

Modellgestützte quantifizierende Prognose des organischen und anorganischen Schadstoffeintrages mit dem Sickerwasser in das Grundwasser mittels des numerisch-diskreten Modells TENSIC

Dagmar Mocker, Michael Eckart, Marcel Roscher, Bernd Volland, Rolf Zurl

Zusammenfassung

Nach dem [1] Gesetz zum Schutz vor schädlichen Bodenveränderungen und zur Sanierung von Altlasten (BBodSchG) – Bundes-Bodenschutzgesetz vom 17. März 1998 sind für die Gefahrenbeurteilung für den Wirkungspfad Boden – Grundwasser die im Sickerwasser auftretenden Schadstoffkonzentrationen ausschlaggebend. Als Instrument zur Abschätzung der zu erwartenden Schadstoffeinträge aus altlastentypischen Verdachtsflächen in das Grundwasser ist in Deutschland nach der [2] Bundesbodenschutz- und Altlastenverordnung, Stand: 12.07.1999 (BBodSchV) eine Sickerwasserprognose erforderlich.

Den Ort der Beurteilung für die dabei mit dem Sickerwasser ins Grundwasser gelangenden Schadstofffrachten stellt der Übergangsbereich von der ungesättigten zur gesättigten Bodenzone dar. Auf Grund offener Fragen beim Transport organischer und anorganischer Schadstoffe durch die Aerationzone wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) das Forschungsprojekt „Sickerwasserprognose“ (SI-WAP) ins Leben gerufen.

Im Rahmen dieses BMBF-Verbundforschungsprojektes wurde unter anderem die HPC AG unter Förderkennzeichen 02WP0288 damit beauftragt, ein Modell zur Nachbildung der Strömungs- und Stofftransportprozesse in der Aerationzone zu entwickeln.

Aufbauend auf dem numerisch-diskreten Modell TENSIC, welches ursprünglich für die Nachbildung von Strömungs- und Stofftransportprozessen in Halden und Tailingsponds eingesetzt wurde [3], erfolgte die Adaption des Programms an die Bedürfnisse der Bundesbodenschutzverordnung in der ungesättigten Bodenzone.

Ein wichtiger Aspekt bei der Modellierung von Sickerprozessen ist die realitätsnahe Abbildung der Strömungsverhältnisse in der ungesättigten Bodenzone. Aufgrund von Inhomogenitäten der Bodenmatrix und ständig wechselnden Niederschlagsintensitäten kommt es in der Aerationzone zur Ausbildung von so genannten präferenziellen Abflüssen. Dabei bildet sich im Boden neben dem langsamen, kontinuierlichen Sickerwasserstrom durch die Bodenmatrix eine zweite, schnellere Abflusskomponente auf bevorzugten Strömungsbahnen aus. Eine programmtechnische Nachbildung dieser realen Sickerwasserverhältnisse ist mit herkömmlichen Modellen nur schwer umsetzbar. Schon die Erfassung bzw. Abschätzung

der zeitlich variierenden Grundwasserneubildungsraten sowie sämtlicher Inhomogenitäten in der Bodenmatrix kleinräumiger Bereiche ist nur mit einem großen technischen und zeitlichen Aufwand durchführbar. Deshalb wird die Strömung in TENSIC durch einen stationär aufgeprägten Volumenstrom (mittlere Grundwasserneubildungsrate) beschrieben. Um der unterschiedlichen Verweilzeit der Wasserteilchen und somit deren unterschiedlichen Schadstoffbelastung unter realen Fließverhältnissen aber dennoch Rechnung zu tragen, wurde die einfache stationäre Nachbildung der Strömung in TENSIC erweitert. Es wurde die bisher übliche Unterteilung im Programm in eine „ruhende“ und „strömende“ Phase beibehalten. Die bisher ruhende Phase wurde lediglich mit einer geringen Strömungsgeschwindigkeit belegt. Damit ergibt sich eine „langsam“ und eine „schnell strömende“ flüssige Phase. Über die langsame Phase wird dabei der Teil der Porosität erfasst, welcher zwischen der Tot- und der Haftsättigung der jeweiligen Bodenart liegt. Die schnelle, strömende Phase wird in TENSIC durch den Anteil des Gesamtvolumenstroms beschrieben, welcher sich im Bereich der Haftsättigung bis zur fallspezifischen Sättigungsgrenze bewegt. Durch diese Unterteilung der strömenden flüssigen Phase in „schnell“ und „langsam“ wird eine deutliche Verbesserung der modelltechnischen Nachbildung der realen, natürlichen Sickerverhältnisse in der ungesättigten Bodenzone erreicht.

Der Transport der Schadstoffe wird in TENSIC mit der allgemeinen Stofftransportgleichung beschrieben. Über die wässrige Phase können dabei z. Zt. 27 anorganische sowie 26 organische Komponenten (unter Beachtung des Einflusses der Gasphase) transportiert werden.

Bei den organischen Schadstoffen wurden die 16 EPA-PAK, 4 BTEX-Aromaten, 4 Vertreter der LHKW sowie jeweils ein Summenparameter für die aliphatischen Kohlenwasserstoffe und die phenolischen Verbindungen im Programm integriert.

Bei dem Transport der organischen Transportkomponenten werden neben den Parametern der allgemeinen Stofftransportgleichung (z. B. Diffusion, Dispersion) Sorptions-/Desorptionsprozesse und der mikrobielle Schadstoffabbau berücksichtigt.

Bei den anorganischen Schadstoffen werden aktuell 27 Transportkomponenten in der flüssigen Phase, 2 Komponenten in der Gasphase, 148 Mineralphasen und 179

chemische Spezies in wässriger Lösung im Programm TENSIC berücksichtigt. Hierzu zählen vor allem die Schwermetalle wie Cr, Ni, Pb, Cd, As, Cu, Zn und Hg aber auch die typischen Schadstoffkomponenten des Uranerzbergbaus. Die so genannten Hauptkomponenten des anorganischen Stoffspektrums wie z.B. Sulfat, Chlorid, Nitrat, Carbonat, Ca, Mg, Fe, Al, Mn, Na, K und gelöster Sauerstoff bestimmen vorwiegend das chemische Milieu des Sickerwassers.

Bei der Transportmodellierung der anorganischen Komponenten wird unter Berücksichtigung des geochemischen Backgrounds das chemische Gleichgewicht in der wässrigen Phase (Porenwasser) für jede Modellzelle und zu jedem Prozesszeitschritt gelöst. Dabei werden die Milieuparameter pH-Wert und Redoxpotential sowie die chemische Speziesverteilung durch Lösung eines mehrdimensionalen nichtlinearen Gleichungssystems berechnet. Die Ermittlung der chemischen Speziesverteilung im Porenwasser bildet wiederum die Voraussetzung für die Untersuchung kinetisch kontrollierter Wechselwirkungsprozesse mit der Festphase oder der Gasphase.

Zu diesen Wechselwirkungen zählen Lösungs- und Fällungsprozesse, Adsorptions-/Desorptionsprozesse, Oxidationsreaktionen sowie die Bilanzierung des Sauerstoffs und Kohlendioxids in der flüssigen und gasförmigen Phase.

Die Sorption der Schwermetalle wird in TENSIC durch Oberflächenkomplexbildung an amorphen Hydroxiden ($\text{Fe}(\text{OH})_3$, $\text{Al}(\text{OH})_3$) beschrieben. Dabei wird die Sorption an schwachen und starken Bindungsstellen des Oxidhydrates unterschieden, wobei die Konstanten aus [4] Dzombak & Morel (1990) verwendet werden.

