

# **Länderfinanzierungsprogramm „Wasser und Boden“ 2003**

## **LABO-Vorhaben B 2.01**

### **Sensitivitätsanalysen bewertungsrelevanter Parameter in Simulationsmodellen zur Sickerwasserprognose**

Abschlußbericht

Auftraggeber: Bund der Ingenieure für Wasserwirtschaft, Abfallwirtschaft und Kulturbau (BWK) e.V.

Hegelweg 17  
D-72793 Pfullingen

im Auftrag der

Länderarbeitsgemeinschaft Boden  
c/o Umweltministerium Mecklenburg-Vorpommern

D-19048 Schwerin

Bearbeiter: KP Ingenieuresellschaft für Wasser und Boden mbH

Weißenburger Straße 19  
D-91710 Gunzenhausen



(09831) 8860-0



(09831) 8860-29



mail@ibwabo.de



www.ibwabo.de

## Vorbemerkungen

Dieses Vorhaben wurde erarbeitet von

Projektleiter: Dr.-Ing. Oliver Kemmesies

Bearbeiter: Dr.-Ing. Oliver Kemmesies

Dipl.-Ing. Gunnar Richter

Dipl.-Ing. (FH) Michael Üschner

mit weiteren Beiträgen von

Herrn Dipl.-Ing. Thomas Claassen (Golder Associates, Celle, CONSIM)

Herrn Dipl.-Ing. Roland Meyer (RWTH Aachen, SISIM)

Frau Dr. Heinke Stöfen (TU Hamburg-Harburg, AF-Verfahren)

Herr Dipl.-Ing. Rolf Zurl und

Herr Dipl.-Geökol. Marcel Roscher (HPC AG, Gera, TenSIC)

Auf Veranlassung des fachlichen Betreuers von seitens der LABO, dem Sächsischen Staatsministerium für Umwelt und Landwirtschaft mussten alle Programmbezeichnungen sowie Standortbezeichnungen anonymisiert werden. Die Bearbeiter bitten um Verständnis.

Im Rahmen des bearbeiteten LABO-Fördervorhabens B 2.01 wurde folgende Berichte und Gutachten erarbeitet, die Grundlage für den vorliegenden Abschlußbericht bzw. die Handlungsanleitung bilden:

- A) Handlungsanleitung (dieses Dokument)
- B) Glossar
- C) Grundlagen der Modellierung der Strömungs- und Schadstofftransportprozesse in der ungesättigten Zone
- D) Sensitivitätsanalysen bewertungsrelevanter Parameter
  - a. Anorganischer Schadensfall – Chromschaden
  - b. Organischer Schadensfall – BTX-Schaden
- E) Programmvorstellungen und Beispielsrechnungen

## Zusammenfassung

Zur Abschätzung der von einer schädlichen Bodenveränderung oder Altlast ausgehenden Gefahren für das Schutzgut Grundwasser ist eine Sickerwasserprognose zu erstellen. Dies kann auch mit Hilfe eines Simulationsprogramms, das Strömungs- und Transportvorgänge in der ungesättigten Zone wiedergeben zu vermag, erfolgen. Obwohl diese Programme in der Lage sind, die komplexen bodenphysikalischen und stofftransportspezifischen Prozesse in ihren Zusammenhängen und auch Wechselwirkungen nachzubilden, wird in der Praxis heute dennoch oftmals auf einfache Schätzungen zurückgegriffen. Die Ursache liegt in der Vielzahl von Randbedingungen und Parametern, die vorzugeben sind, und deren Ermittlung kostenintensiv und stark fehlerbehaftet ist.

Ziel der technisch-wissenschaftlichen Arbeitsgruppe 6.2 des Bundes der Ingenieure für Wasserwirtschaft, Abfallwirtschaft und Kulturbau (BWK) e.V. „Instrumente zur Sickerwasserprognose“ ist Erarbeitung einer Handlungsanleitung bzw. eines Regelwerkes für die Durchführung solcher modellgestützter Sickerwasserprognosen, auch um Fehlerquellen, die aus der Modellbildung und Simulation heraus resultieren, minimieren zu können. Mit diesem Vorhaben wurde ein erster Baustein als Grundlage für dieses Regelwerkes geschaffen werden, in dem die den Simulationsprogrammen zugrunde liegenden Modellvorstellungen sowie die notwendigen Randbedingungen und Parameter erhoben, die dabei möglichen Fehlerquellen aufgezeigt und die möglichen Bandbreiten im Ergebnis (Prognose des zeitlichen Verlaufs der Konzentration und der Fracht am Ort der Beurteilung) abgeschätzt wurden.

Zunächst wurden dazu die Grundlagen der Beschreibung der Strömungs- und Transportvorgänge in der ungesättigten Zone zusammengestellt. Darauf aufbauend wurden die möglichen Idealisierungen abgeleitet und in ihren Auswirkungen beschrieben sowie die Parametermodelle vorgestellt (Teil Grundlagen).

Als erstes Beispiel wurde eine Rüstungsaltpast betrachtet. In Abstimmung mit dem fachlichen Betreuer von seiten der LABO, dem Sächsischen Staatsministerium für Umwelt und Landwirtschaft sowie dem Sächsischen Landesamt für Umwelt und Geologie wurde die Aufgabenstellung dann weiter präzisiert. Den Sensitivitätsbetrachtungen war ein anorganischer Schadensfall (Chrom-Schaden) und ein organischer Schadensfall (MKW-/BTEX-Schaden) zugrunde zu legen. Für diese beiden Schadensfälle wurde je ein Simulationsmodell aufgebaut.

Die Kalibrierung eines solchen Modells ist nicht möglich, da die erforderlichen Messwerte fehlen. Für die Kalibrierung des Strömungsmodells wären gemessene Druckhöhen, Was-

sergehalte und/oder Wassermengen notwendig. Derartige Messwerte sind in der ungesättigten Zone nur höchst aufwendig zu beschaffen, sie liegen in der Praxis nicht vor. Grundlage für die Kalibrierung des Transportmodells wären gemessene Sickerwasserkonzentrationen. Derzeit ist die Bestimmung von Sickerwasserkonzentrationen von anorganischen Stoffen auf der Basis eines Bodensättigungsextraktes oder eines S4-Eluates Gegenstand intensiver wissenschaftlicher Forschung und Diskussion. Aus Vollzugsgründen ist die Festlegung eines oder mehrerer Verfahren abzusehen, der fachliche Hintergrund wird allerdings umstritten bleiben. Für organische Substanzen ist noch nicht einmal dies in Aussicht.

Trotzdem wurde zumindest das Modell für den Chrom-Schadens anhand der auf S4-Eluaten bestimmten Chrom-VI-Konzentrationen kalibriert. Für den BTEX-Schaden war dies nicht möglich, da keine Eluatgehalte bestimmt wurden.

Im Grundfall (=Kalibrierung) wurde ein vollständiges Strömungs- und Transportmodell angewandt. Die Sickerwasserrate am Top der Säule wurde mit einer Auflösung in Tagesschritten des Niederschlags und der potenziellen Evapotranspiration vorgegeben. Grundlage dafür war die synthetische Erzeugung dieser 100-jährigen Zeitreihen mit Hilfe des Wettergenerators. Die erste wesentliche Vereinfachung besteht in der Annahme stationärer Strömungsbedingungen, d. h. die Sickerwasserrate am Top der Säule ist konstant und gleich der Grundwasserneubildungsrate am Fuß der Säule. In den folgenden Szenarien wurden weiter die Annahme eines homogenen Aufbaus der ungesättigten Zone, der Höhe der mittleren Grundwasserneubildungsrate, der Strömungs- und Transportparameter sowie der Größe der Quellkonzentration untersucht.

Die Auswertung zeigte deutlich, dass in dem Fall, in dem Abbau die Prozesse (MKW-/BTEX-Schaden) beeinflusst, auch der instationäre Gang der Sickerwasserrate am Top der Säule zu berücksichtigen ist. Im konkreten Fall wurde bei der Vorgabe einer instationären Sickerwasserrate keine eine Prüfwertüberschreitung für den Ort der Beurteilung prognostiziert, während dies bei der Annahme stationärer Strömungsverhältnisse bereits nach relativ kurzer Zeit und mit deutlich über dem Prüfwert liegenden Konzentrationen erfolgte.

Ansonsten haben die durchgeführten Sensitivitätsanalysen gezeigt, dass es

- ✓ die Grundwasserneubildung
- ✓ die Quellkonzentration und
- ✓ die Sorptionskonstante

sind, die den deutlichsten Einfluss auf das Berechnungsergebnis, d.h. die berechnete Sickerwasserkonzentration am Ort der Beurteilung haben. Werden abbaubare Stoffe betrachtet, kommt der Abbauparameter noch hinzu.

Im zweiten Teil der Bearbeitung sollten die bislang gefundenen Ergebnisse über verschiedene Programme hinweg verifiziert werden. Daher wurden die Autoren/Anbieter von 4 weiteren Programmen gebeten, ihre Programme vorzustellen und die beiden Beispiele Chromschaden und BTEX-Schaden exemplarisch zu betrachten. Da die Auffassungen bezüglich der Prozessidentifikation z.T. differierten, sollten den Berechnungen die mit den Berichten zum Chrom- und BTEX-Schaden vorgegebenen Randbedingungen und Parameter verwendet werden. Da die Teilnahme freiwillig war, konnte kein 100%-iger Rücklauf erreicht werden, weiter besteht auch die Möglichkeit, dass die Überlassung der Modellierungsberichte für eine Programmanpassung genutzt wurde. Die übermittelten Ergebnisse liegen eng beieinander, obwohl den Programmen doch unterschiedliche Modellansätze zugrunde liegen.

In einem dritten Schritt wurden die Kombinationen von Randbedingungen und Parametern identifiziert, die die geläufigsten Fragestellungen im Vollzug, z.B. die nach der maximal möglichen Fracht und deren Eintrittszeitpunkt beantworten.

Die an zwei konkreten Beispielen durchgeführten Sensitivitätsbetrachtungen erlauben aber keine weitreichenden Verallgemeinerungen zum Einfluss bestimmter Randbedingungen und Parameter auf die Berechnungsergebnisse, sie waren im vorliegenden Fall, wie die Untersuchungen auch gezeigt haben, objektbezogen. Für die mit dem Vorhaben angestrebte Systematisierung waren die Grundlagen somit nicht ausreichend. Hier bedarf es der Untersuchung weiterer konkreter Schadensfälle. Dabei sollte ein größeres Augenmerk auf die Ermittlung der Parameter und deren Schwankungsbereiten gelegt werden, um einen Grundstock für die Abschätzung typischer Parameterwerte und deren Schwankungsbereiten aufbauen zu können.

Die Modellbildung und Simulation der Strömungs- und Transportvorgänge in der ungesättigten Zone setzt eine umfangreiche und z.T. sehr detaillierte Ermittlung der Randbedingungen und Parameter voraus, wenn zutreffende Sickerwasserprognosen erstellt werden sollen. Der Einsatz modellgestützter Sickerwasserprognose für eine Gefährdungsabschätzung ist nur dann gerechtfertigt, wenn standortspezifisch erhobene Informationen (Bodenkennwerte, Bodenschichtung, Flurabstand, Grundwasserschwankungsbereich, Schadstoffinventar etc.) vorliegen und nicht überwiegend auf Schätzgrößen zurückgegriffen werden muss.

# Inhaltsverzeichnis

Text:

<b>VORBEMERKUNGEN .....</b>	<b>I</b>
<b>ZUSAMMENFASSUNG .....</b>	<b>II</b>
<b>INHALTSVERZEICHNIS .....</b>	<b>V</b>
<b>1 EINLEITUNG .....</b>	<b>1</b>
1.1 GESETZLICHE GRUNDLAGEN .....	1
1.2 PROBLEMSTELLUNG BEI DER SICKERWASSERPROGNOSE .....	3
1.3 REGELWERKE, MATERIALIEN UND TECHNISCHE MERKBLÄTTER .....	3
1.4 ANFORDERUNGEN AN SICKERWASSERPROGNOSEN .....	5
<b>2 ERARBEITUNG DES KONZEPTIONELLEN MODELLS .....</b>	<b>7</b>
2.1 STANDORTCHARAKTERISIERUNG .....	7
2.1.1 <i>Bodeneigenschaften</i> .....	7
2.1.2 <i>Grundwasserneubildung</i> .....	8
2.1.3 <i>Grundwasserspiegel</i> .....	13
2.2 QUELLTERMERMITTLUNG UND PROZESSANALYSE .....	15
2.2.1 <i>Quelltermbestimmung</i> .....	15
2.2.2 <i>Prozessanalyse</i> .....	16
2.3 AUSGRENZUNG DER RELEVANTEN STOFFE/STOFFGRUPPEN .....	17
<b>3 RANDBEDINGUNGEN UND PARAMETERBESTIMMUNG .....</b>	<b>19</b>
3.1 STRÖMUNGSRANDBEDINGUNGEN UND -PARAMETER .....	19
3.1.1 <i>Anfangsbedingungen</i> .....	19
3.1.2 <i>Randbedingungen</i> .....	19
3.1.3 <i>Bodenphysikalische Parameter</i> .....	20
3.2 STOFFTRANSPORTRANDBEDINGUNGEN UND -PARAMETER .....	22
3.2.1 <i>Stofftransportrandbedingungen</i> .....	22
3.2.2 <i>Stofftransportparameter</i> .....	22
<b>4 VERFAHRENS- UND PROGRAMMAUSWAHL .....</b>	<b>23</b>
4.1 ERGEBNISSE DER DURCHGEFÜHRTEN SENSITIVITÄTSANALYSEN .....	23
4.1.1 <i>Auswirkungen von Idealisierungen</i> .....	24
4.1.2 <i>Auswirkungen von Randbedingungen und Parametern</i> .....	25
4.2 LÖSUNGSANSÄTZE UND GETESTETE PROGRAMME .....	29
4.3 HINWEISE ZUR VERFAHRENSAUSWAHL .....	35
<b>5 MODELLAUFBAU UND SIMULATION .....</b>	<b>36</b>
5.1 ABGRENZUNG DES MODELLRAUMS .....	36
5.2 DISKRETISIERUNG .....	37
5.3 VORGABE DER ANFANGS- UND RANDBEDINGUNGEN .....	38
5.4 PARAMETERBELEGUNG .....	39
5.5 SIMULATIONSSTEUERUNGSVORGABEN .....	39
5.6 SIMULATION .....	39
<b>6 BERECHNUNGSERGEBNISSE UND BEWERTUNG .....</b>	<b>40</b>

6.1	BERECHNUNGSERGEBNISSE .....	40
6.2	PLAUSIBILITÄTSTESTS .....	42
6.3	MAXIMUM- UND MINIMUMBERECHNUNGEN .....	45
6.4	FEHLER- UND DEFIZITANALYSE .....	46
<b>7</b>	<b>LITERATUR.....</b>	<b>47</b>

Abbildungen:

Abb. 1:	Verfahrensabläufe innerhalb von Sickerwasserprognosen (Quelle: SGD) .....	2
Abb. 2:	Schichtenverzeichnis und Kontaminationsprofil .....	8
Abb. 3:	Ermittlung der tatsächlichen Evapotranspiration nach dem BAGROV-Verfahren (aus [BfG 2003]).....	11
Abb. 4:	Abschätzung des Bagrov-Faktors n aus der Bodenart (aus [DYCK 1980]) .....	12
Abb. 5:	Retentionsfunktion mit Kapillarsaum.....	14
Abb. 6:	Aufkonzentration des Sickerwassers unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen (aus [Grathwohl 2002]).....	15
Abb. 7:	Funktion der hydraulischen Leitfähigkeit der Materialien .....	26
Abb. 4:	Online-Grafiken aus der Simulation mit SiWaPro DSS .....	30
Abb. 10:	Kennzeichnung der Abflussanteile.....	36
Abb. 11:	Randbedingungen der 1D-Säule.....	37
Abb. 12:	Diskretisierung der Säule.....	38
Abb. 13:	Grundwasserströmungsverhältnisse und Stoffkonzentration (21.10.1998).....	43

Tabellen:

Tab. 1 :	Prozentuale Korrekturen der Niederschlagswerte nach [Richter, 1995].....	10
Tab. 2:	Parameterbelegung des Verfahrens nach Beims& Gutt [Beims 2002].....	13
Tab. 3:	Anhaltwerte für die Porosität und den Durchlässigkeitsbeiwert (nach [BLT93])	21
Tab. 4:	Definition der Berechnungsfälle, Teil 1: Vereinfachungen.....	24
Tab. 5:	Definition der Berechnungsfälle, Teil 2: Randbedingungs- und Parame- tervariationen am Beispiel BTEX-Schaden.....	25
Tab. 6:	Eignung der getesteten Verfahren für die Sickerwasserprognose gemäss §2 BBodSchV.....	35
Tab. 8:	Vergleich der Berechnungsergebnisse für Fall 2 der Programme.....	41
Tab. 9:	Szenarien zur Abschätzung der möglichen Schwankungsbreiten unter stationären Strömungsbedingungen .....	45

# 1 Einleitung

## 1.1 Gesetzliche Grundlagen

Zweck des am 01. März 1999 in Kraft getretenen Gesetzes zum Schutz vor schädlichen Bodenveränderungen und zur Sanierung von Altlasten (Bundes-Bodenschutzgesetz – BBodSchG) ist, nachhaltig die Funktionen des Bodens zu sichern oder wiederherzustellen (§1 Satz 1 BBodSchG). Hierzu sind schädliche Bodenveränderungen abzuwehren, der Boden und Altlasten sowie hierdurch verursachte Gewässerverunreinigungen zu sanieren und Vorsorge gegen nachteilige Einwirkungen auf den Boden zu treffen (§1 Satz 2 BBodSchG).

Allgemeine Vorschriften und Anforderungen zur Untersuchung und Bewertung von Verdachtsflächen, altlastverdächtigen Flächen, schädlichen Bodenveränderungen und Altlasten werden in der Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) vom 12. Juli 1999 geregelt.

Gemäß §4 Abs. 3 BBodSchV ist zur Bewertung der von Verdachtsflächen oder altlastverdächtigen Flächen für das Grundwasser ausgehenden Gefahren eine Sickerwasserprognose zu erstellen. Der Begriff Sickerwasserprognose wird in §2 BBodSchV definiert als „Abschätzung der von einer Verdachtsfläche, altlastverdächtigen Fläche, schädlichen Bodenveränderung oder Altlast ausgehenden oder in überschaubarer Zukunft zu erwartenden Schadstoffeinträge über das Sickerwasser in das Grundwasser, unter Berücksichtigung von Konzentrationen und Frachten und bezogen auf den Übergangsbereich von der ungesättigten zur wassergesättigten Zone.“

Die BBodSchV benennt in Anhang 1, Nr. 3.3 als mögliche „Verfahren zur Abschätzung des Stoffeintrags aus Verdachtsflächen oder altlastverdächtigen Flächen in das Grundwasser“, dass die annäherungsweise Abschätzung der Stoffkonzentrationen und -frachten im Sickerwasser am Ort der Beurteilung:

- „durch Rückschlüsse oder Rückrechnungen aus Untersuchungen im Grundwasserabstrom unter Berücksichtigung der Stoffkonzentration im Grundwasseranstrom, der Verdünnung, des Schadstoffverhaltens in der ungesättigten und gesättigten Bodenzone sowie des Schadstoffinventars im Boden,
- auf der Grundlage von in-situ-Untersuchungen oder
- auf der Grundlage von Materialuntersuchungen im Labor (Elution, Extraktion), bei anorganischen Stoffen insbesondere der Elution mit Wasser gemäß der Verfahren zur Herstellung von Eluaten mit Wasser (Tab. 2 im Anhang 1 Nr. 3.1.2 der BBodSchV)



auch unter Anwendung von Stofftransportmodellen erfolgen kann.“

Wird eine Sickerwasserprognose auf Untersuchungen nach Anhang 1 Nr. 3.3 gestützt, ist im Einzelfall insbesondere abzuschätzen und zu bewerten, inwieweit zu erwarten ist, dass die Schadstoffkonzentration im Sickerwasser den Prüfwert am Ort der Beurteilung überschreitet. Ort der Beurteilung ist der Bereich des Übergangs von der ungesättigten in die gesättigte Zone (§4 (3) BBodSchV). Bei dieser Abschätzung ist insbesondere die Abbau- und Rückhalte-wirkung der ungesättigten Zone zu berücksichtigen. Hierbei sind vor allem die Kriterien

- ✓ Grundwasserflurabstand,
- ✓ Bodenart,
- ✓ Gehalt an organischer Substanz (Humusgehalt),
- ✓ pH-Wert,
- ✓ Grundwasserneubildungsrate/Sickerwasserrate sowie
- ✓ Mobilität und Abbaubarkeit der Stoffe

maßgebend.

