entwickelt. Der Einsatz dieser Modelle wird im Folgenden kurz vorgestellt. Eine umfassende Darstellung der Projektergebnisse ist in KIRCHHOLTES & UFRECHT (2009) zu finden.

### A4.3.2 Das Hydrogeologische Modell

Der *Modellraum* liegt im Norden von Stuttgart und umfasst die bis zu 100 m mächtigen Abfolgen des Gipskeupers (Mittlerer Keuper, Trias). Der Gipskeuper setzt sich aus Schluff-Tonsteinen mit einzelnen karbonatischen Bänken sowie Sulfatgesteinen zusammen. Er wird vom Unterkeuper und Oberen Muschelkalk unterlagert.

Die Festgesteinsschichten sind flächig mit Quartärsedimenten bedeckt, die besonders am Hangfuß und in der Talniederung des Feuerbachs große Mächtigkeit erlangen. Aus der Mächtigkeitsverteilung der quartären Sedimente zeichnen sich schmale, langgestreckte Körper ab, die in Rinnen des Feuerbachs abgelagert wurden. Die einzelnen Rinnen sind lateral durch Sumpfton, Faulschlamm, Auenlehm und Keuperfließerden begrenzt.

Im Feuerbacher Tal hat sich im Quartär und im Gipskeuper ein mehrschichtiges Grundwasserleitersystem gebildet. Entscheidend für Hydrostratigraphie und Aquifergeometrie ist die Überprägung des Gipskeupers durch selektive Gipsauslaugung (Subrosion). Im Modellgebiet lassen sich in der Beschreibung vom Hangenden zum Liegenden folgende *Grundwasserleiter* voneinander unterscheiden:

- Quartär mit Wanderschutt- und Bachschuttmassen, Hangschutt (1. *Aquifer*): Lockergesteinsgrundwasserleiter.

- Gipskeuper (2. bis 5. *Aquifer*): klüftiger Festgesteinsgrundwasserleiter mit schichtiger Aquifergliederung; Untergliederung in die Teilstockwerke Mittlerer Gipshorizont, Dunkelrote Mergel, Bochinger Horizont und Grundgipsschichten.

Obwohl die *Aquifere* 2 bis 5 Festgesteinsaquifere darstellen, verhalten sich diese aufgrund der teilweise starken Verwitterung und des sehr engmaschigen Kluftnetzes hydraulisch wie ein poröses Medium. Es war daher nicht erforderlich, ein spezielles Simulationsmodell für klüftige *Grundwasserleiter* zu verwenden, sondern die Grundwasserströmung und der Stofftransport konnten mithilfe der in der Arbeitshilfe beschriebenen Standard-Modelle für poröse Medien berechnet werden. Ein hydrogeologischer Vertikalschnitt durch den zentralen Bereich des Modellgebiets ist in Abbildung 34 zu sehen. Schraffierte, braune und weiße Bereiche kennzeichnen quartäre Ablagerungen, lila ist der Mittlere Gipshorizont markiert, rot die Dunkelroten Mergel, beige der Bochinger Horizont, blau die Grundgipsschichten, und grün der Unterkeuper.

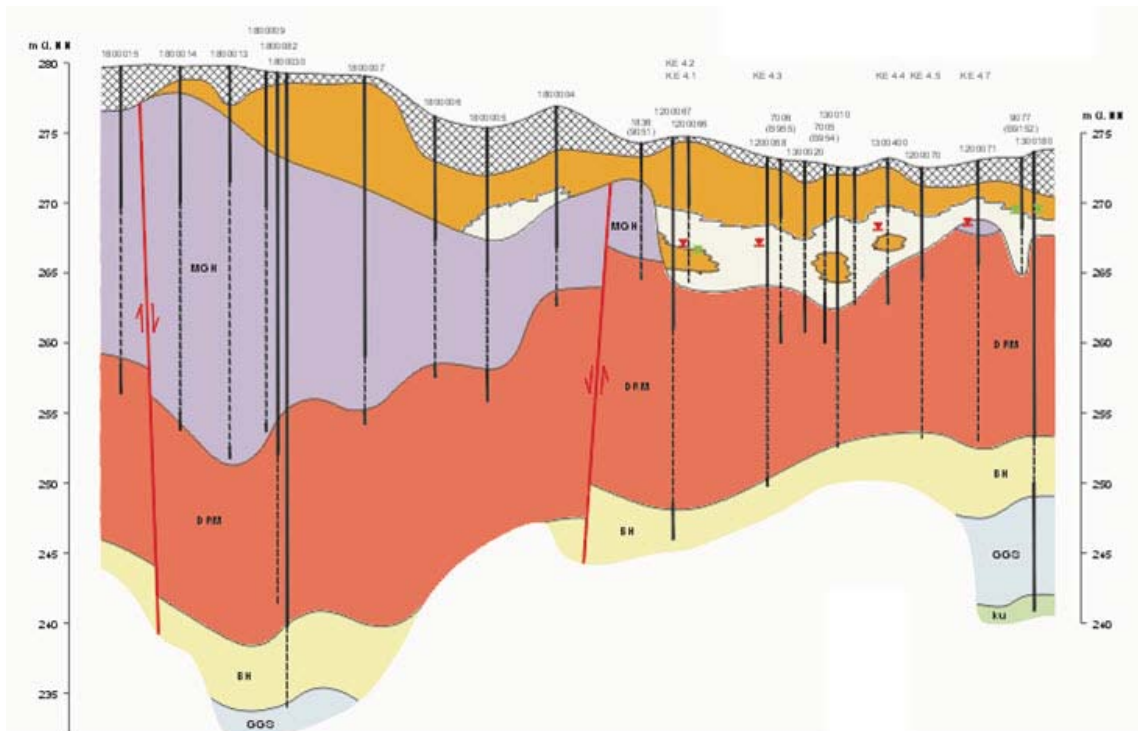


Abbildung 34: Profilschnitt durch das zentrale Modellgebiet von NNW (links) nach SSE (rechts)

In der Summe wurden Aquiferkenndaten für fast 500 Brunnenstandorte ermittelt, die durch rund 150 Beobachtungsdaten ergänzt werden. Erwartungsgemäß liegt der Großteil der Daten für das Quartär und die beiden oberen Festgesteinshorizonte vor.

Für jeden der 5 *Aquifere* wurde eine flächenhafte Verteilung der Basislagen und der hydraulischen Durchlässigkeiten erstellt. Dabei wurden Isolinien der Basislagen in Schritten von fünf Metern erzeugt, die hydraulischen Durchlässigkeiten wurden in Zehnerschritten aufgelöst ( $1 \times 10^{-3}$  m/s,  $1 \times 10^{-4}$  m/s usw.). Die Isolinien wurden sowohl in Kartenform ausgedruckt als auch elektronisch im DXF-Format abgelegt. Die Abbildung 35 zeigt als Beispiel die Lage der Basis der Dunkelroten Mergel.

Bei dieser Regionalisierung der Aquiferkennwerte war die Kenntnis um geologische Prozesse und damit das a priori Wissen des Hydrogeologen von großer Bedeutung. Dieses gilt insbesondere für die von der landschaftsgeschichtlichen Entwicklung abhängigen gebirgsüberprägenden Vorgänge der Verwitterung und Subrosion, die orts- und zeitspezifisch sind.



Letztere steuert nicht nur die Aquifergeometrie und Hydrostratigraphie, sondern auch die Aquiferdurchlässigkeit. Vor allem in den tieferen Teilstockwerken des Gipskeupers, für die nur wenige Kennwerte aus hydraulischen Tests vorliegen, kann mit dem Verständnis der räumlich differenzierten Auslaugung eine plausible Durchlässigkeitsverteilung skizziert werden.

Das Grundwasser wird im Betrachtungsraum durch *Grundwasserneubildung* aus dem Niederschlag sowie durch *Randzuflüsse* aus Teilgebieten im oberirdischen Einzugsgebiet des Feuerbachs alimentiert. Die Bestimmung der *Grundwasserneubildung* basiert auf einer flächendifferenzierten Berechnung mit dem Wasserhaushaltsmodell GWN-BW (ARMBRUSTER, 2002).

Da der *Modellraum* nur teilweise durch hydraulisch wirksame Ränder definiert ist, wie z.B. durch eine oberirdische Wasserscheide im Osten und vergipstes, d.h. undurchlässiges Gebirge im Südosten und Osten, sind Randzu- und -abflüsse in die Bilanzbetrachtung mit einzubeziehen. *Randzuflüsse* existieren an der Süd- und Westgrenze. Eine Quantifizierung der *Randzuflüsse* erfolgt mittels Abschätzung der Grundwasserneubildungsmenge in den an den *Modellraum* angrenzenden Teileinzugsgebieten (*Bilanzraum*), die sich aus der Morphologie ergeben. Es wird vorausgesetzt, dass die oberirdischen Wasserscheiden mit den unterirdischen gleichgesetzt werden dürfen.

Ein signifikanter vertikaler Abstrom über den Unterkeuper bis in den Oberen Muschelkalk ist durch die vollständig ausgelaugten Grundgipsschichten im südwestlichen *Modellraum* möglich (hydraulisches Fenster). Eine wichtige Rolle für die Wasserbilanz spielt außerdem der kanalisierte Feuerbach im Norden des Modellgebiets, wo die Kanalsohle teilweise mehr als 8 m unter der Geländeoberfläche liegt und der Kanal deshalb eine starke Drainagewirkung entfaltet.

Durch Wasserhaltungen zum Trockenhalten von Gebäuden, Brauchwasserentnahmen, Maßnahmen zur Gefahrenabwehr im öffentlichen Bereich sowie hydraulischen Sanierungen bei Schadensfällen kommt es zu Grundwasserentnahmen in der Größenordnung von 12 l/s. Dieser Betrag ist in Bezug auf den Gesamtgrundwasserumsatz sehr hoch und stellt daher eine beachtliche Einflussgröße für das Strömungsregime dar.

In Tabelle 10 sind die wichtigsten hydrogeologischen und hydrochemischen Parameter und deren Herkunft dargestellt.

Tabelle 10: Wichtige hydrogeologische und hydrochemische Einflussgrößen und deren Herkunft für das Anwendungsbeispiel Feuerbach.

<b>Einflussgröße</b>	<b>Herkunft</b>
Aquifergeometrie	Bohrprofile, Hydrogeologisches Modell
Hydraulische Durchlässigkeit	Pumpversuchsauswertungen, Hydrogeologisches Modell
Grundwasserneubildung	Datenbank für Baden-Württemberg (GWN-BW)
Grundwasserentnahmen	Datenbank der Stadt Stuttgart (Umweltamt)
Drainagen, Kanäle	Datenbank der Stadt Stuttgart (Tiefbauamt)
effektive Porosität	Abgeschätzt aus speicherwirksamer Porosität
Dispersivität	Anpassung im Rahmen der Modellkalibrierung
Schadstoffquellen	Indirekte Bestimmung von Lage und Quellstärke im Rahmen der Transportkalibrierung auf der Basis gemessener Konzentrationen im Grundwasser
Abbauraten	Kein Abbau; Transportspezies ist die Summe der LCKW (PER+TRI+CIS+VC)
Sorption	keine Sorption angenommen

### A4.3.3 Numerisches Strömungs- und Transportmodell

#### A4.3.3.1 Modellgebiet und Grundwasserströmung

Für das Untersuchungsgebiet wurde ein dreidimensionales *numerisches Grundwasserströmungs- und Transportmodell* aufgebaut. Als Rechenprogramme wurden die Finite-Differenzen-Modelle MODFLOW (MCDONALD UND HARBAUGH, 1988) für die Grundwasserströmung und MT3DMS (ZHENG UND WANG, 1999) für den Stofftransport verwendet, zur Erleichterung der Dateneingabe und zur Darstellung der Ergebnisse diente die Oberfläche PMWIN-Pro (CHIANG, 2003). Ein dreidimensionaler Ansatz war hier unbedingt erforderlich, weil nur so die teilweise intensiven hydraulischen Wechselwirkungen zwischen den verschiedenen *Grundwasserstockwerken* realistisch nachgebildet werden konnten.

Das aktive Modellgebiet ist in seiner lateralen Ausdehnung identisch mit dem Gebiet des *Hydrogeologischen Modells*. Das Rechengitter erstreckt sich in Ost-West-Richtung über 2950 m und in Nord-Süd-Richtung über 2700 m. Die horizontale *Diskretisierung* beträgt einheitlich 10 m x 10 m. Für das Strömungsmodell alleine wäre möglicherweise eine gröbere Auflösung ausreichend gewesen, die Transportberechnungen verlangen jedoch grundsätzlich relativ hohe räumliche Auflösungen.