Die im Modell verwendeten Geschwindigkeitskonstanten für bestimmte Reaktionen basieren meist auf Angaben aus der Literatur. Außerdem erfolgte, bei Reaktionen ohne Literaturangaben, eine empirische Ermittlung der kinetischen Parameter durch die Auswertung von Experimenten (Säulenversuche, Sickerwassermessungen).

Im Rahmen des BMBF-Forschungsprojektes wurde eine anwenderfreundliche Programmoberfläche für TENSIC gestaltet. Es wurden bei der Neugestaltung der Programmoberfläche Möglichkeiten integriert, die Ermittlung der Eingangsparameter für den Modellanwender teilweise zu automatisieren. Durch die Verknüpfung von Prä- und Postprozessor mit dem Hauptprogramm hat sich die Bedienung des Modells erheblich verbessert, so dass nunmehr ein vermarktungsfähiges Softwareprodukt entstanden ist.

Prinzipiell können die von TENSIC benötigten Parameter zur Durchführung einer Sickerwasserprognose analytisch bzw. messtechnisch bestimmt werden. Die so gewonnenen Daten werden dann über den Präprozessor eingegeben. Die analytische bzw. messtechnische Bestimmung der notwendigen Strömungs- und Stofftransportparameter liefert meist den besten Parametersatz zur Nachbildung der realen Verhältnisse in der Aerationzone.

Jedoch ist es in der Praxis nicht immer möglich, z. B. für die im Untersuchungsgebiet vorhandenen Bodenarten die notwendigen, bodenphysikalischen Parameter im Labor bestimmen zu lassen.

Auch können, aufgrund finanzieller und zeitlicher Restriktionen, nicht immer Untersuchungen zum Sorptionsverhalten, der mikrobiellen Abbaubarkeit oder der geochemischen und mineralogischen Zusammensetzung der Bodenmatrix durchgeführt werden. Deshalb wurde bei der Entwicklung von TENSIC versucht, dem Anwender die notwendigen Parameter weitestgehend über programminterne Datenbanken bereitzustellen. So können bodenphysikalische Parameter wie Kf-Wert, Porosität oder Feldkapazität für typische Bodenarten aus einer integrierten Datenbank eingelesen werden. Die geochemische Zusammensetzung für aktuell 20 Bodentypen der gemäßigt-humiden Klimazone ist in Form einer Datenbank in TENSIC integriert. Das Programm berechnet die für den Transport der organischen Schadstoffe notwendigen Kd-Werte. Dabei werden die Verteilungskoeffizienten in Abhängigkeit vom organischen Kohlenstoffgehalt und des stoffspezifischen KOC-Wertes berechnet.

Neben der Bereitstellung ausgewählter Parameter in Datenbanken ist die Bereitstellung von Daten aus Analysen, Messungen oder der Literatur weiterhin je nach Kenntnisstand zum Betrachtungsgebiet möglich.

Mit dem Programm TENSIC wurde eine hochwertige Softwarelösung geschaffen, welche sich durch folgende Eigenschaften auszeichnet:

- Realitätsnahe Prognosen der Schadstofffreisetzung und des Transportverhaltens in der ungesättigten Bodenzone
- Berücksichtigung des Schadstoffspektrums der Bundesbodenschutzverordnung für organische und anorganische Schadstoffe
- Berücksichtigung aller wesentlichen chemischen, physikalischen und biologischen Prozesse in der ungesättigten Bodenzone nach Stand der Technik
- Überschaubares Handling der erforderlichen Ausgangsparameter
- Bereitstellung geochemischer und bodenphysikalischer Beispieldatensätze
- Vielfältige grafische und numerische Auswertungsmöglichkeiten für die Modellergebnisse
- Verknüpfung theoretischer und praktischer Untersuchungsergebnisse zum Schadensfall
- Langzeitprognose der Freisetzungs- und Transportprozesse möglich
- Ankopplung der Simulationsergebnisse an klassische Modell Anwendungen möglich

1 Einleitung

Die behördliche Umsetzung des Bundesbodenschutzgesetzes ([1] BBodSchG, 1998) benötigt Informationen über die ausgehenden Gefahren von Altlasten bzw. altlastverdächtigen Standorten für das Grundwasser. Als Instrument zur Abschätzung der zu erwartenden Schadstoffeinträge aus diesen Verdachtsflächen über

das Sickerwasser ins Grundwasser ist nach der [2] BBodSchV (1999) eine Sickerwasserprognose erforderlich.

Auf Grund offener Fragen bei der Freisetzung sowie beim Transport organischer und anorganischer Schadstoffe durch die ungesättigte in die gesättigte Zone wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) das Forschungsprojekt Sickerwasserprognose (SIWAP) ins Leben gerufen.

Im Rahmen dieses Verbundforschungsprojektes sollten die Projektteilnehmer Methoden und Verfahren entwickeln, welche die gesetzlichen Bestimmungen zur Durchführung einer Sickerwasserprognose auch in der Praxis umsetzbar machen. Die Projektteilnehmer widmeten sich dabei auf der einen Seite der Entwicklung von Verfahren zur Ermittlung der Quellstärke von Schadstoffen und auf der anderen Seite der Ausarbeitung von Methoden zur Abschätzung des Stofftransportes in der Aerationzone (Transportprognose).

Eine Möglichkeit der Beschreibung der in der ungesättigten Zone ablaufenden Transportprozesse besteht in der Modellierung dieser Vorgänge. Mit diesen Transportmodellierungen werden die Ursachen für das Übertreten von im Boden gespeicherten Schadstoffen in das Grundwasser beschrieben.

Das Modell TENSIC stellt ein zur Durchführung der Strömungs- und Stofftransportmodellierungen in der Aerationzone einsetzbares Programm dar. Es wurde zur Berechnung der langzeitlichen Freisetzung von Schadstoffen entwickelt, die sich infolge geochemischer Prozesse in Bergbauhalden und in der Aerationzone bilden. Es handelt sich dabei um ein numerisch-diskretes Modell, d. h. die Lösung der Gleichungssysteme erfolgt auf numerischem Wege unter der Zerlegung (Diskretisierung) des Strömungsraumes und der Zeit in endliche Stufen. TENSIC stellt ein gekoppeltes Zweiphasenströmungs – Mehrmigrantenstofftransportmodell der Aerationzone dar, welches es erlaubt, Langzeitprognosen über die Entwicklung der Sickerwasserqualität unter Berücksichtigung des Festphase und den Migrationsbedingungen der Gasphase zu erstellen.

Das Programm berechnet die raumzeitliche Druck-, Sättigungs- und Konzentrationsentwicklung im porösen Körper.

Zur Lösung des Problems werden die Gleichungen der Zweiphasenströmung „Gas-Wasser“ verwendet. Aufbauend auf dem aus Sättigung und Druck berechneten Geschwindigkeitsfeld wird die Stofftransportgleichung (Konvektions-Diffusionsgleichung) parallel für mehrere Komponenten (den so genannten Tenaden) gleichzeitig gelöst.

Ursprünglich wurde TENSIC für die Modellierung von Sickerwasserprozessen in Halden und Tailingsponds des Uranerzbergbaus entwickelt und auch über mehr als 10 Jahre erfolgreich eingesetzt. Aus diesem Grund umfasste das Schadstoffspektrum vorwiegend bergbauspezifische Komponenten.