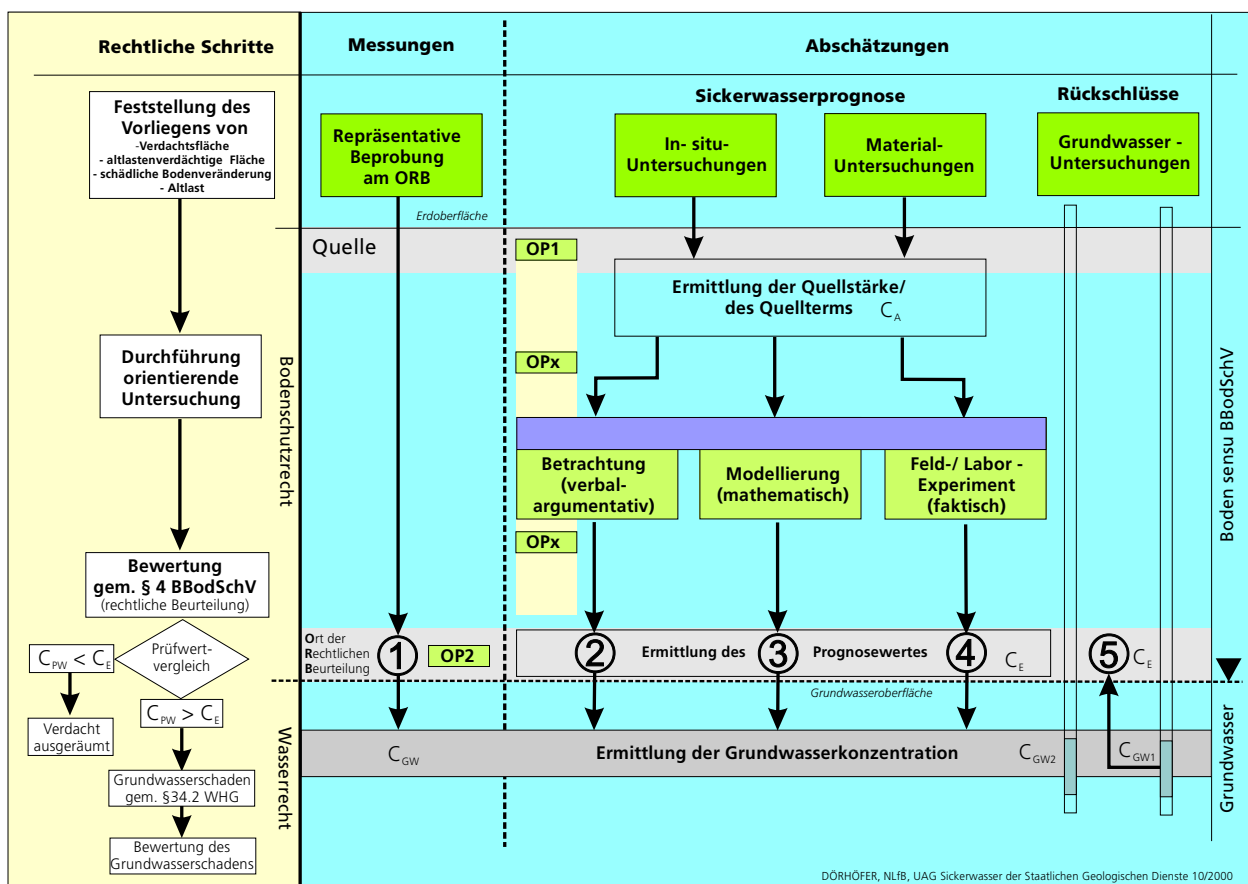


Abb. 1: Verfahrensabläufe innerhalb von Sickerwasserprognosen (aus [SGD UAG 2001])

## 1.2 Problemstellung bei der Sickerwasserprognose

Der Gesetzgeber verweist zwar im Zusammenhang mit der Bestimmung von Schadstoffkonzentrationen und -frachten im Bodensickerwasser auf verschiedene Untersuchungsmethoden. Für die Ableitung, also die Prognose von Schadstoffkonzentrationen am Ort der Beurteilung, werden aber keine konkreten Verfahren benannt. Prinzipiell mögliche Verfahrensweisen zur Ermittlung der Konzentration des Sickerwassers zur Anwendung der Prüfwerte für die Beurteilung des Wirkungspfades Boden-Grundwasser sind in Abb. 1 aufgeführt (Quelle: SGD-AK „Sickerwasser“). Die in Abb. 1 unter Nr. ③ aufgeführten mathematischen Sickerwasserprognosen erfordern Schadstofftransport- und -umsetzungsbetrachtungen in der ungesättigten Zone. Die mathematische Modellbildung und Simulation des Transportes gelöster Stoffe und damit verbundener Stoffumsetzungen in der ungesättigten Zone ist jedoch heute noch nicht Stand der Technik. Aus diesem Grunde wurde die vorliegende Handlungsanleitung erarbeitet, die Ingenieuren, Gutachtern, Fach- und Genehmigungsbehörden Unterstützung bei der Durchführung modellgestützter Sickerwasserprognosen geben soll.

Die innerhalb von modellgestützten Sickerwasserprognosen zu betrachtenden Strömungs-, Stofftransport- und -umsetzungsprozesse in der ungesättigten Boden- und Gesteinszone bis zur vollständig gesättigten Zone, bzw. einem durchgängig ausgebildeten und wasserhaushaltlich wirksamen Grundwasserleiter, basieren auf Modellen bzw. Modellvorstellungen. Solche Modelle bzw. deren rechentechnische Umsetzung in einem Simulationsprogramm<sup>1</sup> sind die Sickerwasserprognoseinstrumente, die innerhalb der vorliegenden Handlungsanleitung betrachtet werden.

## 1.3 Regelwerke, Materialien und technische Merkblätter

Grundlage zur Beschreibung bodenkundlicher Merkmale ist die **Bodenkundliche Kartieranleitung** (KA 4) [[AG Boden 1994](#)]. Für die Ableitung bodenkundlicher Parameter stehen die **DVWK-Regeln, Heft 129** [[DVWK 1995](#)] sowie die **DVWK-Regeln, Heft 136** [[DVWK 1999](#)] zur Verfügung.

Die Probenvorbehandlung, einschließlich der Trocknung des Probenmaterials, für die Bestimmung physikalisch-chemischer Eigenschaften und die Bestimmung anorganischer Schad-

---

<sup>1</sup> Simulationsprogramme sind keine Modelle; sie sind Berechnungshilfen, in denen bestimmte Modelle bzw. Modellvorstellungen rechentechnisch umgesetzt und damit zugänglich gemacht worden sind.

stoffe erfolgt nach **DIN ISO 11464**. Für organische Schadstoffe ist **E DIN ISO 14507** anzuwenden (vgl. BBodSchV, Anhang 1).

Als Methoden zur Herstellung von Eluaten mit Wasser werden in der BBodSchV (Anhang 1, Tab. 2) für anorganische Stoffe der **Bodensättigungsextrakt** sowie die **DIN 38414-4** genannt. Obwohl unter Abschn. 3.3 im Anhang 1 der BBodSchV aufgeführt ist, dass „die Stoffkonzentration im Sickerwasser ... am Ort der Probenahme für anorganische Schadstoffe mit den Ergebnissen des Bodensättigungsextraktes ansatzweise gleichgesetzt werden [kann]“, ist die Anwendbarkeit beider Verfahren für die Bestimmung von Sickerwasserkonzentration (BoSE und S4-Tests) derzeit noch in der intensiven wissenschaftlichen Diskussion (siehe z.B. [Berger 2004] oder [Leuchs 2004]). Rein aus vollzugsrechtlicher Sicht ist zu erwarten, dass frühestens mit dem Abschluss und der Auswertung der Ergebnisse des BMBF-Förderschwerpunktes „Sickerwasserprognose“ Bestimmungsmethoden festgelegt werden.

Als Verfahren zur Herstellung von Eluaten mit Wasser für organische Stoffe werden Säulen- bzw. Lysimeterversuche ohne Nennung einer bestimmten Methode empfohlen. Aufgrund des hohen feldtechnischen Aufwandes ist jedoch zu erwarten, dass Lysimeterversuche für die Gefährdungsabschätzung bei altlastverdächtigen Flächen nur selten zum Einsatz kommen. Die zurückgezogene **DIN Vornorm 19736** „Ableitung von Konzentrationen organischer Stoffe im Bodenwasser“ geht auf Säulenversuche für organische Stoffe ein. Untersuchungsparameter und Verfahrensweisen zur Analyse anorganischer Schadstoffgehalte werden in der BBodSchV in Anhang 1, Tab. 4, die der organischen Schadstoffe in Tab. 5 empfohlen.

Die analytische Bestimmung der anorganischen Stoffkonzentrationen in Eluaten und Sickerwasser ist nach den in Tab. 6 (BBodSchV, Anhang 1) aufgeführten Analyseverfahren durchzuführen, die Bestimmung der organischen Stoffkonzentrationen im Sickerwasser erfolgt nach den in Tab. 7 (BBodSchV, Anhang 1) genannten Methoden.

Untersuchungen zur Validierung von Boden-Eluaten zur Prognose von Inhaltsstoffen des Boden-Sickerwassers gemäß BBodSchV sind in der Texte-Reihe des Umweltbundesamtes [LUBA 1999](#) unter Nr. 86/99 dokumentiert. Sie dienen der Überprüfung natürlicher Schwermetallhintergrundgehalte in Böden anhand von Lysimeterauswertungen von insgesamt 340 Sickerwasserproben. In der ebenfalls zurückgezogenen **DIN Vornorm 19735** wird die Ableitung von Konzentrationen im Bodenwasser aus ammoniumnitratextrahierbaren Gehalten oder Eluatgehalten geregelt.

Für die Gewinnung von Bodenwasserproben mit Hilfe von Saugkerzen wurde das **DVWK-Merkblatt 217/1990** [\[DVWK 1990\]](#) entwickelt.

Laborversuche zur Gewinnung von bodenphysikalischen und anderen, den Schadstofftransport beeinflussenden Parametern werden in dem **Materialienband "Probenahme bei der Technischen Erkundung von Altlasten"** des Sächsischen Landesamtes für Umwelt und Geologie [[LfUG 1999](#)] dargestellt. Die dabei durchgeführten Materialuntersuchungen haben einen besonderen Stellenwert, da sie das einzige Verfahren sind, welches eine längerfristige Prognose ermöglicht. Die im Auftrag des Sächsischen Landesamtes für Umwelt und Geologie erarbeiteten **Muster-Leistungsbeschreibungen „Laborative Untersuchungen zur Sickerwasserprognose im Rahmen der Detailuntersuchung“** [[LfUG 2004b](#)] bieten konkrete Methoden zur Durchführung von Laborversuchen an und ermöglichen damit eine einheitliche und nachvollziehbare Vorgehensweise bei der Parameterermittlung.

Grundlagen und Sachstand zur Simulation des Schadstofftransports in der ungesättigten Zone werden in dem **Materialienband „Simulation des Schadstofftransports in der ungesättigten Zone im Rahmen der Altlastenbehandlung“** des Sächsisches Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung [[SMU 1997](#)] erläutert, der auch als UBA-Text Nr. 90/97 erschienen ist.

#### **1.4 Anforderungen an Sickerwasserprognosen**

Mit der Sickerwasserprognose soll geprüft werden, ob der Boden einen ausreichenden Puffer bieten kann, um altlastbedingte Schadstoffe zurückzuhalten oder umzuwandeln, oder ob tatsächlich relevante Schadstoffeinträge in das Grundwasser stattfinden oder zukünftig zu erwarten sind (Kriterium ist die Überschreitung der Sickerwasserprüfwerte nach BBodSchV) und damit eine ordnungsrechtliche Gefahr verbunden ist. Aufgrund der unterschiedlichen inhaltlichen Schwerpunkte der einzelnen Bearbeitungsstufen innerhalb der Altlastenbearbeitung (Untersuchung, Bewertung oder Sanierungsplanung) ist es erforderlich, die unterschiedlichen Anforderungen an die Sickerwasserprognosen zu definieren und entsprechende Aufgaben zu formulieren, um hierfür geeignete Werkzeuge (Prognoseinstrumente) auswählen zu können.

Innerhalb der Orientierenden Untersuchung liegen i.d.R. nur allgemeine Standortinformationen sowie Messungen von Summenparametern vor. Eine komplexe Modellbildung ist somit nur bedingt bzw. nicht möglich. Die Gefahrenbewertung wird daher eher unter worst-case-Annahmen unter Verwendung einfacher, d.h. wenig aufwändiger, konservativer Abschätzungen vollzogen.

Für die Detailuntersuchung sind nach §3 Abs. 4 BBodSchV für den Ort der Beurteilung präzise und angemessene Aussagen zum Konzentrationsverlauf zu treffen; auf dieser Basis erfolgt auch die abschließende Gefährdungsabschätzung mit der Entscheidung über den Gefahren-tatbestand und ggf. ein Vorschlag über vorläufige Sanierungszielwerte. Bei der Abschätzung des Schadstoffeintrags im Übergangsbereich von der ungesättigten zur gesättigten Zone ist insbesondere die Abbau- und Rückhaltewirkung der ungesättigten Zone zu berücksichtigen.

Nach beendeter Sanierung der Altlast, aber auch schon während der Untersuchungs- und Planungsphasen (Monitoring) können mit Sickerwasserprognosen die Systemzustände ermittelt werden, bei denen keine Emissionen, die über duldbaren Schwellenwerten liegen, aus der Altlast bzw. der ungesättigten Zone in das Grundwasser erfolgen (=Rückwärtsrechnung).

Zur Erfüllung der Vorsorgepflicht gegen das Entstehen schädlicher Bodenveränderungen durch die Nutzung auf dem Grundstück (§7 BBodSchG) können Sickerwasserprognosen die Basis zur Gefahrenbeurteilung für das Schutzgut Grundwasser bilden.

Bei der Anwendung modellgestützter Sickerwasserprognosen ist allerdings zu beachten, dass eine klassische Kalibrierung des Modells für die ungesättigte Zone nicht durchgeführt werden kann. Kalibrierung bedeutet hier eine Variation der Parameter in deren physikalisch bzw. chemisch begründeten Schwankungsbereichen, bis die zugrundeliegenden Messwerte zufriedenstellend nachgebildet werden können. Messwerte wären:

- Druckhöhen
- Wassergehalte
- Wassermengen und
- Sickerwasserkonzentrationen

In der Regel liegt kein einziger dieser Messwerte vor. Die Messung von Druckhöhen und Wassergehalten würde die Installation entsprechender Sonden voraussetzen. Wassermengen ließen sich nur durch Wiegen (z.B. wiegbare Lysimeter) oder mit Durchflussmessgeräten bestimmen.

Und auch für die Sickerwasserkonzentration liegen keine direkten Messwerte vor. Die Gleichsetzung von Eluatkonzentrationen (BoSE oder auch S4-Test) mit Sickerwasserkonzentrationen ist derzeit in der intensiven wissenschaftlichen Diskussion. Auch wenn zu erwarten ist, dass aus Vollzugsgründen ein oder mehrere Verfahren festgelegt werden, bleibt der fachliche Hintergrund stets umstritten.

Aus diesem Sachverhalt ergibt sich, dass alle Eingangsgrößen, die das Ergebnis einer modellgestützten Sickerwasserprognose signifikant beeinflussen können, mit dem notwendigen Maß an Genauigkeit bzw. die Schwankungsbreiten der Eingangsgrößen ermittelt werden müssen.

Die Verwendung komplexer Modellierungen macht auch nur Sinn, wenn standortspezifisch erhobene Informationen (Bodenkennwerte, Bodenschichtung, Flurabstand, Grundwasserschwankungsbereich, Schadstoffinventar etc.) vorliegen und nicht überwiegend auf Schätzgrößen zurückgegriffen werden muss.

## **2 Erarbeitung des Konzeptionellen Modells**

### **2.1 Standortcharakterisierung**

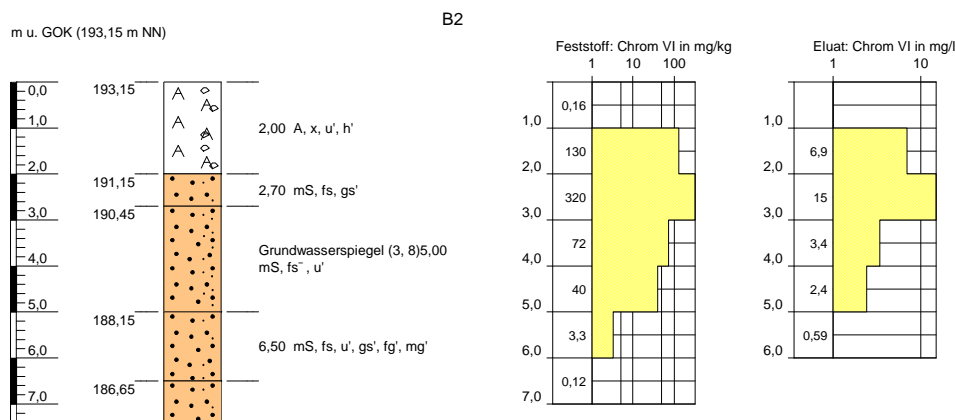
#### **2.1.1 Bodeneigenschaften**

Neben der Schichtansprache Vor-Ort gemäß der KA 4 ([AG Boden 1994]) sind die schichtspezifisch entnommen Bodenmischproben mindestens noch hinsichtlich ihrer

- ✓ Lagerungsdichte (Porositätsbestimmung) und
- ✓ Korngrößenverteilung sowie
- ✓ pH-Wert

zu untersuchen. Ab der Detailuntersuchung ist es sinnvoll, zusätzlich die hydraulischen Bodenparameter (van-Genuchten-Parameter, vertikaler Durchlässigkeitsbeiwert) zu bestimmen, da die Ermittlung der Bodenkennwerte für die einzelnen Bodenschichten die Qualität (und damit Exaktheit) der Sickerwasserprognose beeinflusst. Zur späteren Quelltermbestimmung müssen Informationen über Stoffarten und mögliche Eintrags- bzw. Umschlagsmengen zusammengetragen werden. Wenn diese nicht verfügbar sind – was oftmals der Fall ist –, muss anhand vorliegender oder zu veranlassender Untersuchungen der Ist-Zustand der für die Sickerwasserprognose relevanten Bodenbereiche – von der Geländeoberkante bis zu einer standortspezifisch festzulegenden Tiefe oberhalb der vollständig gesättigten Bodenzone – erhoben werden. Detailliertheit und Güte der standortspezifischen Informationen tragen entscheidend zur Aussagekraft der Sickerwasserprognose bei. Abb. 2 zeigt dazu beispielhaft die

Gegenüberstellung eines aufgenommenen Schichtenverzeichnisses mit der konkreten Belastungssituation im Feststoff sowie den ermittelten Eluatgehalten (Verfahren DIN-38414-4).