In der Vertikalen umfasst das Modell die fünf *Grundwasserleiter* Quartär, Mittlerer Gips-horizont, Dunkelrote Mergel, Bochinger Horizont und Grundgipsschichten. Jeder *Grundwasserleiter* wurde mit jeweils einer Modellschicht aufgelöst. Insgesamt ergaben sich aus den 295 Zellen in x-Richtung, den 270 Zellen in y-Richtung und den 5 Schichten 398.250 Rechenknoten.

Ziel der Strömungsberechnungen war die quantitative Erfassung und Nachbildung der Grundwasserströmung im Projektgebiet und damit die Bereitstellung der Strömungsbasis für das *Transportmodell*. Mithilfe der Transportberechnungen wurde dann die aktuelle Verteilung der LCKW im Modellgebiet nachgebildet, wobei das Hauptaugenmerk auf der Identifizierung und Quantifizierung der Schadstoffherde lag.

Zur Übernahme der Aquiferkenndaten aus dem *Hydrogeologischen Modell* in das numerische Modell wurde eine spezielle grafische Schnittstelle entwickelt. Diese gewährleistete, dass die Daten detailgetreu übernommen werden konnten (siehe Abbildung 36). Nach der Dateneingabe wurde die Modellgeometrie auf Plausibilität geprüft und gegebenenfalls korrigiert.

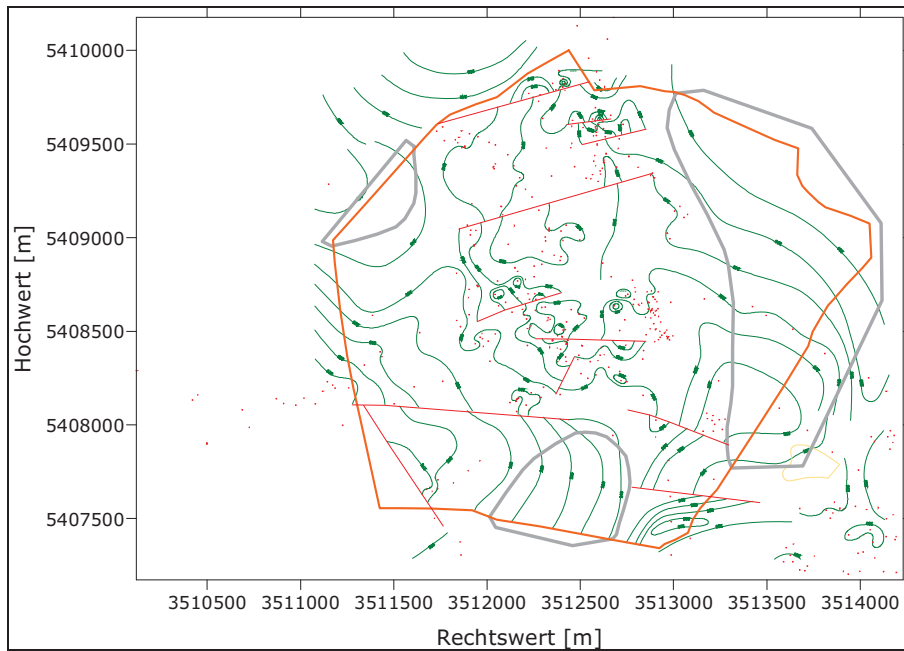


Abbildung 35: Isolinien der Basislage der Dunkelroten Mergel (grüne Linien) und Verlauf der Störungen im Modellgebiet (rote Linien). Das Modellgebiet ist rot umrandet, in grau umrandeten Bereichen sind die Dunkelroten Mergel aufgrund ihres Gipsgehaltes hydraulisch inaktiv

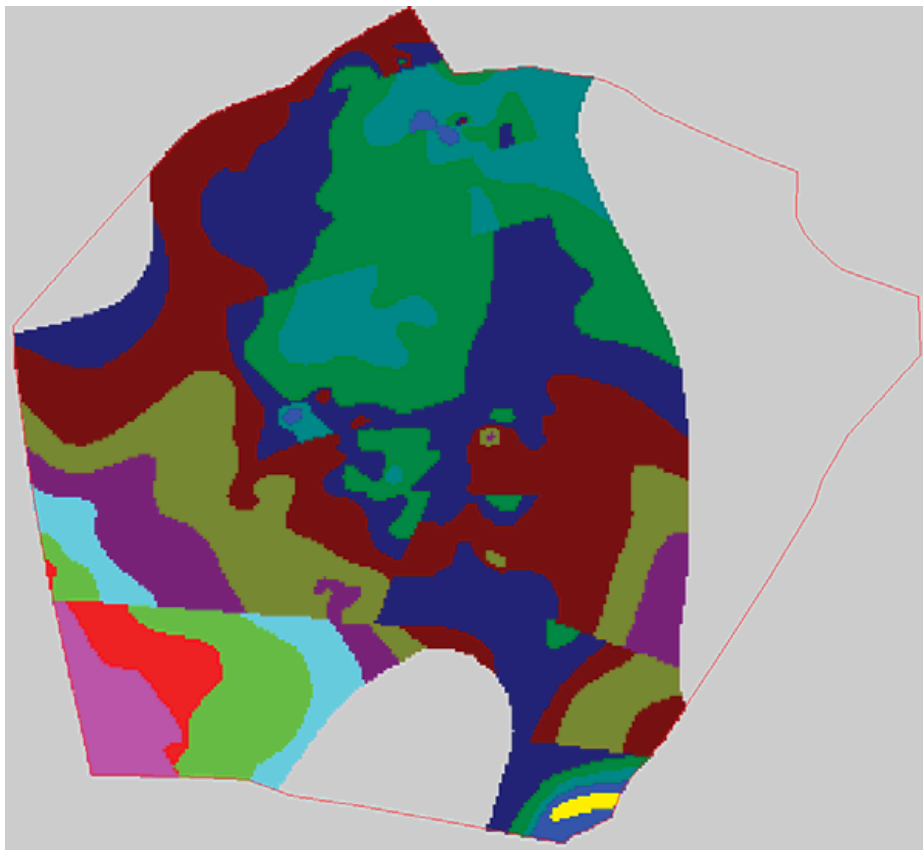


Abbildung 36: Basis der Dunkelroten Mergel im numerischen Modell. Gleiche Farben bedeuten Flächen gleicher Basislagen. Die Verteilung ist eine direkte Kopie der Basislagen aus dem *Hydrogeologischen Modell* (siehe Abbildung 35). Das Modellgebiet ist rot umrandet, graue Bereiche sind inaktiv.

Das Strömungsmodell wurde *stationär kalibriert*. Die Referenzmesswerte entstammen einer im Rahmen des MAGIC-Projekts durchgeführten Stichtagsmessung vom Februar 2007 mit 152 gemessenen Wasserständen. Die wesentlichen Stellgrößen bei der *Kalibrierung* waren die *Randzuflüsse* in das Modellgebiet und der Kontakt zwischen den Grundgipsschichten und dem Unterkeuper im Liegenden. Außerdem war es erforderlich, die Aquifergeometrie lokal anzupassen, beispielsweise wenn ein aktiver Förderbrunnen im Modell fälschlicherweise trocken gefallen war. Die hydraulische Durchlässigkeit wurde weitestgehend unverändert aus dem *Hydrogeologischen Modell* übernommen, lediglich der nördliche Teil der Grundgipsschichten, in dem die Messstellendichte gering war, erforderte eine Anpassung.

Im Verlauf von 59 Modellläufen konnte die mittlere Abweichung zwischen den gemessenen und den berechneten Wasserständen auf 4 % des maximalen gemessenen Wasserstandsunterschiedes im Modellgebiet reduziert werden. Die *Modellkalibrierung* war damit trotz der teilweise komplizierten hydrogeologischen Verhältnisse und der Annahme eines Kontinuummodells auch für die tieferen Gipskeuperschichten erfolgreich. Entscheidend für das Gelingen der Strömungsmodellierung war die zuvor beschriebene Entwicklung des detaillierten dreidimensionalen *Hydrogeologischen Modells*.

#### **A4.3.3.2 Stofftransport**

Auf der Basis des kalibrierten Strömungsmodells wurde dann der Stofftransport simuliert. Als Transportspezies wurde die molare Summe der LCKW Tetrachlorethen, Trichlorethen, cis-1,2-Dichlorethen und Vinylchlorid definiert. Diese summarische Beschreibung hat den Vorteil, dass eine möglicherweise stattfindende reduktive Dechlorierung, bei der höher chlorierte Ethene in die niedriger chlorierten umgewandelt werden, im Modell nicht explizit simuliert werden muss. Dadurch konnte der generell hohe Kalibrierungsaufwand für dieses Modell reduziert werden.

Die *effektive Porosität* zur Umwandlung der *Filtergeschwindigkeiten* aus dem Strömungsmodell in die für den Transport benötigten *Abstandsgeschwindigkeiten* wurde zu 2 % abgeschätzt. Zur Berechnung des Stofftransports wurde ein *upwind-gewichtetes* Finite-Differenzen-Verfahren eingesetzt. Dieses Verfahren ist sehr robust, neigt jedoch zur Erzeugung einer künstlichen Vermischung (*numerische Dispersion*, siehe Kapitel A2.2.2). Um den Einfluss der *Dispersion* auf den Stofftransport und damit die Verdünnung der Schadstoffe dennoch nicht zu überschätzen, wurde nur diese künstliche *Dispersion* verwendet, um die Stoffvermischung im Modell zu simulieren. Dies führt bei der gewählten Gitterweite von 10 m zu einer *Längsdispersivität* von ca. 5 m.

Zur *Kalibrierung* des *Transportmodells* wurde eine nahezu *stationäre* Stoffverteilung berechnet. Um diese zu erzeugen, wurden im Modellgebiet verteilte Schadensherde angenommen und deren Lage und Quellstärke (LCKW-Freisetzung pro Zeit) solange variiert, bis die gemessenen LCKW-Konzentrationen aus 470 Messstellen im Projektgebiet möglichst gut nachgebildet werden konnten. Eine Berechnung der Startkonzentrationen durch eine zeitlich vorgeschaltete Simulation ist der direkten Verwendung einer interpolierten Stichtagsmessung immer vorzuziehen, auch wenn dadurch der Rechenaufwand erhöht wird (siehe Kapitel 4.5.1).

Die bei der *Kalibrierung* bestimmte Konzentrationsverteilung diente als Startverteilung für die Simulation von 37 im Rahmen des Projekts durchgeführten Immissionspumpversuchen (IPV). Die Nachbildung der IPV diente zur *Validierung* des *Transportmodells*. Dabei wurden die Grundwasserströmung und der Stofftransport *instationär* simuliert. Die Berechnungen beginnen ein Jahr vor Beginn der eigentlichen IPV, um die Entwicklung der Grundwasserströmung und des Stofftransports im Vorfeld der IPV realistisch nachbilden zu können.

Insgesamt wurde der Simulationszeitraum für die 37 IPV in 55 Abschnitte mit jeweils unterschiedlichen Förderraten unterteilt. Dadurch konnte das Ein- und Ausschalten der Pumpen und gegebenenfalls auch die Variationen der Förderraten während eines Pumpversuchs detailliert nachgebildet werden. Zur Nachbildung der meisten IPV mussten nur geringfügige oder keine weiteren Anpassung am Transportmodell mehr vorgenommen werden, d.h. die *Modellvalidierung* bestätigte weitestgehend die Annahmen aus der *Modellkalibrierung*.

#### **A4.3.4 Ergebnisse der numerischen Modellrechnungen**

Zur Nachbildung der beobachteten Konzentrationen waren 220 Modellzellen mit Schadstoffeintrag notwendig. Die Quellstärken der einzelnen Zellen unterscheiden sich teilweise um Größenordnungen, wobei die gesamte Freisetzungsrate im Modell 3,2 Mol CKW/d beträgt. Unter der Annahme, dass die CKW zu hundert Prozent aus Tetrachlorethen bestünden, entspricht dies einer Freisetzungsrate von 531 g/d.

Berechnete Konzentrationsverteilungen für den April 2007 (Beginn der IPV) zeigt die Abbildung 37. Das Wechselspiel der Schadstofffreisetzung aus den vielen einzelnen Schadstoffherden und der stark durch Wasserentnahmen und Drainagen geprägten Grundwasserströmung führt zu einem komplexen Muster verschieden langer Schadstofffahnen. Die Interpretation der Fahnen hinsichtlich ihres Ursprungs wird dabei vor allem durch vertikale Strömungsprozesse und das Zusammenfallen mehrerer Einzelfahnen in Fahnenkonglomeraten erschwert.