Das gesamte Recht der technischen Sicherheit und des Arbeitsschutzes

Schmatz/Nöthlichs

SICHERHEITSTECHNIK^{digital}

Fachkompetenz und Aktualität des 17-bändigen Standardwerks jetzt auf einer CD-ROM.



Ergänzbare Sammlung der Vorschriften nebst Erläuterungen für Unternehmen und Ingenieure

Begründet von **Dr. Hans Schmatz** †, ehemals Ministerialdirigent im Bayerischen Staatsministerium für Arbeit und Sozialordnung, und **Matthias Nöthlichs** †, ehemals Ministerialdirigent im Bundesministerium für Arbeit und Sozialordnung

Nutzen Sie die Vorteile des digitalen Werkes:

- Mit einem Mausklick 23.000 Druckseiten sofort im Zugriff
- Alle Inhalte auf einer CD-ROM
- Aktuell durch 4 Updates im Jahr
- Komfortable Suche
- Sekundenschnelle Treffer und vielseitige Suchmöglichkeiten dank leistungsfähiger Verity-Search-Engine
- Bei Bedarf flexibler Bezug von Einzelmodulen

Intranetversion – unternehmensweit im Einsatz

- Zentrale Verwaltung des Datenbestandes und der Aktualisierungen
- Skalierbarkeit durch Anpassung der Lizenzgröße
- Integrierte Lizenzverwaltung
- Preisvorteil durch Mehrfachlizenzierung

Fordern Sie noch heute Ihr persönliches Angebot an:
www.SICHERHEITSTECHNIKdigital.info

Erich Schmidt Verlag GmbH & Co.

Genthiner Str. 30 G – 10785 Berlin

Telefon: 030/25 00 85-460 – Telefax: 030/25 00 85-275

Abo-Vertrieb@ESVmedien.de

ES^{digital}

ERICH SCHMIDT VERLAG

Im Rahmen des Verbundforschungsprojektes „Sickerwasserprognose“ des Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) wurde das Modell, neben bisher noch nicht berücksichtigten anorganischen Schadstoffen der [2] BBodSchV (1999), um organische Verbindungen beim Schadstofftransport erweitert. Durch diese Erweiterung kann TENSIC nun auch neben dem Einsatz bei Halden- und Tailingsmodellierung im Bergbau für die Prognose des Transports typischer Altlastenschadensfälle in der ungesättigten Bodenzone eingesetzt werden. Aktuell werden im Programm 26 organische Schadstoffe aus dem Altlastenspektrum, 27 anorganische Transportkomponenten in der flüssigen Phase, 2 Komponenten in der Gasphase, 148 Mineralphasen und 179 chemische Spezies in wässriger Lösung berücksichtigt.

Zwischen den Migranten innerhalb der flüssigen, aber auch zwischen flüssiger, gasförmiger und fester Phase können Wechselwirkungen bestehen. Es können z. B. Auflösungs- und Fällungsprozesse von Mineralphasen stattfinden, die zu einer Veränderung der Konzentration der strömenden Komponenten führen. Weiterhin sind solche transportrelevanten Größen wie Dispersion, Diffusion, Sorption und der mikrobielle Abbau von Organika implementiert.

Für eine realitätsnahe Nachbildung des Sickerprozesses in der ungesättigten Bodenzone ist es weiterhin erforderlich, solche Effekte wie Instationarität der Niederschläge oder präferenzielle Fließwege in der inhomogenen Bodenmatrix zu erfassen. Diese präferenziellen Abflüsse werden in TENISC durch zwei strömende Phasen beschrieben. Um die bisher übliche Unterteilung in eine „ruhende“ und eine „strömende“ Phase im Programm beizubehalten und keine neue Phase einzuführen, wird die bisher ruhende Phase mit einer geringen Strömungsgeschwindigkeit belegt. Damit ergibt sich eine „langsam“ und eine „schnell strömende“ flüssige Phase. Der Anteil der jeweiligen Phase am Gesamtvolumenstrom ist vom jeweiligen Boden abhängig und kann durch Auswertung von Sickerwasserganglinien empirisch ermittelt werden.

Zwischen den beiden strömenden Phasen finden Wechselwirkungen in Form von Querdiffusion statt. Je größer dabei der Koeffizient der Querdiffusion, umso gleichmäßiger ist der Transport der Schadstoffe in beiden Phasen.

Das Ziel der Anwendung des Programms TENSIC besteht in der Erstellung realitätsnaher Prognosen der zu erwartenden Sickerwassermenge und -konzentration im Boden am Ort der Beurteilung (Übergang ungesättigte – gesättigte Verhältnisse).

2 Modellbeschreibung

2.1 Nachbildung der Strömungsverhältnisse in der ungesättigten Bodenzone

Zur Berechnung der Mengenströmung infolge der raumzeitlichen Druck- und Sättigungsentwicklung im porösen Körper werden in TENSIC die Gleichungen der Zweiphasenströmung „Gas-Wasser“ (ähnlich

der RICHARDS-Gleichung) verwendet. Aufbauend auf dem aus Sättigung und Druck berechneten Geschwindigkeitsfeld wird für jeden Zeitschritt die Stofftransportgleichung (Konvektions-Diffusionsgleichung) parallel für mehrere Komponenten (den so genannten Tenaden) gleichzeitig gelöst.

Eine ausführliche Zusammenstellung der verwendeten Gleichungen der Mengenströmung und des Stofftransportes, deren Diskretisierung und numerische Lösung sind in [5] Eckart (1988) zusammengestellt.

Bei der Berechnung der Sickerwasserströmung wird der nachfolgende Rechenalgorithmus durchlaufen.

Aus der Formel 1 (Kontinuitätsgleichung zur Erhaltung der Masse) kann unter Berücksichtigung der Konvektion (Gesetz von DARCY) die Formel 2 abgeleitet werden, welche für die Berechnung der Druckverteilung in der flüssigen Phase benutzt wird.

Formel 1 (Kontinuitätsgleichung):

$$\frac{\partial(\emptyset \cdot \rho_w \cdot S_w)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial s} \cdot (u \cdot \rho_w) + m_v$$

Formel 2 (Darcy-Gesetz in Kontinuitätsgleichung):

$$\frac{\partial(\emptyset \cdot \rho_w \cdot S_w)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial s} \cdot \rho_w \cdot \frac{k}{\eta_w} \cdot \left(\frac{\partial p_w}{\partial s} - \rho_w \cdot g \cdot \cos \varphi \right) + m_v$$

Zur Berücksichtigung der ungesättigten Verhältnisse wird die effektive hydraulische Leitfähigkeit k aus der absoluten hydraulischen Leitfähigkeit ka, welche bei einer vollständigen Fluidsättigung ermittelt wird und der sättigungsabhängigen relativen Durchlässigkeit kr berechnet.