**Abb. 2: Schichtenverzeichnis und Kontaminationsprofil**

### 2.1.2 Grundwasserneubildung

Die langjährige, mittlere Grundwasserneubildungsrate übersteigt erfahrungsgemäss 1/3 des langjährigen, mittleren Niederschlags nicht. Grundlage für eine detailliertere Abschätzung der mittleren Grundwasserneubildungsrate sind

- ✓ Klimadaten umliegender Wetter- bzw. Niederschlagsmessstationen des DWD's

sowie den Angaben zu

- ✓ Nutzung
- ✓ Versiegelung
- ✓ Bewuchs
- ✓ Lage
- ✓ Höhe
- ✓ Exposition
- ✓ Hangneigung

Aus diesen Angaben lassen sich die benötigten langjährigen Mittelwerte des Niederschlags, der Temperatur und der Sonnenscheindauer ermitteln. Die Korrektur des systematischen Fehlers des gemessenen Niederschlags wegen Windeinfluss sowie Benetzungs- und Verdunstungsverlusten ist dabei unerlässlich, damit dieser Fehler nicht auf die wasserhaushaltlich ermittelte tatsächliche Verdunstung übertragen wird (siehe z.B. [BfG 2003]). Die systematischen Fehler in der Niederschlagsmessung werden in Abhängigkeit der Standortverhältnisse und

der Jahreszeit mit dem Ansatz von [Richter, 1995] korrigiert. Die Multiplikationsfaktoren können Tab. 1 entnommen werden.

Sofern notwendig, bilden die vom DWD übermittelten Zeitreihen auch die Grundlage für eine zeitlich aufgelöste Ermittlung der Sickerwasserrate an der oberen Randbedingung. Das Programm P1 enthält dazu z.B. einen Wettergenerator ([Richter, 2003]) mit dem die Zeitreihen des Niederschlags sowie der potenziellen Evapotranspiration unter Verwendung der Berechnungsansätze von TURC/IVANOV in der Form, wie sie in das Simulationsprogramm P1 als Randbedingungen auch eingehen, erzeugt werden. Der Direktabfluss ergibt sich dann aus dem Anteil, den der Boden nicht mehr aufnehmen kann.

Auf der Grundlage der mittleren Wasserhaushaltsgrößen lässt sich unter Verwendung des Berechnungsansatzes nach TURC die mittlere, potenzielle Evapotranspiration für den jeweiligen Standort berechnen:

$$ETP = 0,0031 \cdot C \cdot (R_G + 209) \cdot \frac{T}{T + 15} \cdot 1,1 \quad (1)$$

$$C = 1,0 \quad U \geq 50\% \\ C = 1 + \frac{50 - U}{70} \quad U < 50\% \quad (2)$$

$$R_G = R_0 \cdot \left( 0,19 + 0,55 \cdot \frac{S}{S_0} \right) \quad (3)$$

wobei bedeuten

ETP	mm/d	Potenzielle Evapotranspiration
C		Korrekturfaktor zur Berücksichtigung der relativen Luftfeuchte
U	%	Relative Luftfeuchte
R <sub>G</sub>	J/cm <sup>2</sup>	Globalstrahlung
R <sub>0</sub>	J/cm <sup>2</sup>	Extraterrestrische Strahlung
S	h/d	tatsächliche Sonnenscheindauer pro Tag
S <sub>0</sub>	h/d	astronomisch mögliche Sonnenscheindauer pro Tag
T	°C	Jahresmitteltemperatur

Liefert die Wetterstation keine Werte für die Strahlungen und Sonnenscheindauer, müssen geeignete Abschätzungen getroffen werden. Der DWD bietet unter <http://www.dwd.de/de/wir/Geschaeftsfelder/KlimaUmwelt/Leistungen/Leistungen.htm> eine DIN A3-Karte der mittleren Globalstrahlung für die Bundesrepublik Deutschland im Maßstab 1 : 2.500.000, basierend auf im 1-km-Raster zum Preis von 33,64 € (29,00 € + 16% MwSt.), an, anhand derer zumindest ein Überblick über die Größenordnung der Globalstrahlung gewonnen werden kann.



**Tab. 1 : Prozentuale Korrekturen der Niederschlagswerte nach [Richter, 1995]**

Gebiet	Lage	Jan	Feb	Mrz	Apr	Mai	Jun	Jul	Aug	Sep	Okt	Nov	Dez
I	A	20,8	23,6	20,0	16,0	12,0	10,3	10,5	10,3	11,5	13,6	16,2	18,9
	B	17,3	17,9	15,5	13,6	10,8	9,2	9,4	9,3	10,2	11,2	12,9	14,6
	C	13,4	13,7	12,6	11,6	9,8	8,4	8,5	8,4	9,1	9,7	10,6	11,6
	D	9,5	9,6	9,4	9,4	8,5	7,3	7,5	7,3	7,8	7,8	8,0	8,4
II	A	27,5	29,0	23,6	18,2	12,3	10,3	10,5	10,5	12,1	14,2	19,1	22,7
	B	20,5	21,5	17,8	15,0	10,9	9,3	9,4	9,5	10,9	11,6	15,0	17,3
	C	15,2	15,8	14,0	12,4	9,8	8,3	8,6	8,6	9,6	10,2	12,0	13,2
	D	10,3	10,7	10,0	9,6	8,5	7,3	7,5	7,5	8,2	8,2	8,7	9,2
III	A	31,6	33,5	26,9	18,3	12,5	10,4	10,8	10,5	12,6	15,5	21,8	26,5
	B	23,3	24,5	20,3	15,1	11,1	9,8	10,0	9,5	11,5	12,7	16,8	19,8
	C	17,3	17,9	15,5	12,7	10,1	8,8	9,1	8,5	10,2	11,0	13,3	15,0
	D	11,5	11,8	10,7	10,0	8,6	7,7	8,0	7,5	8,7	8,8	9,5	10,3
IV	A	31,7	30,5	25,6	18,8	10,4	8,1	7,9	8,2	9,6	13,4	21,3	26,9
	B	23,0	22,2	19,4	15,0	9,0	7,2	7,1	7,3	8,6	10,6	16,0	19,7
	C	16,2	15,7	14,3	11,9	8,0	6,5	6,3	6,6	7,7	8,8	12,1	14,4
	D	10,6	10,2	9,6	8,7	6,7	5,7	5,6	5,8	6,5	6,8	8,3	9,5

Für die Zuordnung der Gebiete gilt dabei:

Gebiet I: westlicher Teil des Norddeutschen Tieflandes einschließlich Schleswig – Holstein und Rheintal sowie Südwestdeutschland ohne westliches Saarland und Schwarzwald

Gebiet II: mittlerer Teil des Norddeutschen Tieflandes sowie westliche Mittelgebirge von der Eifel bis zum Westharz und der Bereich zwischen Frankenhöhe, Steigerwald und Oberpfälzer Wald bis 700 m NN

Gebiet III: östlicher Teil des Norddeutschen Tieflandes und östliche Mittelgebirge bis 700 m NN

Gebiet IV: Alpenvorland südlich der Donau einschließlich tiefere Lagen der Alpen sowie Schwäbische Alb und Bayerischer Wald bis 1000 m NN

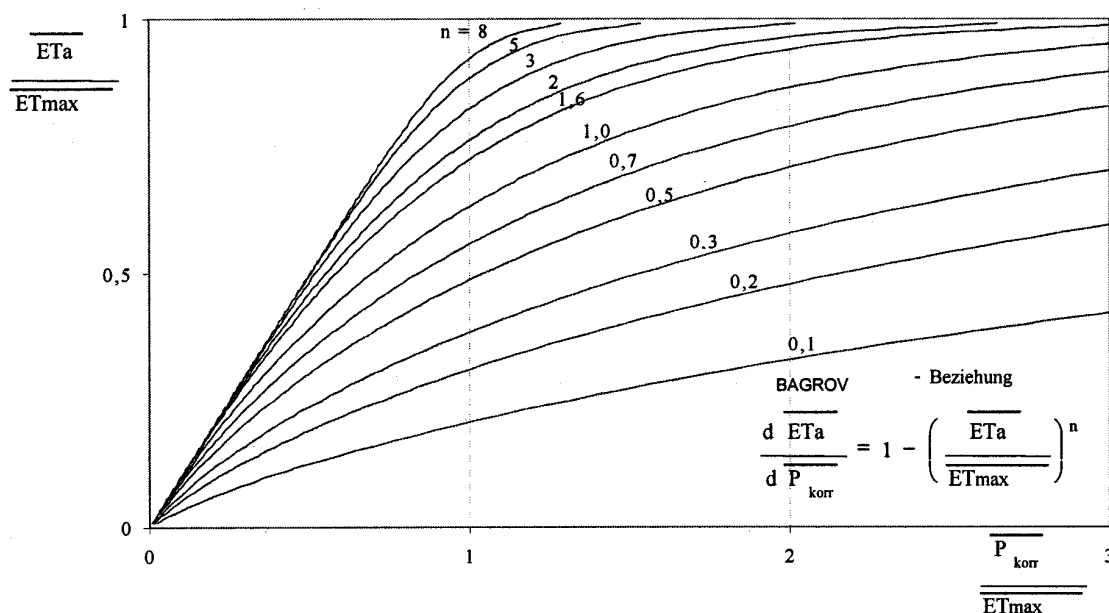
Die Stationslagen erhalten folgende Kennzeichnung:

- Lage A: freie Station
- Lage B: leicht geschützte Station
- Lage C: mäßig geschützte Station
- Lage D: stark geschützte Station

Die Abschätzung der realen Evapotranspiration  $ET_a$  kann dann mit Hilfe des BAGROV-Verfahrens erfolgen:

$$\frac{d\overline{ET_a}}{dN_{\text{korr}}} = 1 - \left( \frac{\overline{ET_a}}{\overline{ET_{\text{max}}}} \right)^n \quad (4)$$

Die Balken über den Formelzeichen zeigen die Belegung dieser Größen mit langjährigen Mittelwerten an. Der Effektivitäts- oder BAGROV-Faktor  $n$  stellt einen Korrekturfaktor in Abhängigkeit von der Bodenart und dem Bewuchs dar. Für die Lösung der o.g. Differenzialgleichung stellt auch [BfG 2003] ein entsprechendes Diagramm, das in die Abb. 3 übernommen wurde, zur Verfügung.



**Abb. 3: Ermittlung der tatsächlichen Evapotranspiration nach dem BAGROV-Verfahren (aus [BfG 2003])**

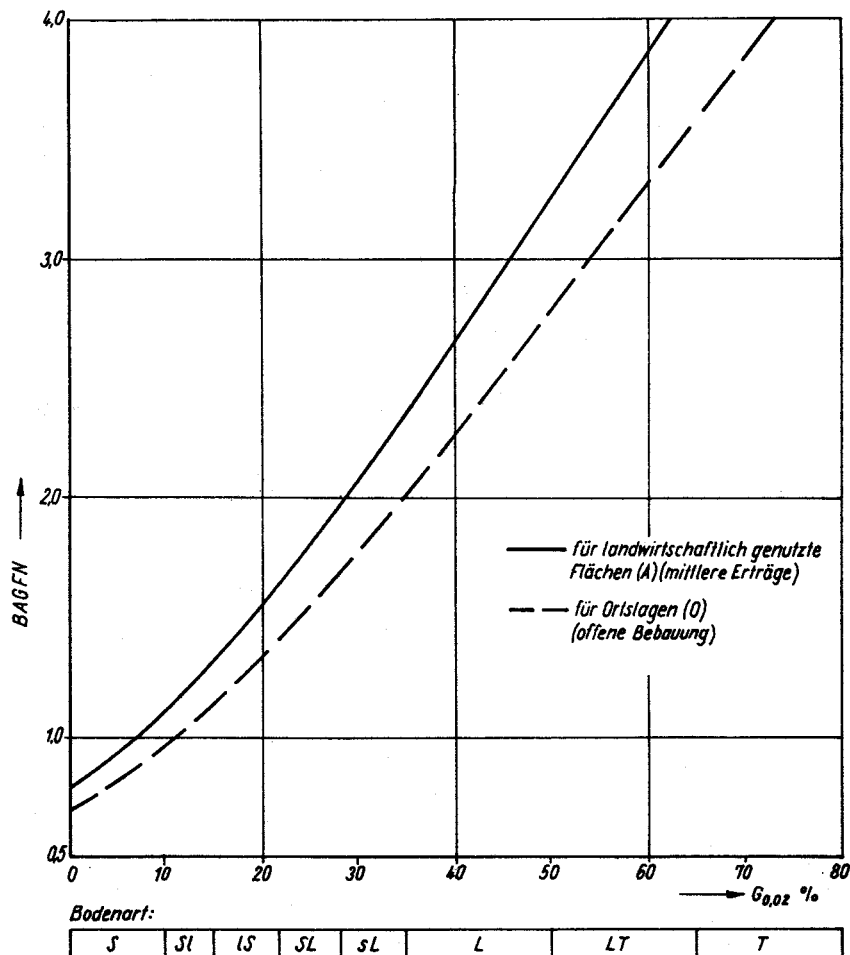
Neuere Forschungsergebnisse sowie Anleitungen zur Ermittlung des Effektivitätsfaktors sind in [BfG 2003] enthalten. Eine erste Abschätzung des Effektivitätsfaktors  $n$  in Abhängigkeit der Bodenart ist anhand des Diagramms aus Abb. 4 möglich, das [DYCK 1980] entnommen wurde.

Aus der Bilanzgleichung

$$N_{\text{korr}} = ET_a + A \quad (5)$$

kann somit der Gesamtabfluss  $A = (A_D + A_I + A_U)$  berechnet werden. Der Direktabfluss  $A_D$  beträgt erfahrungsgemäss ca. 25% des Gesamtabflusses  $A$ . Die Komponenten Interflow bzw. Zwischenabfluss  $A_I$  und unterirdischer Abfluss  $A_U$  lassen sich nicht ohne weiteren Aufwand

trennen. Der Zwischenabfluss  $A_i$  ist der Abflussanteil der auf den einfallenden Schichtgrenzen in Vorfluter entwässert. Der unterirdische Abfluss  $A_U$  ist gleichzusetzen mit der Grundwasserneubildungsrate. Wenn sich beide Komponenten nicht weiter trennen lassen, ist die langjährige mittlere Sickerwasserrate gleich der langjährigen mittleren Grundwasserneubildungsrate.



**Abb. 4: Abschätzung des Bagrov-Faktors n aus der Bodenart (aus [DYCK 1980])**

Der Ansatz, dass 75% des Gesamtabflusses A den unterirdischen Abfluss  $A_U$  bilden, ist empirisch. Ebenso könnte dieser Anteil 60% oder 90% betragen. Gesicherte Aussagen lassen sich nur durch detailliertere Wasserhaushaltsbetrachtungen treffen.

In der Musterleistungsbeschreibung des Sächsischen Landesamtes für Umwelt und Geologie in [LfUG 2004b] ist auch das Verfahren nach Beims & Gutt zur Abschätzung der Grundwasserneubildungsrate [Beims 2002] dargestellt. Bei diesem gehen neben dem langjährigen mittleren Niederschlag, die Bodenart, die Vegetation und der Versiegelungsgrad in die Abschätzung der Grundwasserneubildung ein:

$$GWN = a \cdot (N - b)^c \cdot d \quad (6)$$

mit

- a Bodenkennwert
- b Bodenkennwert
- c Vegetationskennwert
- d Versiegelungsgrad

Die Parameterbelegung in Tab. 2 wurde der Muster-Leistungsbeschreibung des SLfUG ([LfUG 2004b]) entnommen.

**Tab. 2: Parameterbelegung des Verfahrens nach Beims& Gutt [Beims 2002]**

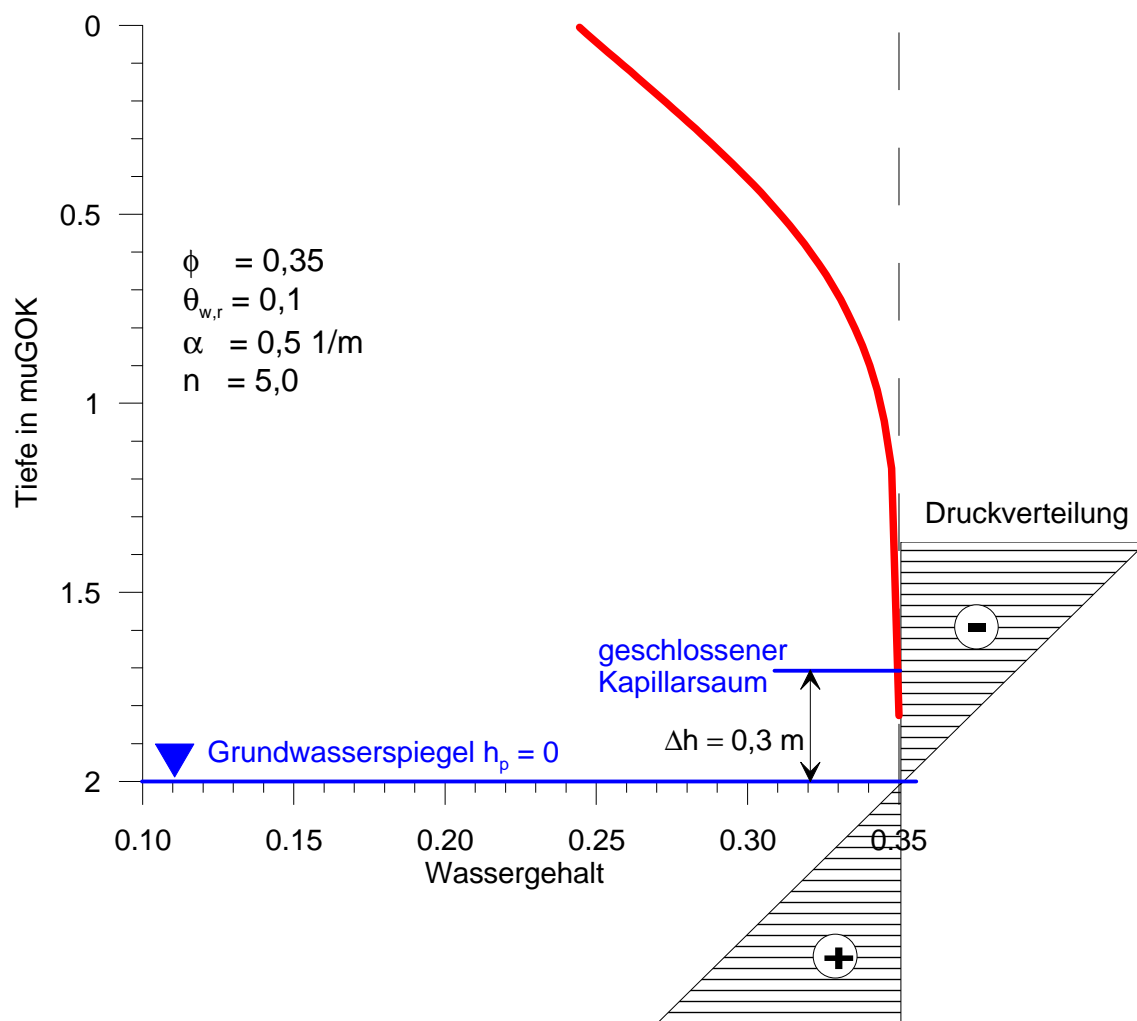
Bodenart	Parameter		Vegetation	Parameter
	A	b		c
Grobsand (gS)	0,56	240	Ödland	1,03
Mittelsand (mS)	0,56	250	Gras	1,00
Feinsand (fS)	0,55	260	Landw. Nutzfläche	0,97
Schluffiger Sand	0,54	270	Wald	0,94
Lehmiger Schluff	0,52	300	Versiegelungsgrad	d
Sandiger Ton	0,49	350	0%	1,00
Toniger Lehm	0,45	400	25%	0,85
			50%	0,70
			75%	0,50

### 2.1.3 Grundwasserspiegel

Der Ort der Beurteilung ist der Übergang von ungesättigten zur gesättigten Zone. Dieser Ort ist konkret nicht bestimmbar, da der Grundwasserspiegel Schwankungen unterliegt und zudem ein geschlossener Kapillarsaum in der ungesättigten Zone ausgebildet ist. Im Kapillarsaum gilt bereits  $h_p < 0$ , d.h. es liegt ein Unterdruck bei noch voller Wassersättigung vor, während die Grundwasseroberfläche durch die Bedingung  $h_p = 0$  gekennzeichnet ist. Abb. 5 verdeutlicht die Zusammenhänge. Rot eingetragen ist in Abb. 5 die Funktion des Wassergehaltes über die Tiefe unter der Annahme hydrostatischer Bedingungen und eines homogenen Aufbaus der ungesättigten Zone. Erst 30 cm über dem Grundwasserspiegel wird der Wassergehalt geringer als die Porosität, d.h. (Boden-)Luft dringt in die Poren ein (=Lufteintrittspunkt).