Mithilfe einer speziellen Sensitivitätsanalyse kann der Beitrag einzelner Schadensherde zu einer zusammengesetzten Schadstofffahne für einen bestimmten Ort rechnerisch analysiert werden. Dazu werden alle eventuell relevanten Schadensherde im Anstrom des ausgewählten Orts nacheinander im Modell abgestellt und der Einfluss des Abschaltens auf die Schadstoffkonzentration am Ort berechnet. Diese Vorgehensweise kann rechenintensiv werden, da für jeden betrachteten Ort und jeden untersuchten Schadensherd ein eigener Rechenlauf erforderlich ist, aber sie liefert dafür auch die prozentuale Beteiligung eines Schadensherds an der Schadstoffkonzentration des ausgewählten Orts. Diese Information kann aus der einfachen Betrachtung einer interpolierten Schadstofffahne nicht gewonnen werden.

Die Ergebnisse des integralen Modellansatzes können herangezogen werden, um die einzelfallbezogene Altlastenerkundung im Projektgebiet zu unterstützen. Beispielsweise ist es möglich, auf Basis der mit dem Modell ermittelten Schadstoffeintragsraten und der berechneten Fahnenlängen eine Dringlichkeitsskala für die Bearbeitung der einzelnen Schadensfälle zu erstellen. Das regionale Modell ermöglicht auch, den einzelnen Schadensfall in sein hydraulisches und hydrochemisches Umfeld einordnen zu können.

Das numerische Modell erlaubt es weiterhin, im Rahmen einer *Szenariotechnik* die Auswirkungen unterschiedlicher Annahmen zu zukünftigen Strömungs- und Transportverhältnissen zu prognostizieren. Beispielhaft ist in Abbildung 38 dargestellt, wie sich die Schadstoffsituation bis zum Jahr 2012 entwickeln wird, wenn die aktuellen Förderraten der Sanierungs- und Entwässerungsbrunnen beibehalten werden, oder wenn, zur Kennzeichnung einer absoluten Extremsituation, alle Brunnen abgestellt würden. Dabei wird deutlich, dass es bei einer erheblichen Reduzierung der Wasserförderung im Modellgebiet zu deutlich ausgeprägten Schadstofffahnen und einem Schadstoffabstrom über den Feuerbachkanal am Nordrand des Modellgebiets kommen wird.

Das Beispiel zeigt, dass Grundwassermodelle auch bei komplexen hydrogeologischen Bedingungen erfolgreich und nutzbringend im Rahmen der Altlastenbearbeitung eingesetzt



werden können. Voraussetzung ist jedoch die Entwicklung eines detaillierten, die speziellen lokalen Verhältnisse berücksichtigenden *Hydrogeologischen Modells*.

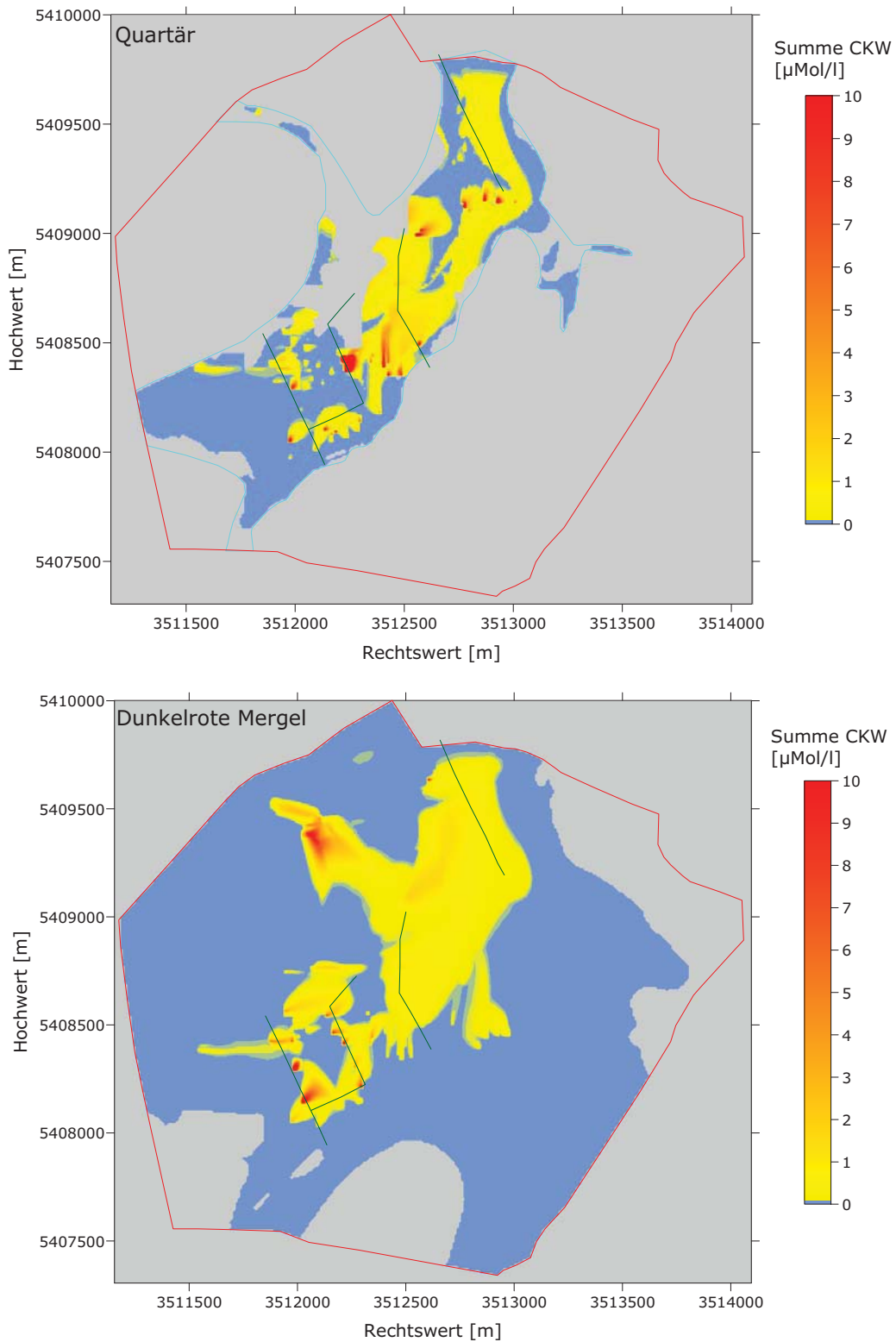


Abbildung 37: Berechnete LCKW-Verteilung für den April 2007 in den quartären Sedimenten (oben) und in den Dunkelroten Mergeln (unten). Das Modellgebiet ist rot umrandet, graue Bereiche sind inaktiv.

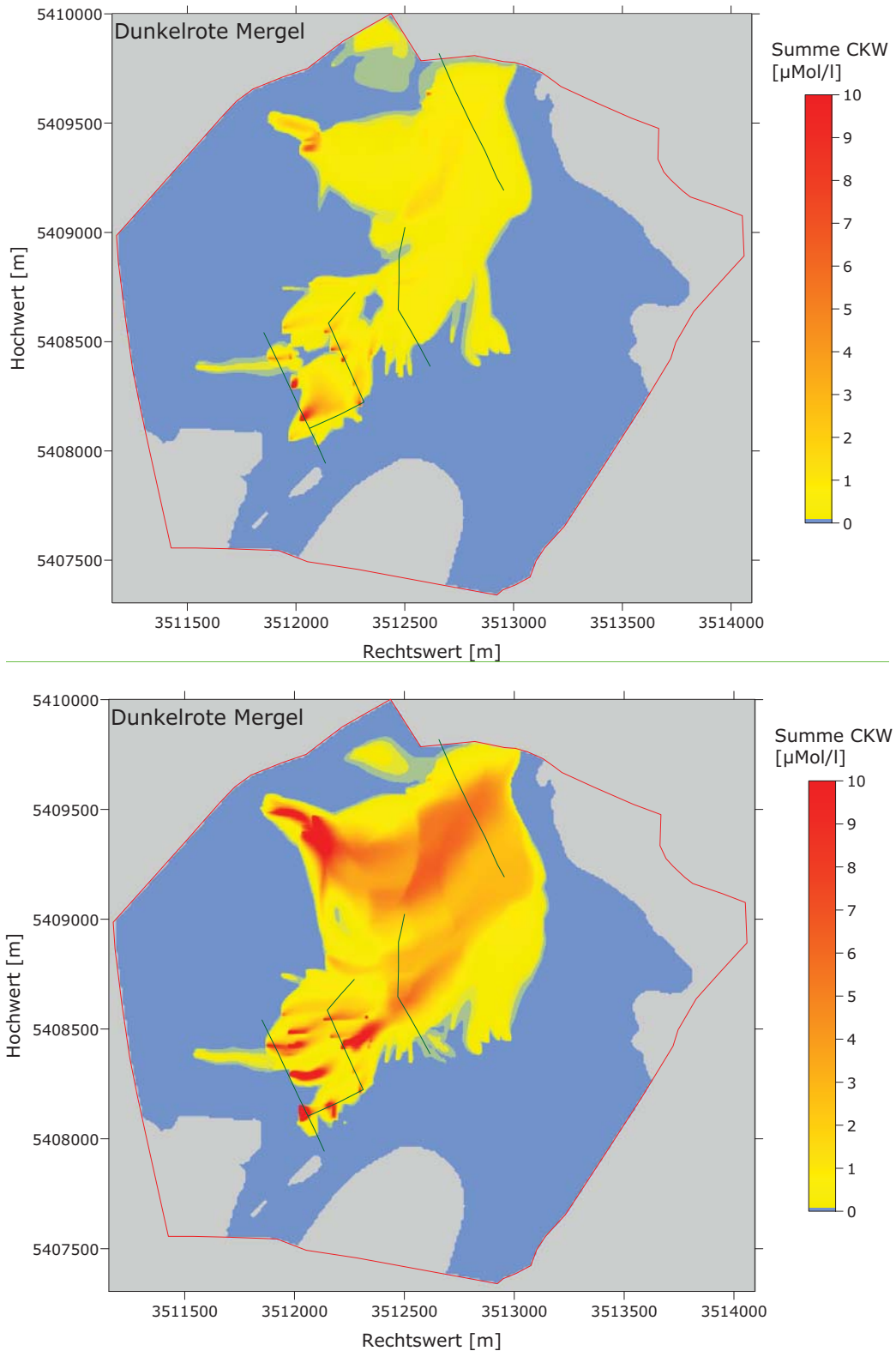


Abbildung 38: Berechnete LCKW-Verteilung für den April 2012 in den Dunkelroten Mergeln. Für das obere Bild wurde angenommen, dass alle Brunnen unverändert weiterbetrieben werden, bei der Berechnung für das untere Bild wurden sämtliche Brunnen im Modellgebiet abgestellt.