Formel 3: Effektive Durchlässigkeit

$$k = k_a \cdot k_r$$

Die relative Durchlässigkeit ist sättigungsabhängig und wird nach der folgenden Beziehung berechnet:

Formel 4: Relative Durchlässigkeit

$$k_r = \left(\frac{S_w - S_{haft}}{1 - S_{haft}} \right)^\alpha$$

Der Speicherterm der Formel 2 wird folgendermaßen entwickelt:

Formel 5:

$$\emptyset \cdot \frac{\partial S_w}{\partial t} = \emptyset \cdot \frac{\partial S_w}{\partial p_c} \cdot \frac{\partial p_c}{\partial t} = \emptyset \cdot \frac{\partial S_w}{\partial p_c} \cdot \frac{\partial (p_g - p_w)}{\partial t}$$

| | | |
|--------------------|--------------------------------|---------------------|
| S | ... Sättigung | [1] |
| S _{haft} | ... Haftsättigung | [1] |
| k | ... effektive Durchlässigkeit | [m/s] |
| kr | ... relative Durchlässigkeit | [1] |
| ∅ | ... Porosität | [1] |
| p _{c/w/g} | ... Kapillar-/Wasser-/Gasdruck | [Pa] |
| η | ... dynamische Viskosität | [Pa • s] |
| u | ... Darcygeschwindigkeit | [m/s] |
| φ | ... Winkel zur Vertikalen | [grad] |
| m _v | ... Speicherterm | [1/s] |
| g | ... Gravitationskonstante | [m/s ²] |

| | | |
|----------|--|----------------------|
| ρ | ... Dichte | [g/cm ³] |
| s | ... Strömungsweg | [m] |
| α | ... Exponent zur relativen Durchlässigkeit (substratabhängig) | [1] |
| w, g | ... Index für Wasser, Gas | |

Durch die Erweiterung des Speicherterms mit dem Kapillardruck und die Einführung der Beziehung

Formel 6

$$p_c = p_g - p_w$$

(Kapillardruck ist gleich der Differenz der Phasendrucke Gas-Wasser) wird die Verbindung zu den Bilanzgleichungen der Gasphase hergestellt.

Als Triebkraft für die Gasphase wurde die Sättigungsänderung der flüssigen Phase nach (Gassättigung ist gleich die Differenz aus 1 minus Wassersättigung)

Formel 7

$$S_g = 1 - S_w$$

in die Bilanzgleichung der Gasphase eingesetzt:

Formel 8:

$$\frac{\partial(\rho_g \cdot S_g)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial s} \cdot \rho_g \cdot \frac{k}{\eta_g} \cdot \left(\frac{\partial p_g}{\partial s} - \rho_g \cdot g \cdot \cos \varphi \right) + m_v$$

mit $\frac{\partial S_g}{\partial t} = - \frac{\partial S_w}{\partial t}$ Formel 9

Nach einer Berechnung der Drücke der flüssigen und der Gasphase wird die Sättigungsänderung der flüssigen Phase berechnet. Dafür wird die Bilanzgleichung (Formel 2) ohne weitere Umstellung des Speicherterms verwendet.

Der beschriebene Zyklus zur Berechnung der Sättigungsverhältnisse wird innerhalb eines Strömungszeitschrittes so lange durchlaufen, bis ein programminternes Gütekriterium erfüllt ist.

Für eine realitätsnahe Nachbildung des Sickerprozesses in der ungesättigten Bodenzone ist es weiterhin erforderlich, solche Effekte wie Instationarität der Niederschläge oder präferenzielle Fließwege in der inhomogenen Bodenmatrix zu erfassen. Diese präferenziellen Abflüsse werden in TENISC durch zwei strömende Phasen beschrieben. Dazu wird der Gesamtvolumenstrom in eine „langsam“ und eine „schnell“ fließende Phase aufgeteilt. Dabei entspricht der langsame Fluss dem Sättigungsanteil zwischen Tot- und Haftsättigung. Liegt eine größere Wassersättigung in einer Bodenschicht als die typische Haftsättigung der entsprechenden Bodenart vor, so wird dieser Anteil des Gesamtvolumenstroms im Modell TENSIC der schnellen strömenden Phase zugeordnet. Der Anteil der jeweiligen Phase am Gesamtvolumenstrom ist vom jeweiligen Boden abhängig und kann z. B. durch Auswertung von Sickerwasserganglinien analytisch ermittelt werden.

2.2 Berücksichtigte Stofftransportmechanismen

Nachdem durch Lösung der Gleichungen der Mehrphasenströmung die Transportgeschwindigkeiten vorliegen, müssen die Gleichungen des Stofftransportes für die oben genannten strömenden Komponenten gelöst werden. Der Transport der Schadstoffe in der flüssigen Phase wird in TENSIC mit der allgemeinen Stofftransportgleichung beschrieben.

Formel 10: Allgemeine Stofftransportgleichung

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) = -u \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial s} \right) + D_L \cdot \left(\frac{\partial^2 C}{\partial s^2} \right) - \left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)$$

$(\partial C / \partial t)_s$... ortsgebundene Stoffkonzentrationsänderung in der flüssigen Phase in Abhängigkeit von der Zeit

$-u \cdot (\partial C / \partial s)_t$... Konvektionsterm

$D_L \cdot (\partial^2 C / \partial s^2)_t$... Diffusions-Dispersionsterm

$(\partial q / \partial t)_s$... ortsgebundener Quell-Senken-Term in Abhängigkeit von der Zeit

Weiterhin werden im Modell die Festphase und die Gasphase beim Stofftransport in der ungesättigten Bodenzone berücksichtigt. Das Schema in der Abbildung 1 zeigt die im Programm integrierten Phasen mit den dazugehörigen Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Transporteinheiten.

Als Ergebnis der Lösung der Stofftransportgleichung erhält man die örtlich-zeitliche Verteilung einer jeden Einzelkonzentration.

Zur Beschreibung des Masseaustausches zwischen den beiden strömenden Phasen wird das Prinzip der Querdiffusion benutzt. Diese wird über das 1. Fick'sche Gesetz beschrieben. Hierbei stellt der Massestrom zwischen den beiden Phasen (langsam à schnell oder schnell à langsam) jeweils eine Senke bzw. Quelle für die jeweilige Phase dar und leistet einen Beitrag zum Quell-Senken-Term n_v :

Formel 11

$$n_v = k_{qdiff} \cdot (c_{i-schnell} - c_{i-lang})$$

$c_{i-schnell}$... Konzentration der strömenden flüssigen Phase [mol/L]

c_{i-lang} ... Konzentration der ruhenden Phase [mol/L]

k_{qdiff} ... Konstante der Querdiffusion [1/s]

Mit der flüssigen Phase in TENSIC können z. Zt. 27 anorganische sowie 26 organische Komponenten gleichzeitig (unter Beachtung des Einflusses der Gasphase und des geochemischen Milieus) transportiert werden. Bei der Transportmodellierung der anorganischen Komponenten wird unter Berücksichtigung des geochemischen Backgrounds das chemische Gleichgewicht in der wässrigen Phase (Porenwasser) für jede Modellzelle und zu jedem Prozesszeitschritt berechnet. Dabei werden die Milieuparameter pH-Wert und Redoxpotential sowie die chemische Speziesverteilung durch Lösung eines mehrdimensionalen nichtlinearen Gleichungssystems bestimmt. Die Ermittlung der

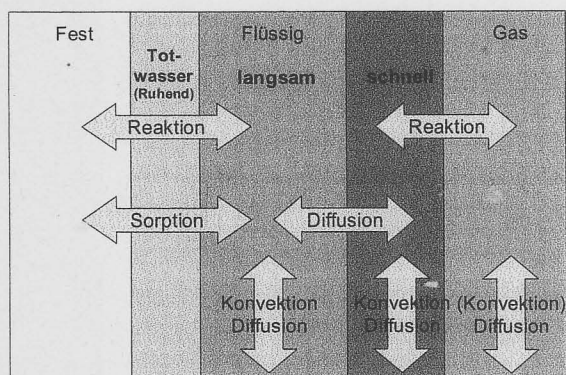


Abbildung 1:

Schematische Darstellung der Transporteinheiten und Wechselwirkungen im numerisch-diskreten Modell TENSIC

chemischen Speziesverteilung im Porenwasser bildet wiederum die Voraussetzung für die Untersuchung kinetisch kontrollierter Wechselwirkungsprozesse mit der Festphase oder der Gasphase. Zu diesen Wechselwirkungen zählen:

- Lösungs- und Fällungsprozesse
- Adsorptions-/Desorptionsprozesse
- Oxidationsreaktionen
- Bilanzierung des Sauerstoffs und Kohlendioxids in der flüssigen und gasförmigen Phase.