Die Höhe dieses geschlossenen Kapillarsaumes kennzeichnet den Maßstabsfaktor  $\alpha$  des anstehenden Bodens (hier: Boden i.S.d. BBodSchG).

Welcher Aufwand zur Ermittlung des „Beurteilungs“-Grundwasserstandes betrieben werden muss, ist von der Stufe der Altlastenbearbeitung und von der erwarteten Prognosegenauigkeit und -sicherheit abhängig. Liegen keine detaillierteren Informationen vor, ist es bei der Gefährdungsabschätzung im Rahmen der Orientierenden Untersuchung ausreichend, einen mittleren Grundwasserstand abzuschätzen. Da in den weiteren Stufen der Erkundungsgrad - insbesondere der der lokalen Grundwasserverhältnisse - steigt, kann der Ort der Beurteilung dann auch mit zunehmender Sicherheit genauer festgelegt werden.



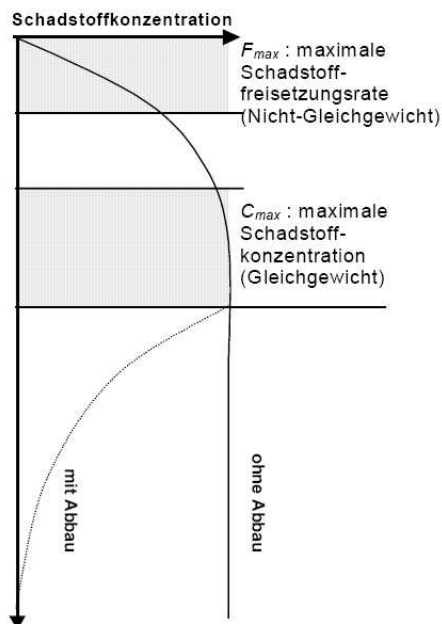
**Abb. 5: Retentionsfunktion mit Kapillarsaum**

Vielfach wird heute in der praktischen Umsetzung die Festlegung eines mittleren Grundwasserhöchststand (MHGW) als Ort der Beurteilung akzeptiert bzw. gefordert.

## 2.2 Quelltermmittlung und Prozessanalyse

### 2.2.1 Quelltermbestimmung

Die Stoffquelle liegt vielfach unterhalb der Erdoberfläche. Das eindringende Sickerwasser ist stofffrei bzw. mit einer Hintergrundkonzentration beladen. Bei der Durchsickerung der unterirdischen Stoffquelle wird der Stoff aus der Feststoffmatrix gelöst und dann in der ungesättigten Zone weiter bis ins Grundwasser transportiert. Sofern keine Gleichgewichtsbedingungen herrschen, konzentriert sich das Sickerwasser dabei bis zu einer bestimmten Maximalkonzentration  $c_{max}$  auf (vgl. Abb. 6). Lägen hingegen sofort Gleichgewichtsbedingungen vor, würde die Maximalkonzentration im Sickerwasser idealerweise sofort nach Eintritt in das Quellmaterial auftreten.



**Abb. 6: Aufkonzentration des Sickerwassers unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen (aus [Grathwohl 2002])**

Um dies mit einem Modell nachbilden zu können, müsste als Randbedingung bzw. als Quellterm eine Stoffkonzentration in der festen Phase in Abhängigkeit von der Zeit und den Milieubedingungen vorgegeben werden. Die Formulierung solcher Quelltermfunktionen ist derzeit noch Gegenstand intensiver Forschungen auch innerhalb des BMBF-Förderschwerpunktes „Sickerwasserprognose“. Sofern keine Laborversuche vorliegen, behilft man sich deshalb derzeit noch vielfach damit, dem Sickerwasser am Top der Säule eine bestimmte Konzentration zu zuordnen. Prinzipiell sind aber Laborversuche zur Bestimmung der Quellterm eigenschaf-

ten, wie sie in der Musterleistungsbeschreibung aus [LfUG 2004b] beschrieben sind, zu empfehlen.

Der vorzugebende Quellterm ist auf jeden Fall anhängig von der Zeit. Alle anderen Einflussfaktoren, wie z.B. Temperatur, Druck, Milieubedingungen, werden i.d.R. vernachlässigt. Aber selbst die Berücksichtigung des zeitlichen Quellschüttungsverhaltens ist in der praktischen Anwendung mit Ausnahme der Simulation von Sanierungsvarianten häufig nicht begründbar.

Aufgrund der geschilderten Schwierigkeiten bei der Quelltermbestimmung sollte versucht werden, eine Massenbilanz zu erstellen. Dazu sind folgende Angaben zu erheben:

- ✓ Ausgangsprodukte
- ✓ Kontaminationszeitpunkt
- ✓ Massenermittlung

### **2.2.2 Prozessanalyse**

Bei der Ermittlung des Konzentrationsverlaufs über die Zeit und des Schadstoffmassenflusses (Fracht) in das Grundwasser sind die physikalisch-chemischen und biologischen Prozesse, die das Migrationsverhalten beeinflussen, wie z. B. Mobilisierung und Immobilisierung oder Stoffumwandlungen in der ungesättigten Bodenzone sowie der Grundwasserflurabstand und dessen Schwankungen besonders zu berücksichtigen.

#### *- Sorption*

Die Sorptionseigenschaften von Stoffen werden im Wesentlichen beeinflusst von

- ✓ der Bodenart,
- ✓ dem Gehalt an organischer Substanz und
- ✓ dem pH-Wert

Bodenproben sind daher immer auch auf ihre Milieubedingungen und auch Kationenaustauschkapazität hin zu untersuchen. In der Musterleistungsbeschreibung aus [LfUG 2004b] ist für Detailuntersuchungen ein Leistungskatalog der notwendigen Feld- und Laborversuche zur Bestimmung der Quellterm und Stofftransportparameter zusammengestellt.

Liegen keine konkreten Untersuchungsergebnisse vor, können vergleichende Literaturstudien über die vorgefundenen Stoffe, Böden und Milieubedingungen weiterführen. Die dabei erzielten Ergebnisse sind immer kritisch zu hinterfragen, da häufig die zugrundeliegenden Zusammenhänge voneinander abweichen bzw. nicht direkt vergleichbar sind.

### - Abbau

Die Einschätzung der Abbaubarkeit ist stoffabhängig. Generell wird davon ausgegangen, dass ein Stoffabbau nur in den fluiden Phasen Bodengas und Sickerwasser hinreichend beschrieben werden kann, um in einer Modellbildung und Simulation berücksichtigt werden zu können.

Schwermetalle sind nicht abbaubar. Sie können allerdings in Abhängigkeit vom vorherrschenden Milieu immobilisiert werden. Deshalb sind in solchen Schadensfällen immer die Milieubedingungen mit aufzunehmen.

Um eine zutreffende Prozessanalyse durchführen zu können, sind also mindestens folgende Parameter vor Ort bzw. im Laborversuch schichtspezifisch zu bestimmen:

- ✓ Organischer Kohlenstoffgehalt
- ✓ Milieubedingungen (pH-Wert, O<sub>2</sub>, Eh, ...)
- ✓ Feststoff- und Eluatgehalte der relevanten Stoffe/Stoffgruppen
- ✓ Bindungsformen des Haupt-/pilotstoffes
- ✓ Kationenaustauschkapazität

## 2.3 Ausgrenzung der relevanten Stoffe/Stoffgruppen

Kontamination setzen i.d.R. einen Schadstoffmix/-cocktail frei. Die einzelnen Stoffe weisen dabei unterschiedliche Eigenschaften auf, die in unterschiedlichen Transport- und Umsetzungseigenschaften resultieren. Während in der Modellbildung noch mehrere Stoffe und ihre Wechselwirkungen untereinander betrachtet werden können, ist spätestens bei der Simulation die Abrüstung des Modells auf einen oder mehrere Pilotstoffe notwendig. Von dem identifizierten Pilotstoff muss eine Rückrechnung durch geeignete Modellbeziehungen auf den gesamten Schadstoffcocktail oder Teile davon möglich sein. Gleichzeitig muss die Modellbildung zumindest im Rahmen der Detailuntersuchung auf ein

- a) worst-case-Szenario und
- b) auf die Dauer der langfristigen Schadstofffreisetzung

ausgerichtet sein. Pilotstoff im Fall a) sollte der mobilste und am geringsten abbaubare Stoff aus dem Cocktail sein, gleichzeitig muss er jedoch auch gefährdungsrelevant sein. Im Fall b) ist es der gefährdungsrelevante Stoff, der am langsamsten freigesetzt, transportiert und abgebaut wird.

Beispiel für PAK (aus [KP 2002]):



Die Stoffgruppe der PAK beinhaltet Verbindungen, die sich durch eine unterschiedlich ausgeprägte Mobilität unterscheiden. Eine Betrachtung der Gesamtstoffgruppe PAK innerhalb der Modellbildung und Simulation kann deshalb nicht zielführend sein. Im Allgemeinen gilt für die PAK: Je geringer die Ringzahl um so höher die Mobilität der Einzelverbindung. Um für die Stoffgruppe der PAK eine repräsentativen Pilotstoff zu identifizieren, sollten die schichtspezifisch ermittelten Anteile der 3-Ring-Verbindungen<sup>2</sup> (Acenaphthylen, Acenaphthen, Fluoren, Phenanthren und Anthracen) im Eluat den jeweiligen Gesamt-PAK-Gehalt gegenübergestellt werden. Es sind zunächst die 3-Ring-Verbindungen zu identifizieren, die im Eluat über alle schichtspezifischen Proben wiedergefunden werden können. Stehen nach diesem Auswahl-schritt immer noch mehrere 3-Ring-Verbindungen zur weiteren Auswahl, ist die Verbindung zu wählen, die mit der höchsten Eluatkonzentration nachgewiesen werden konnte. Der Anteil des Pilotstoffes am Gesamtgehalt muss über die Tiefe steigen, da die PAK's mit steigender Ringzahl weniger mobil sind. Beträgt der Anteil des Pilotstoffes im oberen Bereich der Säule z.B. nur 10% am Gesamt-PAK-Gehalt liegt er am unteren Ende häufig bei > 50%.

Aufgrund dieser Anforderungen kann auch es sinnvoll sein, mehrere Pilotstoffe parallel zu betrachten. Dies trifft vor allem dann zu, wenn Kreuzkontaminationen unter folgenden Stoffgruppen auftreten:

- 1) Organische Stoffe
  - a) leichtflüchtiger organischer Stoff
  - b) sonstiger organischer Stoff
- 2) Anorganische Stoffe
  - a) Schwermetalle
  - b) Sonstige

In Abhängigkeit von der Stoffgruppe kann es aber durchaus sinnvoll sein, anstelle der Einzelsubstanzen die gesamte Stoffgruppe an sich im Rahmen der Modellbildung und Simulation zu betrachten. Diese Vorgehensweise wurde beispielweise bei der Sickerwasserprognose für den BTEX-Schaden gewählt.

---

<sup>2</sup> Naphthalin ist eine 2-Ring-Verbindung und weitaus mobiler als die 3-Ring-Verbindungen. Es ist aber mit seinen Transporteigenschaften wenig repräsentativ für die Stoffgruppe der PAK's und strenggenommen auch kein PAK.

## 3 Randbedingungen und Parameterbestimmung

### 3.1 Strömungsrandbedingungen und -parameter

#### 3.1.1 Anfangsbedingungen

Anfangsbedingungen (AB) sind vorzugeben, sobald instationäre Strömungs- und/oder Transportprozesse betrachtet werden sollen. Anfangsbedingungen sind:

- ✓ Druck  $p(z)$  oder Druckhöhe  $h_p(z)$  oder Potenzialhöhe  $H(z)$
- ✓ Wassergehalt  $\theta(z)$  und Prozessrichtung (Be- oder Entwässerung)

Die Vorgabe des Wassergehaltes und der Prozessrichtung ist nur dann erforderlich, wenn die Hysterese in der Retentionsfunktion Beachtung finden soll. Da dafür i.d.R. keine belastbaren Daten vorliegen, ist die Vorgabe der Ausgangsdruckverteilung ausreichend. Aus dieser wird der Wassergehalt dann berechnet.

#### 3.1.2 Randbedingungen

Randbedingungen (RB) sind vorgegebene Lösungen der zugrundeliegenden Modellgleichungen. Dies sind:

- ✓ RB 1. Art: Vorgegebene Druckverhältnisse  $p(t)$ ,  $h_p(t)$ ,  $H(t)$
- ✓ RB 2. Art: Vorgegebene Stromraten  $v(t)$

Oben an einer 1D-Säule liegt die Grundwasserneubildungsrate mit  $GWN(t)$  bzw.  $v_N(t)$  als RB 2. Art, unten i.d.R. der Grundwasserspiegel als RB 1. Art mit  $H(t)$  (vgl. Abb. 11). Die NoFlow-Randbedingungen (RB 2. Art mit  $v=0$ ) links und rechts einer 1D-Säule müssen nicht explizit vorgegeben werden.

**Die im Rahmen des Vorhabens durchgeführten Sensitivitätsanalysen haben gezeigt, dass die Grundwasserneubildungsrate neben der Quellkonzentration die Randbedingung ist, die einen signifikanten Einfluss auf das Berechnungsergebnis hat.**

- Innere Randbedingungen

Zusätzlich zu diesen äußeren Strömungsrandbedingungen können innere Randbedingungen definiert werden, wie z.B. Dränagen oder Saugkerzen.

### 3.1.3 Bodenphysikalische Parameter

Vorzugebende bodenphysikalische Parameter sind:

- ✓ **Durchlässigkeitsbeiwert**  $k_f$  in m/s
- ✓ **Porosität**  $\phi$
- ✓ **Restwassergehalt**  $\theta_{w,r}$  ( $\theta_{w,r} \approx 0,25 \cdot \phi$ )
- ✓ **Restluftgehalt**  $\theta_{a,r}$  ( $\theta_{a,r} \approx 0,25 \cdot \phi$ )
- ✓ **Maßstabsfaktor**  $\alpha^j$  und  $\alpha^d$  ( $\alpha^j \approx 2 \cdot \alpha^d$ ,  $\alpha \approx 1/h_c$ )
- ✓ **Anstiegsparameter**  $n$  ( $n=2$ )
- ✓ **Transformationsparameter**  $m = 1-1/n$
- ✓ **Lagerungsdichte**  $\rho_b$  in kg/m<sup>3</sup>
- ✓ **Dispersivität**  $\delta$  in m

Die Parameter  $\alpha$  und Parameter  $n$ ,  $m$  sind die Parameter des van-Genuchten-Modells zur Beschreibung der Retentionsfunktion. Wenn dieses Modell nicht verwendet wird, sind hier die entsprechenden Parameter des alternativen Modells (z. B. Brooks-Corey etc.) einzusetzen.

Wird die Hysterese und auch der Lufteinschluss in der Retentionsfunktion vernachlässigt, was der üblichen Vorgehensweise entspricht und aufgrund der unsicheren Datengrundlage auch zulässig ist, verbleiben die 5 oben fett markierten bodenphysikalischen Parameter, die für die Beschreibung der hydraulischen Eigenschaften der ungesättigten Bodenschichten benötigt werden<sup>3</sup>. Der Vollständigkeit halber sind auch noch die Lagerungsdichte und die Dispersivität aufgeführt. Diese beiden Parameter sind zur Beschreibung der Transportvorgänge notwendig, haben aber bodenphysikalische Ursachen.

Liegen keine Versuchsdaten vor, erfolgt die weitere Parameterschätzung häufig auf der Basis von Erfahrungswerten und Literaturangaben. Dazu kann die UNSODA (United Nations Soil DataBase z.B. auf der HYDRUS-CD enthalten) verwendet werden. Dort muss dann nach Materialien bzw. Böden gesucht werden, die vergleichbare Ansprachen und Lagerungsverhältnisse aufwiesen. Dazu wurde am U.S. Salinity Lab das Programm ROSETTA ([Schaap 1999]) entwickelt. Vorzugeben sind die Sand-, Schluff- und Tongehalte sowie die Lagerungsdichte. Anhand dieser 4 einfach zu bestimmenden Kennwerte schätzt das Programm die Werte für die Parameter Restwassergehalt  $\theta_{w,r}$ , Porosität-Restluftgehalt =  $\theta_s$ ,  $\log(\alpha)$ ,  $\log(n)$  und  $\log(K_s)$  ab.

Die Reindichte der Materialien wird häufig mit  $\rho_s=2.650 \text{ kg/m}^3$  abgeschätzt. Ihre Roh- bzw. Lagerungsdichte ergibt sich dann zu  $\rho_b=\rho_s \cdot (1-\phi)$ .

<sup>3</sup> Zum Vergleich: Bei der Betrachtung von reinen Grundwasserströmungsprozessen sind es 2 Parameter, der Durchlässigkeitsbeiwert und die Speicherkapazität, die zudem noch Konstanten sind.

Die Dispersivität beschreibt die unterschiedlich schnelle Ausbreitung von Stoffteilchen gegenüber dem strömenden Wasser. Sie ist abhängig vom Fließweg. Die in der Literatur häufig zitierten Werte für Dispersivitäten im cm-Bereich gelten nur für den Labormaßstab. Im Feld lassen sich Dispersivitäten bis in den m-Bereich hinein identifizieren. Ein solch große Dispersivität kann auch ein Hinweis auf das Vorliegen präferenzierter Fließwege sein.

Erfahrungsgemäss ist der Ansatz

$$\delta = 0,1 \dots 0,5 \cdot \text{Grundwasserflurabstand} \quad (7)$$

eine gute Schätzung, wenn konkrete Anhaltspunkte fehlen.

**Tab. 3: Anhaltwerte für die Porosität und den Durchlässigkeitsbeiwert (nach [BLT93])**

Erdstoffart	Porosität	Entwässerbare Porosität	kapillare Steighöhe	Durchlässigkeitsbeiwert
	$\phi$	$\theta_e = \phi - \theta_{w,r}$	$h_c = 1/\alpha$	$k_f$
			m	m/s
Sandiger Kies	0,25 – 0,35	0,20 – 0,25	< 0,01	$3 \cdot 10^{-3} - 5 \cdot 10^{-4}$
Kiesiger Sand	0,28 – 0,35	0,15 – 0,20	0,01 – 0,05	$1 \cdot 10^{-3} - 2 \cdot 10^{-4}$
Mittlerer Sand	0,30 – 0,38	0,10 – 0,15	0,05 – 0,1	$4 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-4}$
Schluffiger Sand	0,33 – 0,40	0,08 – 0,12	0,1 – 0,5	$2 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-5}$
Sandiger Schluff	0,35 – 0,45	0,05 – 0,10	0,5 – 1	$5 \cdot 10^{-5} - 1 \cdot 10^{-6}$
Toniger Schluff	0,40 – 0,55	0,03 – 0,08	1 – 2	$5 \cdot 10^{-6} - 1 \cdot 10^{-8}$
Schluffiger Ton	0,45 – 0,65	0,02 – 0,05	> 2 – 5	$\approx 10^{-8}$

Solange Transportprozesse ohne Abbau und bei einer mittleren Grundwasserneubildungsrate (stationäre Strömungsverhältnisse) betrachtet werden, können die van Genuchten Parameter  $\alpha$  und  $n$  bzw. generell **die Parameter der Retentionsfunktion** aufgrund der Vernachlässigung der Speicherterme **keinen größeren Einfluss auf die Berechnungsergebnisse** haben. Da weiter die Grundwasserneubildungsrate um Zehnerpotenzen geringer als der vertikale Durchlässigkeitsbeiwert (gesättigte hydraulische Leitfähigkeit) ist, hat auch dieser Parameter nur einen geringen Einfluss auf die Berechnungsergebnisse. Diese Zusammenhänge konnten mit den durchgeführten Sensitivitätsanalysen belegt werden.