## A5 Glossar

<i>Ab initio Rechnung</i>	Eine Stofftransportsimulation, die die Ausbreitung des Wasserinhaltsstoffs vom Anbeginn des Stoffeintrags berechnet.
<i>Abbau erster Ordnung</i>	Eine Abbaukinetik ohne Berücksichtigung chemischer Reaktionen. Das Ausmaß des Abbaus 1. Ordnung ist alleine von der Konzentration des betreffenden Stoffs und der Zeit abhängig, er führt zu einer exponentiellen Konzentrationsabnahme. Steuergröße ist der → <i>Abbaukoeffizient</i> bzw. die → <i>Halbwertszeit</i> , → <i>Reaktionskinetik</i>
<i>Abbaukoeffizient</i>	Allgemein: Steuergrößen in Stofftransportmodellen, die das zeitliche Verhalten von Reaktionen bestimmen, die zum Abbau einer Spezies führt. Häufig wird unter dieser Steuergröße der Abbaukoeffizient des → <i>Abbaus 1. Ordnung</i> verstanden.
<i>Abbauprozesse</i>	Prozesse, die zur nicht umkehrbaren Mineralisierung eines Wasserinhaltsstoffes führen, ggf. unter Bildung von Metaboliten.
<i>Abstandsgeschwindigkeit</i>	Mittlere Fließgeschwindigkeit des Grundwassers in einem porösen Medium zwischen zwei Punkten, errechnet sich aus der → <i>Filtergeschwindigkeit</i> dividiert durch die → <i>effektive Porosität</i> . Sie ist daher immer größer als die → <i>Filtergeschwindigkeit</i> .
<i>Advektion</i>	maßgeblicher Stofftransportprozess in Grundwasserleitern, er berücksichtigt den Transport auf Basis der → <i>Abstandsgeschwindigkeit</i> .
<i>Anfangsbedingung</i>	Die Lösung von Differentialgleichungen in numerischen Modellen erfordert u.a. die Definition von Anfangsbedingungen. Bei einem Grundwasserströmungsmodell kann dies z.B. durch Vorgabe eines gemessenen Grundwasserhöhenleichenplanes erfolgen.
<i>Anfangsverteilung</i>	Synonym für die → <i>Anfangsbedingung</i> einer Stofftransportsimulation. → <i>Ab initio Rechnung</i>
<i>Anisotropie</i>	Eine Anisotropie z.B. eines Gesteinskörpers liegt vor, wenn dessen physikalische Eigenschaften in unterschiedlichen Raumrichtungen eine unterschiedliche Größe annehmen. Beispiele: Durchlässigkeit eines Kluftgesteins, Scherfestigkeit eines Schiefers, vertikale Durchlässigkeitsunterschiede eines geschichteten Lockergesteins.
<i>Anthropogene Spurenstoffe</i>	Stoffe, die natürlich in der Umwelt nicht vorkommen und durch menschliche Aktivitäten freigesetzt wurden. Manche Stoffe besitzen eine große Mobilität und Persistenz, so dass sie - meist in geringer Konzentration - in Boden, Wasser und Luft weit verbreitet sind. Beispiel Fluorchlorkohlenwasserstoffe FCKW
<i>Aquifer</i>	Synonym für → <i>Grundwasserleiter</i>
<i>Aquiferparameter</i>	Physikalische Eigenschaften eines → <i>Grundwasserleiters</i> , die seine hydraulischen Eigenschaften kennzeichnen. Beispiele: → <i>Durchlässigkeitsbeiwert</i> , → <i>Speicherkoeffizient</i>
<i>Aussagegebiet</i>	Synonym für → <i>Aussageraum</i>

<i>Aussageraum</i>	Der Bereich eines Modellgebiets, für den ein Modell Aussagen liefern soll.
<i>Basislauf</i>	Referenzberechnung im Rahmen einer → <i>Szenariotechnik</i> .
<i>Bilanzraum</i>	Der Teil eines Untersuchungsgebiets, über dessen Grenzen eine Wasserbilanz möglich ist. → <i>Modellraum</i>
<i>Charakteristiken-Verfahren</i>	Diskretisierungsverfahren bei → <i>Transportmodellen</i> . Gehört zur Gruppe der "particle tracking" Verfahren.
<i>Courant-Zahl</i>	Numerisches Stabilitätskriterium.
<i>Deterministisches Modell</i>	Ein Modell, in dem alle Parameter eindeutig festgelegt sind. → <i>Stochastisches Modell</i>
<i>Diffusion</i>	Strömungsunabhängiger Stofftransportprozess. Treibende Kraft sind Konzentrationsunterschiede. Ist in Grundwasserleitern meist von untergeordneter Bedeutung, kann aber in gering durchlässigen Gesteinen den dominierenden Prozess darstellen. → <i>Tortuosität</i>
<i>Diskretisierung</i>	Räumliche und zeitliche Gliederung eines Modellgebiets bzw. eines Modellzeitraumes in eine endliche Anzahl von Modellelementen bzw. Zeitschritten. → <i>Zeitliche Diskretisierung</i> , → <i>Modellgitter</i>
<i>Diskretisierungsverfahren</i>	Verfahren zur räumlichen Aufgliederung eines Modellraumes. → <i>Finite Elemente Methode</i> , → <i>Finite Differenzen Methode</i>
<i>Dispersion</i>	Transportprozess, dessen Ursache in den unterschiedlich langen Fließwegen und unterschiedlichen Fließgeschwindigkeiten des Grundwassers innerhalb des Grundwasserleiters liegt. Die Dispersion findet in allen Skalenebenen statt und führt zur Aufweitung einer Fahne infolge dieser Vermischungsprozesse längs und quer zum advektiven Transport. → <i>Makrodispersion</i> , → <i>kommergestbedingte Dispersion</i> , → <i>longitudinale Dispersion</i> , → <i>transversale Dispersion</i> , → <i>Dispersionskoeffizient</i> , → <i>Dispersivität</i>
<i>Dispersionskoeffizient</i>	Produkt aus → <i>Abstandsgeschwindigkeit</i> und → <i>Dispersivität</i>
<i>Dispersivität</i>	Maßzahl mit der Dimension einer Länge zur Quantifizierung der → <i>Dispersion</i> . → <i>Längs- und Querdispersivität</i>
<i>Durchlässigkeitsbeiwert</i>	( $k_f$ -Wert) Proportionalitätsfaktor im DARCY Gesetz mit der Dimension einer Geschwindigkeit. Er dient der Quantifizierung der Wasserdurchlässigkeit insbesondere von Gesteinen. → <i>Permeabilität</i>
<i>Effektive Porosität</i>	Der Anteil des Porenvolumens, der effektiv (transportwirksam) durchströmt wird. Formal streng zu unterscheiden von der → <i>Speichernutzbaren Porosität</i>
<i>Effluenz</i>	Wasser tritt aus dem Grundwasser in ein Oberflächengewässer über. → <i>Influenz</i>
<i>ENA</i>	Abkürzung für "Enhanced Natural Attenuation", unterstützter natürlicher Abbau (von Schadstoffen).
<i>Euler-Verfahren</i>	Gruppe von → <i>Diskretisierungsverfahren</i> bei → <i>Stofftransportmodellen</i> , die auf einem → <i>Modellgitter</i> basieren.

<i>Explizite Verfahren</i>	Bei expliziten Verfahren werden für die unbekanntes Piezometerhöhen bzw. Konzentrationen im neuen Zeitintervall die Ergebnisse des vorangegangenen Zeitschritts benutzt. → <i>Implizite Verfahren</i>
<i>Festkonzentration</i>	In → <i>Transportmodellen</i> ein Modellknoten mit vorgegebener Konzentration (Randbedingung 1. Art).
<i>Festpotenzial</i>	Synonym für → <i>Festpotenzialknoten</i> .
<i>Festpotenzialknoten</i>	In Strömungsmodellen ein Modellknoten mit vorgegebener Piezometerhöhe (Randbedingung 1. Art).
<i>Filtergeschwindigkeit</i>	Flächenspezifische ( $m^2$ ) Durchflussrate ( $m^3/s$ ) durch ein poröses Medium mit der Dimension einer Geschwindigkeit $m^3/s/m^2 = m/s$ . Häufig auch als DARCY-Geschwindigkeit bezeichnet. Sie beschreibt nicht unmittelbar die → <i>Fließgeschwindigkeit</i> des Grundwassers. → <i>Abstandsgeschwindigkeit</i>
<i>Finite Differenzen Methode</i>	Weit verbreitetes räumliches und zeitliches → <i>Diskretisierungsverfahren</i> numerischer Modelle.
<i>Finite Elemente Methode</i>	Weit verbreitetes räumliches → <i>Diskretisierungsverfahren</i> numerischer Modelle.
<i>Fließgeschwindigkeit</i>	Die tatsächliche Fließgeschwindigkeit des einzelnen Wasserpartikels im Grundwasserleiter auf Porenebene ist nicht messbar. Hilfsweise werden die Begriffe → <i>Filtergeschwindigkeit</i> und → <i>Abstandsgeschwindigkeit</i> zur Quantifizierung der Fließgeschwindigkeit des Grundwassers herangezogen.
<i>Freie Grundwasseroberfläche</i>	Bei einer freien bzw. ungespannten Grundwasseroberfläche liegt die → <i>Piezometerhöhe</i> innerhalb des → <i>Grundwasserleiters</i> .
<i>FREUNDLICH-Isotherme</i>	Der funktionale Zusammenhang zwischen am Korngerüst sorbierter und in Wasser gelöster Masse ist im Fall der Freundlich Isotherme nichtlinear, wodurch z.B. berücksichtigt werden kann, dass bei höheren Konzentrationen in der Lösung verhältnismäßig weniger sorbiert werden kann. → <i>Langmuir-Isotherme</i> , → <i>Lineare Isotherme</i>
<i>Geologisches Strukturmodell (GSM)</i>	Räumliches Modell der geologischen Struktur eines Standortes. → <i>HGSM</i> , → <i>MSE</i>
<i>Gespannte Grundwasseroberfläche</i>	Bei einer gespannten Grundwasseroberfläche liegt die → <i>Piezometerhöhe</i> stets oberhalb der den Grundwasserleiter nach oben abschließenden Deckfläche.
<i>Gewichtungsverfahren</i>	Verfahren, um den diskontinuierlichen Ansatz des Stofftransports bei → <i>Gitterverfahren</i> → <i>Finite Differenzen</i> -, → <i>Finite Elemente Methode</i> zu berücksichtigen.
<i>GIS</i>	Abkürzung für "Geografisches Informationssystem".
<i>Gitter-PECLET-Zahl</i>	Numerisches Stabilitätskriterium
<i>Gitterverfahren</i>	Gruppe von → <i>Diskretisierungsverfahren</i> bei → <i>Stofftransportmodellen</i> , die auf einem → <i>Modellgitter</i> basieren. → <i>Gewichtungsverfahren</i> , → <i>Euler-Verfahren</i>
<i>Grundwasserdruckhöhe</i>	Synonym für → <i>Piezometerhöhe</i>



<i>Grundwasserkörper</i>	Ein abgrenzbares Grundwasservorkommen.
<i>Grundwasserleiter</i>	Ein wasserdurchlässiges Gestein, welches in nennenswertem Umfang eine gesättigte Wasserströmung erlaubt.
<i>Grundwassermonitoring</i>	Messung, Auswertung und Dokumentation grundwasserbezogener Daten.
<i>Grundwasserneubildung</i>	1. Der Teil des durch versickernde Niederschläge gebildeten Sickerwassers, der aus der ungesättigten Bodenzone in die gesättigte übertritt und auf diese Weise das Grundwasser anreichert. 2. Durch → <i>Influenz</i> an Oberflächengewässern neu gebildetes Grundwasser.
<i>Grundwasserstockwerk</i>	Liegen übereinander mehrere durch gering- bzw. undurchlässige Schichten getrennte Grundwasserleiter vor, bilden diese jeweils gesonderte Grundwasserstockwerke.
<i>Grundwasserströmungsmodellierung</i>	→ <i>Numerische Grundwasserströmungsmodellierung</i>
<i>Halbwertszeit</i>	Bei einer → <i>Reaktionskinetik</i> 1. Ordnung die Zeit, die vergeht, bis die Konzentration des betrachteten Stoffs um die Hälfte abgenommen hat.
<i>Heterogenität</i>	Heterogene Körper sind verschiedenartig aufgebaut und besitzen ungleichförmige physikalische Eigenschaften. Dies gilt in besonderem Maße für Untergrundeigenschaften.
<i>Homogenität</i>	Homogene Körper sind gleichartig aufgebaut und besitzen gleichförmige physikalische Eigenschaften.
<i>Hydrogeologisch-geochemisches Strukturmodell (HGSM)</i>	Besteht aus hydrogeologisch-geochemischen Struktureinheiten mit ähnlichen hydraulischen und geochemischen Eigenschaften, welche auf Basis → <i>modellstratigraphischer Einheiten</i> (MSE) entwickelt werden. → <i>Geologisches Strukturmodell</i>
<i>Hydrogeologisches Modell</i>	Abstraktion der Wesensmerkmale eines → <i>hydrogeologischen Systems</i> im 3D Raum. Einzelne Komponenten können eine zeitliche Dimension beinhalten. → <i>Numerisches Grundwassermodell</i> .
<i>Hydrogeologische Systemanalyse</i>	Analyse der Wesensmerkmale eines → <i>hydrogeologischen Systems</i> .
<i>Hydrogeologisches System</i>	Gesamtheit der individuellen Ausbildung aller hydrogeologischen Strukturen und Prozesse an einem Standort im 3-D-Raum. Einzelne Komponenten können eine zeitliche Dimension beinhalten.
<i>Implizite Verfahren</i>	Bei impliziten Verfahren werden die Piezometerhöhen bzw. Konzentrationen in den zeitlichen Differenzentermen innerhalb des Zeitintervalls $t + \Delta t$ angesetzt. → <i>Explizite Verfahren</i>
<i>Influenz</i>	Wasser tritt aus einem Oberflächengewässer in das Grundwasser über. → <i>Effluenz</i>
<i>Inhomogenität</i>	Gegenteil von → <i>Homogenität</i> . → <i>Heterogenität</i>
<i>Instationär</i>	Instationäre Verhältnisse herrschen in einem Grundwasserströmungsfeld, wenn sich die Piezometerhöhen $h$ in der Zeit ändern, d.h. $dh/dt \neq 0$ . → <i>stationär</i> , → <i>quasistationär</i>

