

# Modellierung des Stofftransports im Grundwasser



DR.-ING. WOLFGANG SCHÄFER  
GRUNDWASSERMODELLIERUNG

© Dr.-Ing. Wolfgang Schäfer  
Grundwassermodellierung  
Odenwaldstr. 6  
D-69168 Wiesloch

# Inhaltsverzeichnis

<b>Modellierung des</b>	<b>1</b>
<b>Stofftransports im Grundwasser</b>	<b>1</b>
<b>1 Literatur</b>	<b>4</b>
<b>2 Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1 Einsatzbereiche von Transportmodellen	5
<b>3 Transportmechanismen</b>	<b>6</b>
3.1 Advektion	6
3.2 Diffusion	7
3.3 Dispersion	8
3.4 Reaktion	12
<b>4 Lösung der Transportgleichung</b>	<b>14</b>
4.1 Gitterverfahren (Euler-Verfahren): Finite Differenzen	15
4.1.1 Numerische Kriterien für Gitterverfahren	16
4.2 Charakteristiken-Verfahren (Lagrange-Verfahren)	19
<b>5 Übungsaufgabe zum Transport mit PMWIN</b>	<b>21</b>
5.1 Öffnen eines bestehenden Modells (Untermenü File)	21
5.2 Eingabe eines Schadensherds	21
5.2.1 Grid – Cell Status – ICBUND:	23
5.3 Eingabe der allgemeinen Transportparameter (Untermenü Parameters)	23
5.3.1 Parameters – Time	23
5.3.2 Parameters – Effective Porosity	24
5.4 Festlegung der Transportspezies (Untermenü Models – MT3DMS – Simulation Settings)	25
5.5 Eingabe der Anfangskonzentrationen (Untermenü Models – MT3DMS – Initial Concentrations)	25
5.6 Auswahl des numerischen Verfahrens für den advektiven Transport (Untermenü Models – MT3DMS – Advection)	26
5.7 Eingabe der Dispersivitäten (Untermenü Models – MT3DMS – Dispersion)	26
5.8 Gleichungslösung (Untermenü Models – MT3DMS – Solver)	27
5.9 Kontrolle der Ausgabe (Untermenü Models – MT3DMS – Output Control)	28
5.10 Berechnung der Konzentrationen mit dem FD-Verfahren	29
5.10.1 Models – MT3DMS – Run	29
5.11 Verteilung der berechneten Konzentrationen (Untermenü Tools – 2D - Visualization)	29
5.11.1 Anpassung der Darstellung: Options – Environment	29
5.11.2 Anwendung der Transportberechnung	30
5.12 Abschätzung des Einflusses der numerischen Dispersion	30
5.12.1 Berechnung der Konzentration mit dem MOC-Verfahren (Untermenü Models – MT3DMS – Advection)	30
<b>6 Fortsetzung der Übungsaufgabe</b>	<b>34</b>

6.1	<i>Erweiterung des Modellzeitraums</i>	34
6.2	<i>Abschätzung der erforderlichen Entnahmeraten</i>	36
6.3	<i>Hydraulische Auslegung mittels Bahnlinien (Untermenü Models – PMPATH)</i>	36
6.3.1	Simulation des Stofftransports (Untermenü Models – MT3DMS – Run)	37
6.3.2	Implementierung von Messstellen	37
<b>7</b>	<b>Transport und Reaktion</b>	<b>38</b>
7.1	<i>Abbau 1. Ordnung</i>	38
7.2	<i>Retardierung (Sorption/Desorption)</i>	40
7.3	<i>Abschluss der Übungsaufgabe</i>	43
7.3.1	Festlegung der Reaktion (Untermenü Models – MT3DMS – Simulation Settings)	43
7.3.2	Eingabe der Reaktionsparameter (Untermenü Models – MT3DMS – Chemical Reaction)	43
7.3.3	Berechnung der Schadstoffausbreitung (Untermenü Models – MT3DMS – Run)	43
<b>8</b>	<b>Kalibrierung und Anwendung von Transportmodellen</b>	<b>45</b>
8.1	<i>Anpassung der Transportparameter</i>	45
8.2	<i>Rückkopplung mit dem Strömungsmodell</i>	45
8.3	<i>Qualitätskriterien der Transportkalibrierung</i>	46
8.4	<i>Modell-Test</i>	47
8.5	<i>Anwendung des Transportmodells</i>	47
8.5.1	Darstellung des Ist-Zustands	47
8.5.2	Prognoseberechnungen	48
	<b>Übungsaufgabe zur Transportmodellierung</b>	<b>49</b>

# 1 Literatur

**Rausch, R., Schäfer, W., Wagner, Ch.:** Einführung in die Transportmodellierung im Grundwasser, 2002. Gebrüder Borntraeger, Berlin Stuttgart.

**Rausch, R., Schäfer, W., Therrien, R., Wagner, Ch.:** Solute Transport Modelling – An Introduction to Models and Solution Strategies, 2005. Gebrüder Borntraeger Verlagsbuchhandlung Science Publishers, Berlin Stuttgart. Englische Version des vorgenannten Lehrbuches mit einem zusätzlichen Kapitel zum Stofftransport in geklüfteten Medien.

**Landesamt für Natur, Umwelt und Verbraucherschutz NRW (LANUV):** Hinweise zur Erstellung und Beurteilung von Grundwassermodellen im Altlastenbereich, 2010. Die Arbeitshilfe ist sehr praxisorientiert und bietet einen Überblick über das Thema.

**DVGW: Technische Regel – Arbeitsblatt DVGW W 107 (A):** Aufbau und Anwendung numerischer Grundwassermodelle in Wassereinzugsgebieten, Februar 2016. Aktualisiertes Regelwerk, gute Orientierungshilfe bei der Erstellung von Modellen und Modell-Berichten.

## 2 Grundlagen

Behandelt wird der Transport einzelner wassergelöster Substanzen im gesättigten Untergrund. Als Transportmechanismen werden die Verfrachtung mit dem strömenden Grundwasser (Advektion) und die Vermischung der Wasserinhaltsstoffe (Diffusion/Dispersion) beschrieben. Vorgestellt werden außerdem einfache Reaktionsmodelle. Nicht berücksichtigt werden eventuelle Rückwirkungen des Stofftransports auf die Grundwasserströmung (z.B. infolge von Dichteeffekten), der Transport von Stoffen in Phase, und chemische oder biochemische Wechselwirkungen der Wasserinhaltsstoffe (Multi-Spezies-Modelle).

Ebenso wie Strömungsmodelle sind die Transportmodelle mechanistisch aufgebaut. Die zugrunde liegenden Mechanismen sind allerdings komplizierter als bei Strömungsmodellen und Transportmodelle stellen höhere Anforderungen an die Diskretisierung und die numerische Lösung. Während Strömungsmodelle bereits Stand der Technik sind, ist der Einsatz von Transportmodellen im Umweltbereich bisher noch nicht so weit verbreitet. Ihre Bedeutung nimmt aber zu.

### 2.1 Einsatzbereiche von Transportmodellen

- Interpolation von punktuell gemessenen Konzentrationen
- Bilanzierung von Stoffflüssen
- Auswertung von Tracer-Experimenten
- Prognose der Schadstoffausbreitung (z.B. im Rahmen von Natural Attenuation Betrachtungen)
- Kontrolle von in situ Sanierungsmaßnahmen
- Einsicht in die Entwicklung der Grundwasserbeschaffenheit

Transportmodelle bauen immer auf Strömungsmodelle auf, d.h. eine Transportmodellierung kommt nicht ohne vorangehende Strömungsmodellierung aus.

# 3 Transportmechanismen

## 3.1 Advektion

Die Advektion ist der Stofftransport entlang von Bahnlinien der Grundwasserströmung. Der advective Transport stellt somit die Schnittstelle zwischen Strömungs- und Transportmodell dar. Die Transportgeschwindigkeit wird aus der bei der Strömungssimulation berechneten Filtergeschwindigkeit  $q$  bestimmt.

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

$$u = \frac{q}{n_e}$$

mit  $u$  = Abstandsgeschwindigkeit L/T

$n_e$  = effektive Porosität -

Der advective Massenfluss ergibt sich zu

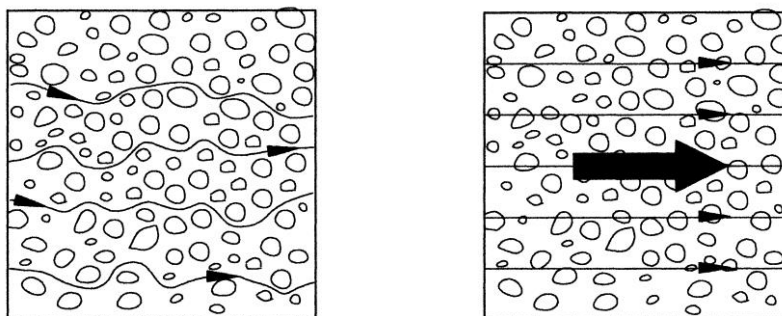
$$J_{adv} = u c$$

mit  $J_{adv}$  = advektiver Massenfluss M/L<sup>2</sup>/T

$u$  = Abstandsgeschwindigkeit L/T

$c$  = Konzentration M/L<sup>3</sup>

Bei der Beschreibung des advectiven Transports im Modell werden Fließrichtung und Fließgeschwindigkeit an einem Punkt des Aquifers als Mittelwerte über ein repräsentatives Volumen verstanden, d.h. im Transportmodell wird mit der mittleren advectiven Bewegung der Wasserinhaltsstoffe gearbeitet. Das Mittelungsvolumen ist dabei die Gitterzelle des Strömungsmodells:



Tatsächliche Bewegungspfade im Porenraum (links) und im Modell verwendete mittlere Abstandsgeschwindigkeit  $u$  in der Zelle des porösen Mediums (rechts) (aus Rausch et al., 2002)

## 3.2 Diffusion

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

Der diffusive Massenfluss kann oberhalb der molekularen Skala analog zum Darcy-Gesetz als sog. Fluss-Gradienten-Gesetz formuliert werden (FICK ´sches Gesetz). Dabei ist der Massenfluss proportional zum antreibenden Konzentrationsgradienten. Der Proportionalitätsfaktor ist der molekulare Diffusionskoeffizient:

$$J_{diff} = -D_m \frac{\partial c}{\partial x}$$

mit  $J_{diff}$  = diffusiver Massenfluss  $M/L^2/T$

$D_m$  = molekularer Diffusionskoeffizient  $L^2/T$

$\partial c/\partial x$  = Konzentrationsgradient (hier in x-Richtung)  $M/L^3/L$

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

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

$$D_{m \text{ Aquifer}} = \tau D_{m \text{ Wasser}}$$

mit  $\tau$  = Tortuositätsfaktor -

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

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

Mit einer stark vereinfachten Rechnung lässt sich die diffusive Transportgeschwindigkeit abschätzen:

$$l = 2.2 \sqrt{D_m t}$$

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

$t$  = Zeit  $T$

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

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

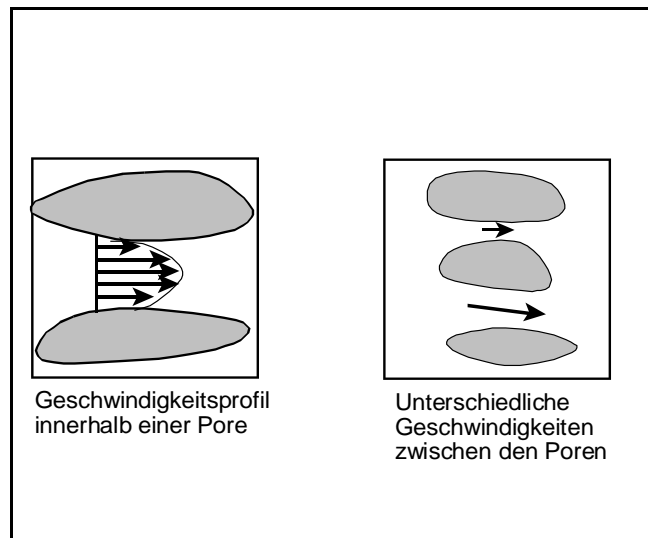
### 3.3 Dispersion

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

Innerhalb einer Pore entstehen unterschiedliche Geschwindigkeiten auf Grund des annähernd parabolischen Geschwindigkeitsprofils, das sich zwischen den Porenwänden einstellt. Wegen der unterschiedlichen Porenquerschnitte sind aber auch die mittleren Geschwindigkeiten in den einzelnen Poren unterschiedlich.

Diese Geschwindigkeitsverteilung führt zu einer Aufweitung scharfer Stofffronten. Da die Geschwindigkeitsverteilung innerhalb einer Modellzelle nicht aufgelöst, sondern durch eine einzige mittlere Geschwindigkeit repräsentiert wird (s.o.), erscheint die Aufweitung einer Stofffront in Form einer zusätzlich zur molekularen Diffusion wirksamen Vermischung. Diese wird korngerüstbedingte Dispersion genannt. Die folgende Abbildung veranschaulicht die wesentlichen Ursachen der korngerüstbedingten Dispersion.