## 3.2 Stofftransportrandbedingungen und -parameter

### 3.2.1 Stofftransportrandbedingungen

Anfangsbedingung ist die Vorgabe einer Stoffkonzentration  $c(z)$  in der wässrigen Phase in Abhängigkeit von der Tiefe. Stofftransportrandbedingungen sind für alle äußeren Modellränder vorzugeben. Innere Stofftransportrandbedingungen können vorgegeben werden.

- ✓ RB 1. Art: Vorgegebene Konzentrationen  $c_0(t)$
- ✓ RB 2. Art: rein konvektiver Massenstrom und  $Y(t) = v(t) \cdot c_n(t)$

Als Stoffquelle wird vielfach vereinfachend dem einsickernden Niederschlagswasser eine bestimmte Quellkonzentration, ggf. als Funktion der Zeit, zugewiesen. Die im Rahmen des Vorhabens durchgeführten Sensitivitätsanalysen haben gezeigt, dass die **Quellkonzentration** neben der Grundwasserneubildungsrate die Randbedingung ist, die einen **signifikanten Einfluss** auf das Berechnungsergebnis hat.

Am unteren Rand ist die Konzentration gesucht. Je nach verwendetem Verfahren bzw. Programm ist dies explizit im Sinne einer Anweisung „Berechne für diesen Randabfluss die darüber abfließende Stoffkonzentration“ vorzugeben oder ohnehin Berechnungsergebnis.

### 3.2.2 Stofftransportparameter

Konkrete Vorgaben zur Ermittlung der Quelltermeigenschaften und der Transportparameter unter Verwendung von Laborversuchen im Rahmen der Detailuntersuchung enthält die entsprechende Musterleistungsbeschreibung aus [LfUG 2004b]. Innerhalb der Orientierenden Untersuchung ist ein solcher Aufwand i.d.R. nicht gerechtfertigt. Zur Parameterabschätzung müssen dann Literatur- bzw. Internetrecherchen durchgeführt oder auf Erfahrungswerte zurückgegriffen werden.

Solange Transportprozesse ohne Abbau und bei einer mittleren Grundwasserneubildungsrate (stationäre Strömungsverhältnissen) betrachtet werden, ist die **Sorption** der Parameter, der die **Berechnungsergebnisse am stärksten beeinflusst**. Die Strömungsparameter, hier vor allem die Parameter zur Beschreibung der Retentionsfunktion (van-Genuchten Parameter) haben aufgrund der Vernachlässigung der Speicherterme keinen größeren Einfluss auf die Berechnungsergebnisse. Da der Stoff keinem Abbau und keiner Immobilisierung unterliegt,

erreicht die Konzentration am Ort der Beurteilung nahezu die Quellkonzentration. Die tatsächlich erreichte maximale Konzentration hängt dabei von der Größenordnung der Dispersion ab.

Werden Stoffe oder Stoffgruppen betrachtet, die einem Abbau 1. Ordnung unterliegen, ist jede Vernachlässigung der zeitlichen Abhängigkeiten der Strömungs- und Transportprozesse eine bedeutende Fehlerquelle. Demzufolge ist bei der Simulation der zeitliche Gang der Grundwasserneubildungsrate genauso wie die Wasserspeicherung zu berücksichtigen. Die Zugrundelegung stationärer Strömungsverhältnisse ist in diesem Fall nicht zulässig.

## **4 Verfahren- und Programmauswahl**

### **4.1 Ergebnisse der durchgeführten Sensitivitätsanalysen**

Anhand von zwei konkreten Schadensfällen

1. Anorganischer Schadensfall: Chromschaden
2. Organischer Schadensfall: BTEX-Schaden

wurden Sensitivitätsanalysen durchgeführt, um die Randbedingungen und Parameter zu ermitteln, die den höchsten Einfluss auf die Genauigkeit des Berechnungsergebnisses haben. Aus den Berechnungsergebnissen wurden folgende Einzelwerte herausgefiltert bzw. berechnet

- ✓ die höchste Konzentration sowie
- ✓ deren zeitliches Auftreten
- ✓ die höchste Fracht und
- ✓ deren zeitliches Auftreten
- ✓ die Gesamtmasse des in 100a in das Grundwasser eingetragenen Stoffes

Die betrachteten Szenarien/Fälle unterteilten sich in die Untersuchung

1. der Auswirkungen von Idealisierungen (Fall 1 bis 4, Tab. 4) und
2. der Auswirkungen von Randbedingungen und Parametern (ab Fall 5, Tab. 5)

auf die Berechnungsergebnisse.

#### 4.1.1 Auswirkungen von Idealisierungen

Im Fall 1 bzw. im Grundfall wird von einer instationären Simulation der Strömungs- und Transportprozesse ausgegangen. Als instationäre Strömungsrandbedingung wird der jahreszeitliche Gang der Sickerwasserrate in täglicher Auflösung, wie mit dem Wettergenerator aus Dem Programm P1 erzeugt, angesetzt. Die Auflösung einzelner Regenereignisse auf Tagesbasis bedingt abrupte Wechsel zwischen keiner Infiltration und z.T. beträchtlichen Infiltrationsraten am oberen Ende des Profils. Dadurch muss der Simulationskernel des Programms P1 mit z.T. sehr kleinen Zeitschritten arbeiten. Die Rechenzeitsteigerung ist beträchtlich gegenüber den Fällen, in denen stationäre Strömungsverhältnisse vorausgesetzt werden.

Wegen der erhöhten Anforderungen an die Datenbereitstellung und wegen der damit verbundenen rechentechnischen Schwierigkeiten hat die instationäre Simulation der Strömungsverhältnisse in der ungesättigten Zone bislang kaum Anwendung in der Praxis gefunden. Die Annahme stationärer Strömungsverhältnisse mit einer konstanten Fliess- bzw. Sickerwasser- oder Grundwasserneubildungsrate ist die weitverbreitetste Annahme bei der Betrachtungen des Schadstofftransportes in der ungesättigten Zone (=Fall 2). Alle weiteren Berechnungsfälle/Varianten gehen von stationären Strömungsverhältnissen mit einer konstanten Grundwasserneubildungsrate aus.

**Tab. 4: Definition der Berechnungsfälle, Teil 1: Vereinfachungen**

Idealisierung	Fall 1	Fall 2	Fall 3	Fall 4
Stationäre Strömung		<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Gravitationsgetriebene Strömung			<input checked="" type="checkbox"/>	
Vernachlässigung der Schichtung				<input checked="" type="checkbox"/>

Fall 3 betrachtet eine allein gravitationsgetriebene Strömung in der ungesättigten Zone, d.h. es gilt  $v_f = v_{GWN} = k(\theta)$ . Diese Aufgabenstellung ist für ein Programm, dass die Strömungsgleichung stationär wie auch instationär lösen kann, eine Unterforderung. Auch rechentechnisch sind im Gegensatz zu einer stationären Betrachtung unter Einbeziehung von Druckgradienten keine Vorteile zu erwarten. Es entfällt lediglich die einmalige Lösung der Strömungsgleichung, die üblicherweise in Bruchteilen von Sekunden ermittelt wird. Der Vollständigkeit halber wurde dieser Fall dennoch untersucht. Zur Umsetzung der Strömungsbedingungen wurde in das Programm eingegriffen und Strömungsgeschwindigkeit, Druckhöhe und Wassergehalt an den einzelnen Punkten der Säule gemäss den zugrundeliegenden Modellgleichungen vorgegeben. Zu der in den Beispielen vorgegebenen Strömungsgeschwindigkeit bzw. mittleren Grundwasserneubildungsrate von  $v_f = k(\theta) = 5,5 \cdot 10^{-9}$  m/s gehört z.B. in der Schicht 2 ein Wassergehalt von

$\theta = 0,22$  (vgl. auch Abb. 7) und somit eine Kapillardruckhöhe von ca. 2,3 mWS. Darauf aufbauend erfolgte die instationäre Simulation des Transportprozesse.

Der Fall 4 untersucht die Auswirkungen der Annahme eines homogenen Aufbaus der ungesättigten Zone. Insgesamt werden unter Fall 4 drei Varianten betrachtet, da in den beiden Schadensfällen die ungesättigte Zone aus 3 verschiedenen Schichten aufgebaut ist.

#### 4.1.2 Auswirkungen von Randbedingungen und Parametern

Im zweiten Teil waren einzelne Randbedingungen und Parameter auf deren Einfluss auf das Berechnungsergebnis hin zu untersuchen. Die zugehörige Definition der Berechnungsfälle ist in Tab. 5 zu finden. Die in der Tabelle enthaltenen Werte gelten für den simulierten BTEX-Schaden, deren Herleitung ist im separaten Modellierungsbericht zum BTEX-Schaden dokumentiert.

**Tab. 5: Definition der Berechnungsfälle, Teil 2: Randbedingungs- und Parametervariationen am Beispiel BTEX-Schaden**

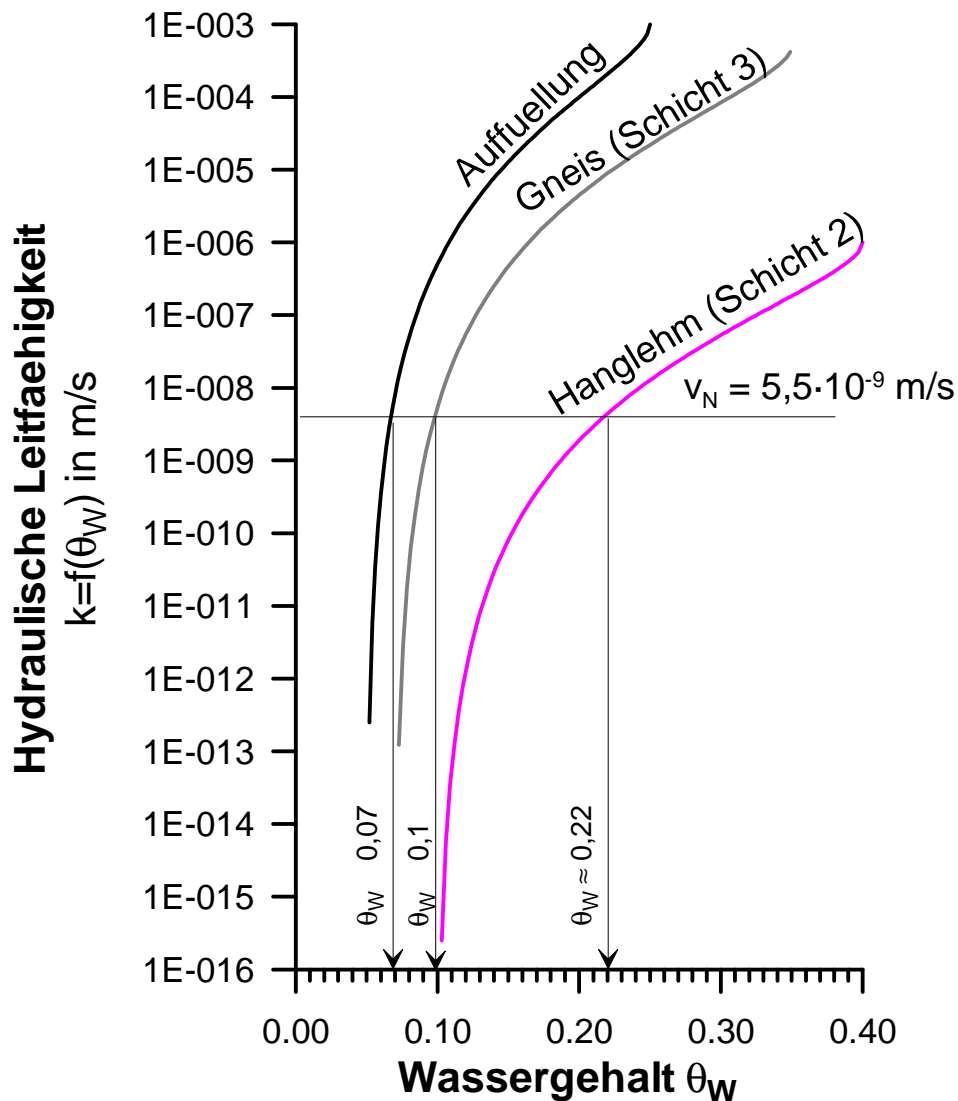
Fall	Randbedingung/Parameter	Ausgangs-	Unterer	Oberer
		Wert		
			Fall b	Fall a
5 a/b	Grundwasserneubildungsrate	174 mm/a	139 mm/a	209 mm/a
6 a/b	Durchlässigkeitsbeiwert ( $k_f$ -Wert)	$1 \cdot 10^{-6}$ m/s	$5 \cdot 10^{-7}$ m/s	$1 \cdot 10^{-5}$ m/s
7 a/b	Maßstabsfaktor $\alpha$	1 1/m	0,5 1/m	2,0 1/m
8 a/b	Anstiegswert $n$	2,0	1,5	3,0
9 a/b	Restwassergehalt	0,10	0,05	0,15
10 a/b	Porosität	0,40	0,35	0,45
11 a/b	HENRY-Konstante ( $K_D$ -Wert)	$2 \cdot 10^{-4}$ m <sup>3</sup> /kg	$5 \cdot 10^{-5}$ m <sup>3</sup> /kg	$5 \cdot 10^{-4}$ m <sup>3</sup> /kg
12 a/b	Quellkonzentration $c_0$	180 mg/l	50 mg/l	150 mg/l
13 a/b	Dispersivität $\delta$	0,01 m	0,005 m	0,1 m
14 a/b	Abbaurrate $\mu_{fl}$	0,011 1/d	0,005 1/d	0,05 1/d

Legende: Fall 14 nur beim Chromschaden berücksichtigt

Da das Strömungsproblem mit der Vorgabe der Sicker- bzw. Grundwasserneubildungsrate gelöst ist, ist nicht zu erwarten, dass die Berechnungsfälle 6-10 signifikant vom Vergleichsfall

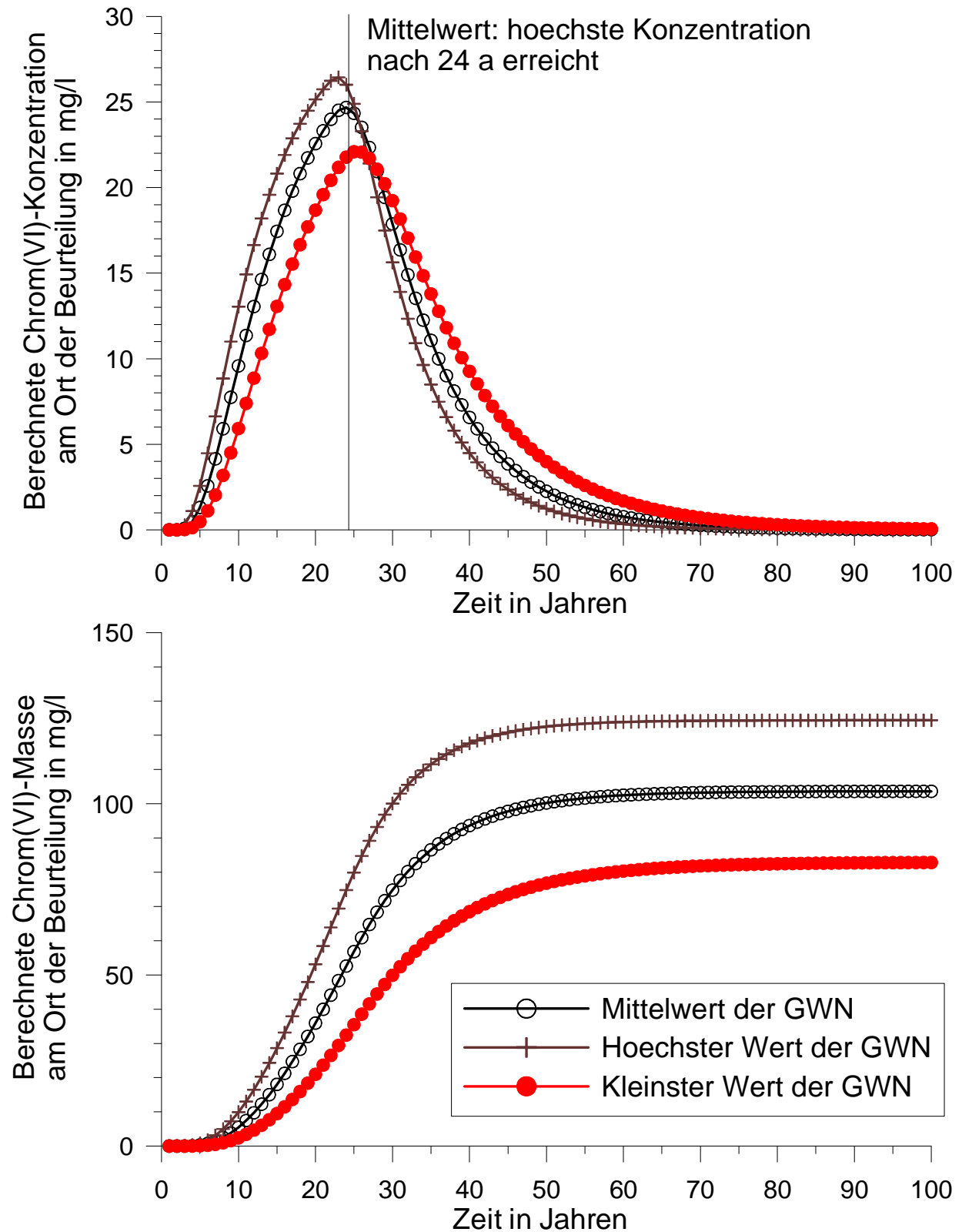


2 abweichen. Die Speicherkapazität (repräsentiert durch die Parameter  $\phi$ ,  $\theta_{w,r}$ ,  $\alpha$  und  $n$ , Fall 7 - 10) wird bei einer stationären Betrachtung ohnehin außer Acht gelassen. Über die Wassergehaltsbestimmung als Grundlage für die Berechnung der ungesättigten hydraulischen Leitfähigkeit können die Parameter  $\alpha$  und  $n$  allerdings die Migrationsgeschwindigkeit beeinflussen, gleiches gilt für die Parameter  $\phi$ ,  $\theta_{w,r}$ , die in die Stofftransportgleichung über die Wassergehaltsbestimmung einfließen.



**Abb. 7: Funktion der hydraulischen Leitfähigkeit der Materialien**

Die mittlere Sickerwasserrate ist mit 0,17 m/a bzw.  $5,5 \cdot 10^{-9}$  m/s wesentlich kleiner als der Durchlässigkeitsbeiwert  $k_f$  (=Hydraulische Leitfähigkeit bei voller Sättigung) der Materialien. Der Zusammenhang ist in Abb. 7 dargestellt. Der Wassergehalt in den Materialien liegt stets über der Restsättigung, so dass die Sickerwasserrate ohne weiteres in Richtung Grundwasserspiegel durchgeleitet werden kann.