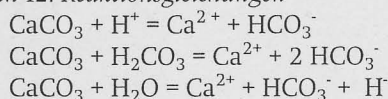
Im Gegensatz zu anderen Modellen stehen im Modell TENSIC die verschiedenen Modellzellen bezüglich der Gasphase untereinander in Verbindung. Die Zusammensetzung der Gasphase wird gleichzeitig durch die Wechselwirkung mit der flüssigen Phase in der einzelnen Modellzelle (Henry-Austausch, Veränderung der Konzentrationen von Sauerstoff und Kohlendioxid durch anorganische und organische chemische Reaktionen) als auch durch den konvektiven Gastransport beeinflusst.

Die im Modell verwendeten Geschwindigkeitskonstanten für bestimmte Reaktionen basieren meist auf Angaben aus der Literatur. Außerdem erfolgte, bei Reaktionen ohne Literaturangaben, eine empirische Ermittlung der kinetischen Parameter durch die Anpassung an Experimente (Säulenversuche, Sickerwassermessungen, ...).

Als Beispiel für die Erfassung der Wechselwirkungsprozesse mit der Festphase wird nachfolgend die kinetische Behandlung der Karbonatumsatzung im Programm beschrieben:

pH-abhängige Auflösung bzw. Fällung von Karbonaten [6] Plumer et al, 1978; [7] Plumer et al, 1979)

Formeln 12: Reaktionsgleichungen



Formel 13: Reaktionsrate Calzit

$$R_{\text{Cal}} = (k_1 \cdot [\text{H}^+] + k_2 \cdot [\text{H}_2\text{CO}_3] + k_3 \cdot [\text{H}_2\text{O}]) \cdot (1 - \text{IAP} / L_{\text{CaCO}_3})$$

Dimension von R: $[\text{mmol cm}^{-2} \text{s}^{-1}]$

$$\log k_1 = 0.198 - 444 / T$$

$$\log k_2 = 2.84 - 2177 / T$$

$$\text{wenn } T < 298 : \log k_3 = -5.86 - 317 / T$$

$$\text{wenn } T > 298 : \log k_3 = -1.1 - 1737 / T$$

T ... Temperatur in Kelvin, $[\text{H}_2\text{O}] = 1$

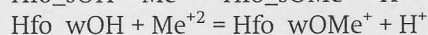
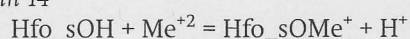
IAP ... Ionenaktivitätsprodukt

L_{CaCO_3} ... Löslichkeitsprodukt von Kalzit

Sorption von Schwermetallen

Die Sorption der Schwermetalle wird in TENSIC durch Oberflächenkomplexbildung an amorphen Hydroxiden ($\text{Fe}(\text{OH})_3$, $\text{Al}(\text{OH})_3$) beschrieben. Dabei wird die Sorption an schwachen und starken Bindungsstellen des Oxidhydrates unterschieden, wobei die Konstanten aus [4] Dzombak & Morel (1990) verwendet werden.

Formeln 14



Hfo_sOH ... starke Bindungsstellen Oxidhydrat

Hfo_wOH ... schwache Bindungsstellen Oxidhydrat

(Hfo: hydrated ferric oxid)

Bei der Modellierung des Stofftransportes von organischen Komponenten sind neben dem konvektiven und diffusiven Schadstofftransfer, die Adsorptions- / Desorptionsprozesse und der mikrobielle Schadstoffabbau zu beachten.

Kd-Wert-Ermittlung

Die Bestimmung der Verteilungskoeffizienten zwischen der festen und der flüssigen Phase erfolgt in TENSIC für organische Stoffe in Abhängigkeit vom organischen Kohlenstoffgehalt des Bodens. Nach [8] KARICKHOFF (1981) lässt sich der Kd-Wert einer organischen Verbindung wie folgt ermitteln:

Formel 15

$$K_d = \frac{C_{\text{org}} \cdot K_{\text{OC}}}{100}$$

K_d ... Verteilungskoeffizient zwischen der festen und flüssigen Phase [L/kg]

C_{org} ... Anteil des organischen Kohlenstoffes im Boden [%]

K_{OC} ... Verteilungskoeffizient einer organischen Verbindung in der reinen organischen Kohlenstoffphase Octanol [L/kg]

Der K_{OC} -Wert stellt dabei eine stoff- und temperaturabhängige Konstante dar, welche aus der entsprechenden Literatur entnommen werden kann.

Die K_{OC} -Werte der einzelnen Stoffe werden programmintern mit den bodenartabhängigen organischen Kohlenstoffgehalt multipliziert. Die sich ergebenden Kd-Werte fließen anschließend in den Quellsenkter der allgemeinen Stofftransportgleichung ein.

Mikrobieller Schadstoffabbau

Eine weitere Größe, welche im Quell-Senken-Term der allgemeinen Stofftransportgleichung mit einfließt, ist der mikrobielle Schadstoffabbau der organischen Verbindungen. In TENSIC wird dabei nur der Abbau unter oxidativen Bedingungen berücksichtigt, da die Verstoffwechselung der Organika ohne Sauerstoff bedeutend langsamer abläuft und damit eine eher untergeordnete Rolle spielt. Auch wird im Programm von einer vollständigen Mineralisation der organischen Stoffe zu Kohlendioxid und Wasser ausgegangen. Die Bildung von Metaboliten wird momentan noch nicht in TENSIC berücksichtigt. Programmtechnisch wird der mikrobielle Abbau in TENSIC anhand der beiden nachfolgenden Gleichungen erfasst:

Formel 16

$$MA = c_i(k) \cdot \mu_p(i,k) \cdot Fak_{O_2}(k)$$

mit Formel 17

$$Fak_{O_2}(k) = \frac{c_{O_2-real}(k)}{c_{O_2-max}(k)}$$

- MA

... mikrobieller Abbau [mg/L · s]
- $c_i(k)$

... Konzentration des Stoffes i in der Zelle k [mg/L]
- $\mu_{f1}(i, k)$

...stoff-und zellenabhängige, mikrobielle Abbaukonstante [1/s]
- $Fak_{O_2}(k)$

... sauerstoffabhängiger Faktor [-]
- $c_{O_2-real}(k)$

... reale, aktuelle Konzentration von in Wasser gelöstem Sauerstoff in der Zelle k [mg/L]
- $c_{O_2-max}(k)$

... maximal mögliche Konzentration von in Wasser gelöstem Sauerstoff in der Zelle k (bei 10°C Wassertemperatur) [mg/L]

2.3 Schadstoffspektrum

2.3.1 Anorganika

Bei den anorganischen Schadstoffen werden aktuell 27 Transportkomponenten in der flüssigen Phase, 2 Komponenten in der Gasphase, 148 Mineralphasen und 179 chemische Spezies in wässriger Lösung im Programm TENSIC berücksichtigt. Es zählen dazu vor allem die Schwermetalle wie Cr, Ni, Pb, Cd, As, Cu, Zn und Hg und zusätzlich die typischen Schadstoffkomponenten des Uranerzbergbaus. Die so genannten Hauptkomponenten des anorganischen Stoffspektrums wie z. B. Sulfat, Chlorid, Nitrat, Carbonat, Ca, Mg, Fe, Al, Mn, Na, K und gelöster Sauerstoff bestimmen vorwiegend das chemische Milieu des Sickerwassers.