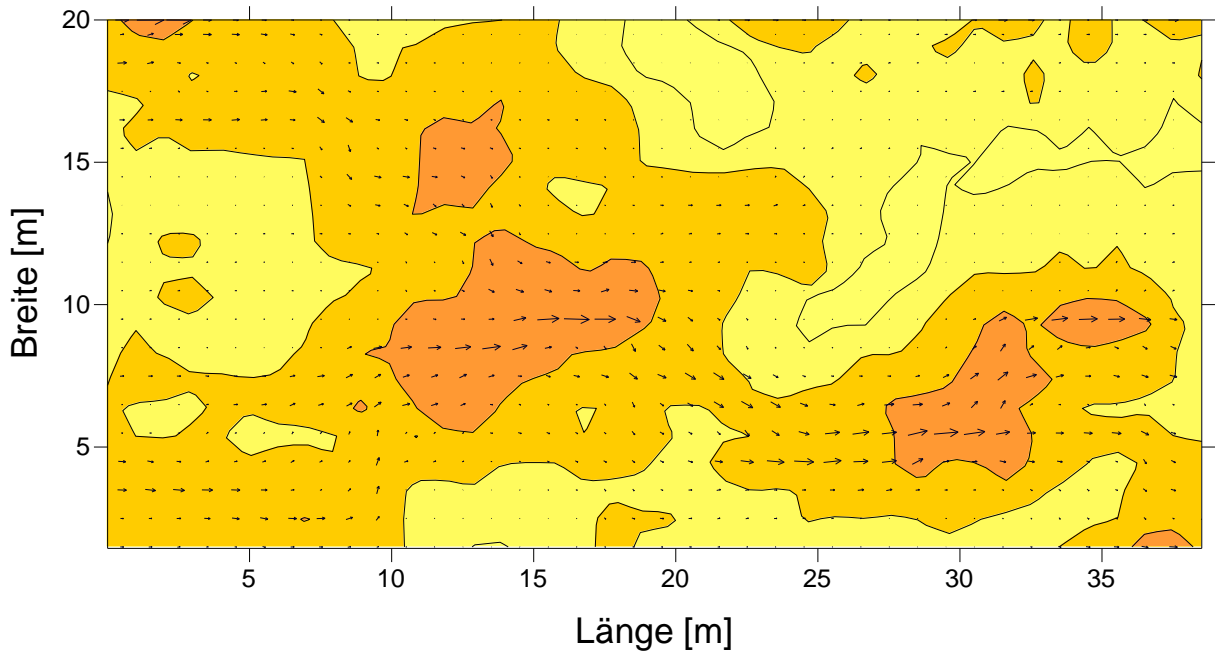
Was das Auseinanderziehen einer Ausbreitungsfront angeht, wird der Diffusions-effekt im Allgemeinen durch den Beitrag der korngerüstbedingten Dispersion übertroffen. Sie ist z.B. der wesentliche Vermischungsprozess in homogenen Laborsäulen.

In einem völlig homogenen Grundwasserleiter gäbe es nur die korngerüstbedingte Dispersion. Natürliche Grundwasserleiter sind jedoch immer heterogen. Dadurch kommt es auch auf Skalenebenen oberhalb des Porenbereichs zu einer ungleichförmigen Geschwindigkeitsverteilung und damit zu einer Aufweitung von Stofffronten.

Da die Ausdehnung der Heterogenitäten, die diese Geschwindigkeitsvariationen hervorrufen (z.B. Ton-, Sand- oder Kieslinsen und Schichtung), größtenteils oberhalb der Auflösung des Rechengitters angesiedelt ist (d.h. die heterogenen Strukturen erstrecken sich über mehr als eine Gitterzelle), könnten sie im Transportmodell prinzipiell direkt berücksichtigt werden. Dazu wäre aber die detaillierte Kenntnis des Aquiferaufbaus notwendig, die im Allgemeinen nicht gegeben ist.

Die Vermischungseffekte, die durch die Nichtberücksichtigung der Heterogenitätsstruktur des Aquifers und damit der Geschwindigkeitsvariabilitäten oberhalb der Porenebene hervorgerufen werden, müssen daher in aller Regel in Form der sog. Makrodispersion parametrisiert werden.

Ein Beispiel für solche Heterogenitäten zeigt die untenstehende Abbildung. Die Größe der Pfeile ist dort proportional zur Abstandsgeschwindigkeit. Helle Flächen repräsentieren Zonen mit geringer Durchlässigkeit, dunklere Flächen Zonen mit hoher Durchlässigkeit. Die Durchlässigkeitsverteilung wurde statistisch erzeugt. Die Makrodispersion wird meist zum dominanten Vermischungsprozess bei der Simulation der Stoffausbreitung in Aquiferen.



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

$$J_{disp} = -D \frac{\partial C}{\partial n}$$

mit  $J_{disp}$  = dispersiver Massenfluss  $M/L^2/T$

$D$  = Dispersionskoeffizient  $L^2/T$

$\partial c/\partial n$  = Konzentrationsgradient  $M/L^3/L$

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

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

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

$$D_L = \alpha_L u$$

$$D_T = \alpha_T u$$

mit  $D_L$  = Koeffizient der Längsdispersion  $L^2/T$

$D_T$  = Koeffizient der Querdispersion  $L^2/T$

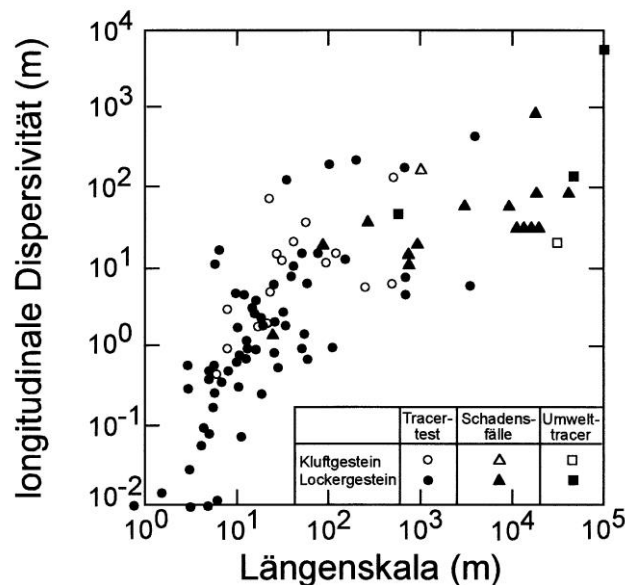
$\alpha_L$  = longitudinale Dispersivität L

$\alpha_T$  = transversale Dispersivität L

$u$  = Abstandsgeschwindigkeit  $L/T$

Die Dispersivität kann als Mischungslänge verstanden werden. Sie ist eine Eigenschaft des porösen Mediums und hängt vom Grad der Ungleichförmigkeit (Heterogenität) des Aquiferaufbaus und von der Skala ab, auf der der Transport betrachtet wird.

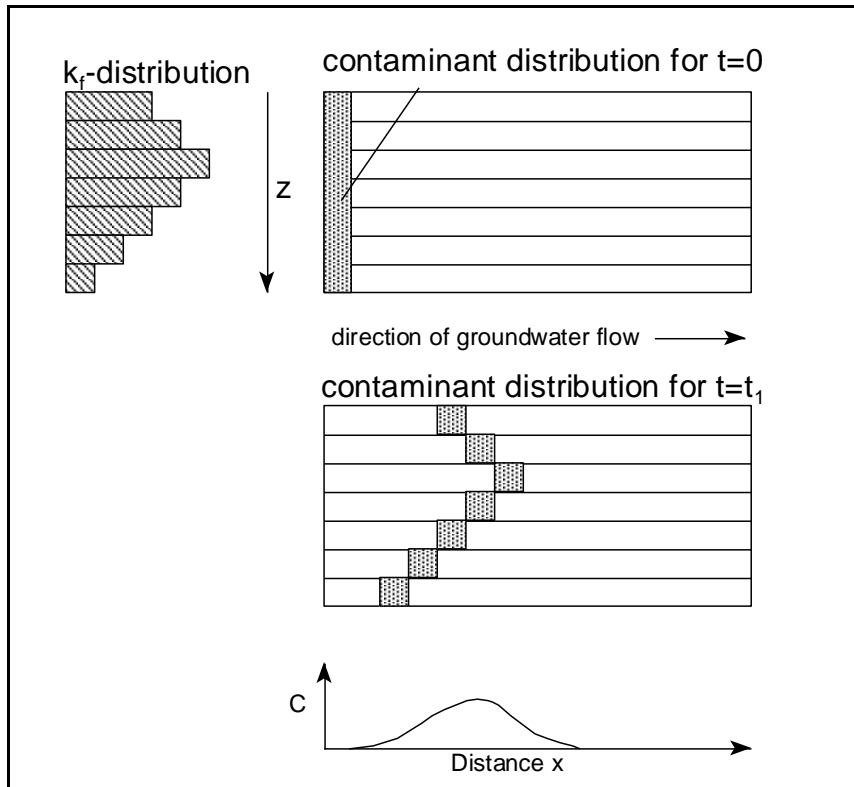
Für homogene Einkornsande liegt die Dispersivität im Bereich des Korndurchmessers, in natürlichen Aquiferen wird die Dispersivität sehr viel größer. Einen empirischen Zusammenhang zwischen der Größe des betrachteten Gebiets und der Dispersivität zeigt die folgende Abbildung. Die Dispersivitäten in dieser Abbildung stammen entweder aus der Auswertung aktiver Tracertests (überwiegend für kleinere Gebiete möglich), aus der Interpretation von beobachteten Schadstoffahnen (für mittelgroße und große Untersuchungsgebiete), oder aus der Auswertung des Transportverhalten von sog. Umwelttracern wie atmosphärisches Tritium (für große Untersuchungsräume).



Die korrekte Anwendung des Dispersionskonzepts setzt voraus, dass die Ausdehnung der verursachenden Inhomogenitäten (z.B. Feinsandlinsen in einem

ansonsten grobsandigen Aquifer) deutlich kleiner ist als das Modellgebiet. Der Einfluss von Inhomogenitäten, deren Erstreckung so groß wie oder größer als das Modellgebiet ist, wie z.B. langgestreckte durchlässige Rinnenstrukturen, kann mit dem Makrodispersionsansatz nur in grober Näherung beschrieben werden.

Die Dispersion ist kein regelloser Prozess wie die "echte" Diffusion, sondern eine differenzielle Advektion. Dies soll folgende Skizze verdeutlichen:



Erst die molekulare Diffusion schafft die tatsächliche Vermischung, wobei die Dispersion jedoch die Gradienten im Aquifer verstärkt und so die molekulare Diffusion fördert.

Die Dispersion ist quantitativ sehr viel bedeutender für den Stofftransport im Aquifer als die Diffusion, wie folgende Abschätzung zeigt: Für den Stofftransport im Bereich über mehrere hundert Meter kann eine Dispersivität von ca. 10 m angenommen werden. Bei einer mittleren Abstandsgeschwindigkeit von 1 m/d =  $1.16 \times 10^{-5}$  m/s ergibt sich der Dispersionskoeffizient zu  $1.16 \times 10^{-4}$  m<sup>2</sup>/s. Er ist damit um 5 Größenordnungen größer als der molekulare Diffusionskoeffizient. Letzterer wird daher in Transportmodellen meist vernachlässigt.

### 3.4 Reaktion

Außer Advektion und Diffusion/Dispersion unterliegen die meisten Stoffe in Grundwasserleitern noch chemischen oder biochemischen Reaktionen. Dazu zählen Adsorption/Desorption, Abbau/Zerfall, Lösung/Fällung usw. Auf einige einfache Reaktionen wird später eingegangen werden. Zunächst soll nur der Transport konservativer, hydrodynamisch neutraler Wasserinhaltsstoffe behandelt

werden. Konservativ heißt, dass der Stoff keinerlei Reaktionen eingeht, hydrodynamisch neutral bedeutet, dass die Stoffkonzentration so gering ist, dass der Einfluss auf die Dichte des Wassers und damit auf die Wasserströmung vernachlässigt werden kann.

## 4 Lösung der Transportgleichung

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

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla(uc) + \nabla(D \nabla c) + \sigma$$

mit  $c$  = Stoffkonzentration  $M/L^3$

$t$  = Zeit  $T$

$u$  = Abstandsgeschwindigkeit  $L/T$

$D$  = Diffusions-/Dispersionskoeffizient  $L^2/T$

$\nabla$  = Nabla-Operator in drei Dimensionen ( $\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z$ )

$\sigma$  = Externer Quell/Senkenterm  $M/L^3/T$

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

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

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

Die duale Natur der Transportgleichung hat weitreichende Folgen. Zunächst ist es so, dass es kein Diskretisierungsverfahren gibt, das für beide Aspekte des Stofftransports optimal geeignet ist. Stattdessen bieten viele Transportmodelle mehrere alternative Diskretisierungsverfahren an. Dies wiederum erfordert vom Bearbeiter, dass er das für die gegebene Situation am besten geeignete Verfah-

ren erkennen und auswählen muss. Letztlich wird eine Transportmodellierung dadurch meist deutlich aufwändiger als eine Strömungsmodellierung, und es besteht die Gefahr, dass allein durch die Wahl eines ungeeigneten Diskretisierungsverfahren ein fehlerhaftes Ergebnis produziert wird. Bei der Strömungsmodellierung ist dies so nicht der Fall.

#### 4.1 Gitterverfahren (Euler-Verfahren): Finite Differenzen

Zu den numerischen Lösungsverfahren, die auf der Diskretisierung der Differentialgleichung auf Gittern beruhen, zählt neben dem Finite-Elemente-Verfahren (FE) das bereits für die Strömungsmodellierung beschriebenen Finite-Differenzen-Verfahren (FD).

Das Prinzip des FD-Verfahrens besteht darin, die Differentialgleichung zur Beschreibung des Stofftransports durch Differenzenquotienten in Raum und Zeit anzunähern:

$$\frac{\partial c}{\partial x} \approx \frac{\Delta c}{\Delta x} = \frac{c_2 - c_1}{x_2 - x_1}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{\Delta c}{\Delta t} = \frac{c_2 - c_1}{t_2 - t_1}$$

Die Unbekannte, nach der die Transportgleichung gelöst wird, ist die Stoffkonzentration im Grundwasser. Die Verwendung von Differenzen anstelle von Differenzialen führt, wie bei der Strömungsmodellierung, dazu, dass das Modellgebiet kein räumliches Kontinuum mehr darstellt, sondern dass es auf einem Modellgitter diskretisiert werden muss. Die Konzentrationen werden daher nicht überall im Modellgebiet berechnet, sondern nur an diskreten Gitterpunkten. Diese Gitterpunkte werden auch Berechnungspunkte oder Knoten genannt.