<i>Instationäre Kalibrierung</i>	Eine → <i>Modellkalibrierung</i> unter → <i>instationären</i> Bedingungen.
<i>Isotropie</i>	Eine Isotropie z.B. eines Gesteinskörpers liegt vor, wenn dessen physikalische Eigenschaften in unterschiedlichen Raumrichtungen gleich groß sind.
<i>Kalibrierung</i>	→ <i>Modellkalibrierung</i> , → <i>stationäre Kalibrierung</i> , → <i>Instationäre Kalibrierung</i>
<i>Kolmationsschicht</i>	Behinderung des Austauschs zwischen Oberflächengewässer und Grundwasser durch mechanische, chemische und biologische Prozesse. → <i>Leakageknoten</i>
<i>Konservativer Transport</i>	Transport eines Wasserinhaltsstoffs, der nur der → <i>Advektion</i> , → <i>Dispersion</i> , → <i>Diffusion</i> und ggf. → <i>Retardation</i> unterliegt. Ein Abbau findet nicht statt. Der Transport ist konservativ bzw. massenerhaltend.
<i>Kontinuumansatz</i>	Bei dem in numerischen Modellen verwendeten Kontinuumansatz wird aufgrund der räumlichen Aufgliederung (→ <i>Diskretisierung</i> ) des kontinuierlichen Bodenkörpers in eine endliche Zahl von Modellelementen das Modellelement/die Modellzelle als kleinste Einheit definiert.
<i>Konzeptionelles Standortmodell</i>	Vereinfachende Modellvorstellung zu den wesentlichen einen Standort charakterisierenden Strukturen und Prozessen.
<i>Korngerüstbedingte Dispersion</i>	Transportprozess, dessen Ursache in den unterschiedlich langen Fließwegen und unterschiedlichen Fließgeschwindigkeiten des Grundwassers innerhalb des Grundwasserleiters auf Porenebene liegt. Die Dispersion findet in allen Skalenebenen statt und führt zu einem Auseinandergehen einer Konzentrationsfahne längs und quer zum advektiven Transport. → <i>Dispersion</i> , → <i>Makrodispersion</i> → <i>Dispersivität</i> , → <i>Skalierende Größe</i>
<i>LANGMUIR-Isotherme</i>	Der funktionale Zusammenhang zwischen am Korngerüst sorbierter und in Wasser gelöster Masse ist im Fall der Langmuir Isotherme nichtlinear mit einem oberen Grenzwert, wodurch eine maximale Sorptionskapazität bei höheren gelösten Konzentrationen berücksichtigt werden kann. → <i>Lineare Isotherme</i> , → <i>FREUNDLICH Isotherme</i>
<i>Längs- und Querdispersivität</i>	Die → <i>Dispersion</i> wirkt längs und quer zur Ausbreitungsrichtung. Die → <i>longitudinale Dispersion</i> beschreibt die Vermischung/ das Auseinanderziehen längs der Fahnenachse, die → <i>Transversale Dispersion</i> quer zur Ausbreitungsrichtung. → <i>Dispersivität</i> , → <i>Skalierende Größe</i>
<i>Leakagefaktor</i>	Aus dem DARCY-Gesetz ableitbarer Term zur Quantifizierung des hydraulischen Widerstands an einem → <i>Leakageknoten</i> . → <i>Festpotenzial</i>
<i>Leakageknoten</i>	Modellknoten mit Randbedingung 3. Art
<i>Leakagekoeffizient</i>	Synonym für → <i>Leakagefaktor</i>

<i>Leakage-Randbedingung</i>	Randbedingung 3. Art, Kombination aus Randbedingung 1. und 2. Art, flexible Randbedingung zur Beschreibung des (behinderten) Austauschs zwischen Grundwasser und Oberflächengewässern. → <i>Randbedingungen</i> , → <i>Randbedingung zweiter Art</i>
<i>Lineare Isotherme</i>	Der funktionale Zusammenhang zwischen am Korngerüst sorbierter und in Wasser gelöster Masse ist im Fall der linearen Isotherme linear. Die lineare Isotherme stellt oft eine gute Näherung bei geringen Konzentrationen dar. → <i>LANGMUIR- Isotherme</i> , → <i>FREUNDLICH Isotherme</i>
<i>Longitudinale Dispersion</i>	Die → <i>Dispersion</i> wirkt längs und quer zur Ausbreitungsrichtung. Die longitudinale Dispersion beschreibt die Vermischung längs der Fahnenachse. → <i>Transversale Dispersion</i> , → <i>Dispersivität</i> , → <i>Skalierende Größe</i>
<i>Makrodispersion</i>	Im Gegensatz zur → <i>korngerüstbedingten Dispersion</i> , Transportprozess, dessen Ursache in den unterschiedlich langen Fließwegen und unterschiedlichen Fließgeschwindigkeiten des Grundwassers innerhalb des Grundwasserleiters infolge geologischer Heterogenitäten in der Skala (etwa 0,1 m - 1000 m) liegt. Die Dispersion findet in allen Skalenebenen statt und führt zu einem Auseinanderziehen einer Konzentrationsfahne längs und quer zum advektiven Transport. → <i>Dispersion</i> , → <i>korngerüstbedingte Dispersion</i> , → <i>Skalierende Größe</i>
<i>Mehrschritt-Verfahren</i>	Auch als "Operator Splitting"-Verfahren bezeichnet. Künstliche mathematische Entkoppelung von physikalisch parallel ablaufenden Prozessen. Beispiel: Transport und Reaktion von Wasserinhaltsstoffen.
<i>MNA</i>	Abkürzung für "Monitored Natural Attenuation", überwachter natürlicher Abbau (von Schadstoffen).
<i>MOC-Verfahren</i>	"Method of characteristics" → <i>Charakteristiken-Verfahren</i>
<i>Modelleichung</i>	Synonym für → <i>Modellkalibrierung</i>
<i>Modellgitter</i>	Durch die räumliche → <i>Diskretisierung</i> des Modellraums in eine endliche Zahl von Modellelementen bzw. Modellzellen entsteht ein Modellgitter.
<i>Modellkalibrierung</i>	Systematische Variation der Modellparameter, um eine bestmögliche Modellanpassung an die natürlichen Verhältnisse zu erzielen. → <i>Stationäre Kalibrierung</i> , → <i>Instationäre Kalibrierung</i>
<i>Modellraum</i>	Teil des → <i>Bilanzraums</i> , entspricht der Umgrenzung des Grundwassermodells.
<i>Modellstratigraphische Einheiten (MSE)</i>	Komponenten eines → <i>Geologischen Strukturmodells (GSM)</i> . → <i>Hydrogeologisch-geochemisches Strukturmodell (HGSM)</i>
<i>Modellvalidierung</i>	Überprüfung einer → <i>Modellkalibrierung</i> anhand eines weiteren Grundwassermessdatensatzes.
<i>Modellzeitschritt</i>	Bei instationären Modellen ist der Modellzeitraum in eine endliche Anzahl von Modellzeitschritten diskretisiert. Innerhalb eines Modellzeitschritts sind in der Regel die Randbedingungen konstant. → <i>Diskretisierung</i>

<i>Monitoring</i>	→ <i>Grundwassermonitoring</i>
<i>Multispeziesmodelle</i>	Transportmodell mit mehreren Spezies, die untereinander in Wechselwirkung stehen, z.B. infolge von biochemischen Reaktionen.
<i>Numerische Dispersion</i>	Unerwünschter numerischer Effekt bei → <i>Stofftransportsimulationen</i> mit Hilfe von Gitterverfahren. Kann durch die Einhaltung → <i>numerischer Kriterien</i> minimiert werden. → <i>Dispersion</i>
<i>Numerische Einschwingphase</i>	Kann bei instationären Simulationen (Strömung und Stofftransport) auftreten, wenn die Anfangsbedingungen nicht adäquat formuliert werden können. Diesbezügliche Fehler können i.d.R. durch einen längeren Simulationszeitraum abgefangen werden.
<i>Numerische Grundwassermodelle</i>	Oberbegriff für → <i>Numerische Grundwasserströmungsmodelle</i> und → <i>Transportmodelle</i>
<i>Numerische Kriterien</i>	Kriterien zur mathematischen Absicherung der Berechnungsqualität eines numerischen Verfahrens.
<i>Numerisches Grundwasserströmungsmodell</i>	Lösung der Differentialgleichung der Grundwasserströmung mit Hilfe numerischer Methoden auf der Basis einer Finitisierung des Raumes und der Zeit. Bildet die Voraussetzung für jede → <i>Stofftransportmodellierung</i> . → <i>Numerische Grundwassermodelle</i>
<i>Numerisches Prinzipmodell</i>	Numerisches Grundwassermodell, das die wesentlichen Merkmale eines → <i>konzeptionellen Standortmodells</i> qualitativ zutreffend abbildet.
<i>Nutzbares Porenvolumen</i>	Synonym für → <i>Speicherwirksame Porosität</i>
<i>Oszillation</i>	Unerwünschte numerische Effekte bei gitterbasierten Transportmodellen infolge nicht adäquater Diskretisierung.
<i>particle-tracking-Technik</i>	Gruppe von Diskretisierungsverfahren bei Stofftransportmodellen, die nicht auf einem → <i>Modellgitter</i> basieren und mit Hilfe von virtuellen Partikeln den advektiven Transport auf Basis der Ergebnisse des Strömungsmodells berechnen. → <i>MOC-Verfahren</i> , → <i>Random-Walk-Verfahren</i>
<i>Permeabilität</i>	Die Permeabilität beschreibt die Durchlässigkeit eines porösen Feststoffs für beliebige Fluide. Die Permeabilität ist eine Eigenschaft des porösen Mediums ohne Berücksichtigung der physikalischen Eigenschaften des durchströmenden Fluids. Aus der Permeabilität des porösen Mediums, der dynamischen Viskosität und der Wichte des Fluids kann der → <i>Durchlässigkeitsbeiwert</i> eines porösen Mediums für ein bestimmtes Fluid (z.B. Wasser) berechnet werden.
<i>Piezometerhöhe</i>	Entspricht der Standrohrspiegelhöhe der DIN 4049: Summe aus geodätischer Höhe und Druckhöhe an einem Punkt innerhalb eines Grundwasserkörpers.
<i>Potenzialquelle</i>	Bereiche innerhalb eines Potenzialfeldes, wie es z.B. die Grundwasserströmung bildet, in dem Potenzial aufgebaut wird, wie z.B. an einem punktförmigen Infiltrationsbrunnen oder entlang eines linienförmigen infiltrierenden Fließgewässers. → <i>Quell- und Senkenterme</i>