2.3.2 Organika

Bei den organischen Schadstoffen wurden insgesamt 26 altlastentypische Verbindungen im Programm TENSIC integriert. Neben 20 Einzelverbindungen mono- und polyzyklischer Aromaten wurden weiterhin vier Vertreter der LHKW's sowie die Summenparameter für die Phenole und die aliphatischen Kohlenwasserstoffe in das Modell aufgenommen. In der Tabelle 1 sind die

Tabelle 1:

Übersicht über die in TENSIC integrierten organischen Tenaden

| Stoffgruppe | Einzelverbindungen |
|---------------|---|
| BTEX-Aromaten | Benzol, Toluol, Ethylbenzol, Xylol (Summe o-, m-, p-Xylol) |
| 16 EPA-PAK | Naphthalin, Acenaphthylen, Acenaphthen, Fluoren, Phenathren, Anthracen, Fluoranthen, Pyren, Benz(a)anthracen, Chrysen, Benzo(b)fluoranthen, Benzo(k)fluoranthen, Benzo(a)pyren, Indeno(1, 2, 3-cd)pyren, Dibenz(a, h)anthracen, Benzo(ghi)perylen |
| LHKW | Vinylchlorid, Dichlorethen, Trichlorethen, Tetrachlorethen |
| MKW | Summenparameter |
| Phenol | Summenparameter |

integrierten Stoffgruppen mit den dazugehörigen Einzelverbindungen zusammengefasst.

2.4 Aufbau einer Bodendatenbank

Im Rahmen des Verbundforschungsprojektes „Sickerwasserprognose“ wurde damit begonnen, eine Bodendatenbank in das Modell TENSIC zu integrieren. In dieser Bodendatenbank sind zum einem die physikalischen Bodenparameter, wie z. B. Feldkapazität (= Haft sättigung), Totwasseranteil oder kf-Wert der verfügbaren natürlichen Bodenarten enthalten. Diese Parameter werden von TENSIC zur Berechnung des Strömungsfeldes benötigt. Die Daten für die einzelnen Parameter sind bereits in HELP ([9] SCHROEDER & BERGER, 2002) bzw. in der Bodenkundlichen Kartieranleitung (1996) [10] zusammengefasst und verifiziert. Diese konnten somit direkt aus diesen beiden Literaturquellen übernommen werden. Durch die Bereitstellung der wichtigsten strömungsrelevanten Parameter in einer Datenbank wird der Umgang mit TENSIC stark vereinfacht, da die benötigten Bodenkennwerte bei der Dateneingabe einer Modellierung aus der Datenbank einfach nur noch eingelesen werden müssen.

Neben den physikalischen Bodenparametern sind in dieser Datenbank die Werte der chemischen und mineralogischen Zusammensetzung der 14 bedeutendsten und am weitesten in Deutschland verbreiteten Bodentypen enthalten. In Verbindung mit einer Diplomarbeit an der TU Bergakademie Freiberg wurde zur Datenbeschaffung eine Literaturrecherche über die chemisch-mineralogische Beschaffenheit der einzelnen Bodentypen durchgeführt. Durch die Bereitstellung der Chemie- und Mineralogiedaten in einer programminternen Datenbank kann somit der geochemische Background des Untersuchungsgebietes bei der Modellierung mit TENSIC für natürliche Böden weitestgehend berücksichtigt werden. Dadurch werden gerade bei anorganischen Schadensfällen realistischere Ergebnisse bei der Nachbildung vor allem

von Transportprozessen in der ungesättigten Bodenzone überhaupt erst möglich.

2.5 Programmoberfläche

Neben der fachlichen Aufwertung des Modells wurde im Rahmen des Forschungsprojektes die Bedienung des Modells durch die Gestaltung einer anwenderfreundlichen Programmoberfläche deutlich verbessert. So schaffen eine übersichtliche Projektsteuerung, die unterstützte Dateneingabe z. T. über Schnittstellen, das Modellierungsfenster und eine umfangreiche Datenauswertung eine anwenderfreundliches Softwareprodukt. Auch führen Vorgaben von Parametern in integrierten Datenbanken zu einer erheblichen Erleichterung des Präprozessings.

2.6 Fallbeispiele

2.6.1 Nachbildung eines Tracerversuches im Lysimeter Waldfeucht

Nach der ersten Validierung des Modells an einem Säulenversuch unter stationären hydrostatischen Bedingungen folgten Beispielrechnungen für instationäre Verhältnisse. Dabei galt es vor allem die Nachbildung des Strömungsverhaltens in der ungesättigten Bodenzone zu realisieren. In Folge dieser Zielstellung wurden die Ergebnisse von Lysimeterversuchen aus der Literatur herangezogen und versucht, die gemessenen Sickerwasserraten über die Zeit mit TENSIC zu reproduzieren. Für ein ausgewähltes Beispiel ist hier die Nachbildung des realen Strömungsverhaltens in einem Lysimeter mit dem Modell TENSIC dargestellt. Im Rahmen eines Projektes des LUA Nordrhein-Westfalens und der DMT GmbH wurden auf der Lysimeterstation Waldfeucht Untersuchungen zur Mobilisierbarkeit von PAK in der ungesättigten Bodenzone für zwei unterschiedliche Böden durchgeführt. Im Rahmen der Versuchsdurchführung wurde zur Ermittlung der Sickerwasserrate Kaliumbromid als Tracer auf die beiden verwendeten Lysimeter aufgegeben. Die beobachtete Austragskurve von Bromid in dem Lysimeter mit gewachsenen Boden diente zur Validierung des Strömungsmodells.

a) Ableitung der notwendigen Modellparameter

Die für die Modellierung verwendeten Parameter stammen größtenteils aus den Aufzeichnungen zur Durchführung der Lysimeterversuche. Nur die bodenphysikalischen Parameter wie z. B. Feldkapazität mussten für die einzelnen Bodenarten aus der Literatur entnommen werden. Die verwendeten Modellparameter zur Nachbildung des Lysimeterversuches für gewachsenen Boden sind in der Tabelle 2 zusammengefasst.

b) Modellierungsergebnisse

Mit den in der Tabelle 2 aufgeführten Parametern wurde eine Modellrechnung des reinen Tracertransportes in dem Lysimeter durchgeführt. Das Ergebnis der Modellierung wurde zum Vergleich der gemessenen Durchbruchskurve für das Bromid gegenüberge-