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

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

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

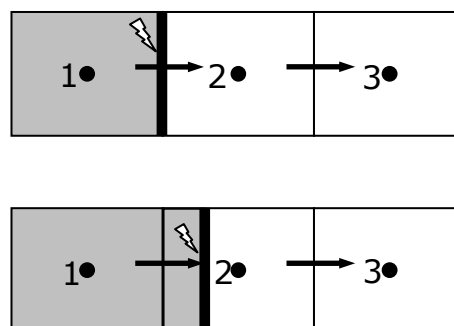
Gitterverfahren sind relativ robuste Lösungsverfahren, die deshalb auch zur Simulation des Stofftransports weit verbreitet sind. Bei Einsatz eines Gitterverfahrens zur Transportsimulation muss das Gitter aus der Strömungsmodellierung übernommen werden. Daher muss in diesem Fall bereits das Strömungsgitter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

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

#### 4.1.1 Numerische Kriterien für Gitterverfahren

Das Phänomen der numerischen Dispersion lässt sich anschaulich am Beispiel einer scharfen Konzentrationsfront darstellen (s.u.). Diese verlässt zum Zeitpunkt  $t$  den Knoten 1 durch advektiven Transport (oberes Bild). Nach dem Zeitschritt  $\Delta t$  erreicht die Front eine Position zwischen Knoten 1 und 2 (unteres Bild).

Die Diskretisierung auf dem Gitter verlangt jedoch, dass der Wasserinhaltsstoff gleichmäßig über die gesamte Zelle 2 verteilt wird (die Gitterzelle ist die kleinste räumliche Einheit des Modells). Aus Gründen der Massenerhaltung muss die resultierende Konzentration in Zelle 2 daher kleiner sein als die ursprüngliche Konzentration an der Stofffront. In der Folge wird die Stofffront aufgeweitet, was einer zusätzlichen Vermischung entspricht. Dieser künstliche Vermischungsprozess wird numerische Dispersion genannt.





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

$$Pe_g = \frac{\Delta x}{\alpha_L}$$

mit  $\Delta x =$  Gitterweite  $L$

$\alpha_L =$  Längsdispersivität  $L$

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

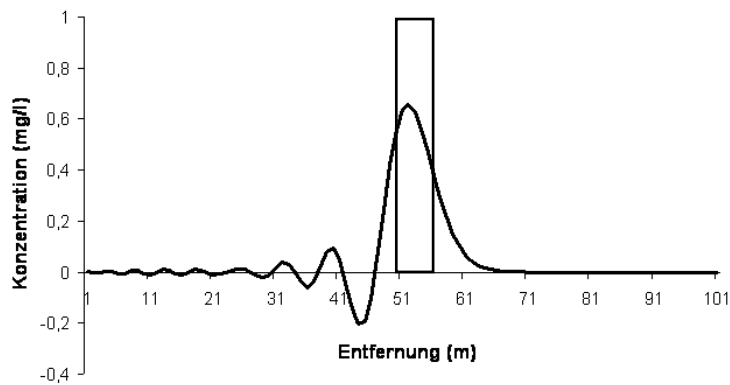
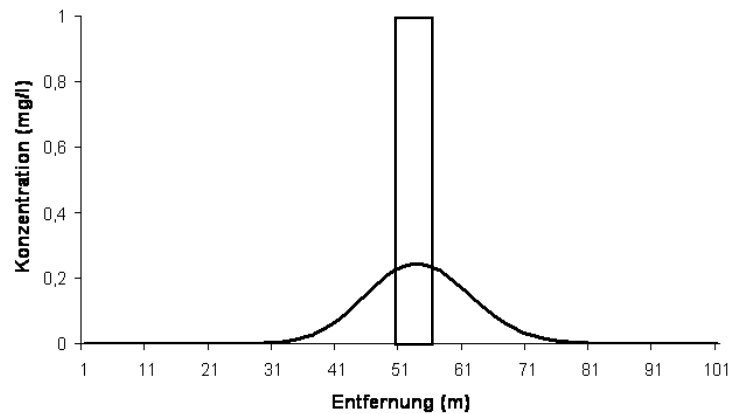
Eine Besonderheit bei der Diskretisierung der Transportgleichung mit einem Gitterverfahren ist die Bildung des advektiven Transportterms  $u \cdot c$  (Produkt aus Abstandsgeschwindigkeit und Konzentration). Weil beim FD-Verfahren die Geschwindigkeiten **zwischen** den Zellen bekannt sind (sie werden aus den Gradienten der berechneten Piezometerhöhen ermittelt), die Konzentrationen jedoch in der Zell**mitte**, ist die Zuordnung von Geschwindigkeit und Konzentration für den Advektionsterm nicht eindeutig.

Viele Modelle bieten deshalb mehrere Kombinationsmöglichkeiten an. Bei der sog. **upwind-Gewichtung** (upstream weighting) wird die Konzentration in der Zelle mit der Geschwindigkeit am oberstromigen Rand multipliziert, bei der sog. **zentralen Gewichtung** (central-in-space weighting) mit dem arithmetischen Mittelwert der beiden Geschwindigkeiten an den Zellrändern.

Grundsätzlich sind zentrale Schemata genauer als upwind-gewichtete Differenzen. Allerdings kann ihre Anwendung zu unphysikalischen Oszillationen in der Lösung führen (sog. Über- und Unterschwinger). Diese zeigen eine unzureichende Diskretisierung zwar deutlicher auf als die numerische Dispersion, es ist allerdings zu bedenken, dass negative Konzentrationen beim Transport große numerische Probleme verursachen können, wenn zusätzlich chemische Reaktionen berechnet werden sollen.

Die folgende Abbildung zeigt die Auswirkungen numerischer Dispersion und von Oszillationen auf den Stofftransport für eine einfache Situation. Berechnet wurde der Transport eines nicht reaktiven Stoffes durch ein eindimensionales Gebiet. Die Dispersion wurde zu Null gesetzt, d.h. ohne numerische Dispersion sollte sich der Stoff in Form des dargestellten Rechteck-Pulses durch das Gebiet bewegen. Die obere Abbildung zeigt die Ergebnisse zu einem gegebenen Zeitpunkt bei Verwendung eines upwind-gewichteten Differenzen-Schemas. Deutlich wird die starke künstliche Vermischung infolge numerischer Dispersion.

Die untere Abbildung wurde mithilfe eines zentral gewichteten Differenzen-Schemas erzeugt. Hier ist der Effekt der numerischen Dispersion geringer, dafür entstehen Über- und Unterschwinger der Lösung (Oszillationen).



Eine weitere dimensionslose Kenngröße zur Beschreibung der Diskretisierung in Gitterverfahren ist die **Courant-Zahl**  $C_0$ :

$$C_0 = \frac{|u \Delta t|}{\Delta x}$$

mit  $u$  = Abstandsgeschwindigkeit L/T

$\Delta t$  = zeitliche Schrittweite T

$\Delta x$  = Gitterweite L

Die Courant-Zahl ist das Verhältnis zwischen der Schrittweite des advektiven Transports und der Gitterweite. Bei einer expliziten zeitlichen Diskretisierung muss die Courant-Zahl immer kleiner 1 sein, d.h. beim advektiven Transportschritt darf keine Zelle übersprungen werden. Nichteinhaltung dieses Kriteriums führt in diesem Fall zum Abbruch des Rechenprogramms.

Eine implizite zeitliche Diskretisierung erlaubt zwar grundsätzlich größere Courant-Zahlen, allerdings erhöhen diese die Auswirkungen der numerische Dispersion bzw. der Oszillationen.

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

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

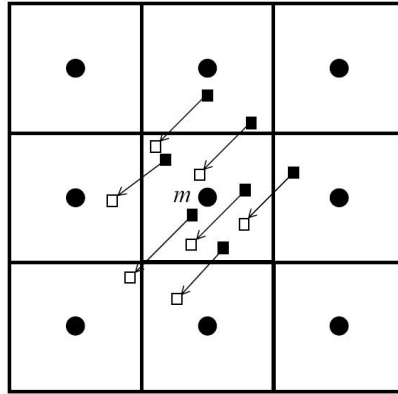
## 4.2 Charakteristiken-Verfahren (Lagrange-Verfahren)

Das zuvor dargestellte Finite-Differenzen-Verfahren ist, wie bereits erwähnt, als Gitterverfahren relativ gut in der Lage, den Diffusions-/Dispersionsterm der Transportgleichung wiederzugeben. Der Advektionsterm wird jedoch weniger gut nachgebildet, was zu numerischer Dispersion bzw. zu Oszillationen führen kann.

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

Ein Beispiel für ein Charakteristiken-Verfahren ist das MOC-Verfahren (Method of Characteristics). Es verwendet eine sog. particle-tracking-Technik zur Lösung des Advektionsterms. Dabei wird zu Beginn der Simulation eine größere Zahl virtueller Partikel im Modellgebiet entweder zufällig oder mit einer festen Ordnung verteilt. Jedem dieser Partikel ist eine Position und eine Konzentration zugeordnet, d.h. ein Partikel repräsentiert die Schadstoffkonzentration in seiner Umgebung. Die Bewegung der Partikel im Modellgebiet wird dann mithilfe der im Rahmen der Strömungsmodellierung ermittelten Geschwindigkeitsverteilung beschrieben.

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



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

Der Vorteil des MOC-Verfahrens ist, dass es frei von numerischer Dispersion ist. Die Behandlung des advektiven Transports mit einem Partikelverfahren gewährleistet beispielsweise, dass scharfe Konzentrationsfronten erhalten bleiben, unabhängig davon, an welcher Position des Strömungsgitters sie sich befinden. Allerdings ist insbesondere in drei Raumdimensionen ein erheblicher Speicher- und Verwaltungsaufwand für die Partikel notwendig.

Außerdem garantiert das MOC-Verfahren keine lokale Massenerhaltung, denn infolge der künstlichen Aufspaltung des Transportschritts in einen advektiven und in einen dispersiv/diffusiven Teilschritt und des ständigen Wechsels zwischen dem Partikelverfahren für die Advektion und dem Gitterverfahren für die Diffusion und Dispersion kann es bei dieser Methode zeitweise zu Fehlern in der Massenbilanz kommen.

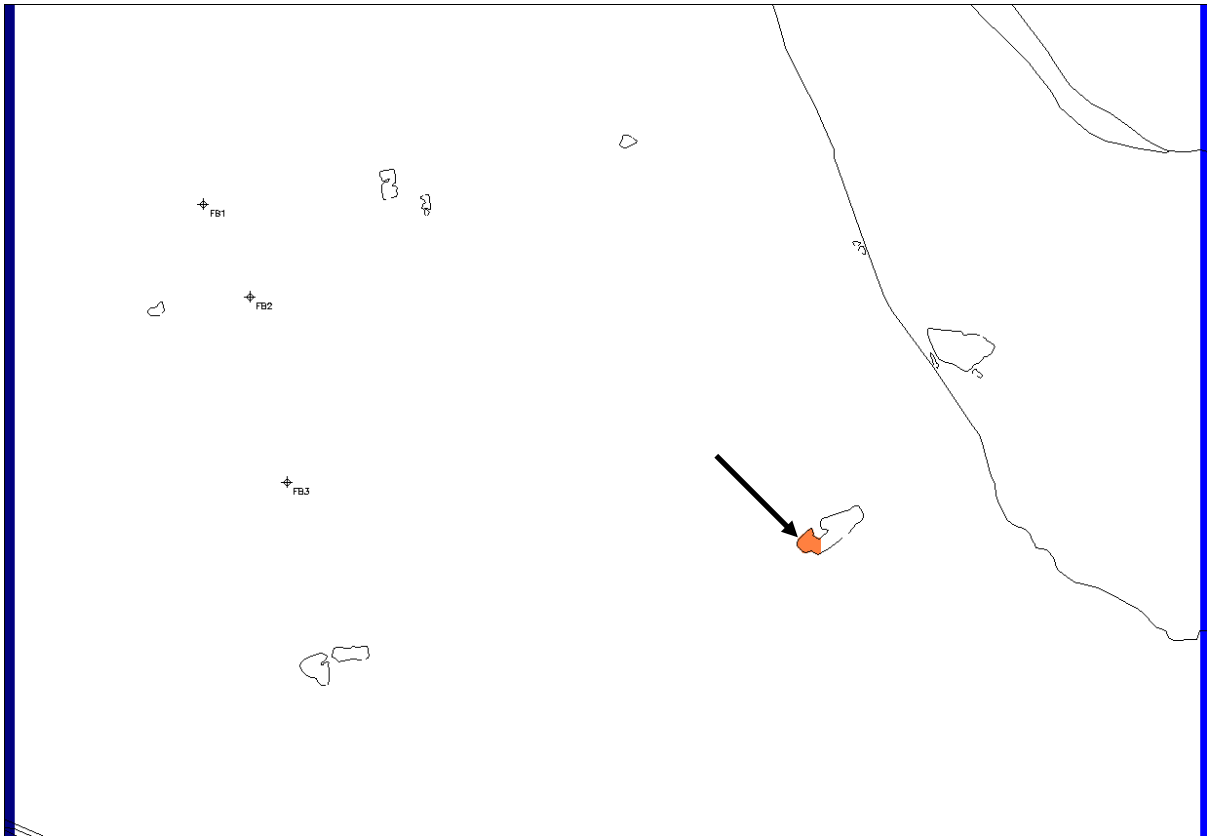
# 5 Übungsaufgabe zum Transport mit PMWIN

## 5.1 Öffnen eines bestehenden Modells (Untermenü File)

*File – Open Model:* Bitte verwenden Sie Ihr instationäres Strömungsmodell.