<i>Potenzialsenken</i>	Bereiche innerhalb eines Potenzialfeldes, wie es z.B. die Grundwasserströmung bildet, in dem Potenzial abgebaut wird, wie z.B. an einem punktförmigen Entnahmebrunnen oder entlang einer linienförmigen Vorflut für das Grundwasser. → <i>Quell- und Senkenterme</i>
<i>Quasistationär</i>	→ <i>Stationäre</i> Verhältnisse in einem Grundwasserströmungsfeld kommen in der Natur praktisch nicht vor. Wenn sich die Piezometerhöhen $h$ in der Zeit vergleichsweise geringfügig ändern ohne Vorhandensein eines Trends, spricht man von quasistationären Verhältnissen. → <i>stationär</i> , → <i>instationär</i>
<i>Quell- und Senkenterme</i>	→ <i>Potenzialquelle</i> , → <i>Potenzialsenke</i> . Oft als "Term" bezeichnet, da sie innerhalb der Differentialgleichung des Potenzialfeldes einen eigenständigen Ausdruck bilden.
<i>Randbedingung erster Art</i>	→ <i>Festpotenzial</i> → <i>Festkonzentration</i>
<i>Randbedingung zweiter Art</i>	Zuflussrandbedingung, im → <i>Modellzeitschritt</i> konstante Flussrate auf dem Randelement. → <i>Randzufluss</i>
<i>Randbedingung dritter Art</i>	→ <i>Leakageknoten</i>
<i>Randbedingungen</i>	Die Lösung von Differentialgleichungen wie auch numerische Modelle benötigen Randbedingungen, um den Zustand an der Grenze eines Gebietes zu definieren. → <i>Festpotenzialknoten</i> , → <i>Festkonzentration</i> , → <i>Leakage-Randbedingung</i> , → <i>Randzufluss</i> , → <i>Transmissions-Randbedingung</i> .
<i>Random-Walk-Verfahren</i>	Diskretisierungsverfahren bei Stofftransportmodellen. Arbeitet mit Zufallsgeneratoren. Gehört zur Gruppe der particle tracking Verfahren. → <i>particle-tracking-Technik</i>
<i>Randzufluss</i>	→ <i>Randbedingung zweiter Art</i> .
<i>Reaktionskinetik</i>	Chemische bzw. biochemische Reaktionen erfolgen oft relativ langsam und gehorchen bezüglich der Reaktionsraten unterschiedlichen zeitlichen Gesetzen, die als Reaktionskinetiken bezeichnet werden.
<i>Retardierung</i>	Konservativer, d.h. massenerhaltender Transportprozess, der zu einer Verlangsamung der mittleren Transportgeschwindigkeit führt. Ursache sind Sorptions- und Desorptionsprozesse zwischen Wasser- und Feststoffphase. → <i>lineare Isotherme</i> . → <i>Retardation</i>
<i>Retardierungsfaktor</i>	Faktor $> 1$ , um den die für den Transport eines Stoffs benötigte Zeit aufgrund von Sorptionsprozessen verlängert wird. Nur anwendbar bei → <i>linearer Isotherme</i> . → <i>Retardation</i>
<i>Schadstofffracht</i>	Transportierte Masse eines Schadstoffs pro Zeiteinheit.
<i>Screeningtools</i>	Vereinfachende i.d.R. analytische Modellinstrumente .
<i>Sickerwasserrate</i>	Wasservolumenstrom in der ungesättigten Bodenzone, hervorgerufen durch Versickerung z.B. von Niederschlag und aus influenten Gewässern.
<i>Skalierende Größe</i>	Eine Größe, die mit der räumlichen Ausdehnung des betrachteten Phänomens wächst. Beispiel: → <i>Dispersivität</i>



<i>Speicherkoefizient</i>	DIN 4049: Integral des $\rightarrow$ <i>spezifischen Speicherkoefizienten</i> über die Grundwassermächtigkeit.
<i>Speichernutzbare Porosität</i>	Synonym für $\rightarrow$ <i>Speicherwirksame Porosität</i> .
<i>Speicherwirksame Porosität</i>	Der durch die Schwerkraft entwässerbare Hohlraumanteil eines Lockergesteins. Formal zu unterscheiden von der $\rightarrow$ <i>Effektiven Porosität</i> . Synonym für $\rightarrow$ <i>Speichernutzbare Porosität</i> , $\rightarrow$ <i>Nutzbare Porenvolumen</i> .
<i>spezifischer Speicherkoefizient</i>	DIN 4049: Änderung des gespeicherten Wasservolumens je Volumeneinheit des Grundwasserraumes bei Änderung der Standrohrspiegelhöhe um 1 m.
<i>stationäre Kalibrierung</i>	Eine $\rightarrow$ <i>Modellkalibrierung</i> unter $\rightarrow$ <i>stationären</i> Bedingungen.
<i>Stationär</i>	Stationäre Verhältnisse herrschen in einem Grundwasserströmungsfeld, wenn sich die Piezometerhöhen $h$ mit der Zeit nicht ändern, d.h. $dh/dt = 0$ . $\rightarrow$ <i>instationär</i> , $\rightarrow$ <i>quasistationär</i>
<i>Stochastisches Modell</i>	Ein Modell, in dem einzelne/alle Parameter nicht eindeutig bestimmt sind, sondern statistisch verteilt sind. $\rightarrow$ <i>Deterministisches Modell</i>
<i>Stofftransportmodellierung</i>	Lösung der Differentialgleichung des Stofftransports mit Hilfe numerischer Methoden. Ein $\rightarrow$ <i>Transportmodell</i> benötigt immer als Voraussetzung ein Strömungsmodell. $\rightarrow$ <i>Transportgleichung</i> , $\rightarrow$ <i>Numerisches Grundwasserströmungsmodell</i>
<i>Stofftransportsimulation</i>	Synonym für $\rightarrow$ <i>Stofftransportmodellierung</i>
<i>Szenarietechnik</i>	Verfahren, um der Unsicherheit eines deterministischen Modells gerecht zu werden, in dem sensitive Modellparameter in sinnvollem Rahmen gezielt variiert werden. $\rightarrow$ <i>worst-case</i>
<i>Tortuosität</i>	Bei der Stofftransportmodellierung verwendeter Faktor zwischen 0 und 1 zur Abminderung des Diffusionskoeffizienten einer Modellspezies in reinem Wasser zur Berücksichtigung des naturgemäß verwinkelten Porenraumes. $\rightarrow$ <i>Diffusion</i>
<i>Transmissions-Randbedingung</i>	Besondere Randbedingung am Abstromrand einer Transportmodellierung. Erlaubt das Verlassen der transportierten Wasserinhaltsstoffe entsprechend dem Volumenstrom über den Rand.
<i>Transmissivität</i>	Produkt aus $\rightarrow$ <i>Durchlässigkeitsbeiwert</i> und Mächtigkeit eines Grundwasserleiters. DIN 4049: Integral des $\rightarrow$ <i>Durchlässigkeitsbeiwertes</i> über die wassererfüllte Mächtigkeit.
<i>Transportgleichung</i>	Differentialgleichung des Stofftransports unter Berücksichtigung der $\rightarrow$ <i>Advektion</i> , $\rightarrow$ <i>Dispersion</i> , $\rightarrow$ <i>Diffusion</i> , $\rightarrow$ <i>Retardation</i> sowie eines $\rightarrow$ <i>Quell- und Senkenterms</i> . $\rightarrow$ <i>Stofftransportmodellierung</i> ,
<i>Transportmodell</i>	$\rightarrow$ <i>Stofftransportmodellierung</i>
<i>Transversale Dispersion</i>	Die $\rightarrow$ <i>Dispersion</i> wirkt längs und quer zur Ausbreitungsrichtung. Die transversale Dispersion beschreibt die Vermischung quer zur Fahnenachse, wobei unterschieden wird zwischen quer/vertikal und quer/horizontal. $\rightarrow$ <i>Longitudinale Dispersion</i> , $\rightarrow$ <i>Dispersivität</i>

<i>upwind-Gewichtung</i>	Gewichtungsschema durch Übernahme der oberstromigen Konzentration von zwei Modellzellen/ -knoten bei Gitterverfahren des Stofftransports. → <i>zentrale Gewichtung</i>
<i>Validierung</i>	→ <i>Modellvalidierung</i>
<i>Verteilungskoeffizient</i>	In den Umweltwissenschaften häufig verwendeter Begriff zur Beschreibung der Gleichgewichtsverteilung eines Stoffs zwischen unterschiedlichen Stoffen/Medien. Beispiel: Octanol/Wasser Verteilungskoeffizient, Adsorptionskoeffizient Wasser/Boden
<i>Wechselwirkende Spezies</i>	Stoffe, die miteinander reagieren und in Wechselwirkung stehen → <i>Multispeziesmodell</i>
<i>worst-case</i>	Der schlechteste anzunehmende Fall im Rahmen einer → <i>Szenariotechnik</i> .
<i>Zeitliche Diskretisierung</i>	Aufteilung des Simulationszeitraumes in eine endlich Anzahl von Zeitschritten. → <i>Diskretisierung</i> , → <i>Modellzeitschritt</i> .
<i>Zentrale Gewichtung</i>	Gewichtungsschema durch Mittelwertbildung der Konzentrationen zwischen zwei Modellzellen/ -knoten bei Gitterverfahren des Stofftransports. → <i>upwind Gewichtung</i> .

## A6 Checkliste

### A6.1 Vorbemerkungen

Die hier vorgestellte Checkliste orientiert sich teilweise an der „Checkliste für Grundwassermodelle im Altlastenbereich“ des ALTLASTENFORUMS BADEN WÜRTTEMBERG (2004).

Die Checkliste ist als Ergänzung der vorliegenden Arbeitshilfe gedacht. Sie kann als Unterstützung bei der Beurteilung eines vorhandenen Modells nach formalen Kriterien oder bei der Erstellung von Kriterien im Rahmen der Ausschreibung einer geplanten Modellrechnung eingesetzt werden. Die in der Liste angesprochenen Bewertungskriterien werden im Textteil der Arbeitshilfe näher erläutert und diskutiert. Die entsprechenden Kapitelnummern der Arbeitshilfe sind in der Checkliste in Klammern aufgeführt.

### A6.2 Generelle Überlegungen

**Was ist die Fragestellung des Modells?** (siehe Kapitel 1.3)

Mögliche Fragestellungen im Altlastenbereich sind:

- Positionierung / Optimierung von Sanierungsbrunnen
- Optimierung von Entnahmeraten
- Optimierung des *Grundwassermonitorings* (Lage, Ausbau von Messstellen, Untersuchungsparameter, Untersuchungsintervalle)
- Quantifizierung der ausbreitungsrelevanten Prozesse für die bisherige Schadstoffausbreitung der Fahne
- Prognose der künftigen Entwicklung der räumlichen Ausbreitung/Erstreckung einer Schadstofffahne
- Abgrenzung von Schadstofffahnen mit gleichem Schadstoffspektrum und unterschiedlichen Eintragsorten
- Prognose der Konzentrationen innerhalb der Schadstofffahne
- Emissionsabschätzung (*Schadstofffrachten*)
- Prüfung, Gegenüberstellung, Optimierung von Sanierungsszenarien
- Prognose der Wirkung *natürlicher Abbauprozesse* (MNA)
- Prognose der Wirkung *stimulierter Abbauprozesse* (ENA)

### A6.3 Hydrogeologisches System (Hydrogeologisches Modell)

- Ist eine Beschreibung der Geologie vorhanden? (siehe Kapitel 2.1.2)
- Was ist über die hydrogeologischen Verhältnisse bekannt? (siehe Kapitel 2.1.2)
- Wurden für das Gebiet der *hydrogeologischen Systemanalyse* hydraulisch sinnvolle Grenzen gewählt? (siehe Kapitel 2.1.1)
- Wurden die geologischen und hydrogeologischen Einheiten hinreichend genau beschrieben und dokumentiert? (siehe Kapitel 2.1.2)
- Wie wurde das *hydrogeologische Modell* schematisiert? Kann eine hydrogeologisch begründete Zonierung und Regionalisierung der *Aquiferparameter* vorgenommen werden? (siehe Kapitel 2.1.2 und 2.1.4)
- Wie sind die hydrochemischen Bedingungen (z.B. aerobe oder reduzierte Verhältnisse)? (siehe Kapitel 2.1.8)
- Gibt es geostatistische Auswertungen?

- Erlaubt das *hydrogeologische Modell* eine lückenlose Beschreibung des Modellgebiets, d.h. kann es unmittelbar als Basis für *das* numerische Modell herangezogen werden? (siehe Kapitel 2.3)
- Wo bestehen noch Informationsdefizite?
- Wie groß sind die Unsicherheiten bzw. die Bandbreiten der einzelnen hydrogeologischen Parameter?