**Abb. 8:** Vergleich der berechneten Konzentration und Masse am Ort der Beurteilung für die Variation der Grundwasserneubildungsrate

Stellvertretend für die vielen Variationsrechnungen ist in Abb. 8 das Ergebnis der Variation der Grundwasserneubildungsrate bei der Simulation des Chromschadens dargestellt. Die mit schwarzen Kreisen gekennzeichnete Kurve stellt den berechneten Konzentrations-/Massenverlauf am Ort der Beurteilung für eine mittlere Grundwasserneubildungsrate von 174 mm/a (homogene Säule, Fall 4b) dar. Der Graph mit den braunen Kreuzen steht für die Konzentration/Masse bei einer mittleren Grundwasserneubildungsrate von 209 mm/a und die rote Kurve gilt für  $v_N=139$  mm/a. Das obere Diagramm zeigt, dass bei einer erhöhten mittleren Grundwasserneubildungsrate am Ort der Beurteilung etwas früher höhere Konzentrationen und bei einer geringeren Grundwasserneubildungsrate diese später und kleiner auftreten. Die eingetragene Masse (Fracht) sinkt aber mit geringerer Grundwasserneubildungsrate wie das untere Diagramm deutlich zeigt.

Die durchgeführten Sensitivitätsanalysen im Falle des Chromschadens haben gezeigt, dass es im Wesentlichen

- ✓ die Grundwasserneubildung
- ✓ die Quellkonzentration und
- ✓ die Sorptionskonstante

sind, die den deutlichsten Einfluss auf das Berechnungsergebnis, d.h. die berechnete Sickerwasserkonzentration am Ort der Beurteilung haben. Sobald abbaubare Stoffe betrachtet werden, kommt der Abbauparameter noch hinzu.

Am konkreten Fall BTEX-Schaden lässt sich allerdings nicht nachweisen, dass allein der Abbauparameter noch hinzu kommt. Vielmehr wurde hier festgestellt, dass nahezu alle anderen Randbedingungen und Parameter ebenfalls einen deutlichen Einfluss auf die Simulationsergebnisse hatten, sobald sie variiert wurden. Die Sensitivitätsanalyse zeigte, dass die Schwankungsbreiten der zugrundeliegenden Randbedingungen und Parameter nahezu jedes Ergebnis zu lassen würden. Hieraus wird ersichtlich, dass die Datengrundlage für eine hinreichend genaue Modellbildung für den BTEX-Schaden nicht ausreichend war. Der Einfluss von Randbedingungen und Parametern auf die Simulationsergebnisse ist nur dann zutreffend zu bestimmen, wenn das Simulationsmodell dem realen Untergrundmodell (Standort, Schadstoff, Quelle) im Wesentlichen entspricht, d.h. wenn die Modellkalibrierung hinreichend genau abgeschlossen wurde ([Häfner 1985]). Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse sind daher für den BTEX-Schadensfall als nicht vertrauenswürdig einzustufen.

## 4.2 Lösungsansätze und getestete Programme

Ursprünglich war zur Bearbeitung der Aufgabenstellung vorgesehen, auf der Grundlage einer Modellklassifikation solche Programme auszuwählen und zu testen, die jeweils unterschiedliche Modellansätze repräsentieren. Dieser Anspruch konnte nicht umgesetzt werden. Die auf dem deutschen Markt verfügbaren Programmen lassen sich lediglich in Modellgruppen gliedern:

1. Deterministische Modellansätze auf der Grundlage der Richard's- und der Advektions-Dispersion-Gleichung mit entweder
  - a. einer numerischen Lösung oder
  - b. einer analytischen Lösung
2. und empirische Ansätze

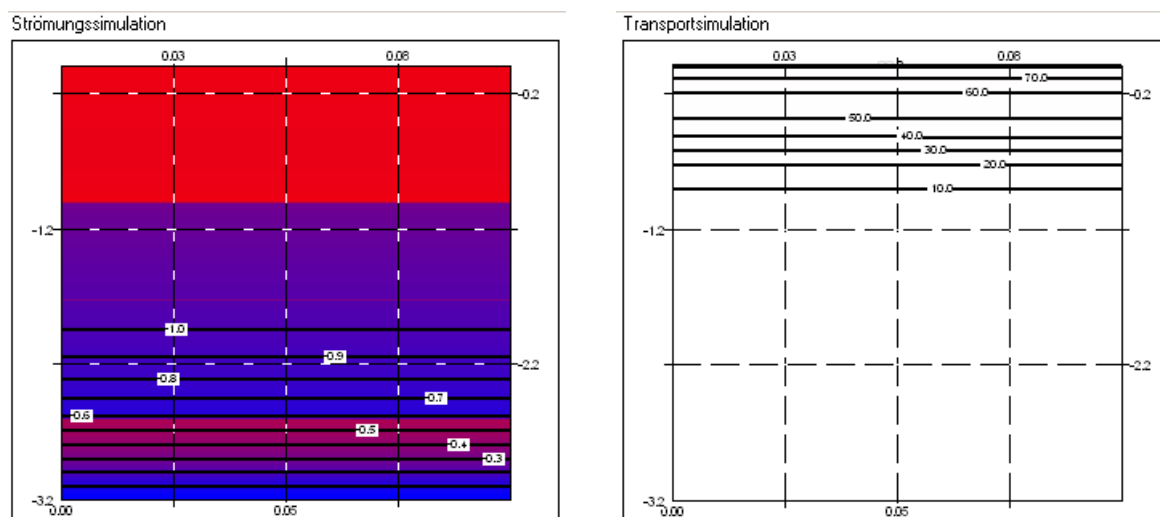
und folgen somit keiner klaren Modellklassifikation, wie im Teil Grundlagen dargestellt. Deshalb wurden die Anbieter/Autoren von insgesamt 5 der im Rahmen des BMBF-Förderschwerpunktes „Sickerwasserprognose“ weiterentwickelten Programmsysteme gebeten, ihre Programme vorzustellen und die beiden Beispiele Chromschaden und BTEX-Schaden exemplarisch zu betrachten. Dies waren

- ✓ Programm P1
- ✓ Programm P2
- ✓ Programm P3
- ✓ Programm P4
- ✓ Programm P5

Diese fünf Programme bilden einen repräsentativen Querschnitt der heute auf dem deutschen Markt angebotenen Programme bzw. Lösungsansätze. Die Programme P1, P2 und P5 basieren dabei auf der Lösung der Richards-(Strömungs)- sowie der Advektions-Dispersion-Gleichung. Sie unterscheiden hauptsächlich in der Handhabung bzw. in der Beschreibung der Strömungsprozesse. Das Verfahren P4 eignet sich nach Einschätzung der Programmautoren zur Prozessidentifikation im Rahmen der Orientierenden und der Detailuntersuchung. Das Programm P3 basiert im Wesentlichen auf empirischen Grundlagen. Die Ergebnisse der mit diesen Programmen durchgeführten Berechnungen sowie eine Programmkurzbeschreibung sind in einer separaten Dokumentation enthalten und können abgefordert werden.

## - Programm P1

Das Programm P1 entstammt der SWMS\_2D/HYDRUS-Familie ([Šimunek 1992] und [Šimunek 1999]). Das ursprüngliche DOS-Programm wurde innerhalb des BMBF-Förderschwerpunktes „Sickerwasserprognose“ in ein windows-konformes Programmsystem mit definierten Schnittstellen zu anderen Modulen, Programmen und Datenbanken überführt. Es ist ein Einkomponentenmodell, das zur Simulation der 1D- oder 2D-Strömungs- und Stofftransportprozesse in der ungesättigten Zone die Methode der Finiten Elemente zur Lösung der RICHARD's-Gleichung benutzt. Die Simulation der Transportprozesse erfolgt auf der numerischen Lösung der Konvektions-Dispersions-Gleichung, die um entsprechende Sorptions- und Abbauterme erweitert wurde. Gegenüber dem Programm SWMS\_2D zeichnet sich das Programm P1 durch eine flexible Wahl der Randbedingungen, der Berücksichtigung von hysteresen Prozessen in der ungesättigten Zone sowie einen implementierten Parameteridentifikationsalgorithmus aus.



**Abb. 9: Online-Grafiken aus der Simulation mit dem Programm P1**

Die Modellerstellung wird durch eine Schnittstelle zum Schichtenerfassungsprogramm GeO-Din unterstützt, über diese ist der Aufbau eines 1D-vertikalen Strömungs- und Transportmodells aus den in der Datenbank verfügbaren Angaben zum Schichtaufbau, zum Grundwasserspiegel und ggf. zum Stoffinventar und -konzentrationen möglich. Die Übernahme der Schichtenverzeichnisse, also der Schichtansprachen, schafft die Grundlage zur Ankopplung einer Bodendatenbank (derzeit: United Nations Soil Database (UNSODA [Schaap 1999]), in der Versuche zur Bestimmung der bodenhydraulischen Eigenschaften oder die Parameter selbst gespeichert sind.

## - Programm P2

Das Programm P2 wurde in Zusammenarbeit mit der Environment Agency in Großbritannien zur Gefährdungsabschätzung von Boden- und Grundwasserschadensfällen entwickelt. Es berechnet den Austrag einzelner Schadstoffe (ohne Berücksichtigung von Wechselwirkungen) aus einer Schadstoffquelle auf der Basis des Gleichgewichts zwischen im Sickerwasser gelöstem und ungelöstem Schadstoff und simuliert den Stofftransport durch die ungesättigte Zone und im Grundwasser. Konzentrationen im Sickerwasser (z. B. aus Eluatwerten) können auch direkt eingegeben werden. Transportprozesse wie Dispersion, Abbau und Retardation werden berücksichtigt. Die Eingangsparameter können als Einzelwert oder in Form von Bandbreiten definiert werden, die beispielsweise zwischen einem Minimal- und Maximalwert gleichmäßig verteilt sind oder einer definierten Verteilungsfunktion (z. B. Normalverteilung, logarithmische Normalverteilung, Dreieckverteilung) gehorchen.

Berechnet werden die Konzentrationen und Transportzeiten im Bereich der Schadstoffquelle, an der Basis der grundwasserungesättigten Zone, im Grundwasser unterhalb der Schadstoffquelle und an beliebigen Punkten im Abstrom. Die Berechnungen basieren auf iterativen Lösungen von analytischen Strömungs- und Transportgleichungen nach der Methode der Monte-Carlo-Simulation. Bei diesem Verfahren werden alle in Form von statistischen Größen angegebenen Eingangsparameter entsprechend ihrer Verteilungsfunktionen durch Zufallszahlen in einer großen Zahl aufeinanderfolgender Rechenläufe (Iterationen) variiert. Das Programm P2 liefert dadurch auf der Ausgabeseite ebenfalls statistische Größen für die berechneten Schadstoffgehalte und Transportzeiten. Allerdings kann dabei keine abnehmende Schadstoffquelle simuliert werden kann. Aussagen zur zeitlichen Entwicklung der Konzentration an einem bestimmten Ort  $z$  sind ebenfalls nicht möglich. Berechnungsergebnisse sind somit die Aussagen, ob bestimmte Konzentrationen erreicht werden und in welchem Zeitraum dies geschieht.

Das Programm P2 ermöglicht die Simulation der Schadstoffausbreitung in drei aufeinanderfolgenden Stufen:

- Stufe 1:** Mobilisierung (Desorption, Elution) aus der Schadstoffquelle. Die Ausgangskonzentration in Lösung  $C_L$  wird entweder vorgegeben oder anhand der Konzentration im Feststoff  $C_S$  vom Programm P2 ermittelt.
- Stufe 2:** Transport in der ungesättigten Zone und Emission in das Grundwasser. Niederschlagswasser sickert durch den kontaminierten Boden und mobilisiert die Schadstoffe. Die Transportzeit bis zum Grundwasserspiegel und die Konzentration in der ungesättigten Zone im Bereich des Grundwasserspiegels werden berechnet. Die

Schadstoffe werden in das Grundwasser eingetragen, wo sie entsprechend verdünnt werden.

**Stufe 3:** Transport in der gesättigten Zone und Immission im Abstrom. Auf Basis der zweidimensionalen Dispersionsgleichung wird der Stofftransport durch den Grundwasserleiter simuliert. Es werden die Transportzeiten bis zu einem als Rezeptor definierten Bezugspunkt im Abstrom (z.B. Grundstücksgrenze oder Brunnen) und die dort vorliegenden Schadstoffkonzentrationen berechnet.

#### - Programm P3

Das Programm P3 basiert auf einer einfachen Bilanzierung des sickwassergetragenen Stoffstromes durch die ungesättigte Bodenzone in Form einer Kaskadengleichung. Für die Modellierung des Schadstofftransportes wird ein stationärer Wasserfluss angenommen, der der standortspezifischen Grundwasserneubildungsrate entspricht. Ein Wasserrückstau resp. ein aufsteigender Wasserfluss wird vor dem Hintergrund der Simulation eines durchschnittlichen Transportgeschehens nicht berücksichtigt. Das Simulationsergebnis liefert demnach die durchschnittlich zu erwartende Sickerwasserkonzentration am Ort der Beurteilung ohne einzelne - beispielsweise durch Schwankungen in der Niederschlagsintensität hervorgerufene - Konzentrationsspitzen zu erfassen. Die einfache Herangehensweise reduziert den erforderlichen Eingabeparametersatz zur Durchführung einer Gefährdungsabschätzung auf einen sinnvollen, praktikablen Umfang, der sich an den realen Verhältnissen orientiert, dass in der Regel lediglich rudimentäre Informationen bezüglich der Schadstoffquelle sowie der Bodenverhältnisse vorliegen.

#### - Programm P4

Im Programm P4 werden alle möglichen Komponenten, die an einem Standort zu einer Abminderung der Konzentration beim Transport von der Quelle zum Ort der Beurteilung führen können, mit Hilfe einfacher konservativer Abschätzformeln und Nomogramme auf ihre Relevanz hin überprüft. Insgesamt werden vier Komponenten berücksichtigt, die zu einer Konzentrationsabminderung führen können:

- Zeitliches Verhalten der Stofffreisetzung aus der Schadensquelle („Endlichkeit der Quelle“),
- Schadstoffabbau bzw. -umwandlung innerhalb der Transportstrecke („Abbau“),

- Verdünnung durch transversale Dispersion, die zu einer dreidimensionalen Stoffausbreitung im Boden führt („transversale Dispersion“) und
- Verdünnung am Ort der Beurteilung infolge des Einmischens von Sickerwasser in das Grundwasser („Einmischen in das Grundwasser“).

Für die vier Komponenten wird jeweils ein Abminderungsfaktor (AF-Wert) berechnet, so dass die Konzentrationsabminderung quantifiziert werden kann. Mit dem Programm P4 wird die Frage beantwortet, ob die Prüfwerte jemals über- oder unterschritten werden. Eine genaue Aussage über den Zeitpunkt der Prüfwertüberschreitung ist mit dem Programm P4 derzeit nicht möglich.

Die Aufteilung des Transportgeschehens in Komponenten zeigt, welche Stoff- bzw. Bodeneigenschaften für das Ausmaß der Konzentrationsabminderung verantwortlich sind. In der Praxis der Altlastenbearbeitung kann dadurch ein besseres Verständnis für die Abminderungsprozesse in der ungesättigten Bodenzone und damit einhergehend auch eine wesentliche Verbesserung der gutachterlichen Arbeiten erreicht werden.

Die Abschätzformeln und Nomogramme basieren auf der Advektions-Dispersions-Gleichung unter der Annahme stationärer Wasserbewegung. Es wird Advektion, Dispersion, Diffusion in Bodenwasser und –luft, lineare Gleichgewichtssorption und Abbau 1. Ordnung berücksichtigt.

#### - Programm P5

Das eindimensionale Modell P5 wurde ursprünglich zur Modellierung von Sickerwasserprozessen und Berechnung der langzeitlichen Freisetzung von Schadstoffen in Halden des Uranerzbergbaus entwickelt. Im Rahmen des BMBF-Förderschwerpunktes „Sickerwasserprognose“ wurde seine Anwendung auf die Aerationzone natürlicher Böden erweitert. Es handelt sich dabei um ein numerisch-diskretes Modell, d. h. die Lösung der Gleichungssysteme erfolgt auf numerischem Wege unter der Zerlegung (Diskretisierung) des Strömungsraumes und der Zeit in endliche Stufen. Das Programm P5 stellt ein gekoppeltes Zweiphasenströmungs- Mehrmigrantenstofftransportmodell der Aerationzone dar, welches es erlaubt, geochemische Langzeitprognosen für die Entwicklung der Sickerwasserqualität unter Berücksichtigung des Mineralbestandes, der Migrationsbedingungen der Gasphase und der Qualität der Abdeckung zu treffen.

Das Programm berechnet die raumzeitliche Druck- und Sättigungsentwicklung im porösen Körper. Zur Lösung des Problems werden die Gleichungen der Zweiphasenströmung „Gas-Wasser“ verwendet. Zur Berücksichtigung der ungesättigten Fließverhältnisse geht man von



der Theorie der relativen Durchlässigkeit aus. Dabei wird die effektive hydraulische Leitfähigkeit aus der absoluten hydraulischen Leitfähigkeit und sättigungsabhängigen relativen Durchlässigkeit berechnet. Um die in der Natur nachweislich auftretenden präferenziellen Abflüsse in der Aerationzone besser nachbilden zu können, wird der stationäre Gesamtvolumenstrom in Abhängigkeit der sich einstellenden Sättigungsverhältnisse des vorliegenden Bodens in eine „schnell“ und „langsam“ strömende, flüssige Phase unterteilt.

Aufbauend auf dem aus Sättigung und Druck berechneten Geschwindigkeitsfeld wird die Stofftransportgleichung (Konvektions-Diffusionsgleichung) parallel für mehrere Komponenten (den so genannten Tenaden) gleichzeitig gelöst. Dabei werden für die insgesamt 26 organischen Schadstoffe im Quell-Senken-Term der Gleichung solche Prozesse wie Sorption und mikrobieller Abbau berücksichtigt.

Bei der Transportmodellierung der 26 anorganischen Komponenten wird unter Berücksichtigung des geochemischen Backgrounds das chemische Gleichgewicht in der wässrigen Phase (Porenwasser) für jede Modellzelle und zu jedem Prozesszeitschritt gelöst. Dazu sind im Modell zusätzlich 2 Komponenten in der Gasphase, 92 Mineralphasen und 166 chemische Spezies in wässriger Lösung notwendig. Im Programm werden dabei die Milieuparameter pH-Wert und Redoxpotential sowie die chemische Speziesverteilung durch Lösung eines mehrdimensionalen nichtlinearen Gleichungssystems berechnet. Die Ermittlung der chemischen Speziesverteilung im Porenwasser bildet wiederum die Voraussetzung für die Untersuchung kinetisch kontrollierter Wechselwirkungsprozesse mit der Festphase oder der Gasphase. Zu diesen Wechselwirkungen zählen Lösungs- und Fällungsprozesse, Adsorptions-/Desorptionsprozesse, Oxidationsreaktionen sowie die Bilanzierung des Sauerstoffs und Kohlendioxids in der flüssigen und gasförmigen Phase.

Im Ergebnis einer Modellierung mit dem Programm P5 werden die Konzentrationen der jeweiligen Schadstoffe am Ort der Beurteilung sowie deren benötigte Transportzeiten ausgegeben.

### 4.3 Hinweise zur Verfahrensauswahl

Als Recherchekatalog für die Auswahl eines Simulationsprogramms zur Sickerwasserprognose kann die „Datenbank zur Auswahl von Simulationsprogrammen bei der Altlastenbearbeitung“ (DASIMA) des [Sächsischen Landesamtes für Geologie und Umwelt](#) (Navigation über Informationssysteme) empfohlen werden.

Setzt man voraus, dass mit der Formulierung „überschaubar“ aus §2 Nr. 5 BBodSchV gemeint ist, dass bei der Sickerwasserprognose Aussagen zum erwarteten zeitlichen Verlauf der Konzentration und der Fracht am Ort der Beurteilung getroffen werden sollen, ist festzustellen, dass bereits einige der getesteten Programme nicht alle diese Anforderungen erfüllen können, wie die Übersicht in Tab. 6 zeigt.