## 5.2 Eingabe eines Schadensherds

Ein ehemaliger Baggersee im Anstrom der Wasserwerksbrunnen soll teilweise mit schadstoffhaltigem Material verfüllt worden sein. Dieser Verfüllungsbereich (in der untenstehenden Abbildung rot markiert) stellt eine Altlast dar, aus der ein Schadstoff ins Grundwasser gelangt.



Der Schadensherd beschränkt sich auf die oberste Modellschicht und ist in Form von Festkonzentrationsknoten vorzugeben.

### **Einschub: Simulation von Schadstoffquellen**

Der Nachbildung des Schadstoffeintrags kommt eine zentrale Rolle bei der Erstellung des Transportmodells zu. Leider ist es aber so, dass in den allermeisten Anwendungsfällen weder die Schadstoffmasse im Untergrund noch der Umfang des Schadstoffübergangs in das Grundwasser bekannt sind. Diese Größen müssen daher abgeschätzt und gegebenenfalls im Rahmen der Modellkalibrierung angepasst werden.

Bei Altlasten erfolgt der Schadstoffeintrag an einem oder an mehreren eng umgrenzten Orten, er wird daher oft vereinfachend als punktförmig betrachtet. In industriell stark genutzten Gebieten kann es bei einer Vielzahl von Einzeleinträgen jedoch vorkommen, dass der Schadstoffeintrag flächenhaften Charakter annimmt.

MT3DMS ist, wie viele Transportmodelle, auf die gesättigte Zone beschränkt. Dies hat zur Folge, dass der Schadstoffeintrag in der ungesättigten Zone nur indirekt berücksichtigt werden kann.

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

- **Annahme einer oder mehrerer Zellen mit Festkonzentration:** Hierbei wird ein zeitlich konstanter Schadstoffeintrag simuliert. Die Festkonzentrationszelle repräsentiert den Ort des Übergangs von Schadstoff aus dem Boden bzw. dem Aquifermaterial ins Grundwasser. Zu beachten ist, dass sich die Schadstofffracht im Grundwasser (= Produkt aus Konzentration und Abfluss) in Abhängigkeit von der Grundwasserströmung ändert. Wenn beispielsweise im Abstrom des Schadstoffeintrags ein Brunnen in Betrieb genommen wird, erhöht sich die Schadstofffracht im Vergleich zur natürlichen Strömung, da die Grundwasserströmung durch den Brunnenbetrieb erhöht wird und die Konzentration gleich bleibt.
- **Vorgabe eines Schadstoffeintrags (Masse pro Zeit, englisch: „mass loading rate“):** Mit dieser Randbedingung wird ein Schadstoffeintrag mit konstanter Fracht simuliert. Die Schadstoffkonzentration im Grundwasser ergibt sich aus der Eintragsrate und der Strömungsgeschwindigkeit. Im Gegensatz zur Festkonzentrationsbedingung ändert sich die Fracht bei Variation der Strömung nicht. Daher würde sich bei Inbetriebnahme eines Sanierungsbrunnens wie im obigen Beispiel die Schadstoffkonzentration verringern, um bei der erhöhten Grundwasserströmung die vorgegebene konstante Fracht zu gewährleisten.
- **Eintrag über die Grundwasserneubildung:** Dem aus der Grundwasserneubildung zufließenden Sickerwasser wird die Konzentration des Schadstoffs zugeordnet. Da der Schadstoffeintrag in der Realität meist nur untergeordnet über das Sickerwasser, sondern vielmehr aus dem direkten Kontakt zwischen schadstoffbelasteten Aquifermaterial und Grundwasser erfolgt, ist diese Variante zur Nachbildung des gesamten Schadstoffeintrags eher ungeeignet.
- **Annahme eines Reservoirs:** Ein Schadstoffherd in einer Modellzelle kann näherungsweise auch dadurch simuliert werden, dass dieser Zelle ein sehr großer Adsorptionskoeffizient und eine entsprechende Schadstoffanfangskonzentration zugeordnet wird. Dieser Ansatz ähnelt einer Festkonzentrationsrandbedingung, allerdings mit zeitlich abnehmender Schadstoffkonzentration. Der zeitliche Rückgang der Schadstoffkonzentration ist dabei vor allem vom Adsorptionskoeffizienten abhängig.

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

### 5.2.1 Grid – Cell Status – ICBUND:

Der oben angegebenen Bereich des Baggersees mit der Altlast erhält den Cell Status **-2**, d.h. die dort eingegebene Anfangskonzentration (s.u.) wird während der gesamten Simulationszeit beibehalten. Die Kennung **-2** ist analog zur Kennung **-1** = Festpotential aus der Strömungsmodellierung. Der Vorgabewert für den Cell Status im Transportmodell ist **1** (normale Transportzelle).

Mit dem Cell Status **0** können Zellen markiert werden, für die zwar die Strömung berechnet wird, nicht jedoch der Transport. Mit dieser Option ist es möglich, den Berechnungsaufwand bei der Transportmodellierung zu reduzieren.

## 5.3 Eingabe der allgemeinen Transportparameter (Untermenü Parameters)

In diesem Untermenü wurden die meisten Parameter bereits im Rahmen der Strömungsmodellierung eingegeben. Jetzt werden nur noch die zeitliche Schrittweite für die Transportberechnungen und die effektive Porosität verändert.

### 5.3.1 Parameters – Time

Für die zeitliche Diskretisierung und die Einteilung des Modellzeitraums in Perioden sollen die Werte aus dem instationären Strömungsmodell übernommen werden. Als *Zeitschrittweite für den Transport* (Transport Stepsize) soll **0** verwendet werden (Erläuterung s.u.); Maximal **100000** Zeitschritte sollen berechnet werden; Multiplikator für die zeitliche Schrittweite des Transports = **1**;

*Einheit für die Simulationszeit* = **Sekunden**

Die Transportberechnung erfolgt immer instationär, dies muss nicht extra eingegeben werden.

#### **Einschub: Zeitliche Schrittweite**

Wie im Kapitel 4.1.1 erläutert, ist es bei der Transportsimulation mit dem Finite-Differenzen-Verfahren erforderlich oder zumindest sinnvoll, eine Courant-Zahl  $Co < 1$  ( $Co = \left| \frac{u \times \Delta t}{\Delta x} \right|$ ) einzuhalten. Da die Strömungsgeschwindigkeiten  $u$  aus der Strömungsmodellierung und die Gitterabstände  $\Delta x$  aus dem Modellaufbau vorgegeben sind, bleibt hier nur noch die zeitliche Schrittweite der Transportberechnung ( $\Delta t$ ), über die die Courant-Zahl beeinflusst werden kann. Bei Vorgabe einer zeitlichen Schrittweite von 0 wird dem Programm signalisiert, dass es die zeitliche Schrittweite intern so wählen soll, dass die im Untermenü *Models – MT3DMS - Advection* angegebene Courant-Zahl überall eingehalten wird.

Grundsätzlich kann die zeitliche Schrittweite auch direkt vorgegeben werden (z.B. 10000 für  $\Delta t = 10000$  Sekunden), das Einhalten des Courant-Kriteriums erfordert bei dieser Eingabeform jedoch eine aufwändige Kontrolle.

### 5.3.2 Parameters – Effective Porosity

Für die Strömungsberechnung war für das gesamte Modellgebiet ein einheitlicher Wert von 22 % gewählt worden. Dieser Wert hat keinen Einfluss auf das Strömungsergebnis, er beeinflusst lediglich den zeitlichen Verlauf von Bahnlinien. Für die Transportberechnung ist die effektive Porosität jedoch von großer Bedeutung.

Für die Schicht 1 soll der Wert von **22 %** beibehalten werden. Für die gering durchlässige Schicht 2 soll ein Wert von **5 %** gewählt werden, und für die Schicht 3 ein Wert von **10 %**.

#### **Einschub: Effektive Porosität**

Die effektive Porosität (häufig als  $n_e$  abgekürzt und in % des Gesamtvolumens angegeben) verknüpft die Filtergeschwindigkeiten, die im Rahmen der Strömungsmodellierung ermittelt wurden, mit den im Transportmodell benötigten Abstandsgeschwindigkeiten. Der Begriff effektive Porosität bedeutet, dass damit derjenige Teil der Gesamtporosität des Untergrunds gemeint ist, der effektiv am Stofftransport beteiligt ist. Die effektive Porosität wird deshalb auch transportwirksame Porosität genannt. Sie kann größer oder kleiner sein als die speicherwirksame Porosität, d.h. desjenigen Anteils am Porenraum, der bei einer Grundwasserabsenkung entwässert werden kann und der im Rahmen von Pumpversuchsauswertungen bestimmt werden kann. Dennoch wird, wenn keine anderen Daten vorhanden sind, die speicherwirksame Porosität manchmal zur Abschätzung der transportwirksamen Porosität herangezogen.

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

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

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

Die Bestimmung der effektiven Porosität ist gerade bei großräumigeren Modellanwendungen, wie sie bei der Altlastenbearbeitung auftreten können, nicht einfach. Während für Modellgebiete im Meter- oder Zehnermeterbereich die Möglichkeit besteht, die effektive Porosität direkt mithilfe eines Tracerexperiments zu bestimmen, ist diese Vorgehensweise bei größerer Modellausdehnung nicht praktikabel.

Die effektive Porosität ist außerdem eine skalierende Größe, d.h. ihr Wert ist auch abhängig von der Größe des betrachteten Gebiets. Daher ist es in der Re-



gel auch nicht sinnvoll, einen Wert, der mithilfe eines kleinräumigen Tracerexperiments bestimmt wurde, auf ein großräumiges Modell zu übertragen.

Typischerweise wird für das gesamte Modellgebiet oder zumindest für einzelne hydrogeologische Einheiten nur ein einheitlicher Wert angesetzt, da über die räumliche Variabilität von  $n_e$  meist sehr wenig bekannt ist.

Die effektive Porosität kann natürlich nicht größer werden als die Gesamtporosität des Untergrunds. Wenn bei einer Modellanwendung effektive Porositäten von mehr als 35 % bestimmt wurden, ist das Hinweis darauf, dass entweder die Filtergeschwindigkeiten zu hoch sind (Fehler im Strömungsmodell) oder dass eine Retardierung nicht berücksichtigt wurde.

#### **5.4 Festlegung der Transportspezies (Untermenü Models – MT3DMS – Simulation Settings)**

MT3DMS bietet die Möglichkeit, mehrere Modellspezies gleichzeitig zu transportieren. Allerdings sind deren Wechselwirkungen auf einige vorgegebene einfache Reaktionen beschränkt (z.B. Zerfallsreihen radioaktiver Isotope oder Umwandlung von Tetrachlorethen zu Trichlorethen und Dichlorethen). Dadurch unterscheidet es sich von echten Multi-Spezies-Modellen, bei denen viel komplexere Wechselwirkungen berücksichtigt werden können.

Simulation mode: **Constant Density Transport with MT3DMS**

Type of Reaction: **No kinetic reaction is simulated**

**1** Spezies (Schadstoff) soll aktiv sein; der Name kann frei gewählt werden, allerdings wiederum **ohne Umlaute, Leerzeichen o.ä.**

#### **5.5 Eingabe der Anfangskonzentrationen (Untermenü Models – MT3DMS – Initial Concentrations)**

Der Vorgabewert für das gesamte Modellgebiet ist 0. Dieser Wert soll auch überall beibehalten werden außer in den Zellen, die die Altlast darstellen und die im Untermenü *Grid – Cell Status – ICBUND* mit dem Cell Status -2 als Festkonzentrationen vorgegeben wurden. Für diese Zellen soll ein Wert von  $1000 \text{ mg/m}^3 = 1000 \text{ } \mu\text{g/l}$  eingegeben werden. Diese Eingabe bedeutet, dass dem Grundwasser, welches durch die mit -2 markierten Zellen strömt, während der gesamten Simulationszeit die Konzentration von  $1000 \text{ mg/m}^3$  zugeordnet wird.

#### **Einschub: Masseneinheiten**

Wie schon die Längeneinheit ist auch die Einheit für Stoffmassen in PMWIN nicht vorgegeben. Im vorliegenden Fall wurde mg gewählt, d.h. auch alle Massenbilanzen werden in mg angegeben.

Wichtig ist, dass in jeder Simulation nur mit einer einzigen Masseneinheit gearbeitet wird. Wenn die Masseneinheit verändert werden soll, müssen auch sämtliche zugehörigen Zahlen geändert werden (z.B.  $1 \text{ g/m}^3$  statt  $1000 \text{ mg/m}^3$ )

## 5.6 Auswahl des numerischen Verfahrens für den advektiven Transport (Untermenü Models – MT3DMS – Advection)

Während MODFLOW mit dem Finite-Differenzen-Verfahren nur ein einziges Verfahren zur Strömungssimulation anbietet, kann der Stofftransport in MT3DMS mit unterschiedlichen Verfahren simuliert werden (vgl. Kap. 4). Für das Übungsbeispiel soll zunächst das Finite-Differenzen-Verfahren ausgewählt werden.

*Solution Scheme:* **Finite Difference Method**

*Weighting Scheme:* **Upstream weighting** bzw. **Central-in-space weighting**, (bitte mit dem Nachbarn abwechseln).

*Courant Number:* **0.75**

Die Bedeutung der räumlichen Gewichtung (*weighting scheme*) und der Courant-Zahl (*Courant Number*) wurden im Kapitel 4.1.1 erläutert.

## 5.7 Eingabe der Dispersivitäten (Untermenü Models – MT3DMS – Dispersion)

Da die Dispersion, im Gegensatz zur echten Diffusion, ein räumlich gerichteter Prozess ist, wird für die Dispersivitäten nicht nur ein Wert pro Zelle vorgegeben, sondern drei: Die Längsdispersivität, die Quersdispersivität in horizontaler Richtung, und die Quersdispersivität in vertikaler Richtung (vgl. Kap. 3.3).