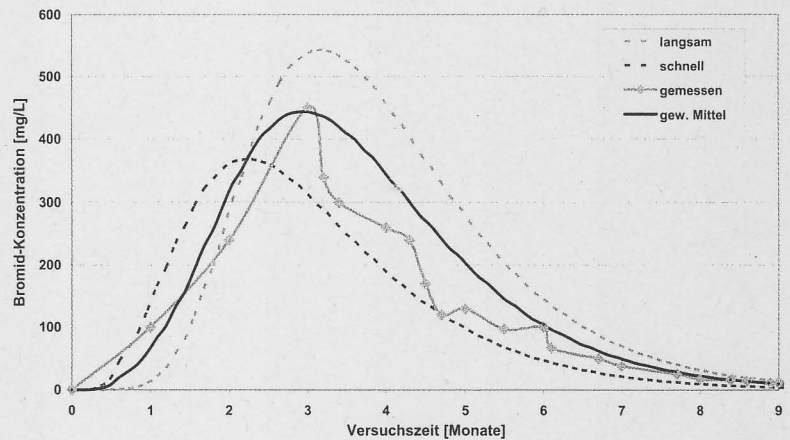
Tabelle 2:
Verwendete Modellparameter für die Nachmodellierung des Tracerversuches

| Parameter | Dimension | Gew. Boden | Filterquarz |
|---|-------------------|------------|---------------------|
| Versuchsdauer | Monate | 12 | |
| Strömungsraumlänge | m | 1,50 | |
| Darcygeschwindigkeit | m/s | 2,275E-08 | |
| T | % | 0,0 | XXX |
| fU | % | 2,4 | XXX |
| mU | % | 11,0 | XXX |
| gU | % | 74,1 | XXX |
| fS | % | 5,7 | XXX |
| mS | % | 3,7 | XXX |
| gS, G | % | 3,1 | 100 |
| Bodenart | [-] | Su4 | gS, G |
| Porosität | [1] | 0,462 | 0,32 – 0,44 |
| Lagerungsdichte | Ld | 3 | 3 |
| TOC | % | 3,3 | 0,01 |
| k _r -Wert | m/s | 1,85E-08 | 3,50E-02 – 5,00E-04 |
| Haftsättigung | [1] | 0,375 | 0,055 – 0,200 |
| Totporosität | [1] | 0,11 | 0,010 – 0,030 |
| Dispersivität | m | 0,1 | |
| Diffusionskoeffizient | m ³ /s | 2,00E-09 | 2,00E-09 |
| Querdiffusion zw. langsamer und schneller Phase | m ³ /s | 8,00E-09 | 1,00E-09 – 1,00E-10 |

stellt. Die modellierten Ergebnisse und die gemessene Kurve sind in der Abbildung 2 dargestellt. Durch die Unterteilung des Sickerwasserstromes im Modell TENSIC in eine schnelle und eine langsame flüssige Phase verteilt sich auch der Stofftransport (in diesem Fall Bromid) auf die beiden Phasen. In der Praxis ist es aber am Ort der Beurteilung nicht möglich, eine Differenzierung der gemessenen Stoffkonzentrationen vorzunehmen. Es wird nur eine Austragskurve des Stoffes über die Zeit gemessen, welche keine quantitativen Rückschlüsse auf die Art und Weise (über präferenzuelle Fließanteile oder über den Sickerwasserstrom durch die kompakte Bodenmatrix) des Stoffeintrages zulässt. Um die Kurve der gemessenen Konzentration für Bromid in der Abbildung 2 mit den Modellierungsergebnissen vergleichen zu können ist es erforderlich, das gewichtete Mittel aus der Konzentration in der schnellen und langsamen Phase der Modellierungsergebnisse über die Zeit zu bilden. Beim Vergleich der Durchbruchskurve für das gewichtete Mittel mit der gemessenen Kurve für den Tracer Bromid wird ersichtlich, dass TENSIC in der Lage ist das Wesen des realen Transportes gut nachzubilden. Sowohl der Trend des Kurvenverlaufes als auch die maximal gemessene Bromidkonzentration nach ca.

Abbildung 2:

Nachbildung eines Tracerversuchs in einem Lysimeter für einen „Gewachsenen Boden“ (Uu, fmG2 - 58 % langsame und 42 % schnelle Fließanteile)



3 Monaten sind mit dem numerisch-diskreten Modell reproduzierbar.

2.6.2 TZW – Säulenelutionsversuch

2.6.2.1 Kurzbeschreibung des verwendeten Fallbeispiels

Für eine Validierung des Modells wurde ein Säulenelutionsversuch des Technologiezentrums Wasser (TZW) Karlsruhe herangezogen. Dieser Versuch der Arbeitsgruppe um Herrn Dr. Lange und Herrn Dr. Stien diente zur Ermittlung der Quellstärke von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen unter der Anwendung des Verfahrens nach DIN V 19736. Als kontaminiertes Material wurde ein mit PAK belasteter Bauschutt in die Säule eingebracht. Oberhalb und unterhalb der Kontaminationsschicht verwendete die Arbeitsgruppe

Quarzkies als Filtermaterial, um den partikulären Austrag mit dem durchströmenden Wasser zu unterbinden. Durch Anlegen eines Unterdruckes wurde für eine Versuchsdauer von 30 Tagen eine konstante Flussrate von der Säulenunterkante zur Säulenoberkante gemäß der DIN-Vorschrift eingestellt. Während der Versuchsdauer erfolgte eine tägliche Messung der PAK-Konzentrationen im Säuleneluat.

2.6.2.2 Ableitung der notwendigen Modellparameter

Die für die Nachmodellierung notwendigen Parameter wurden größtenteils im Säulenversuch bestimmt und konnten somit direkt ins Modell übernommen werden. Die noch fehlenden Größen für die Modellierung (wie. z. B. bodenphysikalische Parameter oder K_d -Werte) wurden aus der Literatur abgeleitet. Die verwendeten Modellparameter sind in Tabelle 3 und Tabelle 4 zusammengefasst.

2.6.2.3 Modelladaption und Darstellung der Modellergebnisse

Aufgrund der abweichenden Literaturangaben für die sorptionsbeeinflussenden Parameter wurden mit den jeweiligen Verteilungskoeffizienten und Ausgangskonzentrationen Modellierungen für einzelnen Parameteransätze im Sinne einer Sensitivitätsanalyse durchgeführt, um den Einfluss der unterschiedlichen K_d -Werte auf die Modellierungsergebnisse nachvollziehen zu können. Dabei ließ sich erkennen, dass für

Tabelle 3:

Verwendete Modellparameter des TZW-Säulenelutionsversuches

| Parameter | Dimension | Bauschutt | Quarzkies |
|-----------------------------|-------------------|---------------------|----------------|
| Versuchsdauer | d | 30 | |
| Strömungsraumlänge | cm | 26 | |
| Flussrate | mL/min | 0,5 | |
| Darcygeschwindigkeit | m/s | 2,95E-06 | |
| Anteil langsamer Abfluss | % | 100 | |
| Querdiffusion | m ² /s | 1,00E-06 | |
| Porosität | [1] | 0,36 | 0,32 |
| Lagerungsdichte | g/cm | 1,85 | 1,16 – 1,41 |
| TOC | % | 0,60 | 0,00 |
| k_f -Wert | m/s | 3,50E-06 | 2,00E-01 |
| Haftsättigung | [1] | 0,165 | 0,05 |
| Totporosität | [1] | 0,06 | 0,02 |
| Dispersivität | m | 0,08 | |
| Diffusionskoeffizient | m ² /s | 2,00E-09 | |
| Mikrobiologischer Abbau | 1/s | 0,00 | |
| Kinet. Sorptionskoeffizient | 1/s | 2,90E-05 – 3,00E-05 | |