**Tab. 6: Eignung der getesteten Verfahren für die Sickerwasserprognose gemäss §2 BBodSchV**

Programm verfahren	Ver-	Berechnung der		Berechnung des <b>zeitlichen</b> Verlaufs der	
		Konzentration	Fracht	Konzentration	Fracht
		am Ort der Beurteilung möglich?		am Ort der Beurteilung möglich?	
P1		<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
P2 <sup>1</sup>		<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	nein	nein
P3 <sup>2</sup>		<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	nein	nein
P4 <sup>3</sup>		nein	nein	nein	nein
P5		<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

<sup>1</sup> zeitliche Entwicklung nicht direkt ausweisbar

<sup>2</sup> zeitliche Entwicklung derzeit noch nicht ausdrückbar, soll aber demnächst programmiert werden

<sup>3</sup> nur Angabe, ob der Prüfwert am OdB überschritten wird oder nicht

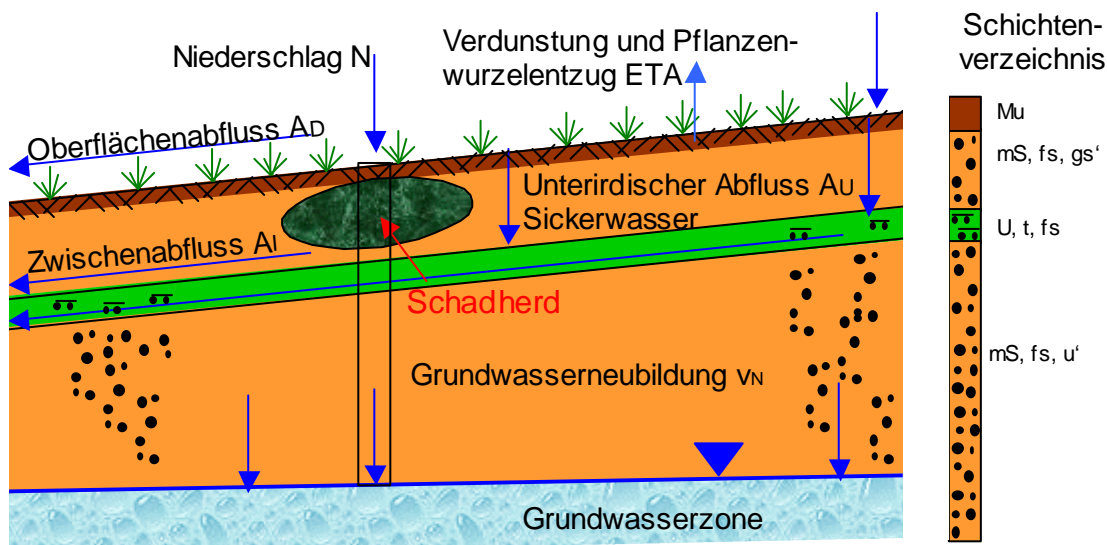
## 5 Modellaufbau und Simulation

### 5.1 Abgrenzung des Modellraums

Zur Illustration der Abgrenzung des Modellsraums sowie zur Verdeutlichung der damit einhergehenden Idealisierungen dienen die Abb. 10 und Abb. 11. In Abb. 10 sind für ein Bodenprofil die einzelnen Wasserhaushaltskomponenten dargestellt. In der Abb. 11 sind die gewählten Randbedingungen eingetragen und erläutert.

Modelltop ist i.d.R. die Geländeoberkante. Über die Geländeoberkante erfolgt zeitabhängig die Sickerwasserneubildung, d.h. die Zusickerung von Niederschlagswasser in das Modellgebiet. Die tatsächliche Grundwasserneubildungsrate  $v_N$  ist abhängig vom Pflanzenwurzelentzug sowie evtl. vorhandenem Zwischenabfluss  $A_i$ .

Die Modellbasis ist der Ort der Beurteilung, d.h. der Übergang von der ungesättigten zur gesättigten Zone. Der Ort der Beurteilung schwankt somit gemäss den Grundwasserspiegelschwankungen. Der Grundwasserspiegel bildet eine zeitabhängige Potenzialrandbedingung (RB 1. Art mit  $H=f(t)$ ) für das Modell.



**Abb. 10: Kennzeichnung der Abflussanteile**

Da von vornherein nur vertikale Strömungsprozesse betrachtet werden sollen, sind auch die beiden Modellränder links und rechts der Säule zu beschreiben. In der Regel sind dies undurchlässige Ränder (RB 2. Art mit  $v(t)=0$ ) über die weder Wasser noch Stoff ausgetauscht wird.

## Hydraulische Randbedingungen

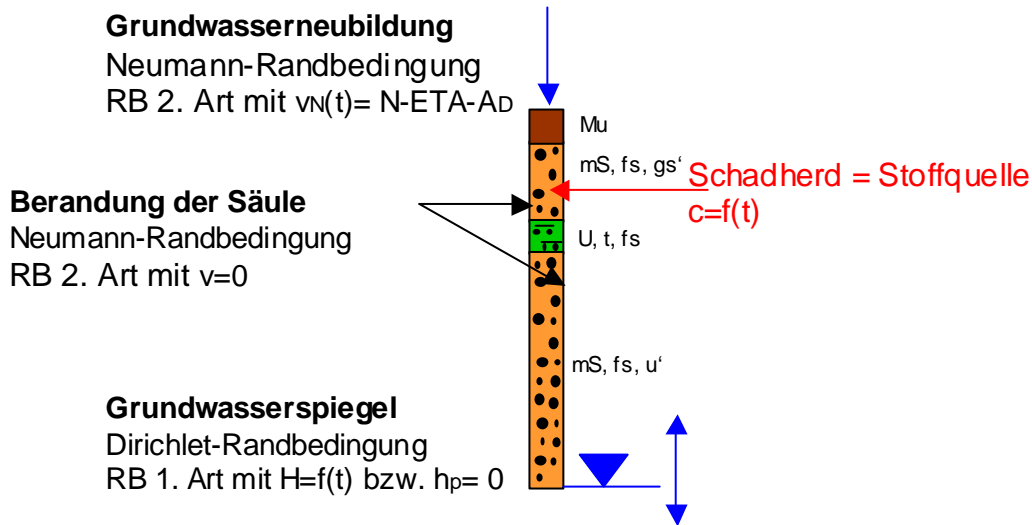


Abb. 11: Randbedingungen der 1D-Säule

## 5.2 Diskretisierung

Unabhängig vom Berechnungsverfahren sind entlang dieser 1D-Säule Berechnungsknoten vorzusehen, für die in der Simulation die Potenzialhöhe, der Wassergehalt und die Konzentration berechnet werden. Liegen die Berechnungsknoten zu weit auseinander, können numerische Artefakte (wie z.B. numerische Dispersion, Oszillationen) auftreten, die das Berechnungsergebnis verfälschen. Liegen die Berechnungsknoten zu eng beieinander, steigt mit dem Berechnungsaufwand die Rechenzeit an.

Generell kann die Stabilität des Lösungsverfahrens und damit die tatsächlich notwendige vertikale Auflösung anhand der Peclet-Zahl abgeschätzt werden:

$$Pe = \frac{v \cdot \Delta z}{\theta \cdot D} \quad (8)$$

mit

Pe		Peclet-Zahl
v	m/s	Strömungsgeschwindigkeit (=Sickerwassergeschwindigkeit)
$\theta$		Wassergehalt
D	m <sup>2</sup> /s	Dispersivität, wobei gilt: $D=v \cdot \delta$
$\delta$	m	Dispersionslänge

In der Vertikalen sollte sich die Netzdiskretisierung an den zu erwartenden Strömungs- und Konzentrationsgradienten ausrichten. Bindige Materialien sind feiner als nichtbindige Materialien aufzulösen. Da dies analog allerdings auch für den Sättigungsgrad gilt, müssen auch nichtbindige Schichten – die bei geringeren Saugspannungen bereits deutlich an Wasser verlieren – feiner aufgelöst werden. Im Zweifelsfall sollte zunächst von einem konstantem  $\Delta z=0,01$  m ausgegangen werden. Dieser Ansatz kann auf der Grundlage von Gl. (8) nachvollzogen werden. Bei  $Pe=1$ , einer Dispersionslänge von  $\delta \approx 0,1$  m und einem Wassergehalt von  $\theta=0,1$  ergibt sich das vorgeschlagene  $\Delta z=0,01$  m.

Im klassischen 1D-Fall liegen die Berechnungsknoten wie an einer Perlenschnur aufgereiht auf einer Geraden (siehe Abb. 12, mittlere Grafik). Die Simulationsprogramme aus der HYDRUS-Familie (wie auch Das Programm P1) arbeiten stets auf der Grundlage einer 2D-vertikal-ebenen Diskretisierung. Der Abstand der beiden Knoten  $\Delta x$  ist vom Nutzer vorzugeben. In der Regel sollte dann ein  $\Delta x=0,1$ m gewählt werden, um horizontale Strömungskomponenten im numerischen Modell zu minimieren.

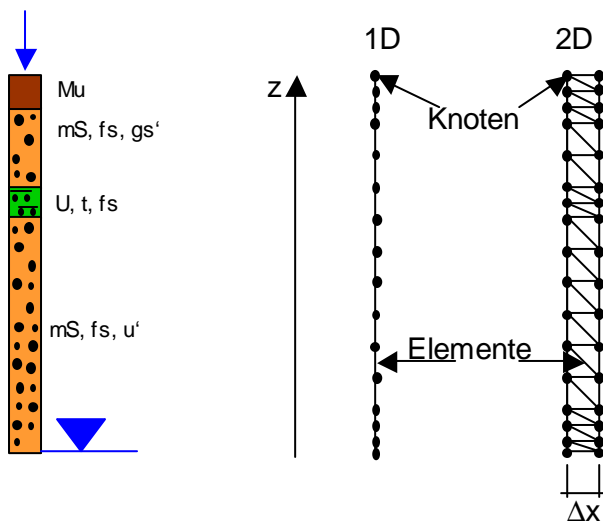


Abb. 12: Diskretisierung der Säule

### 5.3 Vorgabe der Anfangs- und Randbedingungen

Den einzelnen Berechnungsknoten sind nun die Anfangs- und Randbedingungen vorzugeben, so wie sie ermittelt wurden.

## 5.4 Parameterbelegung

Die Zuordnung der hydraulischen Parameter sowie der Stofftransportparameter sollte elementbezogen erfolgen, da sie für repräsentative Flächen bzw. Volumina definiert sind. Vielfach wird von den Berechnungsprogrammen dennoch eine Eingabe der Parameter für jeden Berechnungsknoten – wie z.B. auch in HYDRUS – verlangt.

## 5.5 Simulationssteuerungsvorgaben

Vorzugeben sind in jedem Fall der Betrachtungs- bzw. Simulationszeitraum und dann programmspezifisch ggf. weitere Steuergrößen, wie z.B. eine maximale Zeitschrittweite oder eine maximal mögliche Änderung einer Berechnungsgröße während eines Zeitschrittes. Diese Steuergrößen dienen zur Einhaltung der Stabilitätskriterien der numerischen Lösung. Generell kann die Stabilität des Iterationsverfahrens und damit die tatsächlich notwendige zeitliche Auflösung anhand der Courant-Zahl abgeschätzt werden:

$$Cr = \frac{v \cdot \Delta t}{\theta \cdot R \cdot \Delta z} \leq 1 \quad (9)$$

mit

Cr		Courant-Zahl
v	m/s	Strömungsgeschwindigkeit (=Sickerwassergeschwindigkeit)
$\Delta t$	s	Zeitschritt
$\theta$		Wassergehalt
R		Retardationskoeffizient
$\Delta z$	m	Vertikale Auflösung

Moderne Programme, wie auch HYDRUS, prüfen automatisch die Einhaltung der Stabilitätskriterien (Peclet- und Courantzahl) und steuern z.B. die Zeitschrittweite automatisch über die Courantzahl.

## 5.6 Simulation

Mit diesen Vorgaben sind alle für eine Simulation erforderlichen Größen erfasst und die Simulation kann gestartet werden. Sollte die Simulation zu langsam und schleppend ablaufen, divergiert das Verfahren. Dafür kommen vielfältige Ursachen, die sowohl im Strömungsproblem

als auch im Transportproblem begründet sein können, in Betracht. Neben einfachen Eingabefehlern sind diese häufig in den getroffenen Vereinfachungen zu finden.

Die Stabilität des Lösungsverfahrens hängt bei numerischen Lösungen natürlich auch von der Dominanz einzelner Terme und damit bestimmter Prozesse aus der zugrundeliegenden Konvektions-Dispersions-Gleichung ab.

## 6 Berechnungsergebnisse und Bewertung

### 6.1 Berechnungsergebnisse

Simulationsprogramme berechnen zunächst das Strömungsfeld im Modellraum. Berechnungsgrößen sind

- ✓ die Potenzialhöhen  $H(z,t)$  bzw.  $h_p(z,t)$ ,
- ✓ Wassergehalte  $\theta(z,t)$ ,
- ✓ ungesättigte Leitfähigkeiten  $k(\theta,z,t)$  und
- ✓ die Strömungsvektoren  $v_z(z,t)$  bzw.
- ✓ die Wassermengen  $Q(z,t)$ .

Nach der Lösung der Strömungsgleichung wird die Konvektions-Dispersions-Gleichung für den Schadstofftransport gelöst. Berechnungsgröße ist die

- ✓ Konzentration  $c(z,t)$

eines oder mehrerer Spezies. Gemäß §2 Nr. 5 BBodSchV sind bei der Sickerwasserprognose „die in überschaubarer Zukunft zu erwartenden Schadstoffeinträge über das Sickerwasser in das Grundwasser, unter Berücksichtigung von Konzentrationen und Frachten“ auszuweisen. Darzustellen ist also mindestens der berechnete zeitliche Verlauf der Sickerwasserkonzentration  $c(t)$  und der Fracht  $Y(t)=Q(t)\cdot c(t)$  am Ort der Beurteilung. Für den angestrebten Vergleich der verschiedenen Lösungsansätze (vgl. Abschnitt 4.2) untereinander werden vereinfachend folgende Einzelwerte aus den Zeitreihen herangezogen:

1. die maximal eintretenden Stoffkonzentration  $c_{\max}$  sowie
2. dessen Zeitpunkt,
3. die Größe der höchsten Fracht  $Y_{\max}$  sowie
4. deren Zeitpunkt und
5. die über einen bestimmten Zeitraum ins Grundwasser eingetragene Stoffmasse.

Als Grundlage für den Vergleich der verschiedenen Lösungsansätze wurden allen eingeladenen Interessenten die Ergebnisse der Modellbildung und Simulation mit dem Programm P1 für den Chrom- und den BTEX-Schaden zur Verfügung gestellt. Die darauf einsetzende Diskussion zeigte, dass die Bearbeiter unterschiedliche Auffassungen vor allem hinsichtlich der Prozessidentifikation hatten. Dies hätte in der Konsequenz zu miteinander nicht vergleichbaren Berechnungsergebnissen geführt. Da aber gezeigt werden sollte, welchen Einfluss die einzelnen Randbedingungen und Parameter über verschiedene Lösungsansätze hinweg auf die Berechnungsergebnisse haben, wurden die am Vergleich beteiligten Institutionen gebeten, vorrangig die vorgegebenen Randbedingungen und Parameter zu verwenden und ggf. in einem weiteren Rechengang ihre Vorstellungen von den in den beiden Schadensfällen ablaufenden Prozessen entsprechend umzusetzen. Die Berechnungsergebnisse für letzteren Fall sind in der separaten Dokumentation enthalten und werden hier nicht aufgeführt, da sie eine subjektive Wertung des jeweiligen Bearbeiters darstellen.

**Tab. 7: Vergleich der Berechnungsergebnisse für Fall 2 der Programme**

Programm	Höchste Konzentration		Höchste Fracht		Gesamtmasse in 100 a
	$c_{\max}$	Eintritt	$Y_{\max}$	Eintritt	m
	mg/l	a	mg/a·m <sup>2</sup>	a	g/m <sup>2</sup>
Chromschaden (Chrom-VI, Prüfwert BBodSchV: 8 µg/l = 0,008 mg/l)					
P1	25	24	4.242	24	105
P2 <sup>1</sup>	27	14	4.706	k.A.	k.A.
P3	26-33	25-30	k.A.	k.A.	k.A.
P4	23	35 <sup>2</sup>	k.A.	k.A.	k.A.
BTEX-Schaden (Prüfwert BBodSchV: 20 µg/l = 0,02 mg/l)					
P1	0,07	6	12	33	350
P2 <sup>1</sup>	> 0,10	3	k.A.	k.A.	k.A.
P3	3,89	8	k.A.	k.A.	k.A.
P4	0,13	10 <sup>2</sup>	k.A.	k.A.	k.A.
P5	0,26	14-31	45	31	k.A.

<sup>1</sup> alle Angaben liegen als Wahrscheinlichkeiten vor, Angaben bei 90%

<sup>2</sup> mittlere Aufenthaltszeit

k.A. – keine Angabe



Tab. 7 zeigt den Vergleich der Berechnungsergebnisse für den Fall 2 (stationäre Strömungsverhältnisse, Definition der Berechnungsfälle siehe Tab. 4 und Tab. 5) bei Verwendung der gleichen Randbedingungswerte und Parameter. Je nach Programm existieren weitere Berechnungsergebnisse, die aber nicht in Tab. 7 aufgenommen wurden. Die Ergebnisse sind bsi auf einzelnen Ausreißer, deren Ursachen noch zu ergründen sind, überraschend einheitlich. Die Abweichungen voneinander sind als gering zu bewerten.

## 6.2 Plausibilitätstests

Da eine Kalibrierung des erarbeiteten Strömungs- und Stofftransportmodells nur in den seltensten Fällen tatsächlich möglich ist, kommt der Bewertung der Unsicherheiten der Berechnungsergebnisse eine große Bedeutung zu. Verursacht werden die Unsicherheiten durch folgende Ungenauigkeiten bei der

1. Strömungsverhältnisse
  - a. Bestimmung der Sickerwasserrate/Grundwasserneubildungsrate
  - b. Beschreibung der Lage des Grundwasserspiegels
  - c. Parameterermittlung
2. Stofftransport
  - a. Bestimmung des Quellterms
  - b. Parameterermittlung
3. Simulation
  - a. Vernachlässigung der instationären Strömungsverhältnisse
  - b. fehlende Möglichkeit zur Kalibrierung

Zur Überprüfung eines Strömungs- und Transportmodells bleiben somit nur einfache Plausibilitätsbetrachtungen. Dazu zählen insbesondere die Abschätzung der Migrationsgeschwindigkeit und darauf aufbauend der Migrationszeit. Liegen Messwerte der Stoffkonzentration im Grundwasser vor sind u.U. auch Frachtberechnungen zur Überprüfung der Ergebnisse durchführbar.