Dabei werden nur die Längsdispersivitäten über die Eingabemaske für flächenhaft verteilte Modellparameter vorgegeben. Die beiden Quersdispersivitäten sind mit zwei für jeweils eine Modellschicht einheitlichen Verhältniszahlen an die Werte der Längsdispersivitäten gekoppelt. Diese Verhältniszahlen müssen zuerst eingegeben werden:

Verhältnis zwischen Horizontaler Quersdispersivität zur Längsdispersivität (TRPT): **0.1** (für alle drei Schichten).

Verhältnis zwischen Vertikaler Quersdispersivität zur Längsdispersivität (TRPV): **0.01** (für alle drei Schichten).

Außerdem kann hier noch ein Wert für die molekulare Diffusion eingegeben werden. Da die Diffusion im vorliegenden Fall klein ist gegenüber der Dispersion, wird sie vernachlässigt (DMCOEF = **0**).

Für die Längsdispersivität soll ein einheitlicher Wert von **20** m im gesamten Modellgebiet vorgegeben werden.

Ist das Peclet-Kriterium damit erfüllt?

### Einschub: Der Dispersionstensor

Die Dispersion ist auch in einem ansonsten isotropen Medium anisotrop, daher muss der Dispersionskoeffizient im mehrdimensionalen Modell immer als Tensor geschrieben werden. Einfache Ausdrücke für diesen Tensor gibt es nur für Sonderfälle der Strömung. Im isotropen dreidimensionalen Aquifer gibt es eine Dispersivität in Längs- und **eine** in Querrichtung zur Strömung. Es gilt dann:

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix}$$

Die Elemente, die nicht auf der Hauptdiagonalen liegen, z. B.  $D_{xy}$  und  $D_{xz}$ , sorgen dafür, dass es einen dispersiven Massenfluss in x-Richtung auch auf Grund eines Konzentrationsgradienten in y- und z-Richtung gibt:

$$j_{d,x} = -D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} - D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y} - D_{xz} \frac{\partial c}{\partial z}$$

Falls die x-Achse parallel zur Strömung ausgerichtet ist, sind die Elemente der Nebendiagonalen Null:

$$D = \begin{pmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{pmatrix}$$

## 5.8 Gleichungslösung (Untermenü Models – MT3DMS – Solver)

Zur Lösung der diskretisierten Transportgleichung mit dem Finite-Differenzen-Verfahren steht nur ein einziges Verfahren zur Verfügung, nämlich der **Generalized Conjugate Gradient Solver (GCG)**.

Als Methode zur Vorkonditionierung ist das **Jacobi**-Verfahren zu verwenden. Es sollen **1** äußere Iteration und **50** innere Iterationen gewählt werden, und der Relaxationsfaktor betrage **1** (keine Relaxation). Als Konvergenzkriterium ist für die Änderungen der Konzentrationsänderungen zwischen zwei Iterationen (*Concentration Closure Criterion*)  **$10^{-5}$**  vorzugeben, und der Wert für das Printout Interval betrage **0** (der Iterationsverlauf wird im Protokoll-File OUTPUT.MTM nicht aufgeführt). Es soll der komplette Dispersionstensor verwendet werden (s.o.).

### **Einschub: Iterationen**

Der iterative GCG-Gleichungslöser löst das lineare Gleichungssystem für den Stofftransport nicht exakt, sondern liefert lediglich eine Näherungslösung. Dabei wird zunächst eine Konzentrationsverteilung geschätzt (*Initial Concentrations*) und diese dann durch mehrfaches Wiederholen des Lösungsalgorithmus sukzessive verbessert. Die einzelnen Teilschritte bei dieser Näherungslösung nennt man Iteration. Das Verfahren prüft nach jeder Iteration, wie stark sich das Berechnungsergebnis verändert hat.

Sobald diese Änderung geringer ist als der Wert, der im Konvergenzkriterium (*Concentration Closure Criterion*) vorgegeben ist, wird die Gleichungslösung abgeschlossen und das Ergebnis gespeichert. Grundsätzlich gilt, dass das Ergebnis umso genauer wird, je kleiner das Konvergenzkriterium eingestellt wird. Allerdings wird nicht jede beliebig hohe Genauigkeit erreicht werden können.

Die Vorgabe von mehreren äußeren Iterationen ist nur bei Verwendung nicht-linearer Reaktionsterme (z.B. Freundlich-Isotherme) erforderlich. Ansonsten genügt eine einzige äußere Iteration.

Bei großen Modellen mit langen Rechenzeiten oder bei Konvergenzproblemen kann es sich lohnen, die Methode zur Vorkonditionierung zu variieren, um den Löser optimal einzustellen. Man kann hier eigentlich nichts falsch machen, denn es gibt ja nur eine Lösung für das Gleichungssystem, und diese sollte unabhängig vom Lösungsschema sein. Allerdings lässt sich die Rechendauer mit optimalen Steuerparametern u.U. deutlich verkürzen.

## **5.9 Kontrolle der Ausgabe (Untermenü Models – MT3DMS – Output Control)**

Die Transportberechnung verläuft immer instationär, und häufig werden relativ viele Zeitschritte benötigt, um den gewünschten Simulationszeitraum abzudecken. Falls zu jedem Zeitschritt alle berechneten Konzentrationen ausgegeben würden, würde dies schnell zu sehr großen Datenmengen führen. Die Ausgabe in MT3DMS wird daher extern gesteuert. Ohne weitere Eingabe werden die berechneten Konzentrationen nur am Ende einer Periode ausgegeben.

Um die zeitliche Entwicklung der Schadstoffausbreitung nachvollziehen zu können, sollen die berechneten Konzentrationen auch zu weiteren Zeiten ausgegeben werden.

Untermenü *Output Terms*: Übernahme der Voreinstellung

Untermenü *Output Times*: Klicken mit der linken Maustaste auf das graue Feld **Output Time**; danach öffnet sich ein Pop-up Fenster, für das die voreingestellten Werte zu übernehmen sind: Minimum = **0**; Maximum = **1.831e9** s (58 Jahre); Interval = **1.831e8** s (5,8 Jahre).

Untermenü *Misc.*: Übernahme der Voreinstellung

## 5.10 Berechnung der Konzentrationen mit dem FD-Verfahren

### 5.10.1 Models – MT3DMS – Run

Vor dem Beginn der eigentlichen Berechnung werden die Daten, die bisher nur im binären Format von PMWIN abgespeichert sind, in das ASCII-Format überführt, das von MT3DMS benötigt wird. Dabei erkennt PMWIN automatisch, welche Dateien erzeugt werden müssen und welche bereits vorhanden sind.

Im unteren Teil des Run-Fensters können zwei Check-Boxen angeklickt werden:

- *Regenerate all input files*: Die MT3DMS-Dateien werden neu erzeugt, auch wenn die entsprechenden Dateien schon existieren. Die Umsetzung dieser Option ist schlimmstenfalls überflüssig, sie erzeugt aber keinen Schaden.
- *Generate input files only, don't start MT3DMS*: Falls es Probleme bei der Berechnung gibt, können die MT3DMS-Dateien durch Aktivieren dieser Option erzeugt und überprüft werden, ohne dass die Modellrechnung startet.

Nach dem Start der Modellrechnungen öffnet sich automatisch ein DOS-Fenster, auf dem der Verlauf der Gleichungslösung dargestellt wird.

Die Modellrechnungen sind jetzt abgeschlossen, und die Ergebnisse sind in verschiedenen Dateien abgelegt. PMWIN bietet neben der bisher gezeigten Erleichterung der Dateneingabe auch die Möglichkeit, die Berechnungsergebnisse darzustellen. Einige der Darstellungsmöglichkeiten werden im Folgenden vorgestellt.

## 5.11 Verteilung der berechneten Konzentrationen (Untermenü Tools – 2D - Visualization)

Wählen Sie bitte unter MT3DMS als *Result type* **Solute Concentration** und als Spezies **ihre Transportspezies** (Falls mehrere Spezies simuliert werden, können diese hier ausgewählt werden).

Sie erhalten nun eine Darstellung der berechneten Konzentrationen für die vorgegebenen Zeitpunkte (vgl. Kap. 5.9) und für alle Schichten.

### 5.11.1 Anpassung der Darstellung: *Options – Environment*

Unter *Appearance* können Sie entscheiden, welche Modellparameter in welcher Farbe dargestellt werden.

Unter *Contours* lassen sich die Einstellungen für die Darstellung der berechneten Konzentrationen anpassen. Wenn Sie auf das graue Feld *Level...* klicken, können Sie den dargestellten Konzentrationsbereich und die Abstände zwischen den Isolinien wählen (im vorliegenden Fall ist z.B. eine Darstellung zwischen  $100 \text{ mg/m}^3$  und  $1000 \text{ mg/m}^3$  mit einem Abstand von  $100 \text{ mg/m}^3$  sinnvoll). Unter *Label Format* können Sie die Beschriftung der Isolinien verändern.

### **Einschub: Konzentrationsdarstellung**

Es ist grundsätzlich nicht sinnvoll, eine Isolinie für die Konzentration 0 darzustellen, da Konzentrationen  $< 0$  (negative Konzentrationen) in Wirklichkeit nicht möglich sind. Bei der numerischen Berechnung hingegen können negative Konzentrationen immer auftreten, auch wenn die negativen Zahlenwerte bei einem geeigneten Lösungsschema sehr klein sind. Dennoch würde dann eine unphysikalische Isolinie für 0 dargestellt.

Ein sinnvoller Wert für die niedrigste darzustellende Isolinie kann z.B. der Trinkwasser-Grenzwert eines Schadstoffs sein.

### **5.11.2 Anwendung der Transportberechnung**

Es ist davon auszugehen, dass die Schadstoffquelle bereits seit 1961 aktiv ist. Sind heute schon Belastungen aus dem Schadensherd in einzelnen Wasserwerksbrunnen zu erwarten?

Wie unterscheiden sich die Fahne in der 3. Schicht (d.h. im tieferen Aquifer) von der in der 1. Schicht (d.h. im oberflächennagen Aquifer)?

Welche Unterschiede ergeben sich bei Konzentrationsverteilungen bei Verwendung des upwind-Schemas und des zentralen Schemas. Was bedeuten die unterschiedlichen Ergebnisse für die Bewertung der Modellergebnisse?

### **5.12 Abschätzung des Einflusses der numerischen Dispersion**

Gitterverfahren wie das zuvor verwendete Finite-Differenzen Verfahren erzeugen immer eine gewisse numerische („nicht echte“) Dispersion. Es lässt sich generell nicht exakt abschätzen, wie hoch der Anteil der numerischen Dispersion auf die gesamte berechnete Vermischung ist.

Eine Methode, um den Einfluss der Dispersion auf das Ergebnis insgesamt zu untersuchen, besteht darin, zunächst die Dispersion bei den Berechnungen im Modell auszuschalten. Dann ist es jedoch nicht mehr sinnvoll, die Berechnungen mit dem Differenzen-Verfahren durchzuführen, denn dieses erzeugt auch bei ausgeschalteter Dispersion eine numerische Dispersion.

Stattdessen ist die Charakteristiken-Methode (vgl. Kap. 4.2) zu verwenden, denn diese ist grundsätzlich frei von numerischer Dispersion.

#### **5.12.1 Berechnung der Konzentration mit dem MOC-Verfahren (Unter- menü Models – MT3DMS – Advection)**

Die Steuerung dieses MOC-Verfahrens ist aufwendiger als beim FD-Verfahren und erfordert daher auch eine umfangreichere Parameter-Eingabe. Die meisten dieser Parameter dienen der Kopplung des advektiven Transportschritts mit dem dispersiven Vermischungsschritt.

*Solution scheme:* **Method of Characteristics (MOC)**

*Particle Tracking Algorithm:* **Hybrid 1st order Euler and 4th order Runge-Kutta**

*Simulation Parameters:*

<i>Max. number of total moving particles (MXPART):</i>	<b>500000</b>
<i>Courant number (PERCEL):</i>	<b>2</b>
<i>Concentration weighting factor (WD):</i>	<b>0.5</b>
<i>Negligible relative concentration gradient (DCEPS):</i>	<b>0.001</b>
<i>Pattern for initial placement of particles (NPLANE):</i>	<b>4</b>
<i>No. of particles per cell in case of DCCELL ≤ DCEPS (NPL):</i>	<b>4</b>
<i>No. of particles per cell in case of DCCELL &gt; DCEPS (NPH):</i>	<b>15</b>
<i>Minimum number of particles allowed per cell (NPMIN):</i>	<b>2</b>
<i>Maximum number of particles allowed per cell (NPMAX):</i>	<b>15</b>

### **Einschub: Steuerparameter für das MOC-Verfahren**

Zur Berechnung des advektiven Schrittes des MOC-Verfahrens ist es notwendig, die Geschwindigkeit an jedem Punkt des Modellgebiets aus den von der Strömungsberechnung her bekannten diskreten Geschwindigkeiten zwischen den Knoten zu interpolieren.