Tabelle 4: Ausgangskonzentrationen und verwendete K_d -Werte

| PAK | C_{solid} [µg/kg] | K_d -Wert | C_{liquid} [µg/L] |
|------------------|---------------------|-------------|---------------------|
| Naphthalin | 125,00 | 5,60 | 22,32 |
| Acenaphthen | 1120,00 | 27,43 | 40,83 |
| Phenanthren | 7550,00 | 117,50 | 64,26 |
| Fluoranthren | 7450,00 | 613,97 | 12,13 |
| Pyren | 5350,00 | 772,95 | 6,92 |
| Benz[a]anthracen | 2850,00 | 8282,30 | 0,34 |

K_d ... Verteilungskoeffizient zwischen fester und flüssiger Phase

C_{solid} ... Ausgangskonzentration im Feststoff

C_{liquid} ... Ausgangskonzentration in der flüssigen Phase

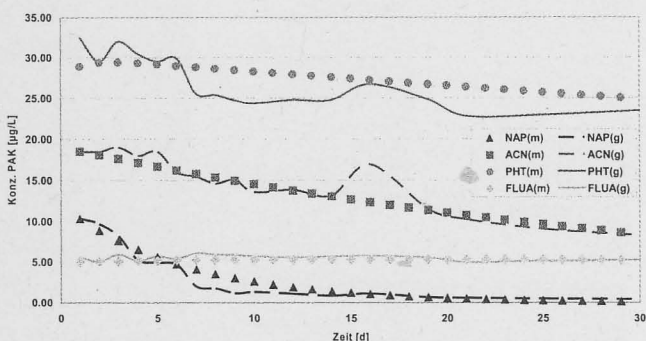


Abbildung 3:

Vergleich gemessene Werte - berechnete Werte für die beste Anpassung der K_d -Werte und einem kinetischen Sorptionskoeffizienten $2,90E-5 \text{ 1/s}$

einige der ausgewählten PAK die gemessenen Konzentrationen gut durch das Modell reproduziert werden konnten. Die geringen Unterschiede zwischen gemessenen und berechneten Konzentrationsverläufen für einige ausgewählte PAK-Vertreter sind ein Zeichen dafür, dass TENSIC in der Lage ist, die realen Verhältnisse gut nachzustellen. Die größeren Abweichungen für die übrigen ausgewählten polyzyklischen Aromaten waren auf eine unzureichende Anpassung der K_d -Werte zurückzuführen. Aus diesem Grund wurde

aus den Modellvarianten die jeweils beste Anpassung für die einzelnen PAK identifiziert und eine weitere Modellierung mit einer Kombination aus den besten K_d -Werten der einzelnen Literaturquellen vorgenommen.

Nach Adaption der Modellparameter (vor allem der K_d -Werte) liefert TENSIC unter stationären Bedingungen für die sechs ausgewählte polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe eine gute wertmäßige Übereinstimmung der berechneten mit den gemessenen Durchbruchkurven (siehe Abbildung 3).

3 Danksagung

Das diesem Beitrag zugrunde liegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem Förderkennzeichen 02WP0288 gefördert. Für diese Unterstützung möchten sich die Autoren bedanken. Die Verantwortung für den Inhalt dieses Beitrages liegt jedoch ausschließlich bei der HPC AG.

4 Literaturverzeichnis

- [1] Gesetz zum Schutz vor schädlichen Bodenveränderungen und zur Sanierung von Altlasten (BBodSchG) - Bundes-Bodenschutzgesetz vom 17. März 1998
- [2] Bundes-Bodenschutz- und Altlastenverordnung (BBodSchV) vom 12. Juli 1999.
- [3] M. Eckart, D. Mocker, S. Jahn, K. Pollmer (1998): Beschreibung der Reaktions- und Transportvorgänge in Halden durch das Mehrmigrantenstofftransport-Zweiphasenströmungsmodell TENSIC. Erschienen in GeoCongress - Uranium Mining and Hydrogeology II, Freiburg, 1998.
- [4] Dzombak D.A. and Morel F.M.M. (1990): Surface Complexation Modeling. Hydrous Ferric Oxide. New York, John Wiley.
- [5] Eckart, M. (1988): Ein Beitrag zur Infiltrationslaugung von Uranerzen mit Unterstützung numerisch-diskreter geostromungstechnischer Modelle. Dissertation, TU Bergakademie Freiberg
- [6] Plummer, L.N., Wigley, T.M.L., Parkhurst, D.L. The kinetics of calcite dissolution in CO₂ water systems at 5 °C to 60 °C and 0,0 to 1,0 atm CO₂ Am. J. Sci. 278, 179-216(1978)
- [7] Plummer, L.N., Parkhurst, D.L., Wigley, T.M.L. Critical review of the kinetics of calcite dissolution and precipitation in E.A. Jenne(ed.), Chemical modeling in aqueous systems, ACS Symp. Ser. 93, 537-573(1979)
- [8] Karickhoff, S. W. (1981): Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments and soils. Chemosphere, Vol. 10, No. 8: 833-946
- [9] Schroeder, P. & Berger, K. (2002): Das Hydraulic Evaluation of Landfill Performance (HELP) Modell - Benutzerhandbuch für die deutsche Version 3. 3., vollst. überarb. Auflage zur deutschen HELP-Version ab 3.55. Institut für Bodenkunde der Universität Hamburg; Environmental Laboratory - U.S. Corps of Engineers, Waterways Experiment Station; Department of Civil Engineering, Clemson University.
- [10] Ad-hoc-Arbeitsgruppe Boden der Geologischen Landesämter und der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe der Bundesrepublik Deutschland (1996): Bodenkundliche Kartierungsanleitung. Leitung: Werner Pälchen, 4. Auflage, Hannover 1994, Berichtigter Nachdruck, 392 S., 33 Abb., 91 Tab.

Anschrift der Autoren:

Dr. D. Mocker, Dr. M. Eckart, Dipl.-Geoökol. M. Roscher, Prof. B. Volland, Dipl.-Ing. R. Zurl
HARRESS PICKEL CONSULT AG, Niederlassung Gera,
Otto - Dix - Str. 9, D-07548 Gera
Tel.: +49-365/56422, Fax: +49-365/56424
E-Mail: rzurl@hpc-ag.de, http://www.hpc-ag.de

NEUAUFLAGE

Haftung für Informationen im Internet

Von Thomas Stadler,
Rechtsanwalt in Freising

2., neu bearbeitete und erweiterte Auflage 2005,
376 Seiten, € (D) 49,80/-sfr. 85,-. ISBN 3 503 08748 6

Electronic Commerce und Recht, Band 5
Online-Bestellung: [www.ESV.info/3 503 08748 6](http://www.ESV.info/3_503_08748_6)

Das Buch von Thomas Stadler beschäftigt sich primär mit den Verantwortlichkeitsregelungen des Teledienstegesetzes (TDG) und des Mediendienste-vertrags. Neben den allgemeinen Strukturen der §§ 8 bis 11 TDG werden eine Reihe von Einzel-fragen dargestellt, u.a. die Haftung für Hyperlinks, die Verantwortlichkeit von Suchmaschinenbetrei-bern sowie die Möglichkeit von Sperrungsanord-nung gegenüber Access-Providern. Die umfang-reiche Rechtsprechung und Literatur der letzten Jahre ist berücksichtigt.



ERICH SCHMIDT VERLAG
www.ESV.info
E-Mail: ESV@ESVmedien.de

Postf. 304240 • 10724 Berlin
Fax 030/25 00 85 - 275