## A6.4 Strömungsmodell

### Grundlagen

- Wurden die Ergebnisse des *hydrogeologischen Modells* in angemessener Detailtiefe auf das numerische Modell übertragen? (siehe Kapitel 3.4 und 2.3)
- Wurden bei der Festlegung der Dimensionalität des *numerischen Strömungsmodells* die Erkenntnisse des *hydrogeologischen Modells* adäquat berücksichtigt? (siehe Kapitel 3.2.1)
- Wurde die Festlegung der Dimensionalität des Modells hinreichend begründet? (siehe Kapitel 3.2.1)
- Wurde eine belastbare Begründung hinsichtlich der Nachbildung des zeitlichen Strömungsgeschehens (*stationär* oder *instationär*) gegeben? (siehe Kapitel 3.2.2 und 2.1.8)
- Welches Simulationsverfahren und welche Software wurden eingesetzt?
- Welche Modellstrategie wurde verfolgt (*deterministisches Modell*, *Szenariotechnik*, *stochastische Modellierung*)? (siehe Kapitel 3.12)
- Ist die Aufgabenstellung klar definiert? (siehe Kapitel 3.1)

### Räumliche und zeitliche Auflösung

- Wurde die gewählte räumliche Auflösung des Modells (Gitterweite) begründet? (siehe Kapitel 3.3.1)
- Ist ggf. bei der gewählten Modellauflösung eine später vorgesehene *Stofftransportmodellierung* berücksichtigt worden? (siehe Kapitel 3.3.1)
- Ist die im Modell gewählte zeitliche Auflösung hinreichend zur Abbildung der Grundwasserdynamik? (siehe Kapitel 3.3.2)
- Konnte ein für die *Modellkalibrierung* geeigneter Simulationszeitraum festgelegt werden? (siehe Kapitel 3.3.2)

### Randbedingungen

- Welche *Randbedingungen* wurden gewählt? (siehe Kapitel 3.5 und A1.1.5)
- Orientieren sich die *Randbedingungen* des numerischen Modells an natürlichen Rändern? (siehe Kapitel 3.5)
- Wurden die *Randbedingungen* aus dem *Hydrogeologischen Modell* adäquat umgesetzt? (siehe Kapitel 3.5)
- Besitzt das Modell noch hinreichende Freiheitsgrade? (siehe Kapitel 3.5)

### Aquiferparameter

- Orientiert sich der vertikale Modellaufbau an der Regionalisierung aus dem *Hydrogeologischen Modell*? (siehe Kapitel 3.4)
- Sind die Annahmen zu den Höhenlagen der Ober- und Unterkanten bzw. zu den Mächtigkeiten der Modellschichten erläutert? (siehe Kapitel 3.4)

- Wie wurden die Verteilungen der Durchlässigkeiten bzw. *Transmissivitäten* ermittelt? (siehe Kapitel 3.8.1)
- Wurde eine *Anisotropie* in der Durchlässigkeits- bzw. Transmissivitätsverteilung berücksichtigt? (siehe Kapitel 3.8.1 und A1.1.2)
- Welche Werte wurden im Falle einer *instationären Kalibrierung* für die *Speicherkoeffizienten* verwendet? (siehe Kapitel 3.8.2 und A1.1.4)
- Gibt es Abweichungen bei der Wahl der Modellparameter von den Annahmen im *Hydrogeologischen Modell*? (siehe Kapitel 2.1)

### Hydrologische Daten und deren zeitliche Dynamik

- Welche Brunnen und Messstellen sind vorhanden und wie sind sie ausgebaut? (siehe Kapitel 2.1.8.1)
- Liegen Stichtagsmessungen der *Piezometerhöhen* und/oder Grundwasserstandsganglinien an einzelnen Messstellen vor? (siehe Kapitel 2.1.8.2 und 2.1.8.3)
- Wie ist die Qualität und Dichte des Messstellennetzes zu beurteilen? (siehe Kapitel 2.1.8.1)
- Liegen Messdaten (Zeitreihen) in ausreichender Dichte zur Beurteilung der Grundwassersituation vor? (siehe Kapitel 2.1.8.2)
- Wie ist die *Grundwasserneubildung* verteilt und wie wurde diese Verteilung ermittelt? (siehe Kapitel 2.1.10 und 3.6.2)
- Wurde die *Grundwasserneubildungsrate zeitlich aufgelöst*? (siehe Kapitel 2.1.10)
- Müssen ex- oder infiltrierende Gewässer beachtet werden? Sind Austauschraten bestimmbar? (siehe Kapitel 2.1.5, 2.1.6 und 3.6.3)
- Sind Abflussmessungen an oberirdischen Gewässern im Modellgebiet vorhanden? (siehe Kapitel 2.1.5)
- Müssen Bewässerungsmaßnahmen oder Drainagen berücksichtigt werden? (siehe Kapitel 3.6.1 und 3.6.3)
- Besteht im Modellgebiet eine Kopplung zwischen unterschiedlichen *Aquifere*n und wie sind diese ggf. berücksichtigt? (siehe Kapitel 3.4, 3.8.3 und 2.1.2)
- Gibt es Zu- oder Abflüsse über die Ränder des Modellgebiets? (siehe Kapitel 2.1.1 und 3.5)

### Kalibrierung des Strömungsmodells

- Wurde eine manuelle oder eine automatische *Kalibrierung* durchgeführt? (siehe Kapitel 3.9)
- Auf welcher Grundlage beruht bei einem *instationären* Modell die gewählte *Anfangsbedingung*? (siehe Kapitel 3.7)
- Passt die *Anfangsbedingung* zum Simulationszeitraum oder muss mit einer *Einschwingphase* gerechnet werden? (siehe Kapitel 3.7)
- Wurde bei *instationären* Simulationen die zeitliche Variabilität der hydrologischen Daten (z.B. bei unterschiedlichen Entnahmeraten von Brunnen) berücksichtigt? (siehe Kapitel 3.6)
- Ist die räumliche Verteilung der kalibrierten Modellparameter dokumentiert? (siehe Kapitel 3.9)
- Stimmt das resultierende Wertespektrum mit den Ergebnissen der *hydrogeologischen Systemanalyse* überein? (siehe Kapitel 3.9)
- Ist die Verteilung plausibel? Gibt es "erzwungene" Bereiche? (siehe Kapitel 3.9)
- Gibt es auffällige Bereiche? Sind diese bedeutsam für das *Aussagegebiet*? (siehe Kapitel 3.9)



- Mussten zusätzliche Annahmen (insbesondere an den Modellrändern) getroffen werden, die denen des *hydrogeologischen Modells* widersprechen? (siehe Kapitel 3.9)
- Ist das Ergebnis der *Kalibrierung* z.B. anhand von Streudiagrammen u.a. dokumentiert? (siehe Kapitel 3.9)
- Wie ist die Güte der *Kalibrierung* unter Berücksichtigung der Datengrundlage und der Komplexität des Standortes zu beurteilen? (siehe Kapitel 3.9)
- Wurden die Ergebnisse der *Kalibrierung* überprüft (z.B. anhand von Stichtagsmessungen oder Zeitreihen, die nicht zur *Kalibrierung* verwendet wurden)? (siehe Kapitel 3.10)
- Ist die Wasserbilanz dokumentiert und plausibel? (siehe Kapitel 3.11)
- Enthält die Ausarbeitung zum numerischen Modell Aussagen zur verbleibenden Parameterunsicherheit? (siehe Kapitel 3.12)
- Ist aus der Sensitivitätsanalyse ggf. ein weiterer Erkundungsaufwand abzuleiten oder kann die verbleibende Parameterunsicherheit akzeptiert werden? (siehe Kapitel 3.12)

### Modellaussagen

- Wurden die zentralen Fragestellungen, die dem Modell zugrunde liegen, ausreichend beantwortet? (siehe Kapitel 1.3 und 3.1)
- Wie wurden die Unsicherheiten bei der *Modellkalibrierung* berücksichtigt? (siehe Kapitel 3.12)
- Wurde eine *Szenariotechnik* angewandt und wurden die maßgeblichen Szenarien betrachtet? (siehe Kapitel 3.12)
- Waren stochastische Simulationen erforderlich? (siehe Kapitel 3.12)
- Ist gewährleistet, dass die *Randbedingungen* der *Modellkalibrierung* auch auf die Prognoserechnungen übertragen werden können? (siehe Kapitel 3.13)
- Sind die Modellaussagen plausibel begründet?

## A6.5 Transportmodell

### Grundlagen

- Wurden die Ergebnisse des *hydrogeologischen Modells* bezüglich der hydrochemischen Bedingungen auf das numerische Modell übertragen? (siehe Kapitel 2.1.8)
- Wurde die Wahl des *Diskretisierungsverfahrens* begründet (z.B. *Gitterverfahren* oder *Charakteristiken-Verfahren*)? Welche Software wurde eingesetzt? (siehe Kapitel 4.2 und A2.2.5)
- Ist die Kopplung zwischen Strömungsmodell und *Transportmodell* erläutert (z.B. ist das Transportmodellgebiet identisch mit dem Gebiet der Strömungsmodellierung)? (siehe Kapitel 4.1)
- Welche Modellstrategie wird verfolgt (*deterministisches Modell*, *Szenariotechnik*, *stochastische Modellierung*, Monte-Carlo-Simulationen)? (siehe Kapitel 3.12)
- Ist die Aufgabenstellung klar definiert? (siehe Kapitel 4.1)

### Räumliche und zeitliche Auflösung

- Wurde die räumliche *Diskretisierung* aus dem Strömungsmodell übernommen oder wurde das *Modellgitter* verfeinert? (siehe Kapitel 4.1)
- Sind im Falle eines *Gitterverfahrens* die numerischen Stabilitäts- und Genauigkeitskriterien erfüllt? (siehe Kapitel 4.2 und A2.2.2)

- Konnte ein geeigneter Simulationszeitraum für die *Modellkalibrierung* festgelegt werden?

### **Rand- und Anfangsbedingungen**

- Sind Aussagen zur Wahl der Konzentrationsrandbedingung an Zuflussrändern des Strömungsmodells getroffen? (siehe Kapitel A2.2.7)
- Werden die berechneten Konzentrationen durch Stromlinienränder oder Abstromränder beeinflusst? (siehe Kapitel A2.2.7)
- Ist dokumentiert, wie die *Anfangsverteilung* der Schadstoffkonzentrationen ermittelt wurde? (siehe Kapitel 4.5.1)
- Sind die *Anfangsbedingungen* so gewählt, dass die Ergebnisse des *Transportmodells* nicht durch numerische Effekte verfälscht werden? (siehe Kapitel 4.5.1)

### **Transportparameter**

- Ist dokumentiert, wie die *effektive Porosität* bestimmt wurde? (siehe Kapitel 4.4.1 und A1.2.1)
- Ist erläutert, wie Vermischungsvorgänge (*Diffusion* und *Dispersion*) berücksichtigt werden? (siehe Kapitel 4.4.2, A1.2.2 und A1.2.3)
- Ist dokumentiert, ob eine *Retardierung* des Stofftransports berücksichtigt wurde und falls ja, wie die Parameter festgelegt wurden? (siehe Kapitel 4.4.3 und A1.2.4)
- Ist dargestellt, ob Reaktionsprozesse berücksichtigt wurden und falls ja, wie die Parameter festgelegt wurden? (siehe Kapitel 4.4.4, A1.2.4 und A1.2.5)
- Ist der Einsatz eines *Multispeziesmodells* sinnvoll oder erforderlich? (siehe Kapitel A1.2.5)
- Falls keine Reaktionsprozesse simuliert werden: Ist sichergestellt, dass die Schadstoffverfrachtung nicht erheblich überschätzt wird oder dass keine relevanten Abbauprodukte zu erwarten sind? (siehe Kapitel 4.4.4)
- Wird der Einfluss der Transportparameter auf das Ergebnis diskutiert?
- Sind die im Modell verwendeten Werte plausibel? (siehe Kapitel A1.2.3 und A1.2.4)

### **Simulation der Schadstoffquellen**

- Ist die Methode zur Implementierung der Schadstoffquellen dokumentiert (z.B. *Festkonzentrationen*, Vorgabe von Frachten)? (siehe Kapitel 4.3.1)
- Sind Anzahl und Quellstärke der Schadstoffherde im Modell angegeben? (siehe Kapitel 4.3.1)
- Ist Schadstoff in Phase vorhanden und wie wird diese im Modell berücksichtigt? (siehe Kapitel 4.3.1)
- Liegt ein Schadstoffgemisch vor? Wie ist dessen Zusammensetzung? (siehe Kapitel 4.3.1)
- Wie wird das zeitliche Verhalten der Schadstoffquellen simuliert? (siehe Kapitel 4.3.1)

### **Numerische Aspekte**

- Welcher Gleichungslöser wurde eingesetzt? Welche Konvergenzkriterien wurden verwendet? (siehe Kapitel A2.2.1)
- Gibt es im Falle eines *Gitterverfahrens* Aussagen zur räumlichen Gewichtung der Differenzterme? (siehe Kapitel A2.2.1)
- Wurde bei Verwendung eines *Gitterverfahrens* der Einfluss *numerischer Dispersion* oder von *Oszillationen* abgeschätzt? (siehe Kapitel A2.2.2)

- Wurde der rechnerische Fehler in der Massenbilanz überprüft? (siehe Kapitel A2.2.1)
- Ist das ggf. verwendete *Charakteristiken-Verfahren* beschrieben? Wurde der Einfluss lokaler Massenbilanzfehler diskutiert? (siehe Kapitel 0.5A2.2.3)
- Wurde im Fall eines *Random-Walk-Verfahrens* der Einfluss der Zufallsbewegung auf die berechneten Konzentrationen diskutiert? (siehe Kapitel A2.2.4)
- Wurde im Falle eines Zweischrittverfahrens zur Kopplung von Transport- und Reaktionsprozessen der entstehende numerische Fehler abgeschätzt? (siehe Kapitel A2.2.6)

### Transportkalibrierung

- Wurde eine manuelle oder eine automatische *Kalibrierung* durchgeführt? (siehe Kapitel 4.5)
- Sind Stichtagsmessungen oder Ganglinien der Schadstoffkonzentrationen vorhanden? (siehe Kapitel 4.5.4)
- Wird dargestellt, welche Parameter im Rahmen der Transportkalibrierung angepasst wurden? (siehe Kapitel 4.5)
- Sind die im Rahmen der *Modellkalibrierung* ermittelten Parameter plausibel? (siehe Kapitel 4.4 und 4.5.2)
- Ist gewährleistet, dass bei einer Anpassung des Strömungsmodells im Rahmen der Transportkalibrierung die Strömungskalibrierung nicht verschlechtert wurde? (siehe Kapitel 4.5.3)
- Ist die Bewertung der Transportkalibrierung nachvollziehbar? (siehe Kapitel 4.5.4)
- Werden mögliche Unstimmigkeiten zwischen gemessenen und berechneten Konzentrationen offen gelegt und diskutiert?
- Wurden die Ergebnisse der Transportkalibrierung überprüft (z.B. anhand von Stichtagsmessungen oder Zeitreihen, die nicht zur *Kalibrierung* verwendet wurden)? (siehe Kapitel 4.5.5)
- Wird diskutiert, welche Transportparameter sensitiv sind und welche nicht? (siehe Kapitel 4.5.2)
- Wurde die Massenbilanz dargestellt?