Bei der linearen Interpolation werden die beiden bekannten Geschwindigkeiten entsprechend ihres Abstandes zum betreffenden Punkt gewichtet:

$$q_x(x_p, y_p, z_p) = (1 - \alpha_x)q_{i,j-1/2,k} + \alpha_x q_{i,j+1/2,k}$$

mit  $q_x$  = gesuchte Filtergeschwindigkeit in x-Richtung

$x_p, y_p, z_p$  = Position des Partikels in x, y, z-Richtung

$q_{i,j-1/2,k}, q_{i,j+1/2,k}$  = bekannte Filtergeschwindigkeiten in x-Richtung an der beiden Zellrändern

$\alpha_x$  = Gewichtung in x-Richtung =  $(x_p - x_{j-1/2})/\Delta x_j$

$\Delta x_j$  = Gitterweite in x-Richtung

Nach dem gleichen Schema wird in y- und z-Richtung vorgegangen. Anschließend werden mittels Division der Filtergeschwindigkeiten durch die effektive Porosität die für den advektiven Transport maßgebliche Abstandsgeschwindigkeiten  $u_x, u_y, u_z$  bestimmt. Die resultierende advektive Bewegung eines Partikels ergibt sich schließlich aus der Überlagerung der Bewegung in die drei Raumrichtungen  $\Delta x_p, \Delta y_p, \Delta z_p$  mit:

$$\Delta x_p = u_x(x_p, y_p, z_p)\Delta t$$

$$\Delta y_p = u_y(x_p, y_p, z_p)\Delta t$$

$$\Delta z_p = u_z(x_p, y_p, z_p)\Delta t$$

Zur Berechnung der Partikelbewegung bietet MT3DMS neben dem zuvor gezeigten linearen Schema auch ein aufwendigeres, aber genaueres Runge-Kutta Schema 4. Ordnung an.

Am Ende eines advektiven Teilschritts wird die mittlere Konzentration in jeder Zelle des Modells ausgerechnet. Im MOC-Verfahren, das in MT3DMS implementiert ist, wird dabei das arithmetische Mittel aus den Konzentrationen der einzelnen Partikel verwendet. Aus der neuen Konzentration am Ende des advektiven Teilschritts,  $C_{ad}$ , wird dann die Konzentration bestimmt, auf deren Basis der dispersive Transport mit dem FD-Verfahren berechnet wird:

$$C_{ad}^* = \omega C_{ad} + (1 - \omega)C(t)$$

Dabei ist  $\omega$  ein Gewichtungsfaktor (**Concentration weighting factor WD**), der Werte zwischen 0.5 und 1 annehmen kann, und  $C(t)$  ist die Konzentration in der Zelle zum alten Zeitschritt. Dieser zeitlichen Gewichtung liegt die Überlegung zugrunde, dass in Wirklichkeit Advektion und Dispersion simultan ablaufen, während die beiden Prozesse im MOC-Verfahren künstlich entkoppelt werden. Zur Berechnung der Konzentrationsänderung aufgrund dispersiver Vermischung  $\Delta C_{dis}$  wird daher eine Konzentration gewählt, die zwischen der Konzentration am Ende des advektiven Teilschritts  $C_{ad}$  und dem zeitlichen Mittelwert zwischen alter Konzentration und  $C_{ad}$  liegt.

Die neue mittlere Konzentration in einer Zelle nach Advektion und Dispersion,  $C(t+\Delta t)$ , ergibt sich dann folgendermaßen:

$$C(t + \Delta t) = C_{ad} + \Delta C_{dis}$$

Vor der Berechnung des nächsten advektiven Teilschritts müssen nun auch noch die Konzentrationen der einzelnen Partikel aktualisiert werden, d.h. die Konzentrationsänderung infolge Dispersion muss nun auf die Partikel verteilt werden. Falls  $\Delta C_{dis}$  positiv ist, wird die Konzentrationsänderung einfach zu den Konzentrationen der einzelnen Partikel hinzu gezählt:

$$C_p(t + \Delta t) = C_p(t) + \Delta C_{dis}$$

Wenn  $\Delta C_{dis}$  jedoch negativ ist und in einer Zelle gleichzeitig Partikel mit hoher und niedriger Konzentration vorliegen kann es passieren, dass die Konzentrationen von Partikeln mit geringer Anfangskonzentration negativ werden. Dies ist physikalisch nicht sinnvoll und muss daher verhindert werden. Falls also die Konzentrationen eines oder mehrerer Partikel negativ würden, werden alle Partikel durch einen Satz gleich vieler neuer Partikel ersetzt, denen dann allen einheitlich die mittlere Zellkonzentration  $C(t+\Delta t)$  zugeordnet wird.

Für die Anfangsverteilung der Partikel in einer Gitterzelle des Strömungsmodells können unterschiedliche Muster gewählt werden (**NPLANE**). Für  $NPLANE = 0$  werden die Partikel zufällig verteilt, und mit einer ganzen Zahl  $NPLANE > 0$  wird vorgegeben, dass die Partikel gleichmäßig und in  $NPLANE$  vertikalen Lagen innerhalb der Zelle verteilt werden.



Um die Anzahl der Partikel und damit den Speicher- und Rechenaufwand zu begrenzen, wird in MT3DMS ein dynamischer Ansatz zur Verteilung der Partikel gewählt. Dies bedeutet, dass die Partikel nicht gleichmäßig auf dem Modellgitter verteilt werden, sondern dass ihre räumliche Verteilung variabel ist, wobei sich die dynamische Verteilung an den Erfordernissen des Transportproblems orientiert. Als Kriterium dient in jeder Zelle der relative Konzentrationsgradient zu den Nachbarzellen **DCCELL**<sub>*i,j,k*</sub>:

$$DCCELL_{i,j,k} = \frac{CMAX_{i,j,k} - CMIN_{i,j,k}}{CMAX - CMIN}$$

Dabei ist  $CMAX_{i,j,k}$  und  $CMIN_{i,j,k}$  die maximale bzw. minimale Konzentration in der Umgebung der Zelle mit dem Index  $i,j,k$ .  $CMAX$  und  $CMIN$  ist die maximale bzw. minimale Konzentration im gesamten Modellgebiet.

Falls der relative Gradient **DCCELL** größer ist als der vernachlässigbare relative Konzentrationsgradient **DCEPS**, werden dort viele Partikel platziert, um die Transporteffekte in diesem Bereich möglichst genau nachbilden zu können. Entsprechend werden nur wenige Partikel dort gesetzt, wo der relative Konzentrationsgradient kleiner als DCEPS ist, denn in diesen Bereichen genügt es, den advektiven Transport mit wenigen Partikeln aufzulösen. Für den typischen Fall von Schadstofffahnen in einem ansonsten unbelasteten Aquifer erlaubt der dynamische Ansatz, die Partikel vor allen auf den schadstoffbelasteten Bereich zu konzentrieren. Dadurch wird die Gesamtzahl der Partikel im Vergleich zur gleichmäßigen Verteilung reduziert, während im Fahnenbereich weiterhin die gewünschte hohe Auslösung zur möglichst genauen Nachbildung des Transports gewährleistet ist.

Der dynamische Ansatz wird nicht nur bei der Anfangsverteilung der Partikel angewandt, sondern er dient während der ganzen Transportsimulation dazu, die Partikelverteilung zu optimieren. Veränderungen der Partikelverteilung werden beispielsweise in Zellen mit Quellen und Senken notwendig. Dabei wird darauf geachtet, dass in Quellen (z.B. Zustromränder, Infiltrationsbrunnen) neue Partikel gesetzt werden, damit eine gegebene Partikelzahl pro Zelle nicht unterschritten wird (**minimum number of particles allowed per cell NPMIN**), während in Senken (z.B. Entnahmebrunnen) Partikel herausgenommen werden, um eine vorgegebene maximale Partikelzahl pro Zelle (**maximum number of particles allowed per cell NPMAX**) nicht zu überschreiten. Aber auch in Zellen ohne Quell/Senken-Terme kann es aufgrund einer zeitlichen Veränderung des Konzentrationsgradienten während des Transports sinnvoll sein, Partikel hinzuzunehmen oder zu entfernen.

Es gibt keine generellen Regeln für die Wahl der Steuerparameter, und es liegt daher am Modellbearbeiter, einen für die gegebene Situation optimalen Parametersatz durch Ausprobieren zu finden.

Deaktivieren Sie bitte zunächst das *Dispersion package* (**Untermenü Models – MT3DMS – Dispersion Deactivate**) und führen Sie dann die rein advektiven Transportberechnung mit dem MOC-Verfahren durch.

Welche Unterschiede ergeben sich im Vergleich zum FD-Verfahren? Wie sind die Unterschiede zu bewerten?

## 6 Fortsetzung der Übungsaufgabe

Da die Altlast möglicherweise eine Bedrohung für das abstromig gelegene Wasserwerk darstellt, soll eine hydraulische Sicherungs- und Sanierungsmaßnahme geplant werden. Die Anlage soll aus einem oder mehreren Brunnen bestehen, die im Abstrom der Altlast im oberflächennahen Aquifer (Schicht 1) installiert werden.

Das Modellgitter ist mit seiner Auflösung von 100 m x 100 m zwar eigentlich zu grob, um die Sicherungs- und Sanierungsbrunnen zuverlässig auslegen zu können. Für das Übungsbeispiel soll das grobe Gitter dennoch genügen. Bei einer echten Modellanwendung sollte die Gitterweite im Bereich der Altlast höchstens 10m x 10m betragen. In PMWIN ist ein Tool zur Gitterverfeinerung implementiert.

### **Einschub: Gitter-Verfeinerung**

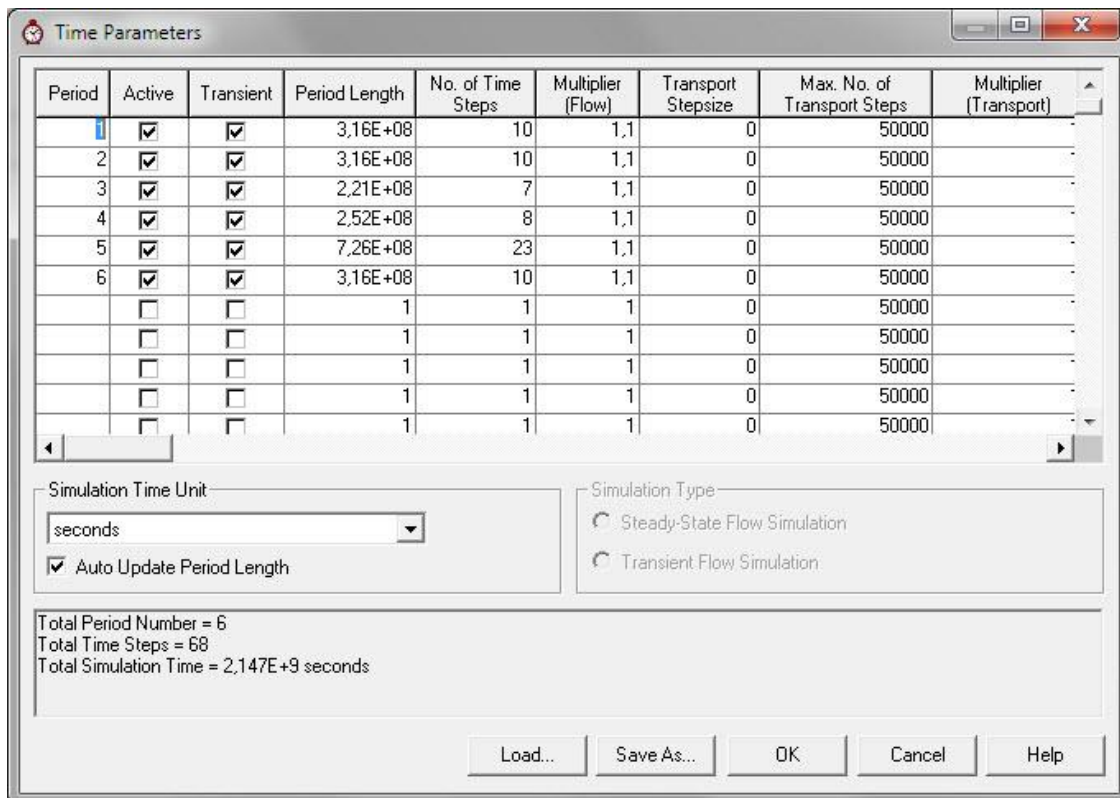
Das Modell mit dem lokal verfeinerten Gitter weist mehr Spalten und Zeilen auf als das ursprüngliche Modell, d.h. der Rechenaufwand steigt mit zunehmender Knotenzahl bei Verfeinerung des Netzes. Zudem verlangt das Courant-Kriterium bei kleineren Zellen auch kleinere Zeitschritte. Ein direkter Austausch von Parametern zwischen dem ursprünglichen und dem verfeinerten Modell ist nicht mehr möglich.

Werden Zellen verfeinert, in denen sich Quellen oder Senken befinden, werden diese gleichmäßig auf die verfeinerten Zellen verteilt (z.B. Brunnen oder Festkonzentrationen).

Da das verfeinerte Gitter eine höhere Auflösung ermöglicht, kann es sinnvoll sein, die Verteilung einzelner Parameter zu überarbeiten.

### **6.1 Erweiterung des Modellzeitraums**

Die geplante Sicherungs- und Sanierungsmaßnahme soll über einen Zeitraum von 10 Jahren als Periode 6 an das bestehende Modell angehängt werden (Prognosezeitraum):



Eine alternative Vorgehensweise bestünde darin, die Modellrechnungen zur Auslegung der Maßnahme erst 2018 beginnen zu lassen (und nicht schon 1961). In diesem Fall müsste die Anfangsverteilung der Schadstoffkonzentration aus der vorangegangenen Berechnung übernommen werden. Mit der alternativen Vorgehensweise könnte die Rechenzeit deutlich reduziert werden, da bei einer Variation des Sanierungsschemas der vorausgehende Modellzeitraum von 1961 – 2018 nicht erneut simuliert werden müsste.

### **Einschub: Anfangsverteilung**

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

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

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

Der Nachteil dieser letzteren Vorgehensweise ist, dass der gesamte Simulationszeitraum einschließlich der Vorberechnungen sehr lang werden kann (mehrere Jahrzehnte sind möglich), und dass für diesen Zeitraum auch Informationen zur Grundwasserströmung ermittelt werden müssen (beispielsweise zum langjährigen Betrieb von Wasserfassungen). Eine Berechnung der Startkonzentrationen durch eine vorgeschaltete Simulation wie zuvor dargestellt ist jedoch der direkten Verwendung einer interpolierten Stichtagsmessung grundsätzlich vorzuziehen, auch wenn dadurch der Aufwand zur Datenerhebung und der Rechenaufwand erhöht werden.