Beispiel Chromschadensfall:

Der Eintrittszeitpunkt der Maximalkonzentration kann anhand der Migrationsgeschwindigkeit abgeschätzt werden:

Sickergeschwindigkeit = Grundwasserneubildungsrate  $v_f = v_{GWN}$  (10)

Abstandsgeschwindigkeit  $v_a = \frac{v_f}{\theta}$  (11)

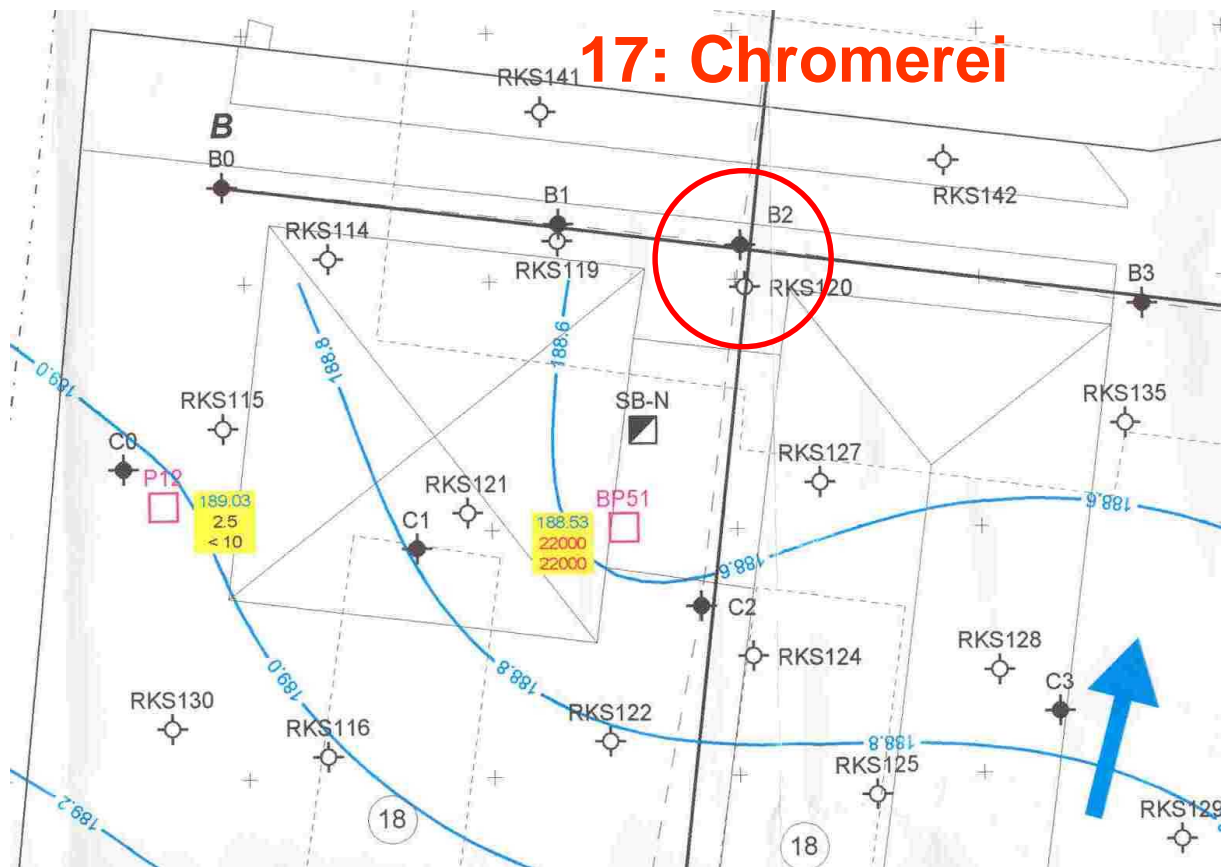
Migrationsgeschwindigkeit  $v_M = \frac{v_a}{R}$  (12)

mit

$\theta$  Wassergehalt  
 $R$  Retardationsfaktor

Sickergeschwindigkeit:  $v_{GWN} = 0,18 \text{ m/a}$   
 Abstandsgeschwindigkeit:  $v_a = 0,5.. 1,0 \text{ m/a}$  (bei  $\theta = 0,18 .. 0,36$ )  
 Migrationsgeschwindigkeit:  $v_M = 0,08 .. 0,15 \text{ m/a}$  (bei  $R=6$ )  
 Transportzeit:  $t = 15 .. 30 \text{ a}$  ( $s=2,5 \text{ m}$ )

Bereits diese einfache Rechnung führt zu der Aussage, dass nach ca. 15 bis 30 a (Mittelwert: 22,5 a) höchstens die Quellkonzentration am Ort der Beurteilung in den Grundwasserleiter eingetragen werden kann.



**Abb. 13: Grundwasserströmungsverhältnisse und Stoffkonzentration (21.10.1998)**

Frachtab schätzung: Mit einer Rammkernbohrung (B2, vgl. Abb. 13) wurde im Chromschadensfall einer der Schadherde erkundet. Die Bohrung lag dabei nicht direkt im Schadherd sondern war eine der Rasterbohrungen im näheren Umfeld. In ca. 15 m Entfernung stromaufwärts befindet sich die Grundwassermessstelle BP 51. Dort wurden am 21.10.1998 Chrom-(VI)-Konzentrationen von 22 mg/l im Grundwasser nachgewiesen. Die berechneten Sickerwasserkonzentrationen liegen in der gleichen Größenordnung. Unter Berücksichtigung der Verdünnung beim Eintritt in das Grundwasser müssten die Sickerwasserkonzentrationen eigentlich sogar noch höher als die für den Standort B2 berechneten sein, um im Grundwasser Konzentrationen von 20 mg/l zu erreichen.

Andererseits liegen die berechneten höchsten Frachten bei ca. 5.000 mg/a·m<sup>2</sup>. Die grundwassererfüllte Mächtigkeit beträgt im betrachteten Grundwasservorkommen ca. 10 m. Bei einer Porosität von  $\phi \approx 0,3$  mischen sich dann 5.000 mg in 3.000 l Grundwasser ein, was bei einer vollständigen Vermischung einer Chrom-(VI)-Konzentration von rd. 2 mg/l entspricht. Werte in dieser Größenordnung wurden bei der Grundwassererkundung in den unmittelbaren Schadensbereichen auch angetroffen. Somit erscheinen die berechneten Konzentrationen plausibel.

#### Beispiel BTEX-Schaden

Sobald Stoffe betrachtet werden, die einem Abbau unterliegen, sind die Migrationszeiten schichtspezifisch zu bestimmen. Bei einer Sickergeschwindigkeit von  $v_N = 5,5 \cdot 10^{-9}$  m/s, liegt in den obersten Schichten ein Wassergehalt von  $\theta_w \approx 0,07$  vor. Damit ergibt sich für die Migrationszeit:

Sickergeschwindigkeit:	$v_N = 0,174$ m/a
Abstandsgeschwindigkeit:	$v_a = 2,5$ m/a ( $\theta = 0,07$ , Wert aus Abb. 7)
Migrationsgeschwindigkeit:	$v_M = 1,25$ m/a ( $R=2$ )
Transportzeit:	$t = 2,5$ a ( $s=3,2$ m)

Im Gegensatz dazu führt die gleiche Betrachtung bei einem homogenen Aufbau der Säule aus Hanglehmen zu folgender Migrationszeit:

Sickergeschwindigkeit:	$v_N = 0,174$ m/a
Abstandsgeschwindigkeit:	$v_a = 0,8$ m/a ( $\theta = 0,22$ , Wert aus Abb. 7)
Migrationsgeschwindigkeit:	$v_M = 0,4$ m/a ( $R=2$ )
Transportzeit:	$t = 8$ a ( $s=3,2$ m)

Bei einer Transportzeit von „nur“ 2,5a kann nicht die gleiche Stoffmenge abgebaut werden, wie bei einer Transportzeit von 8 a. Deshalb müssen bei geringeren Transportzeiten auch höhere Konzentrationen, Frachten und Massen auftreten.

### 6.3 Maximum- und Minimberechnungen

Die durchgeführten Sensitivitätsanalysen haben gezeigt, dass es

- ✓ die Grundwasserneubildung
- ✓ die Quellkonzentration und
- ✓ die Sorptionskonstante

sind, die den deutlichsten Einfluss auf das Berechnungsergebnis, d.h. die berechnete Sickerwasserkonzentration am Ort der Beurteilung haben. Werden abbaubare Stoffe betrachtet, kommt der Abbauparameter noch hinzu.

**Tab. 8: Szenarien zur Abschätzung der möglichen Schwankungsbreiten unter stationären Strömungsbedingungen**

Szenario	Grundwasserneubildung	Quellkonzentration	Sorptionsparameter	Abbauparameter
frühest möglicher und höchster Konzentrationspeak	max	max	min	min
frühest möglicher Eintritt ins Grundwasser	max	↔	min	min
spätest möglicher Eintritt in Grundwasser	min	↔	max	max
ohne Abbau				
Kürzeste Dauer des Eintrags	max	↔	max	
Längste Dauer des Eintrags	min	↔	min	
mit Abbau				
Kürzeste Dauer des Eintrags	max	↔	min	max
Längste Dauer des Eintrags	min	↔	max	min

**Legende:** min – untere Grenze des Schwankungsbereiches  
 max – obere Grenze des Schwankungsbereiches  
 ↔ ohne Einfluss

Da mit der Stofftransportmodellierung unterschiedliche Zielstellungen/Szenarien verfolgt werden können, ist eine unterschiedliche Belegung der Extremwerte der einzelnen Eingangsgrö-

ßen gemäss der Fragestellung bzw. dem betrachteten Szenario erforderlich (vgl. Tab. 8). Hervorzuheben ist dabei, dass die Definition der Szenarien für die Dauer des Stoffeintrags ins Grundwasser davon abhängig ist, ob der betrachtete Stoff einem Abbau unterliegt. Im Falle des Chromschadens findet z.B. kein Abbau statt. Die längste Eintragsdauer tritt auf, wenn die Grundwasserneubildungsrate und die Sorption gering ist (6 bis 100a). Die kürzeste Eintragsdauer (3 bis 54 a), wenn beide Größen mit ihrem höchsten Wert eingesetzt werden.

Im Falle des BTEX-Schadens aber, bei dem ein signifikanter Abbau angenommen wurde, tritt der kürzeste Eintrag (3-31a) beim Minimalwert der Sorption und die längste Dauer (8-61a) beim Maximalwert auf.

#### **6.4 Fehler- und Defizitanalyse**

Die Inhomogenitäten des Untergrundes sowie die Komplexität der Strömungs- und Transportvorgänge in der ungesättigten Zone erfordern, dass der Simulation stets eine Defizitanalyse folgen muss, aus der hervorgeht, ob mit dem Simulationsmodell auf der Grundlage der verfügbaren Daten eine verlässliche Prognose der künftig zu erwartenden Schadstoffeinträge in das Grundwasser möglich ist. Ziel der Defizitanalyse ist also die Abschätzung der erreichten Prognosesicherheit bzw. des Aufwandes der noch zur Datenerhebung notwendig ist, um eine ausreichende Prognosesicherheit zu erhalten. Die Inhalte einer Defizitanalyse sollten sein:

- ✓ die Angabe von räumlichen Gültigkeitsbereichen in Abhängigkeit der Bodenparameter und des Grundwasserflurabstandes,
- ✓ die Ausweisung des Einflusses der Vereinfachungen und Annahmen auf das berechnete Ergebnis,
- ✓ die Benennung der Parameter, die im konkreten Fall den größten Einfluss auf das Berechnungsergebnis haben

Sensitivitäts- und Szenarioanalysen können bei der Bestimmung der möglichen Streubreiten nur bedingt weiter helfen. Spätestens wenn eine Sensitivitätsanalyse wie im Falle des BTEX-Schadens zeigt, dass die Schwankungsbreiten der zugrundeliegenden Randbedingungen und Parameter nahezu jedes Ergebnis zu lassen, wird ersichtlich, dass die Datengrundlage für eine hinreichend genaue Modellbildung nicht ausreichend ist. Vor der weiteren Modellbildung und darauf aufbauend weiteren Simulationen ist in solchen Fällen zunächst die Datenlage entscheidend zu verbessern.

## 7 Literatur

- [AG Boden 1994] Bodenkundliche Kartieranleitung, 4.Auflage, Ad-hoc Arbeitsgruppe der Geologischen Landesämter und der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe der Bundesrepublik Deutschland, Hannover, 1994.
- [Beims 2002] Beims U. und B. Gutt: „Entwicklung eines rationellen Verfahrens zur Bewertung von Bodenkontaminationen und deren Exposition (EXPO-SI)“, Abschlussbericht des Forschungsthemas, Dresden 2002
- [Berger 2004] Berger W. und I. Scheuering (2004): „Können die Ergebnisse des Bodensättigungsextraktes mit den Stoffkonzentrationen im Sickerwasser ansatzweise gleichgesetzt werden?“, GAB/ITVA-Altlastensymposium 2004, Tagungsband, Schweinfurth, 25./26.03.2004.
- [BfG 2003] Wasserhaushaltsverfahren zur Berechnung vieljähriger Mittelwerte der tatsächlichen Verdunstung und des Gesamtabflusses, BfG-Bericht Nr. 1342, Bundesanstalt für Gewässerkunde, Koblenz, 2003. [http://grdc.bafg.de/servlet/is/5699/BAGLUVA\\_BfG-1342.pdf](http://grdc.bafg.de/servlet/is/5699/BAGLUVA_BfG-1342.pdf)
- [BLT 93] Busch, K.-F., L. Luckner und K. Tiemer: Lehrbuch der Hydrogeologie Band 3 „Geohydraulik“, 3. neubearbeitete Auflage, Gebrüder Bornträger Berlin, Stuttgart. 1993.
- [BWK 2000] Technisch-wissenschaftliche Arbeitsgruppe des BWK e.V. „Instrumente zur Sickerwasserprognose“ (BWK-AG 6.2), Darstellung des Sachstandes, BWK-Materialien 1/2000, Düsseldorf, 2000.
- [Grathwohl 2002] Grathwohl P., B. Susset, R. Henzler und I. Madlener: Unterscheidung Gleichgewicht-Ungleichgewicht bei der Elution organischer Schadstoffe“, BMBF-Förderschwerpunkt „Sickerwasserprognose“, Statuskolloquium, Karlsruhe, 18./19.02.2002.
- [Häfner 1985] Häfner F., G. Eckhardt, P. Pohl, H.-D. Voigt und H.-F. Bamberg: dynamische Erkundung von Lagerstätten fluider Rohstoffe mit Hilfe von Modellierungsmethoden. In: Geohydrodynamische Erkundung von Erdöl-, Erdgas- und Grundwasserlagerstätten, Wissenschaftlich-Technischer Informationsdienst des Zentralen Geologischen Instituts, Heft 1, Jahrgang 26/1985.
- [DVWK 1990] DVWK-Merkblätter: Heft 217: Gewinnung von Bodenwasserproben mit Hilfe der Saugkerzen-Methode – DVWK-Fachausschuss "Bodennutzung und Nährstoffaustrag", Bonn, 1990.
- [DVWK 1995] DVWK-Regeln, Heft 129: Bodenkundliche Untersuchungen im Felde zur Ermittlung von Kennwerten zur Standortcharakterisierung, Teil I: Ansprache der Böden – DVWK-Fachausschuss "Standort und Boden", Bonn, 1995
- [DVWK 1999] DVWK-Regeln, Heft 136: Bodenkundliche Untersuchungen im Felde zur Ermittlung von Kennwerten zur Standortcharakterisierung, Teil II: Ableitungen zum Wasser- und Lufthaushalt von Böden – DVWK-Fachausschuss "Standort und Boden", Bonn, 1999.
- [DYCK 1980] Dyck S. u.a.: „Angewandte Hydrologie, Teil 2: Der Wasserhaushalt der Flußgebiete“, VEB Verlag für Bauwesen, Berlin, 2., überarbeitete Auflage, 1980

- [KP 2002] Dr. Kemmesies und Partner Beratender Ingenieur und Hydrogeologe (2002): Ehemaliges Flughafengelände Böblingen – Sindelfingen, Erarbeitung des Eckpunktepapiers Boden – Grundwasser, Modellgestützte Sickerwasserprognosen und Ableitung der Maßnahmenwerte, Im Auftrag des Zweckverbandes Ehemaliges Flughafengelände Böblingen/Sindelfingen, unveröffentlicht, Gunzenhausen, 16.08.2002.
- [LABO 2003] Arbeitshilfe Sickerwasserprognose bei orientierenden Untersuchungen, Bund-/Länderarbeitsgemeinschaft Boden, Altlastenausschuss, Unterausschuss Sickerwasserprognose, Juli 2003.
- [Leuchs 2004] Leuchs & Doetsch (2004): Gegenüberstellung von Analysenergebnissen auf der Grundlage des S4-Tests und es BoSE für Chrom (doppellog. Diagramm), freundliche Mitteilung von Herrn Dipl.-Ing. Roland Meyer, RWTH Aachen, Lehr- und Forschungsgebiet Abfallwirtschaft, 18.10.2004.
- [LfUG 1998] Materialien zur Altlastenbehandlung im Freistaat Sachsen 3/1998: "Probenahme bei der Technischen Erkundung von Altlasten", Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie, Dresden, 1998.
- [LfUG 1999] Materialien zur Altlastenbehandlung im Freistaat Sachsen: "Laborative Vorversuche im Rahmen der Sanierungsuntersuchung und Sanierung", Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie, Dresden, 1999.
- [LfUG 2004a] Materialien zur Altlastenbehandlung im Freistaat Sachsen: Handbuch zur Altlastenbearbeitung, Teil 7 – Detailuntersuchung, Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie, Sächsisches Druck- und Verlags-haus AG, Dresden, 2004
- [LfUG 2004b] Muster-Leistungsbeschreibungen „Laborative Untersuchungen zur Sickerwasserprognose im Rahmen der Detailuntersuchung“, Sächsisches Landesamt für Umwelt und Geologie, Dresden, 2004.
- [Richter, 1995] Richter D. (1995): Ergebnisse methodischer Untersuchungen zur Korrektur des systematischen Messfehlers des Hellmann-Niederschlagsmessers. Bericht des Deutschen Wetterdienstes Nr. 194
- Richter, 2003] Richter G. (2003): „Zeitliche Beschreibung der Sickerwassereinträge in den Boden“, Diplomarbeit zur Erlangung des akademischen Grades Dipl.-Ing. für Wasserwirtschaft, Gunnar Richter, TU Dresden, Institut für Forts-, Geo- und Hydrowissenschaften, Dresden 14.10.2003
- [Schaap 1999] Schaap M. G., F. J. Leij and M. Th. Van Genuchten: „Bootstrap and Neuronal Network Model“, In: M. Th. Van Genuchten, F. J. Leij and L. Wu (eds.): Proceedings of the International Workshop on Characterization and Measurement of the Hydraulic Properties of Unsaturated Porous Media, Part 2, University of California, Riverside, 1999 p. 1237–1250.
- [SGD UAG 2001] UAG Sickerwasser (2001): Handlungsempfehlungen zur Sickerwasserprognose für die Bewertung des Wirkungspfades Boden-Grundwasser – Grundzüge. – UAG Sickerwasser der ad hoc AG Hydrogeologie der BLA-GEO. Zeitschrift für angewandte Geologie, 47 (2001) 3+4, S. 138-145
- [Šimunek 1992] Šimunek J., T. Vogel and M. Th. Van Genuchten: The SWMS\_2D Code for Simulating Water Flow and Solute Transport in Two-Dimensional

- Variably Saturated Media, Version 1.1, Research Report No. 126, U.S. Salinity Laboratory, Agricultural Research Service, U.S. Department of Agriculture, Riverside CA, January 1992.
- [Šimunek 1998] Šimunek, J., M. Sejna and M. Th. van Genuchten: The HYDRUS-2D Software for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat and Multiple Solutes Variably-Saturated Media. User Manual and Reference Document. U.S. Salinity Laboratory, Agricultural Research Service, Riverside, California, USA, 1998
- [Šimunek 1999] Šimunek, J., T. Vogel and M. Th. van Genuchten: The Hydrus-2D Code for Simulating Two-Dimensional Movement of Water, Heat and Multiple Solutes Variably-Saturated Media. Version 2.0. IGWMC-Software documentation, 1999
- [SMU 1997] Simulation des Schadstofftransports in der ungesättigten Zone im Rahmen der Altlastenbehandlung, Grundwasserforschungsinstitut Dresden GmbH, herausgegeben vom Sächsisches Staatsministerium für Umwelt und Landesentwicklung, Dresden, 1997.
- [UBA 1999] Validierung von Boden-Eluatgehalten zur Prognose von Inhaltsstoffen des Bodensickerwassers für das untergesetzliche Regelwerk / BBodSchV, Forschungsbericht 297 73 00 8/02, erschienen als uba-Text 86/99, Berlin, 1999.