### Modellaussagen

- Wurden die zentralen Fragestellungen, die dem Modell zugrunde liegen, ausreichend beantwortet? Konnten die erwarteten Ergebnisse erbracht werden? (siehe Kapitel 4.6.1)
- Wie wurden die Unsicherheiten bei der *Modellkalibrierung* berücksichtigt? Wurde eine *Szenariotechnik* angewandt? (siehe Kapitel 4.5.4)
- Sind ggf. die hydrochemischen und hydraulischen *Randbedingungen* für die Prognoseberechnungen dokumentiert? Ist der Bezug zum Strömungsmodell dargestellt? (siehe Kapitel 4.6.2)
- Werden die Unsicherheiten der Prognoseergebnisse diskutiert? (siehe Kapitel 4.6.2)

## A6.6 Modellpflege

- Ist eine Fortschreibung des Modells vorgesehen?
- Erfolgte eine Modellarchivierung?
- Welche Möglichkeiten sind vorhanden, um neue Daten und Erkenntnisse in das bestehende Modell integrieren zu können?

## A7 Literatur

altlastenforum Baden-Württemberg e.V. (2004): Checkliste für Grundwassermodelle im Altlastenbereich. Anlage zum info 1/2004. - 10 S.; Stuttgart.

Appelo, C.A.J., Postma, D. (2005): Geochemistry, groundwater and pollution. - 649 S.; A.A. Balkema Publishers, Leiden.

Armbruster, V. (2002): Grundwasserneubildung in Baden-Württemberg. - Freiburger Schriften zur Hydrologie, 17: 141 S.; Freiburg.

Bear, J. (1979): Hydraulics of Groundwater. - 569 S.; Dover Publications, Inc., Mineola, New York.

Briggs, G.G. (1981): Theoretical and experimental relationships between soil adsorption, octanol-water partition coefficients, water solubilities, bioconcentration factors, and the parachor. - J. Agric. Food Chemistry, 29: 1050-1059.

Chiang, W.-H. (2003): Processing MODFLOW<sup>pro</sup> - A simulation system for modeling groundwater flow and solute transport. Webtech<sup>360</sup>, Irvine, Ca, USA.

DIN Deutsches Institut f. Normung (1994): DIN 4049 Hydrologie - Teil 3: Begriffe zur quantitativen Hydrologie. - 79 S. Berlin.

Domenico, P.A., Schwartz, F.W. (1998): Physical and Chemical Hydrogeology, 2<sup>nd</sup> ed. - 506 S.; John Wiley & Sons, Inc., New York.

DVGW (2004): Aufbau und Anwendung numerischer Grundwassermodelle in Wassergewinnungsgebieten. - Deutscher Verband des Gas- und Wasserfaches, Arbeitsblatt W 107, 24 S., Bonn.

DVWK (1998): Ermittlung der Verdunstung von Land- und Wasserflächen. - Deutscher Verband für Wasser- und Kulturbau, Merkblatt 238, 135 S., Bonn.

Emschergenossenschaft (2005): Leitfaden zur Erstellung von Grundwasserströmungsmodellen. - 28 S., Essen.

FH-DGG (1999): Hydrogeologische Modelle. Ein Leitfaden für Auftraggeber, Ingenieurbüros und Fachbehörden. - Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Geologischen Gesellschaft, Hydrogeologische Beiträge, Heft 10, 36 S. Hannover.

FH-DGG (2002): Das Hydrogeologische Modell als Basis für die Bewertung von Monitored Natural Attenuation bei der Altlastenbearbeitung - Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Geologischen Gesellschaft, Hydrogeologische Beiträge, Heft 23, 29 S. Hannover.

FH-DGG (2002): Hydrogeologische Modelle. Ein Leitfaden mit Fallbeispielen. - Fachsektion Hydrogeologie in der Deutschen Geologischen Gesellschaft, Hydrogeologische Beiträge, Heft 24, 120 S. Hannover.

Gelhar, L.W., Mantoglu, A., Welty, C. Rehfeldt, K.R. (1985): Review of field-scale physical solute transport processes in saturated and unsaturated porous media. - Water Resources Research, 19 (1), Washington.

Hahn, J., Dörhöfer, G., Josopait, V. (1981): Veränderungen der Grundwasserbeschaffenheit durch anthropogene Einflüsse in norddeutschen Lockergesteingebieten. - Eine Methode zur flächendifferenzierten Ermittlung der Grundwasserneubildungsrate. - Geologisches Jahrbuch Reihe C, Band C 27, 110 Seiten, Schweitzerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart.

Hubbert, M. K. (1940): The theory of groundwater motion. - The Journal of Geology, Vol. XLVIII, No. 8, Part I, USA.

HydroGeoLogic, Inc. (2006): MODFLOW-SURFACT Software (Version 3.0) Documentation. - HydroGeoLogic, Reston, VA, USA.

Istok, J. (1989): Groundwater modeling by the finite element method. - Water Resources Monograph 13, 495 S., American Geophysical Union.

Karickhoff, S.W., Brown, D.S., Scott, T.A. (1979): Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments. - Water Research 13: 241-248.

Kinzelbach, W. (1986): Groundwater modelling. - An introduction with sample programs in BASIC. - 333 S.; Elsevier, Amsterdam.

Kinzelbach, W. (1992): Numerische Methoden zur Modellierung des Transports von Schadstoffen im Grundwasser. - 343 S.; R. Oldenbourg, München, Wien.

Kinzelbach, W., Rausch, R. (1995): Grundwassermodellierung - Eine Einführung mit Übungen. - 283 S.; Gebrüder Bornträger, Stuttgart.

Kirchholtes, H.J., Ufrecht, W. (2009): Integrale Grundwasseruntersuchung in Stuttgart-Feuerbach. - Schriftenreihe des Amtes für Umweltschutz der Stadt Stuttgart, Heft 4/2009, 169 S., Stuttgart.

Kruseman, G.P., de Ridder, N.A. (1994): Analysis and Evaluation of Pumping Test Data. - 2<sup>nd</sup> Edition, International Institute on Land Reclamation and Improvement, 375 S., Wageningen.

Langguth, H.R., Voigt, R. (2003): Hydrogeologische Methoden. - 1005 S.; Springer, Berlin Heidelberg New York.

Linder, B.; Elfers, H.; Schlimm, W.; Schuster, H. (2007): Hydrogeologische Raumgliederung von Nordrhein-Westfalen. - scriptum 16, 49 S., Krefeld.

Luckner, Th. et al. (2008): Systemanalyse, Modellierung und Prognose der Wirkungen natürlicher Schadstoffminderungsprozesse - eine rezente Synopse - KORA TV Modellierung, Prognose; 277 S.; Hrsg.: Dresdener Grundwasserforschungszentrum (DGFZ) Dresden

Luckner Th. (2008): Modellierung und Prognose. In: Michels, J., Stuhmann, M., Frey, C., Koschitzky, H.-P. (Hrsg.) (2008): Handlungsempfehlungen mit Methodensammlung, Natürliche Schadstoffminderung bei der Sanierung von Altlasten - VEGAS, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart, DECHEMA e.V. Frankfurt.

MALBO (2006): Grundwasseruntersuchungen an Altlasten im Lockergestein. Zusammenhänge zwischen Untergrunderbau, Stoffverhalten, Messstellenausbau und Analyseergebnissen. Materialien zur Altlastensanierung und zum Bodenschutz, 25, Landesumweltamt Nordrhein-Westfalen, Essen.



- Marotz, G. (1968): Technische Grundlagen einer Wasserspeicherung im natürlichen Untergrund. - Schriftenreihe des KWK, H. 18, 228 S., Hamburg.
- McDonald, M.C. und Harbaugh, A.W. (1988): MODFLOW. A modular three-dimensional finite difference ground-water flow model. 83-875, U.S. Geological Survey.
- Meßer, J. (1997): Auswirkungen der Urbanisierung auf die Grundwasser-Neubildung im Ruhrgebiet unter besonderer Berücksichtigung der Castroper Hochfläche und des Stadtgebietes Herne. - DMT-Berichte aus Forschung und Entwicklung, Heft 58, Bochum.
- Montgomery, J.H., Welkom, L.M. (1990): Groundwater chemicals desk reference. - 640 S.; Chelsea, MI (Lewis Publishers).
- Morshed, J., Kaluarachchi, J.J. (1995): Critical assessment of the operator-splitting technique in solving the advection-dispersion-reaction equation: 2. Monod kinetics and coupled transport. - Advances in Water Resources 18(2), 101-111.
- Neretnieks, I. (2002): A stochastic multi-channel model for solute transport - analysis of tracer tests in fractured rock. - J. Contaminant Hydrol., 55 (3-4): 175 - 211.
- Rausch, R., Schäfer, W., Wagner, Ch. (2002): Einführung in die Transportmodellierung im Grundwasser. - 183 S.; Gebrüder Borntraeger, Stuttgart.
- Saaltink, M.W., Carrera, J., Ayora, C. (2001): On the behavior of approaches to simulate reactive transport. - J. Contaminant Hydrol., 48(3-4): 213-235.
- Schäfer, D., Hornbruch, G.; Schlenz, B.; Dahmke, A. (2007): Schadstoffausbreitung unter Annahme verschiedener kinetischer Ansätze zur Modellierung mikrobiellen Abbaus. - Grundwasser (2007) 12; S. 15 - 25
- Schwarzenbach, R.P., Westall, J. (1981): Transport of nonpolar organic compounds from surface water to groundwater. - Environ. Sci. Techn., 15(11): 1360 - 1367.
- Suarez, M.P., Rifai, S. (1999): Biodegradation rates for fuel hydrocarbons and chlorinated solvents in groundwater. - Bioremediation Journal 3(4): 337 - 362.
- Stork, W. (1980): Hydrogeologische Grundrisskarten für Lockergesteinsbereiche mit grossen Grundwasserdifferenzen. - Mitteilungen zur Ingeologie und Hydrogeologie, Heft 4, Hydrogeologische und Ingenieurgeologische Karten, Aachen.
- Ufrecht, W. (2003): Das Grundwasser in Stuttgart, kommunaler Umweltbericht. - Schriftenreihe des Amtes für Umweltschutz, 1/2003: 202 S.; Stuttgart.
- Valocchi, A.J., Malmstead, M. (1992): Accuracy of operator splitting for advection-dispersion-reaction problems. - Water Resour. Res., 28(5): 1471-1476.
- Wabbels, D., Teutsch, G. (2008): Leitfaden Natürliche Schadstoffminderungsprozesse bei mineralölkontaminierten Standorten - Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. - 222 S.; Zentrum für Angewandte Geowissenschaften, Tübingen.
- Wang, H. F, Anderson, M.P. (1982): Introduction to Groundwater modeling - Finite Difference and Finite Element Method. - 237 S.; W.H. Freeman and Company, San Francisco.

Zheng, C. und Wang, P.P., (1999): MT3DMS - A modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems. SERDP -99-, University of Alabama, Tuscalossa, Alabama.