## 6.2 Abschätzung der erforderlichen Entnahmeraten

Um den Schadstoffaustrag aus der Altlast zukünftig verhindern zu können ist es erforderlich, das abströmende schadstoffbelastete Grundwasser komplett zu erfassen, d.h. die Förderrate muss mindestens so hoch sein wie der Grundwasserabstrom aus dem Bereich der Altlast. Die Höhe dieses Grundwasserabstroms kann über die Wasserbilanz ermittelt werden, und zwar in dem der Abstrombereich der Altlast als **Teilzone (Subregion)** der Wasserbilanz markiert wird (**Tools – Water Budget - Subregions**).

Teilzonen werden mittels ganzer Zahlen markiert, d.h. wenn Sie beispielsweise eine Anzahl von Modellzellen als Teilzone (Subregion) durch Eingabe des Werts 1 markieren, wird zusätzlich zur Wasserbilanz für das gesamte Modellgebiet auch noch diejenige für die Teilzone 1 ausgegeben. Die Voreinstellung ist 0, d.h. es werden keine Teilzonen berechnet. Maximal können 50 Teilzonen eingegeben werden.

## 6.3 Hydraulische Auslegung mittels Bahnlinien (Untermenü Models – PMPATH)

Der advektive Schadstoffabstrom soll zunächst mittels Bahnlinien simuliert werden. **Implementieren Sie** den oder die geplanten Entnahmehäuser bitte so, dass keine Bahnlinie aus dem Altlastbereich mehr in den Abstrom gelangen kann. Die Verteilung der Brunnen und die einzelnen Förderraten sind durch Ausprobieren zu ermitteln.

Die Funktionsweise des Bahnlinienmodells ist im Skript zur Strömungsmodellierung erläutert.

Denken Sie bitte daran, dass nach jeder Änderung an der Brunnenkonfiguration eine neue Strömungsberechnung durchzuführen ist.

### **6.3.1 Simulation des Stofftransports (Untermenü Models – MT3DMS – Run)**

Für die im Rahmen der Bahnlinienbetrachtung ausgewählte Brunnenkonfiguration ist der Stofftransport zu berechnen.

Um den zeitlichen Verlauf der Schadstoffentwicklung auch im Prognosezeitraum (2018 – 2028) nachvollziehen zu können, sind im Untermenü **Models – MT3DMS – Output Control – Output Time** die Ausgabezeitpunkte anzupassen. Bitte verwenden sie folgende Ausgabesteuerung:

*Minimum:* **0**

*Maximum:* **2.147E+09**

*Interval:* **3.15E+07** (= 1 Jahr)

Die *Output Frequency* wird dann automatisch zu 70 (Jahre).

Bitte verwenden sie das Finite-Differenzen Verfahren mit upstream-Gewichtung und aktivieren Sie das Dispersion Package wieder

Wie verhält sich die Schadstofffahne im Prognose-Zeitraum?

Mit welchen Schadstoffkonzentrationen ist in einer Aufbereitungsanlage für das Förderwasser zu rechnen?

Welche Schadstofffracht wird am Ende des Prognosezeitraums (2028) aus dem Aquifer entnommen?

### **6.3.2 Implementierung von Messstellen**

Vorhandene oder geplante Messstellen können im Untermenü **Models – MT3DMS – Concentration Observations** eingegeben werden:

- Im Feld *Name* bitte keine Leerzeichen, Umlaute oder Schrägstriche (/) verwenden.
- Der Namen kann aus maximal 8 Zeichen bestehen.
- Im Feld *Layer Proportions* ist anzugeben, über welche Modellschichten die Messstellen verfiltert sind.
- Bitte geben Sie mindestens **3 Messstellen** im Fahnenbereich ein und stellen Sie den zeitlichen Verlauf der Schadstoffentwicklung in diesen Messstellen im Simulationszeitraum dar.

## 7 Transport und Reaktion

Bisher wurde nur der Transport konservativer Wasserinhaltsstoffe betrachtet. Diese erfahren advektiven und dispersiv/diffusiven Transport, sie gehen aber keinerlei chemische oder physikalisch-chemische Wechselwirkungen ein.

Für viele Wasserinhaltsstoffe trifft diese Annahme nicht zu. Beispielsweise werden organische Verbindungen im Grundwasser häufig mikrobiell abgebaut oder sie sorbieren an das Aquifermaterial.

In MT3DMS können u.a. ein Abbau 1. Ordnung und lineare und nichtlineare Retardierung berücksichtigt werden. Diese beiden Reaktionsprozesse werden im Folgenden näher erläutert.

### 7.1 Abbau 1. Ordnung

Beim Abbau erster Ordnung ist die Konzentrationsänderung eines Stoffes pro Zeiteinheit proportional zur eigenen Konzentration. Der Proportionalitätsfaktor ist die Abbaurrate:

$$\frac{d c}{d t} = -\lambda c$$

mit  $c$  = Konzentration [M/L<sup>3</sup>]

$t$  = Zeit [T]

$\lambda$  = Abbaurrate [1/T]

Der radioaktive Zerfall folgt sehr genau obigem Gesetz erster Ordnung. Unter bestimmten Randbedingungen kann ein Zerfallsgesetz 1. Ordnung aber auch für die Beschreibung des chemischen oder biochemischen Abbaus von organischen Schadstoffen verwendet werden. Wenn z.B. die Abbaurrate eines Schadstoffs allein von der Konzentration des Schadstoffs selbst abhängt, wenn also die Konzentrationen anderer Stoffe wie Oxidationsmittel keine Rolle spielen, kann der Schadstoffabbau oft mittels einer Kinetik erster Ordnung bzgl. der Schadstoffkonzentration beschrieben werden.

Im allgemeinen Fall sind die chemischen oder biochemischen Reaktionsraten einer Verbindung im Untergrund jedoch immer auch eine Funktion der Konzentrationen weiterer Reaktionspartner. Solche Systeme miteinander wechselwirkender Stoffe können dann nicht mehr adäquat mit einfachen Abbaumodellen nachgebildet werden, sondern verlangen den Einsatz von Multispezies-Modellen.

Ein Abbauterm erster Ordnung ist in fast allen Transportmodellen vorhanden. Er kann immer dann eingesetzt werden, wenn entweder experimentelle Daten auf einen Schadstoffabbau hinweisen, oder wenn Abbauprodukte im Aquifer festgestellt werden, oder wenn sich im Rahmen der Modellkalibrierung zeigt, dass das Modell die Schadstoffkonzentration mit zunehmendem Abstand vom Schadstoffherd überschätzt, d.h. wenn die berechneten Konzentrationen mit zunehmender Fließstrecke systematisch höher werden als die Messwerte.

Die Abbaukonstanten für organische Schadstoffe sind jedoch oft a priori nicht bekannt und von Fall zu Fall sehr unterschiedlich, da beispielsweise die jeweili-

gen Redoxverhältnisse die mikrobielle Dynamik stark beeinflussen. Häufig können sie nur im Nachhinein aus einer Massenbilanz abgeschätzt werden. Für viele organische Verbindungen sind aber auch so genannte Halbwertszeiten in der Literatur dokumentiert<sup>1,2</sup>. Diese Werte wurden in Laborversuchen oder unter Feldbedingungen ermittelt oder abgeleitet und sind ein grobes Maß für die Abbaubarkeit einer Verbindung bei gegebenen Milieuparametern (z.B. unter aeroben oder anaeroben Bedingungen in typischen Aquifermaterialien). Beispiele für Halbwertszeiten sind in der folgenden Tabelle aufgelistet.

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

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

$$\lambda = \frac{\ln 2}{t_{1/2}}$$

Die in obiger Tabelle gezeigten Halbwertszeiten sind jeweils Mittelwerte aus stark streuenden Einzelergebnissen. Sie sind daher nicht als feste Konstanten zu verstehen, die unmittelbar in ein Grundwassermodell übernommen werden können, sondern vielmehr Richtwerte, die eine generelle Tendenz zeigen. Beispielsweise erkennt man die relative gute Abbaubarkeit der BTX-Verbindungen (Benzol, Toluol, Xylol) in aeroben Aquiferen, während Benzol unter anaeroben Bedingungen beständiger ist. Deutlich wird auch die geringe Abbaubarkeit von PER und TRI und aeroben Bedingungen, während die Dechlorierung in anaeroben Aquiferen relativ schnell ablaufen kann.

Auf der Homepage der Bund/Länder-Arbeitsgemeinschaft Bodenschutz (LABO) sind u.a. Informationen zum Schadstofftransport im Untergrund zu finden (<http://www.labo-deutschland.de/>).

<sup>1</sup> Suarez, M.P., Rifai, S. (1999): Biodegradation rates for fuel hydrocarbons and chlorinated solvents in groundwater. - Bioremediation Journal 3(4): 337 - 362.

<sup>2</sup> Wabbels, D., Teutsch, G. (2008): Leitfaden Natürliche Schadstoffminderungsprozesse bei mineralölkontaminierten Standorten - Methoden, Empfehlungen und Hinweise zur Untersuchung und Beurteilung. - 222 S.; Zentrum für Angewandte Geowissenschaften, Tübingen.

Wenn Abbauparameter aus Literatur übernommen werden ist darauf zu achten, dass die hydrochemischen Bedingungen im Aquifer mit denen übereinstimmen, für die die Koeffizienten in der Literatur bestimmt wurden (z.B. aerobe oder anaerobe Bedingungen). Die Übernahme von Literaturdaten kann insbesondere für Szenarienberechnungen sinnvoll sein, z.B. zum Vergleich einer Situation ohne Abbau mit einer mit typischerweise zu erwartendem Abbau.

In vielen Anwendungsfällen werden die Abbauparameter jedoch nicht vor vornherein festgelegt, sondern im Rahmen der Modellkalibrierung angepasst. Die zentrale Schwierigkeit bei dieser Anpassung besteht darin, die Auswirkung von Verdünnungs- bzw. Umströmungsprozessen von denen möglicher Abbauprozesse zu unterscheiden. Deshalb ist es erforderlich, dass klar dokumentiert wird, wieso die Simulation mit Abbau plausibler ist als eine ohne Abbau.

## 7.2 Retardierung (Sorption/Desorption)

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

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

$$c_a = k_d c_g$$

mit  $c_a$  = Konzentration des Stoffes am Aquifermaterial M/M

$c_g$  = gelöste Konzentration des Stoffes M/L<sup>3</sup>

$k_d$  = Adsorptionskoeffizient oder Verteilungskoeffizient L<sup>3</sup>/M

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

$$R = \left( 1 + \frac{\rho_{mat} n_{mat} k_d}{n_e} \right)$$

mit  $R$  = Retardierungsfaktor -

$\rho_{mat}$  = Dichte des Feststoffes M/L<sup>3</sup>

$n_{mat}$  = relativer Anteil der Feststoffmatrix am Gesamtvolumen -

$n_e$  = effektive (transportwirksame) Porosität -

Häufig findet man  $\rho_{mat} n_{mat}$  zur Schüttdichte („bulk density“)  $\rho_b$  zusammengefasst.

Anschaulich bedeutet der Retardierungsfaktor, dass der Transport eines retardierten Stoffes bezüglich des Wassertransports um den Faktor  $R$  verzögert ist.

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



Organische Verbindungen weisen immer eine mehr oder weniger stark ausgeprägte Retardierung auf. Für viele organische Schadstoffe wurden empirische Beziehungen zwischen physikalisch-chemischen Stoffeigenschaften und Verteilungskoeffizienten bzw. Retardierungsfaktoren im Aquifer aufgestellt.

Beispielsweise gibt es aus Laborversuchen abgeleitete Abschätzungen für den Verteilungskoeffizienten  $k_{OC}$  eines organischen Schadstoffs zwischen den organischen Bestandteilen des Aquifermaterials (z.B. Humus) und Wasser. Die  $k_{OC}$ -Werte sind auf den Gehalt an natürlichem organischem Kohlenstoff im Aquifer bezogen. Man erhält daraus den Verteilungskoeffizienten  $k_d$ , wenn man den  $k_{OC}$ -Wert mit dem Gehalt des Bodens an organischem Kohlenstoff  $f_{OC}$  multipliziert:

$$k_d = f_{OC} k_{OC}$$

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

In der folgenden Tabelle sind die Retardierungsfaktoren ausgewählter Schadstoffe für einen hypothetischen Aquifer mit  $n_e = 0,3$ ,  $n_{mat} = 0,7$ ,  $\rho_{mat} = 2,65 \text{ kg l}^{-1}$  und  $f_{OC} = 0,1\%$  dargestellt. Die  $k_{OC}$ -Werte sind aus MONTGOMERY & WELKOM<sup>3</sup> entnommen:

Stoff	Herkunft / Verwendung	Summenformel	$k_{OC}$ [l kg <sup>-1</sup> ]	R [-]
Tetrachlorethen (PER)	Lösemittel	C <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	250	2,55
Vinylchlorid	Abbauprodukt	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> Cl	2,5	1,02
Benzol	Treibstoffzusatz	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	60	1,37
o-Xylol	Lösemittel	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	130	1,8
Monochlorbenzol	Pestizidproduktion	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> Cl	310	2,9
1,2,4-Trichlorbenzol	Pestizidproduktion	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> Cl <sub>3</sub>	1600	10,9
Naphthalin	Kokerei	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	1300	9,0
Anthracen	Kokerei	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>	20000	125

In einigen Grundwassermodellen können neben der linearen Sorption auch nicht-lineare Adsorptionsprozesse simuliert werden. Dabei kommt beispielweise die FREUNDLICH-Isotherme zur Verwendung:

$$c_a = k c_g^n$$

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

<sup>3</sup> Montgomery, J.H., Welkom, L.M. (1990): Groundwater chemicals desk reference. - 640 S.; Chelsea, MI (Lewis Publishers).

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

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

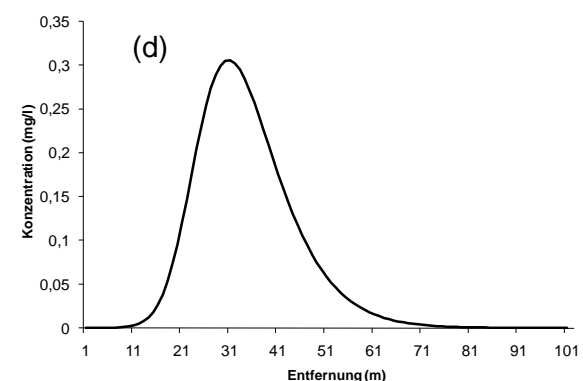
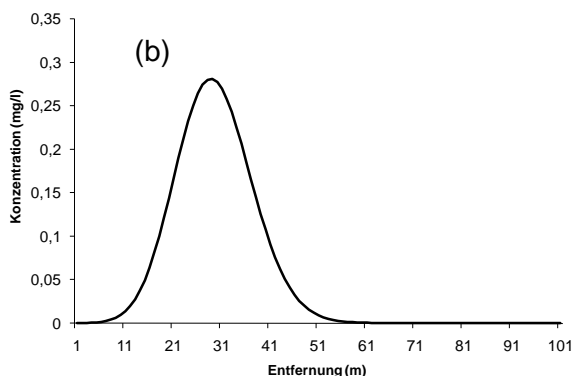
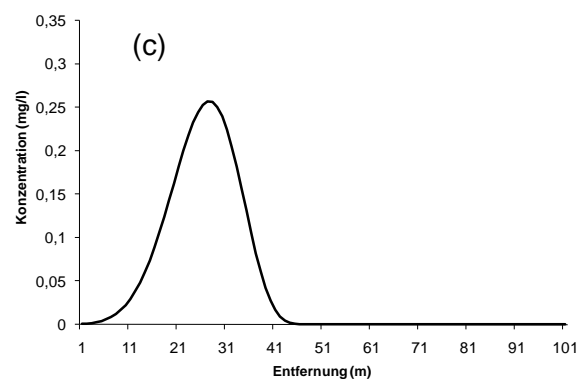
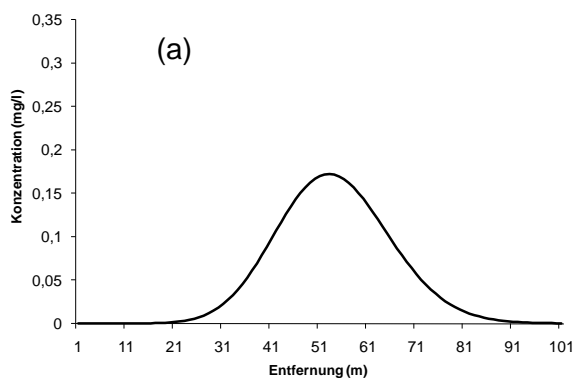
$$c_a = \frac{c_{a,max} k_L c_g}{1 + k_L c_g}$$

mit  $k_L$  = Langmuir-Konstante L3 M-1

$c_{a,max}$  = Maximale adsorbierte Konzentration (Sättigungskonz.) M M-1

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

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



In MT3DMS wird schließlich folgende Differenzialgleichung des reaktiven Transports gelöst:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = -u \nabla c + \nabla(D \nabla c) + \frac{\sigma}{n_e} + \frac{w}{n_e} (c_z - c) - \lambda c$$

bzw.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{u}{R} \nabla c + \frac{1}{R} \nabla(D \nabla c) + \frac{\sigma}{R n_e} + \frac{w}{R n_e} (c_z - c) - \frac{\lambda}{R} c$$

Dies bedeutet, dass die Gleichungslösung völlig analog zum nicht-reaktiven Fall verläuft, wobei jedoch ein zusätzlicher linearer Abbauterm hinzukommt und alle Terme auf der rechten Seite durch R dividiert werden.

### 7.3 Abschluss der Übungsaufgabe

Es soll simuliert werden, wie sich selbst ein geringer Abbau auf den Schadstofftransport auswirkt.

Als Verfahren für den advektiven Transport ist wieder das **upwind-gewichtete FD-Verfahren** mit einer Courant-Zahl von **0.75** zu wählen, die Dispersion soll berücksichtigt werden.

#### 7.3.1 Festlegung der Reaktion (Untermenü Models – MT3DMS – Simulation Settings)

Der Abbau ist als Reaktion erster Ordnung vorzugeben.

*Type of reaction:* **First-order irreversible reaction**

#### 7.3.2 Eingabe der Reaktionsparameter (Untermenü Models – MT3DMS – Chemical Reaction)

Die Halbwertszeit des Schadstoffs soll in allen drei Schichten 10 Jahre betragen. Dies entspricht einer Abbaurrate von **2.2e-9 s<sup>-1</sup>**.

#### 7.3.3 Berechnung der Schadstoffausbreitung (Untermenü Models – MT3DMS – Run)

Berechnen Sie zunächst den Schadstofftransport **ohne Abbau** von 1961 - 2018 und speichern Sie die Konzentrationsverteilungen am Ende des Simulationszeitraums grafisch ab.

Führen Sie die Berechnung dann unter den o.g. Abbau-Bedingungen durch und vergleichen Sie das Ergebnis mit der Situation ohne Abbau.

## **8 Kalibrierung und Anwendung von Transportmodellen**

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

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

### **8.1 Anpassung der Transportparameter**

Durch die Variation der effektiven Porosität und des Retardierungskoeffizienten lässt sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit eines Schadstoffs steuern. Selbstverständlich müssen die Werte innerhalb plausibler Grenzen gewählt werden. So wäre eine effektive Porosität von mehr als 40 % oder eine starke Retardierung für eine polare Verbindung wie Vinylchlorid kein akzeptables Ergebnis einer Modellkalibrierung. Da beide Parameter auf zeitliche Effekte der Stoffausbreitung wirken, können sie auch nur bei Vorliegen von Konzentrationszeitreihen und unter deutlich instationären Bedingungen (Ausbreitung oder Schrumpfen einer Fahne) angepasst werden.

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

Die Berücksichtigung eines Schadstoffabbaus oder -umbaus und die Anpassung des entsprechenden Abbaukoeffizienten wurden bereits im Kap. 7.1 diskutiert.

### **8.2 Rückkopplung mit dem Strömungsmodell**

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

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

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

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

### **8.3 Qualitätskriterien der Transportkalibrierung**

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

Diese Vorgehensweise kann nicht unverändert für die Transportkalibrierung übernommen werden. Dies liegt vor allem an der Natur der zugrundeliegenden Prozesse. Die Grundwasserströmung beschreibt letztlich eine Ausbreitung von Druck, die relativ gleichmäßig in allen Raumrichtungen erfolgt. Der dispersive Teil der Schadstoffausbreitung geschieht auch in dieser Form, die in aller Regel dominierende advective Ausbreitung erfolgt jedoch nicht gleichmäßig, sondern sie ist immer räumlich gerichtet.

Daher gibt es im typischen Fall der Abstromfahne eines Schadstoffherds oder einer Altlast immer relativ viele Messstellen, in denen kein oder sehr wenig Schadstoff gemessen wird, weil sie außerhalb oder am Rand der Fahne liegen. Die Messstellen im zentralen Bereich der Fahne können dagegen extrem hoch belastet sein. Die Spanne zwischen den Messwerten ist beim Stofftransport daher sehr viel größer als bei der Grundwasserströmung und die Messwerte sind auch meist viel ungleichmäßiger verteilt. Ein Streudiagramm bzw. eine formale Berechnung der mittleren Abweichung sind daher häufig nicht sehr aussagekräftig.

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

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

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

## **8.4 Modell-Test**

Bei einem Modell-Test (früher Validierung genannt) soll untersucht werden, ob es gelingt, mit dem für einen bestimmten Stichtag oder für einen ausgewählten Zeitraum kalibrierten Modell auch die gemessenen Konzentrationen aus einem anderen Zeitraum oder für veränderte Randbedingungen nachzubilden. Zeitlich variable Eingangsgrößen wie Grundwasserneubildung, Randzuflüsse oder Schadstoffeinträge werden dabei entsprechend angepasst.

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

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

## **8.5 Anwendung des Transportmodells**

### **8.5.1 Darstellung des Ist-Zustands**

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

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

Um Missverständnisse zwischen Auftraggebern und Modellierer zu vermeiden, ist es wichtig, dass die Aufgabenstellung für das Transportmodell bereits im Vorfeld klar definiert wird, d.h. es muss deutlich werden, zu welchen Aspekten des Schadstofftransports im Rahmen der Darstellung des Ist-Zustands Aussagen erwartet werden.

### **8.5.2 Prognoseberechnungen**

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

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

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

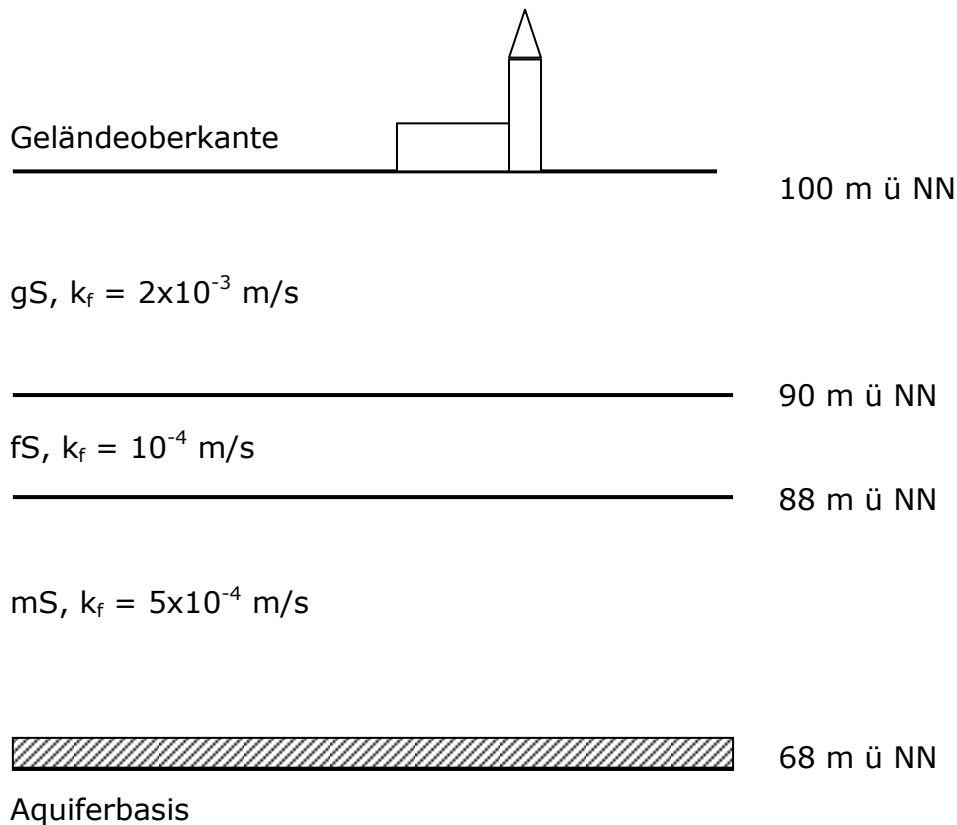
Eine sehr große Unsicherheit besteht bei Prognoseberechnungen fast immer hinsichtlich des mobilisierbaren Schadstoffvorrats im Untergrund. Aufgrund der typischerweise stark heterogenen Schadstoffverteilung wird in vielen Modellen von einem praktisch unbegrenzten Schadstoffvorrat ausgegangen (worst-case Annahme). Eine zuverlässige Prognose zum Rest-Dauer der Schadstoff-Freisetzung im Untergrund ist in der Regel nicht möglich.

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



# Übungsaufgabe zur Transportmodellierung

Die umseitige Abbildung zeigt skizzenhaft das Modellgebiet. Es stellt einen Ausschnitt aus einem hypothetischen Talaquifer dar, der in der Vertikalen folgendermaßen aufgebaut sein soll:



Der Aquifer kann als isotrop angenommen werden, die Grundwasseroberfläche sei ungespannt. Die effektive Porosität betrage 25%, die Grundwasserneubildung 200 mm/a ( $6,3 \times 10^{-9} \text{ m/s}$ ). Der Fluss sei 20 m breit und 4 m tief. Der Wasserstand im Fluss betrage im gesamten Modellgebiet  $h = 97 \text{ m ü NN}$

An der bezeichneten Stelle soll ein Wasserwerksbrunnen mit einer Förderleistung von 10 l/s abgeteuft werden. Der Brunnen soll nur im unteren, mittelsandigen Aquiferbereich verfiltert sein.

Auf der anderen Seite des Flusses befindet sich eine Kontaminationsstelle, an der organische Lösemittel ins Grundwasser gelangen. Die Schadensstelle sei etwa 20 m x 20 m groß. Im oberen, grobsandigen Aquiferbereich wurden dort maximale Schadstoffkonzentrationen im Grundwasser von 50 mg/l gemessen. Der Schadensherd beschränkt sich auf den oberen Aquifer.

Mithilfe von MODFLOW und MT3DMS soll untersucht werden, wie groß das Einzugsgebiet des geplanten Förderbrunnens sein wird. Vor allem soll geprüft werden, ob eine Kontamination des Brunnenwassers durch Schadstoff aus dem gegenüberliegenden Schadensherd möglich ist und wenn ja, mit welchen Schadstoffkonzentrationen im Brunnen zu rechnen ist.

